

Федеральное государственное учреждение «Федеральный научный центр  
Научно-исследовательский институт системных исследований Российской  
академии наук»

На правах рукописи

Стамов Любен Иванович

**Математическое моделирование неравновесных процессов  
детонации и горения, а также переходных режимов на  
многопроцессорных ЭВМ**

Специальность 01.02.05 —  
«Механика жидкости, газа и плазмы»

Диссертация на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
д.ф.-м.н, профессор  
Смирнов Николай Николаевич

Научный консультант:  
д.ф.-м.н, профессор  
Рыбакин Борис Петрович

Москва — 2020

## Оглавление

|  | Стр.      |
|--|-----------|
| <b>Введение . . . . .</b>  | <b>4</b>  |
| <b>Глава 1. Состояние вопроса . . . . .</b>  | <b>12</b> |
| 1.1 Краткая история исследования детонации в газовых смесях . . .  | 12        |
| 1.2 Моделирование турбулентности . . . . .   | 20        |
| 1.3 Моделирование химических взаимодействий . . . . .  | 25        |
| <b>Глава 2. Описание математической и вычислительной моделей .</b>   | <b>28</b> |
| 2.1 Математическая модель течений многокомпонентной химически<br>реагирующей смеси вязких и теплопроводных газов . . . . . | 28        |
| 2.1.1 Законы сохранения . . . . .  | 28        |
| 2.1.2 Модель турбулентности . . . . .  | 29        |
| 2.1.3 Термодинамические соотношения и состав газовой смеси .   | 30        |
| 2.1.4 Кинетическая модель . . . . .  | 36        |
| 2.1.5 Молекулярная вязкость . . . . .  | 42        |
| 2.1.6 Граничные условия . . . . .  | 43        |
| 2.1.7 Начальные условия . . . . .  | 48        |
| 2.2 Вычислительная модель для описания турбулентных течений<br>реагирующих газов . . . . .                                 | 49        |
| 2.2.1 Расчет газовой динамики . . . . .  | 49        |
| 2.2.2 Расчет химической кинетики . . . . .   | 55        |
| 2.2.3 Расчет шага по времени . . . . .   | 69        |
| <b>Глава 3. Тестирование вычислительного комплекса . . . . .</b>   | <b>70</b> |
| 3.1 Задача Римана о распаде произвольного разрыва . . . . .  | 70        |
| 3.2 Задача об инициировании и распространении детонационной<br>волны в трехмерной постановке . . . . .                     | 77        |
| 3.3 Параллельная реализация вычислительного комплекса . . . . .  | 91        |
| 3.4 Заключение по главе . . . . .  | 97        |

|   |            |
|---|------------|
| <b>Глава 4. Исследование фокусировки ударных волн в<br/>конической и клинообразной областях в химически<br/>реагирующей газовой смеси . . . . .</b> | <b>98</b>  |
| 4.1 Возникновение детонации в клине . . . . .   | 99         |
| 4.2 Возникновение детонации в конусе . . . . .  | 109        |
| 4.3 Отражение ударной волны от внутренней поверхности клина . . .   | 116        |
| 4.4 Случай перехода горения в детонацию при отражении от<br>внутренней поверхности клина . . . . .  | 118        |
| 4.5 Заключение по главе . . . . .   | 139        |
| <b>Заключение . . . . .</b>   | <b>140</b> |
| <b>Список сокращений и условных обозначений . . . . .</b>   | <b>142</b> |
| <b>Список литературы . . . . .</b>  | <b>143</b> |
| <b>Список рисунков . . . . .</b>  | <b>159</b> |
| <b>Список таблиц . . . . .</b>  | <b>166</b> |

## Введение

Настоящая работа посвящена проведению вычислительного моделирования неравновесных нестационарных процессов детонации и переходных режимов на многопроцессорных электронно-вычислительных машинах (ЭВМ) и разработке для этих целей специализированного программного комплекса.

Процессы горения являются одними из первых, с которыми столкнулась человеческая цивилизация на пути своего развития, и они всегда играли (и продолжают играть) в нем важную роль. Несмотря на их многочисленные научные исследования и богатый накопленный теоретический и экспериментальный опыт, многие вопросы до сих пор раскрыты не достаточно полно ввиду сложности и многомасштабности протекающих процессов.

Существует несколько наиболее приоритетных направлений исследований процессов горения и детонации горючих смесей. Одним из таких направлений является разработка различных двигательных установок. Под установками понимаются как двигатели внутреннего сгорания, так и различные типы реактивных и ракетных двигателей, применяемых в разных областях человеческой деятельности. Причем, исследования могут проходить как в направлении оптимизации конструкций уже существующих систем с целью повышения их экономичности и увеличения производительности [1], так и для разработки принципиально новых двигательных устройств. Последнее является более перспективным в силу того, что в настоящий момент повсеместно используемые системы достигли достаточно высоких показателей эффективности и дальнейшее их улучшение требует огромных затрат. Например, весьма многообещающими являются двигатели, основанные на детонационном сжигании топлива [2; 3].

Среди других направлений исследований процессов горения можно выделить задачи пожаро- и взрывобезопасности жизнедеятельности. Например, при использовании различных типов топлив возникают проблемы с их хранением и транспортировкой [4; 5]. Другой важной и актуальной является проблема взрывоопасности в шахтах и безопасной работы различных технических устройств [6]. Еще одной актуальной проблемой является проблема лесных пожаров [7; 8].

Проведение различных физических экспериментов (причем не только в рассматриваемой области) связано с рядом трудностей. Одной из которых яв-



ляется высокая стоимость проведения некоторых экспериментов. К примеру, создание натурного образца реактивного двигателя является весьма ресурсозатратной процедурой. Другой проблемой может быть сложность или даже невозможность проведения самого эксперимента или какой-либо его части (чаще всего техническая), либо его слишком высокая длительность. Использование вычислительного моделирования позволяет решить часть этих проблем, однако, при этом возникают сложности другого характера.

Если рассматривать задачи физико-химической газовой динамики, то использование полных кинетических механизмов при моделировании горения различных топлив требуют огромных вычислительных ресурсов. Использование редуцированных механизмов позволяет сократить затраты, но всё равно объемы расчетов остается достаточно большими и требуют применения мощных специализированных вычислительных средств. Использование таких систем подразумевает применение различных технологий распараллеливания, что, в свою очередь, накладывает определенные требования на разрабатываемые алгоритмы и программное обеспечение. Помимо этого создаваемые программы должны учитывать специфику рассматриваемых систем дифференциальных уравнений. К примеру, системы уравнений химической кинетики являются жесткими, и их решение необходимо осуществлять специализированными методами.

Данная работа посвящена вычислительному моделированию на современных многопроцессорных системах неравновесных нестационарных процессов детонации и переходных режимов, протекающих при отражении и фокусировке ударных волн в химически реагирующих газовых средах. С этой целью был разработан специализированный программный пакет и проведена его проверка на ряде тестовых задач. Были исследованы процессы, протекающие в достаточно хорошо изученных на практике водородо-воздушных смесях, хотя сам разработанный комплекс программ позволяет работать с любыми горючими смесями.

**Целью** данной работы является проведение исследований процессов горения и детонации газовых смесей, возникающих в результате отражения и фокусировки ударных волн в химически реагирующей газовой смеси, с помощью специального разработанного программного комплекса.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Разработать трехмерную математическую модель нестационарного горения многокомпонентной газовой смеси, учитывающую возможность возникновения дефлаграции и детонации, а также перехода между этими режимами.
2. Разработать численную модель рассматриваемой системы с учетом ее работы на гибридных вычислительных системах.
3. Провести тестирование разработанных математической и численной моделей.
4. Исследовать с помощью разработанного комплекса процессы, протекающие при отражении и фокусировке ударных волн в трубе, заполненной химически реагирующей смесью газов.
5. На основании результатов исследований провести валидацию разработанного программного комплекса.

**Научная новизна:**

1. Впервые создана трехмерная вычислительная модель, позволяющая описать переходные процессы в химически реагирующей газовой смеси: переход горения в детонацию. В отличие от существующих моделей детонации в данной учитывается турбулентный перенос и подсеточная турбулентность, что и позволяет проводить моделирование переходных процессов.
2. Впервые созданы коды для решения трехмерных задач физико-химической газовой динамики на универсальных процессорах и на графических ускорителях.
3. Впервые была осуществлена валидация трехмерного вычислительного комплекса физико-химической динамики вязкого газа путем сравнения результатов расчетов с экспериментами по отражению ударных волн в химически реагирующем газе от внутренней поверхности клина и конуса.
4. Было выполнено оригинальное исследование перехода горения в детонацию при отражении ударной волны от внутренней поверхности клина.
5. Показано, что при отражении ударной волны в химически реагирующем газе от внутренней поверхности клина или конуса возможны три различных сценария развития процесса: при слабой падающей волне отражение и фокусировка не приводят к зажиганию горючей смеси, при сильной падающей волне ее отражение и фокусировка приводят к возникновению детонационной волны в вершине, а при падающей волне промежуточной

интенсивности за отраженной ударной волной возможно возникновение волны горения, которая после воспламенения в вершине клина отстает от отраженной волны, затем ускоряется в результате турбулизации и приводит к возникновению детонации (взрыва во взрыве).

**Практическая значимость.** Исследование процессов горения и детонации газовых смесей, возникающих в результате отражения и фокусировки ударных волн в химически реагирующей газовой смеси, имеет различное применение во многих отраслях деятельности. Результаты исследований могут существенно упростить и ускорить некоторые стадии разработки новых устройств, основанных на горении и детонации. Это относится как к существующим двигателям и их оптимизации, так и к разработке перспективных детонационных двигательных систем. С другой стороны, данные исследования могут также спрогнозировать и предотвратить некоторые негативные последствия горения и детонации, связанные с безопасностью жизнедеятельности и возникающие при работе с различными видами горючих веществ. Наличие программного пакета, позволяющего достаточно точно и быстро проводить моделирование такого рода процессов, позволяет проводить решение многих задач, связанных с горением и детонацией газовых смесей, в том числе и в перечисленных выше областях.

**Методология и методы исследования.** Методом исследований являлось вычислительное моделирование на основе механики сплошных сред с учетом физических и химических превращений, а также с учетом подсеточных моделей турбулентности. В качестве вычислительных схем были рассмотрены несколько явных схем сквозного счета 2-го/3-го порядка точности по пространству и времени. Схемы реализованы на регулярной сетке из одинаковых элементов (прямоугольных параллелепипедов) и произвольной, в общем случае, топологии. В качестве языков программирования были рассмотрены языки Фортран и С. Параллельность исполнения осуществлялась с помощью технологий OpenMP и CUDA.

Используемая математическая модель основана на системе уравнений трехмерной нестационарной многокомпонентной газовой динамики с химическими реакциями, с учетом эффектов переноса и турбулентности и представляет собой систему уравнений типа Навье—Стокса, осредненных по Рейнольдсу. Использована модель турбулентности  $k - \omega$ . Граничные условия на стенах соответствуют условию непротекания. Для вязкого турбулентного течения

используется дополнительное граничное условие, определяющее напряжение сдвига на стенке по данным модели турбулентности. Использован кинетический механизм сжигания водорода, включающий 20 реакций.

Исследование проводилось поэтапно. На первом этапе проведена разработка вычислительной модели для описания переходных процессов, основанные на полной системе уравнений динамики многокомпонентных сред с учетом физических и химических превращений, а также с учетом подсеточных моделей турбулентности.

Вторым этапом было проведение тестирования разработанного вычислительного комплекса путем сравнения результатов расчетов модельных задач с точными решениями задач о распаде произвольного разрыва в реагирующем газе, а также путем сравнения результатов расчетов с экспериментальными данными по распространению волн в сложных геометрических конфигурациях. Проведение на основании сравнений данных уточнения моделей химических взаимодействий и турбулентности.

На третьем этапе проведена разработка параллельной версии вычислительного комплекса, позволяющая использовать системы с общей памятью и графические процессоры.

На заключительном этапе проведено исследование процессов, протекающих при отражении и фокусировке ударных волн в ударной трубе, заполненной водородо-воздушной смесью.

Принципиальной новизной подходов и методов была разработка и корректировка вычислительных моделей, исходя из сравнения результатов с экспериментальным базисом неравновесных переходных процессов.

### **Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Разработана вычислительная модель нестационарного горения многокомпонентной газовой смеси в трехмерной постановке, учитывающая возможность возникновения дефлаграции и детонации, а также переходных режимов и ее параллельная реализация.
2. Получены результаты оригинального численного исследования процессов отражения и фокусировки ударных волн в клиновидной и конусообразной вставках в химически реагирующей газовой смеси в трехмерной постановке.
3. Получены различные сценарии развития процессов при отражении ударной волны в химически реагирующем газе от внутренней поверхности кли-

на или конуса: при слабой падающей волне отражение и фокусировка не приводят к зажиганию горючей смеси, при сильной падающей волне ее отражение и фокусировка приводят к возникновению детонационной волны в вершине, а при падающей волне промежуточной интенсивности в результате воспламенения смеси в вершине возникает волна горения, которая отстает от отраженной волны, затем ускоряется в результате турбулизации и приводит к возникновению детонации (взрыва во взрыве).

4. Созданы верификационный и валидационный базисы для решения задач горения и детонации.
5. Проведена настройка вычислительной модели для водородно-воздушных смесей путем проведения различных вычислительных и физических экспериментов.

**Достоверность** Основу используемых при построении программного комплекса физических моделей и математических алгоритмов составляют общепринятые в научной среде фундаментальные законы. Созданные программные реализации были протестированы на ряде специализированных тестовых задач. Используемые численные методы показали хорошую сходимость к аналитическим решениям. Полученные результаты хорошо согласуются с теоретическими и экспериментальными данными по горению и детонации водородо-воздушных смесей газов.

**Апробация работы.** Результаты работы докладывались на российских и международных конференциях:

1. VI Минский международный colloquium по физике ударных волн, горения и детонации (г. Минск, Беларусь, 11-14 ноября 2019).
2. XX Всероссийская конференция молодых учёных по математическому моделированию и информационным технологиям (г. Новосибирск, Россия, 28 октября - 1 ноября 2019).
3. Научная конференция «Ломоносовские чтения— 2017» (МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия, 17-26 апреля 2017).
4. XVI Международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование» (г. Саров, Россия, 3-7 октября 2016).
5. Международная конференция «Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе», посвященная дню рождения великого русского математика академика П.Л. Чебышева и приуроченная к 20-летию

- сотрудничества ОАО «Сургутнефтегаз» и компании SAP (СурГУ, г. Сургут, Россия, 17-18 мая 2016).
6. Научная конференция «Ломоносовские чтения— 2016» (МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия, 18-27 апреля 2016).
  7. IV Минский международный коллоквиум по физике ударных волн, горения и детонации (г. Минск, Беларусь, 9-12 ноября 2015).
  8. Международная конференция «Суперкомпьютерные дни в России 2015» (г. Москва, Россия, 28-29 сентября 2015).
  9. XI Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики (г. Казань, Россия, 20-24 августа 2015).
  10. Международная конференция «Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе», посвященная дню рождения великого русского математика академика П.Л.Чебышёва и приуроченная к 20-летию сотрудничества ОАО «Сургутнефтегаз» и компании SAP (СурГУ, г. Сургут, Россия, 14-16 мая 2014).
  11. Международная суперкомпьютерная конференция «Научный сервис в сети Интернет: многообразие суперкомпьютерных миров» (г. Новороссийск (пос. Абрау-Дюрсо), Россия, 22-27 сентября 2014).

**Личный вклад.** Все исследования, результаты которых изложены в диссертационной работе, проведены лично автором в процессе научной деятельности. Материалы из совместных публикаций, использованные в работе, по большей части состоят из оригинальных результатов автора. Основные результаты диссертации получены впервые и лично автором. В совместных работах научному руководителю д.ф.-м.н. Н. Н. Смирнову принадлежит выбор темы исследований, первоначальная постановка задач и интерпретация полученных результатов, научному консультанту д.ф.-м.н. Б. П. Рыбакину принадлежит постановка, метод решения и результаты моделирования по задаче о взаимодействии сильной ударной волны со сферой газа пониженной плотности.

**Публикации.** Основные результаты по теме диссертации изложены в 40 печатных изданиях, 4 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 8 — в периодических научных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus (из них 7 работ в журналах из квартиля Q1), 24 — в тезисах докладов, на основании созданных программных кодов получено 2 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения. Полный объём диссертации составляет 166 страниц, включая 60 рисунков и 7 таблиц. Список литературы содержит 167 наименований.

## Глава 1. Состояние вопроса

В данной главе дан краткий обзор истории исследования процессов горения и детонации газовых смесей, переходов между этими режимами, турбулентности и рассмотрено современное состояние и современные способы математического моделирования данных процессов для газовых смесей.

### 1.1 Краткая история исследования детонации в газовых смесях

Проводя эксперименты по изучению горения, французские физики Франсуа Эрнест Малляр и Анри Луи Ле Шателье в 1881 году [9] и независимо от них Марселен Бертело и Поль Вьель Вьей в 1881—1882 годах [10; 11] в опытах с распространением пламени в трубках обнаружили, что при обычных условиях пламя в трубе с гомогенной газовой смесью распространяется с небольшой скоростью порядка нескольких метров в секунду. Такой тип горения был назван дефлаграцией. Но при определенных условиях скорость распространения пламени внезапно может достигать нескольких тысяч метров в секунду. Этот быстрый процесс был назван «фальшивым горением» или детонацией. Сам термин «детонация» использовался еще с конца 18 века для описания взрывных процессов в твердых взрывчатых веществах. Например, его использовал Лавуазье в своем «Трактате по элементарной химии» (1789).

Теоретические исследования детонации в газовых смесях были проведены Владимиром Александровичем Михельсоном в 1890 году [12], а затем Дэвидом Леонардом Чепменом в 1899 году [13] и Эмилем Жуге в 1905 году [14]. Михельсон, основываясь на работах Уильяма Ранкина [15] и Пьера-Анри Гюгонио [16], вывел уравнения для распространения детонационной волны и получил выражение для скорости детонации. В работах, выполненных Чепменом и Жуге, была создана газодинамическая теория детонации, основанная на теории ударных волн, в которой детонационная волна рассматривалась как поверхность разрыва, и было также определено условие для определения скорости этой волны. Такого рода детонация, распространяющаяся с постоянной минимальной скоростью среди всех возможных для данного вещества, была названа детона-



цией Чепмена—Жуге, а саму теорию детонации называют теорией детонации Михельсона—Чепмена—Жуге.

Среди дальнейших теоретических исследований в этой области можно выделить исследования Анатолия Андреевича Гриба, который в своей диссертации (1939 год) показал, что плоская волна детонации обязательно должна распространяться в режиме Чепмена—Жуге с соответствующей скоростью [17], и работы 40—х годов XX века Якова Борисовича Зельдовича [18—20], в которых была создана одномерная модель детонации с учетом ширины зоны реакции (в которой учитывается конечное время протекания химической реакции вслед за нагревом вещества ударной волной), доказана определенность скорости детонации, получено решение задачи о сферической детонации. К схожим результатам пришли также Джон фон Нейман [21] и Вернер Дёринг [22]. Разработанная модель была названа в их честь моделью Зельдовича—Неймана—Дёринга или ЗНД. В России эту модель также называют моделью Гриба—Зельдовича—Неймана—Дёринга.

В 1945 году Леонидом Ивановичем Седовым на основании теории размерности был рассмотрен общий метод анализа задач о распространении волн горения и детонации и получены автомодельные решения многих задач, распространения детонации Чепмена—Жуге, а также слабой дефлаграции от точечного инициатора в случае сферической симметрии. Данные результаты обобщены в его монографиях [23; 24].

Теоретический анализ устойчивости модели ЗНД, проведенный в работах Джерома Эрпенбека [25; 26], показал, что детонационная структура данной модели неустойчива к бесконечно малым продольным возмущениям. Данный анализ был численно подтвержден Фикеттом и Вудсом [27], которые исследовали эволюцию одномерной детонационной волны, генерируемую с помощью поршня. Оба анализа показали, что для фиксированной степени пересжатия детонационной волны существует критическое значение энергии активации, ниже которого детонация является стабильной, а выше — нестабильной. И наоборот, увеличение коэффициента пересжатия приводит к стабилизации волны детонации.

В ходе экспериментальных исследований в области газовой детонации в 1926 году Колином Кэмпбелом и Дональдом Вудхедом [28] в смеси окиси углерода с кислородом вблизи детонационных пределов был открыт эффект спирального продвижения фронта детонации, который, двигаясь вблизи поверх-

ности трубы, описывал спираль с шагом, примерно равным трем диаметрам трубы. Этот процесс был назван «спиновой детонацией». Впоследствии появилось и множество других экспериментальных доказательств того, что детонационная волна не является плоской устойчивой структурой [29—31], были открыты ячеистая структура детонации и пульсирующие режимы распространения детонационной волны, возникающие из-за неустойчивости фронта плоской детонационной волны, и было показано, что предельным случаем ячеистой детонации является спиновая детонация [29; 30; 32].

С 60—х годов научным сообществом активно начинает использоваться такой метод проведения исследований как вычислительное моделирование, причем не только в области горения и детонации. Математическое моделирование позволило существо дополнить натурные эксперименты, так как этот метод дал возможность проводить множество однотипных экспериментов и широко варьировать различные параметры системы независимо друг от друга, что весьма затруднительно или вовсе невозможно при проведении физического эксперимента.

В работе Виктора Павловича Коробейникова и Владимира Алексеевича Левина [33] была предложена двухстадийная кинетическая модель тепловыделения детонационной волны, которая, в отличие от модели ЗНД, позволила хорошо описать внутреннюю нестационарную нелинейную структуру детонации за фронтом детонационной волны с помощью системы уравнений Эйлера и двух модельных уравнений для химической кинетики, описывающих задержку воспламенения и выделение тепла. В [33—37] и в последующих работах данных авторов довольно полно представлено исследование инициирования детонации достаточно сильной ударной волной, за которой в результате повышения температуры и давления происходит возникновение химических реакций, приводящих к поддержанию скорости волны на уровне скорости самоподдерживающейся детонации, т.е. не затухающей и не зависящей от энергии инициирования. В работе [38] представлены численные исследования инициирования детонации с помощью сильной ударной волны на базе уравнений Эйлера с учетом химических реакций в одномерной и двумерной постановках, проведена оценка влияния малых температурных возмущений на поведение потоков. В работах [39; 40] представлены результаты моделирования возникновения детонации в искривленном трехмерном канале с круглым поперечным сечением постоянной ширины, продуваемым сверхзвуковым потоком стехиометрической

смеси пропан-воздух. Исследование проводилось в рамках одностадийной кинетики горения численным методом на основе схемы Годунова в оригинальном программном комплексе, разработанном для многопараметрических расчетов и визуализации течений. Автором были получены нестационарные модели течений и исследована их зависимость от параметров задачи, получены три режима течения: без детонации, с детонационной волной, выходящей из канала через входное сечение, и режим с установившейся детонацией. В работах [41; 42] проведено вычислительное моделирование трехмерных детонационных структур в каналах круглого сечения, формирующихся из-за неустойчивости при инициировании одномерного течения подводом энергии у закрытого торца канала. Получено, что в зависимости от диаметра канала наблюдается как нерегулярная трехмерная ячеистая структура детонации, так и трансформация изначально плоской детонационной волны в волну спиновой детонации. Исследована устойчивость волны спиновой детонации при переходе в канал большего или меньшего диаметра. Также авторами проведено исследование формирования трехмерной детонации при воздействии движущихся границ области течения при вращении эллиптического цилиндра и в квадратной камере изменяющегося размера.

В ряде работ [43—48] исследователями было получено, что при некоторых условиях происходит переход от медленного горения к детонации, а также были обнаружены зависящие от множества факторов различные сценарии этих переходов в смесях водорода с воздухом [43—46], а в дальнейшем и в смесях углеводородов с воздухом [47; 48]. Одним из вариантов объяснения механизма перехода горения в детонацию (ПГД) была идея «взрыва во взрыве» Энтони Оппенгейма [43; 44]. Другой точкой зрения на природу перехода — механизм градиентного ускорения пламени или «спонтанного горения» Я.Б. Зельдовича [49].

Некоторые теоретические и экспериментальные исследования показали, что из-за возникающей на микроуровне неустойчивости перед фронтом пламени в результате увеличения неравномерности распределения температуры и возрастания градиентов концентраций появляются некоторые локальные экзотермические центры [48; 50—57]. Авторами было получено, что данных условий может быть достаточно для самовоспламенения в этих горячих точках и дальнейшего развития либо волны нормального горения, либо детонационной волны, что и служит причиной существования множественности сценариев

ПГД [58]. При этом во всех этих сценариях локальные горячие точки образуются по механизму Оппенгейма, а последующая детонация развивается на микроуровне согласно механизму Зельдовича [58]. Первые численные исследования ПГД в рамках модели Навье—Стокса [59], а также дальнейший анализ [57] в рамках модели Эйлера тоже показали этот эффект. Аналогичные результаты были получены в работе [60], в которой авторы численно исследовали ПГД между двумя параллельными бесконечными плоскими стенками. Однако, не все расчетные и наблюдаемые экспериментальные данные могут быть объяснены с помощью данного механизма. В частности для случаев, когда температура в возникающих «горячих точках» соответствует слишком большим временам индукции для возникновения ПГД, используемые существенно сокращенные кинетические модели воспроизводили появление детонации в этих точках. В работах [61; 62] предложен механизм ускорения пламени и перехода к детонации за счет формирования областей высокого давления на фронте волны горения, стимулирующих ускорение пламени за счет развития гидродинамической неустойчивости.

Существует ряд обзорных работ [63—65], в которых достаточно полно изложена основная известная информация по исследованию ускорения пламени и ПГД в газовых смесях. В работе [63] представлен обзор по газовой детонации, в том числе в аэрозолях, облаках горючей пыли и гибридных смесях, с точки зрения химической безопасности. В работе [65] представлен подробный обзор исследований по ускорению пламени и ПГД в гладких каналах и каналах с препятствиями. Авторы делают акцент на экспериментальные исследования с однородным газофазным горением. В работе [64] приведен обзор работ, связанных с прямым численным моделированием детонации на основании уравнений Навье—Стокса для химически реагирующей смеси с учетом возникающей неустойчивости и, чаще всего, одноступенчатого механизма, что накладывает ряд ограничений на возможности моделирования и получаемые результаты.

Важным этапом перехода горения в детонацию является предшествующий ему процесс ускорения фронта пламени. Изучение ускорения пламени проводилось множеством исследователей [66—73]. Несмотря на то, что взаимодействие пламени со стенками может его замедлить [67], исследователи получили, что ускорение сильно зависит от шероховатости стенки. Наличие шероховатости способствует образованию турбулентного пограничного слоя, который, взаимо-

действуя с фронтом пламени, значительно увеличивается скорость последнего [66—68]. Причем, чем выше шероховатость, тем быстрее этот слой образуется. Также было получено, что на скорость возникновения ПГД влияет диаметр трубы, в которой рассматривается ускорение пламени, начальное давление смеси и температура.

Существует множество работ по исследованию в области ускорения ПГД за счет увеличения турбулизации потоков. Например, путем введения в рассматриваемую область различных турбулизаторов: шероховатость стенок в виде спирали, известной как спираль Щелкина [32; 74], заполнением канала пластинами с отверстиями [75—78], использованием специализированных форкамер большего чем сам канал диаметра [47; 48; 79—82], за счет использования различных препятствий [83—86] или каналов сложной геометрии [87]. Еще одним способом ускорить возникновение детонации является взаимодействие ударной волны с некоторым углом или вогнутой стенкой за счет ее отражения и фокусировки [88—96]. В работе [92] численно исследовано инициирование детонации в стехиометрической смеси водорода и кислорода при фокусировке ударной волны на базе двумерной системы уравнений Эйлера с учетом химических реакций. Найдены критические значения числа Маха падающей волны, которые позволяют смеси детонировать. В работах [93—96] исследована фокусировка ударных волн в водородовоздушных смесях и установлена зависимость критического числа Маха, при котором происходит инициирование детонации в области вершины вогнутого отражателя, в зависимости от формы и размера отражателя и реакционной способности смеси.

В работах [97; 98] было проведено исследование возникновения детонации после взаимодействия фронта пламени с достаточно сильной ударной волной, интенсивности которой недостаточно для прямого инициирования детонации при ее распространении по холодной смеси, но, после взаимодействия с прогретыми слоями в окрестности фронта пламени, происходила детонация смеси. При этом, в работах [56; 98] было получено, что из-за взаимодействия ударной волны и волны горения появляются условия для образования горячих точек, в которых по градиентному механизму происходит ПГД. В работе [99] проведено исследование развития фронта пламени после взаимодействия с падающими и отраженными ударными волнами, наблюдался как режим ускорения пламени, так и возникновение детонации в зависимости от силы падающей ударной волны.

В работах [100; 101] исследованы различные вопросы, связанные с автотурбулизацией при распространении сферического пламени в газовых смесях и, в некоторых случаях, его переходе в детонацию за счет развития неустойчивости.

В работах [79—82] представлены результаты исследования влияния геометрических характеристик канала (наличия в нем камер большего диаметра) и определяющих параметров, таких как температура смеси и концентрация горючего, на режим распространения пламени и создание условий для перехода горения в детонацию в водородо-воздушных смесях и в смесях углеводородных топлив с воздухом с помощью численного моделирования. Данные численных расчетов сравнивались с теоретическими значениями скоростей турбулентного горения для различных концентраций горючего и данными экспериментов. Авторами было получено, что наличие форкамер приводит к возникновению существенных неоднородностей в потоке перед зоной пламени, что может привести к возникновению детонации. При вхождении пламени в участок трубы между камерами оно ускоряется вследствие расширения продуктов реакций в предыдущей камере. В результате образуется струя газа с высокой скоростью, которая проникает в последующую камеру и приводит к развитию быстро распространяющегося пламени, чему способствует как дополнительная турбулизация потока, так и поршневой эффект расширяющихся продуктов реакции, который поддерживается продолжающимся в предыдущей камере горением. Авторы получили, что достаточно быстрое сгорание смеси приводит к резкому подъему давления, под действием возникающего перепада давления выходящее из камеры пламя получает дополнительное ускорение, и перед его фронтом начинает формироваться ударная волна. Волны сжатия, генерируемые продолжающимся горением в камерах, обгоняют фронт пламени и подпитывают головную ударную волну, что приводит к формированию неравномерностей зоны горения и поперечных волн сжатия. В какой-то момент из горячей точки внутри зоны пламени возникает детонация. До перехода за счет «горячих точек» формируются волны сжатия, распространяющиеся во всех направлениях. При переходе к детонации из горячей точки возникает детонационная и ретонационная волны. Увеличение числа камер в начальной секции трубы способствует процессу ПГД и сокращает преддетонационное расстояние до тех пор, пока скорость турбулентного пламени при выходе из последней не превышает скорость звука. При дальнейшем увеличении числа камер переходный процесс не развивается.

В работах [84; 85] авторы, проводя численные исследования распространения пламени в каналах с препятствиями, получили, что расширение газа за счет замедленного горения смеси между препятствиями создается мощный струйный поток по центру канала, который ускоряет фронт пламени. В дальнейшем данное ускоряющееся пламя достигает сверхзвуковой по отношению к покоящемуся газу скорости и вызывает детонацию, причем, как утверждают авторы, турбулентность в данном механизме ускорения пламени играет лишь вспомогательную роль, что, скорее всего, справедливо для ограниченного вида специальных конструкций.

Существует много исследований, в которых не все расчетные и наблюдаемые экспериментальные данные могут быть объяснены с помощью градиентного механизма [61; 62; 102—104]. В указанных выше работах авторами был предложен несколько другой механизм ускорения пламени и перехода к детонации при формировании областей высокого давления на фронте волны горения, стимулирующих ускорение пламени за счет развития гидродинамической неустойчивости. В работах [61; 62] в ходе теоретического, численного и экспериментального изучения ПГД в водород-кислородных и этилен-кислородных смесях был предложен новый механизм перехода, в котором на передней границе пламени образуется сжатая и нагретая зона не прореагировавшего газа, формирующая экспоненциально возрастающий за счет усиления реакции импульс давления большой амплитуды, который превращается в сильную ударную волну, образуя совместно с зоной реакции пересжатую детонационную волну. Авторы получили [62], что давление возрастает до тех пор, пока скорость передней границы зоны горения не достигнет локальной скорости звука, что влечет за собой формирование детонационной волны. При этом возникающие «горячие точки» практически не влияют на ПГД за счет более слабого воздействия на термодинамические параметры в зоне горения. Аналогичные результаты были получены при теоретическом и численном исследованиях в двумерной постановке влияния диаметра канала на возникновение ПГД при использовании детальной кинетики [102]. Авторы получили, что динамика развития ПГД не соответствует градиентному механизму Зельдовича, образуются экспоненциально возрастающие пики давления без температурных градиентов, детонация развивается не из горячих точек, и температурные градиенты не могут являться механизмом перехода. Результаты дальнейших исследований по данному направлению представлены в работе [103], в которой проведено уже

трехмерное моделирование ускорения пламени и ПГД. Было получено, что результаты как двумерного моделирования, так и трехмерного демонстрируют соответствующее экспериментальным данным развитие происходящих процессов, однако, временные масштабы отличаются. В случае трехмерного канала, предетонационное расстояние меньше, чем в двумерном, соответственно, ПГД происходит гораздо раньше. В работе [104] был проведен анализ возникновения ПГД при использовании одностадийной и полной кинетики. Авторы получили более строгие критерии возникновения перехода при использовании детальной кинетики. ПГД при этом происходил в ходе фокусировки возникающих из-за импульсов давления большой амплитуды ударных волн.

## 1.2 Моделирование турбулентности

Как уже было сказано выше, турбулентность является одним из основных факторов необходимых для возникновения детонации при переходных процессах. Турбулентность представляет собой завихренное хаотическое движение вещества, возникающее самопроизвольно. Характер течения может описываться с помощью некоторого параметра. В качестве такого параметра чаще всего используют число Рейнольдса. При низких числах Рейнольдса регулярное течение называется ламинарным. При значениях, превышающих некоторую критическую величину, характер течения меняется, начинают появляться различные волнообразные возмущения, которые начинают взаимно пересекаться, движение становится хаотичным или турбулентным. Критическое значение числа Рейнольдса зависит от ряда факторов, например, от таких характеристик среды таких как плотность, вязкость, от скорости потока, от параметров обтекаемых объектов и стенок, в которых происходит течение. Чаще всего турбулентность возникает вблизи стенок, либо на некотором расстоянии за обтекаемыми телами. Проблема исследователя при рассмотрении турбулентного движения заключается в том, что описать его, получив какие-либо аналитические решения уравнений движения жидкости или газа не представляется возможным. Для моделирования турбулентных течений на текущий момент создано огромное количество математических моделей турбулентности, которые можно разделить на три основных класса: модели, основанные на решении



осредненных по Рейнольдсу уравнений, прямое численное моделирование и вихре-решающие модели.

Метод Рейнольдса состоит в осреднении значений характеристик потока в пределах некоторого промежутка времени. При его использовании относительно уравнений движения Навье—Стокса (было сделано Рейнольдсом в 1895 году) в них появляются дополнительные неизвестные члены, называемые тензором турбулентных напряжений или тензором Рейнольдса. Поэтому, для замыкания системы уравнений Рейнольдса необходимо определить связь между тензором турбулентных напряжений и характеристиками потока. Различные способы задания этих связей и характеризуют модели турбулентности в рамках данного подхода. Большинство этих моделей используют гипотезу Буссинеска (1877 год), которая говорит, что тензор турбулентных напряжений линейно зависит от градиента осредненного поля скорости с турбулентной вязкостью в качестве коэффициента пропорциональности. Довольно подробное описание данного типа моделей и их применимости сделано в работах Вилкокса [105] и Роди [106].

Из всего многообразия моделей турбулентности, основанных на решении осредненных по Рейнольдсу систем уравнений (RANS, англ. Reynolds Averaged Navier-Stokes), можно выделить несколько групп [107]. Одними из простейших типов моделей, долгое время используемых как основной способ расчета турбулентных течений, являются алгебраические модели. В них связь между турбулентной вязкостью и характеристиками течения задается алгебраическими соотношениями. К их достоинствам стоит отнести вычислительную простоту, легкость настройки и модификации. Недостатком является узкая область применения данных моделей, так как большое значение для них несут эмпирические данные о рассматриваемых течениях и процессах. Другим недостатком является неприменимость данных моделей для процессов, в которых преобладает конвективный и диффузионный перенос турбулентности. В основе моделей данного типа используется гипотеза о пути перемешивания (англ. *mixing length*), предложенная Л. Прандтлем в 1925 году [108]. Согласно данной гипотезе Прандтль предположил, что при турбулентном движении каждый образованный объем жидкости (вихрь) переносит некоторое количество движения, перемешиваясь с другими структурами и передавая свой импульс. Расстояние, на протяжении которого вихрь сохраняет свое количество движения, было названо путем перемешивания. Этот путь представляет аналогию с длиной свободного пробега молекул в кинетической теории газов. Также

Прандтль предложил способ вычисления вихревой вязкости с помощью введенного пути перемешивания. Несмотря на ошибочность некоторых исходных предпосылок, введенные Прандтлем выражения достаточно точно учитывают особенности турбулентного переноса и неплохо согласуются с экспериментальными данными.

Для преодоления недостатков, присущих алгебраическим моделям, были разработаны методы, учитывающие перенос турбулентности путем решения модельного дифференциального уравнения переноса для энергии турбулентных пульсаций. При этом для других турбулентных характеристик используются алгебраические или иные соотношения. Модели такого типа позволяют учитывать конвективный и диффузионный перенос и предысторию процесса, и поэтому в некоторых случаях являются предпочтительнее по сравнению с гипотезой пути перемешивания. Начало этой группе моделей, названной группой однопараметрических моделей турбулентности, положил Прандтль, сформулировав в 1945 году модель, в которой турбулентная вязкость зависит от кинетической энергии турбулентных флуктуаций, и предложив модельное дифференциальное уравнение для аппроксимации точного уравнения для турбулентной энергии.

Стоит отметить, что модели с одним дифференциальным уравнением обладают лучшей пригодностью для описанию турбулентных течений, однако, они обычно применимы для простых конфигураций, и в них довольно сильное влияние оказывают калибровочные течения. Устранить ограничения однопараметрических моделей можно, например, с помощью определения масштаба турбулентности как зависимой переменной. Так было сделано в моделях турбулентности с двумя и более параметрами.

Другой значительной группой являются двухпараметрические модели, т.е. методы, использующие два дифференциальных уравнения для моделирования турбулентных параметров. Впервые достаточно полное описание модели такого рода предложил Колмогоров в 1942 году [109]. Он ввел в дополнение к уравнению для турбулентной энергии  $k$  дифференциальное уравнение для параметра мелкомасштабной турбулентности, который был обозначен как удельная скорость диссипации энергии в единицу времени и служил аналогом длины смешения. Эта модель зародила основы семейства  $k-\omega$  моделей турбулентности, которые, вместе с  $k-\varepsilon$  моделями, в настоящее время являются наиболее используемыми при практических расчетах.

Первые наработки в области создания  $k-\varepsilon$  моделей были сделаны Чоу в 1945 году [110]. Однако считается, что самой значимой стала работа Лаундера 1972 года [111]. Дальнейшее развитие и обобщение этих идей привело к понятию стандартной  $k-\varepsilon$  модели турбулентности. Вычислительная простота таких моделей позволила добиться значительных успехов в области расчета турбулентных течений и стимулировала их активное развитие, даже несмотря на неадекватность (по сравнению с экспериментом) результатов для некоторых типов течений [112]. К настоящему времени появилось целое множество моделей такого типа (например, предложенные Лаундером-Приддином-Шармой (1977), Лэмом-Бремхерстом (1981), Ченом (1982), Якхотом и Орзагом (1986) и многие другие).

Не зная о работах Колмогорова, Саффмен в 1970 году предложил свой вариант  $k-\omega$  модели турбулентности [112]. В 1972 году Сполдинг модифицировал версию модели Колмогорова, исправив ряд её недостатков. Дальнейшее развитие семейства  $k-\omega$  моделей получило в работах Вилкокса, Саффмена, Рубезина, Коклея, Спезайла, Ментера и многих других исследователей (1972-1988 гг.). Дальнейшее развитие получила  $k-\omega$  модель Вилкокса 1998 года, в которой автор устранил ряд недостатков предыдущей версии, выявленных при прогнозировании характеристик свободных сдвиговых течений, и модель Вилкокса 2008 года, в которой автор ввел некоторые дополнительные коэффициенты и зависимости, позволившие увеличить области применимости модели и повысить ее точность [105; 113]. Интересный вариант  $k-\omega$  модели предложил Ментер в 1993 году [114]. Он объединил способность  $k-\varepsilon$  модели лучше описывать свойства свободных сдвиговых течений и преимущество  $k-\omega$  модели при моделировании пристеночных течений. Для этого он, перестроив  $k-\varepsilon$  модель в терминах  $k$  и  $\omega$ , ввел эмпирическую функцию перехода от  $k-\omega$  модели вблизи стенок к  $k-\varepsilon$  модели вдали от них. Также он изменил выражение связи между турбулентной вязкостью, турбулентной энергией и скоростью диссипации энергии.

Существует огромное множество других двухпараметрических моделей турбулентности, обзор которых может составить отдельную монографию ([105; 107]) и выходит за пределы данной работы. Однако, большинство из них, также как и перечисленные выше модели турбулентности, не всегда адекватно описывают моделируемые течения. Это касается сложных течений, которые существенно анизотропны относительно составляющих напряжений Рейнольдса, и, естественно, плохо описываются введением изотропной турбулентной

вязкости. С этой точки зрения лучше работают модели, которые используют уравнения переноса для компонент тензора напряжений Рейнольдса. Методы такого типа впервые ввел Дж.К. Ротта (1951) [115], достаточно полно изложив способ построения модели, называемой моделью турбулентных напряжений Рейнольдса. Важным преимуществом данного семейства методов является естественное включение различных эффектов и автоматический учет таких процессов как внезапное изменение скорости деформации, вращения твердого тела и др. Для трехмерных потоков модели данного типа в общем виде вводят семь уравнений: одно для турбулентного масштаба и шесть для компонент тензора напряжений Рейнольдса. Решение такой системы дифференциальных уравнений требует немало вычислительных ресурсов и ограничивает применимость данных моделей. Еще одним существенным ограничением для применения данных методов является их недостаточная универсальность. Некоторые исследователи с помощью различных предположений уменьшают число уравнений для рейнольдсовых напряжений, тем самым значительно снижают сложность данных моделей. Решение таких упрощенных систем похоже на решение в рамках двухпараметрических моделей.

Все рассмотренные выше методы основывались на осреднении по Рейнольдсу модели турбулентности. Каждый метод не является универсальным и применим только к своей области задач. Отладка методов производится в области полностью развитых турбулентных течений и лишь учитывает возможность переходных процессов. Достоверность результатов, полученных за пределами калибровочных баз, не гарантируется. В противопоставлении этим методам существуют принципиально другие подходы. Одним из таких способов является прямое численное моделирование (DNS, англ. Direct Numerical Simulation). Данный способ представляет собой решение полных нестационарных трехмерных уравнений Навье—Стокса и уравнений неразрывности на разностных сетках, размер ячеек которых не превосходит колмогоровский масштаб турбулентности. Даже для простой геометрии расчетной области и без учета дополнительных процессов в системе моделирование такого рода требует огромных вычислительных мощностей. Ограничение по компьютерным ресурсам делают такие расчеты не реализуемыми, за исключением некоторых частных случаев, используемых для проверки и модификации имеющихся полумэмпирических моделей.

Другим подходом к моделированию турбулентности, относящимся к классу вихреразрешающих моделей, является способ моделирования крупных вихрей (LES, англ. Large Eddy Simulation). Впервые этот подход был использован Дирдорфом в 1970 году [116]. В данном методе используется то, что наиболее крупные вихри несут максимум рейнольдсовых напряжений, и поэтому, в отличие от предыдущего способа, рассчитываются только вихри этих размеров, а для очень мелких вихрей используются различные модели подсеточного масштаба. Благодаря этому, размеры расчетных сеток могут быть значительно снижены, а временные шаги увеличены, относительно прямого численного моделирования. Поэтому данный метод представляется весьма перспективным. Однако, главной проблемой является то, что вблизи стенок все вихри весьма малы, в связи с чем шаги по пространству для расчетной сетки и шаги по времени, необходимые для их разрешения, значительно уменьшаются до сопоставимых с прямым численным моделированием величин.

Существуют и другие способы расчета турбулентных течений, например, такой гибридный подход, как моделирование отсоединенных вихрей (DES, англ. Detached Eddy Simulation), предложенный П. Спалартом в 1997 году [117]. Он сочетает в себе достоинства решения осредненных по Рейнольдсу уравнений и метода моделирования крупных вихрей. Выбор между двумя этими способами происходит автоматически в зависимости от соотношения между размером вычислительной сетки и характерным масштабом турбулентности в рассматриваемой точке пространства. В тоже время в переходной между методами зоне вопрос об адекватности метода остается открытым.

### 1.3 Моделирование химических взаимодействий

Моделирование рассматриваемых газодинамических явлений горения и детонации без адекватного описания происходящих химических процессов невозможно. Использование детальных кинетических механизмов при моделировании задач в многомерной постановке на практике выливается в значительные вычислительные затраты, возникающие при решении систем химических уравнений в дополнение к нелинейным уравнениям газовой динамики. В связи с этим часто используют сокращенные или редуцированные меха-

низмы, содержащие меньшее количество реакций и веществ по сравнению с детальными. При этом решение уравнений химической кинетики все равно остается наиболее дорогостоящей частью процесса моделирования реагирующих течений, занимая на порядок больше времени, чем решение уравнений с конвективными и диффузионными членами. Помимо числа реакций и компонентов, а также числа ячеек вычислительной сетки, на время расчета сильно влияет вид выражений, описывающих образование и исчезновение компонентов. Наличие сложных выражений с экспонентой или дробными степенями, какие обычно имеют место при определении констант скоростей химических реакций, существенно увеличивает «стоимость» вычислений.

При моделировании соответствующей рассматриваемым процессам химической кинетики возникает также проблема решения задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Для определения понятия жесткости часто пользуются не строгим определением, которое говорит, что система ОДУ называется жесткой тогда, когда определенные неявные методы решения дают несравненно более хороший результат, чем явные [118]. На жесткость также влияют такие параметры как собственные значения матрицы Якоби системы, её размерность, гладкость решения, интервал интегрирования. Согласно другому определению жесткости [119; 120], система является жесткой, если её решения содержат нестационарные компоненты, затухающие быстро по сравнению с характерным масштабом интегрирования. Также говорят, что система ОДУ является жесткой, если присутствует большой разброс собственных значений матрицы системы [121]. Такое поведение характерно для систем, в которых одни процессы протекают очень медленно, другие же чрезвычайно быстро, что является обычным для химических реакций. В литературе часто используют такой показатель, как число жесткости, определяемый как:

$$g = \frac{\max_i |Re\lambda_i|}{\min_i |Re\lambda_i|}, \quad (1.1)$$

где  $\lambda_i$  — собственные числа матрицы Якоби системы. Тогда система считается жесткой если  $g \gg 1$ , хотя четких границ между жесткими и нежесткими системами нет. На практике в расчетах жесткость связана с величиной минимального допустимого, исходя из времени расчета для конкретного случая и метода решения, размера шага интегрирования, который необходимо взять для того, чтобы получить результат с выбранной точностью.

В настоящее время разработано множество методов решения жестких задач. Наиболее популярные из них описаны в работах [122] и монографиях [118; 123; 124]. Среди них можно выделить: методы разделения, основанные на разделении исходной системы уравнений на быструю и медленную подсистемы и сведение решения исходной жесткой системы к последовательному решению нескольких нежестких систем меньшей размерности, методы формул дифференцирования назад (методы Гира) [120], неявные методы Рунге—Кутта, семейство методов Розенброка, методы локальной линеаризации (экспоненциальные методы), асимптотические методы.

При выборе алгоритма решения необходимо учитывать несколько важных вопросов. Одним из них является выбор шага по времени. Оптимальный вариант — это использование наибольшего для заданной точности шага. Однако, некоторые методы решения ОДУ относительно жестких систем могут значительно мельчить шаг и, тем самым, вносить ошибку в расчет. Также необходимо учитывать, что временной шаг химических процессов в критических местах может на порядок быть меньше, чем газодинамический. В то же время, слишком большой временной шаг может также негативно отражаться на точности результатов. Другим важным вопросом является расчет якобиана. Эта часть решения жесткой системы уравнений химической кинетики является одной из самых затратных. Поэтому, желательно использовать методы и алгоритмы, в которых данная процедура производится как можно реже.

В настоящее время широкое распространение получили методы типа Розенброка [118; 125; 126], которые относятся к одношаговым безытерационным численным формулам. Эти методы принадлежат к большому классу методов, которые пытаются избежать решения нелинейных систем и заменяют их последовательностью линейных систем алгебраических уравнений с помощью введения матрицы Якоби непосредственно в вычислительную формулу. Поэтому такие методы иногда называются линейно-неявными методами Рунге—Кутты. Данные методы обладают низкой вычислительной сложностью, простотой реализации и, в тоже время, достаточной точностью для решения рассматриваемых задач.

## Глава 2. Описание математической и вычислительной моделей

В данной главе представлено изложение используемых математических моделей для описания процессов, протекающих в многокомпонентной смеси химически реагирующих смесей совершенных газов, и соответствующей вычислительной модели.

### 2.1 Математическая модель течений многокомпонентной химически реагирующей смеси вязких и теплопроводных газов

Математическая модель для описания макрокинетики детонации, горения и переходных процессов включает в себя законы сохранения, модель турбулентности, модель химической кинетики, моделирование вязкости, теплофизических параметров смеси, граничные и начальные условия.

#### 2.1.1 Законы сохранения

Для моделирования процессов, протекающих в многокомпонентной газовой смеси с учетом химических превращений, явлений переноса в турбулентном режиме была использована следующая система уравнений баланса массы компонентов, импульса и энергии:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \rho_k \mathbf{u} - D_{eff} \nabla \frac{\rho_k}{\rho} \right) = \dot{\omega}_k, \quad k = 1, 2, \dots, N_c, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} - \boldsymbol{\tau}) + \nabla p = 0, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial(\rho E_T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E_T \mathbf{u} + p \mathbf{u} - \lambda_{eff} \nabla h - \mu_{eff} \nabla K - \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u}) = 0, \quad (2.3)$$

где  $t$  — время,  $\rho_k$  — плотность  $k$ -го компонента смеси,  $\dot{\omega}_k$  — интенсивность образования  $k$ -го компонента смеси,  $\mathbf{u}$  — вектор скорости,  $p$  — давление



смеси или шаровая часть тензора напряжений,  $h$  — энтальпия единицы массы смеси,  $K$  — кинетическая энергия турбулентных пульсаций на единицу массы,  $E_T$  — полная энергия единицы объема газовой смеси, с учетом тепловой, химической, кинетической и турбулентной энергий,  $N_c$  — число компонентов в газовой смеси.

Плотность смеси  $\rho$  определялась как сумма плотностей всех компонентов смеси:

$$\rho = \sum_{k=1}^{N_c} \rho_k. \quad (2.4)$$

Для девиатора тензора напряжений  $\tau$  использовалось следующее соотношение:

$$\tau = \mu_{eff} \left( \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^* - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right), \quad (2.5)$$

где  $\mathbf{I}$  — так называемая тензорная единица.

Коэффициенты переноса  $D_{eff}$ ,  $\lambda_{eff}$ ,  $\mu_{eff}$  выражались через молекулярную  $\mu$  и турбулентную  $\mu_T$  вязкости смеси, числа Прандтля  $Pr$  и Шмидта  $Sc$  и их турбулентные аналоги  $Pr_T$  и  $Sc_T$  следующим образом:

$$D_{eff} = \frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_T}{Sc_T}, \quad \lambda_{eff} = \frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_T}{Pr_T}, \quad \mu_{eff} = \mu + \mu_T. \quad (2.6)$$

### 2.1.2 Модель турбулентности

В работе использовалась  $K$ — $\omega$  модель турбулентности Уилкокса [105], добавляющая еще два уравнения к уравнениям газовой динамики:

$$\frac{\partial(\rho K)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho K \mathbf{u}) - \nabla \cdot ((\mu + \sigma^* \mu_T) \nabla K) = P - \beta^* K \omega, \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \omega \mathbf{u}) - \nabla \cdot ((\mu + \sigma \mu_T) \nabla \omega) = \alpha \frac{\omega}{K} P - \beta \omega^2, \quad (2.8)$$

где  $\omega$  — интенсивность диссипации турбулентной энергии,  $P$  — производство турбулентности.

Турбулентная вязкость  $\mu_T$  определялась из следующего равенства:  $\mu_T = \rho K / \omega$ .

Для определения производства турбулентности  $P$  использовалось следующее выражение:

$$P = \tau^{turb} : (\nabla \otimes \mathbf{u}), \quad (2.9)$$

где  $\tau^{turb}$  — турбулентная составляющая девиатора тензора напряжений:

$$\tau^{turb} = \mu_T \left( \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^* - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right), \quad (2.10)$$

Другие использованные параметры модели:  $\alpha = 5/9$ ,  $\beta = 3/40$ ,  $\beta^* = 0.09$ ,  $\sigma = \sigma^* = 0.5$ .

### 2.1.3 Термодинамические соотношения и состав газовой смеси

В качестве дополнительного набора переменных для определения газовой смеси, помимо основных парциальных плотностей компонент  $\rho_k$ , использовались массовые доли компонент  $Y_k$  и молярные плотности  $X_k$ , определяемые соответственно следующим образом:

$$Y_k = \frac{\rho_k}{\rho}, \quad X_k = \frac{\rho_k}{W_k}, \quad (2.11)$$

где  $W_k$  — молярная масса  $k$ -го компонента.

В этом случае для термодинамического давления смеси совершенных газов  $\tilde{p}$  согласно закону Менделеева—Клапейрона и закону Дальтона можно записать:

$$\tilde{p} = \sum_{k=1}^{N_c} \tilde{p}_k = RT \sum_{k=1}^{N_c} \frac{\rho_k}{W_k} = R\rho T \sum_{k=1}^{N_c} \frac{Y_k}{W_k} = RT \sum_{k=1}^{N_c} X_k, \quad (2.12)$$

где  $\tilde{p}_k$  — парциальное давление компонента  $k$ ,  $T$  — температура газовой смеси,  $R$  — универсальная газовая постоянная.

Также в расчетах иногда использовались ненормализованные молярные доли компонент  $\tilde{C}_k$  (например, при задании начальных условий). Проведя их нормализацию и используя определения молярной доли

$$C_k = \frac{\tilde{C}_k}{\sum_{j=1}^{N_c} \tilde{C}_j} = \frac{X_k}{\sum_{j=1}^{N_c} X_j}, \quad (2.13)$$

можно определить массовые доли компонентов  $Y_k$  и, зная еще давление  $\tilde{p}$  и температуру  $T$  смеси, молярные плотности  $X_k$  с помощью соотношений:

$$Y_k = \frac{\tilde{C}_k W_k}{\sum_{j=1}^{N_c} \tilde{C}_j W_j}, \quad X_k = \frac{\tilde{p}}{RT} \frac{\tilde{C}_k}{\sum_{j=1}^{N_c} \tilde{C}_j}. \quad (2.14)$$

Давление смеси  $p$ , определенное как шаровая часть тензора напряжений, получается из термодинамического давления  $\tilde{p}$  добавкой, возникающей от воздействия хаотических пульсаций скорости:

$$p = \tilde{p} + \frac{2}{3} \rho K, \quad (2.15)$$

что чаще всего является малой поправкой, исключая области особенно интенсивной турбулентности.

Моделирование термодинамической составляющей внутренней энергии единицы объема смеси  $E$  осуществлялось следующим образом:

$$E = \sum_{k=1}^{N_c} X_k E_k(T) = RT \sum_{k=1}^{N_c} \left( X_k (\hat{H}_k(T) - 1) \right), \quad (2.16)$$

где  $E_k$  — внутренняя (тепловая и химическая) энергия единицы моля компонента  $k$ ,  $\hat{H}_k$  — безразмерная энтальпия компонента  $k$ , которая включает в себя энтальпию формирования компонент при заданной температуре  $T_{ref}$ , т.е. «химическую энергию». Данная величина является функцией температуры и для многих веществ затабулирована или аппроксимирована полиномами.

Тогда полную внутреннюю энергию единицы объема  $E_T$  можно представить как сумму:

$$E_T = E + \rho \frac{\mathbf{u}^2}{2} + \rho K. \quad (2.17)$$

Помимо безразмерной энтальпии компонентов были использованы еще две термодинамические функции — безразмерные теплоемкости  $\hat{C}_k$  и энтропии  $\hat{S}_k$  компонентов. Сама концепция безразмерных термодинамических данных представлена в [127], а база данных, описывающих эти термодинамические параметры и формат их хранения, называется CHEMEKIN-II. Эти данные представляют собой полиномиальные коэффициенты, количество которых, а также температурные интервалы различные для разных версий баз данных. В данной работе была использована модель и данные из источника [128]. Данная модель

содержит два температурных интервала и аппроксимационный полином четвертого порядка. Термодинамические коэффициенты  $a_{k,i}$ ,  $i = 1, 2, \dots, 7$  для каждого компонента смеси  $k$  отличаются для нижнего  $[T_{k,min}, T_{k,med}]$  и верхнего  $[T_{k,med}, T_{k,max}]$  температурных интервалов и позволяют вычислить безразмерные функции теплоемкости  $\hat{C}_k$ , энтальпии  $\hat{H}_k$  и энтропии  $\hat{S}_k$  компонента  $k$  внутри интервала температур  $[T_{k,min}, T_{k,max}]$  с помощью следующих соотношений:

$$\begin{aligned}\hat{C}_k(T) &= \sum_{i=1}^5 (a_{k,i} T^{i-1}), \\ \hat{H}_k(T) &= \sum_{i=1}^5 \left( \frac{a_{k,i}}{i} T^i \right) + \frac{a_{k,6}}{T}, \\ \hat{S}_k(T) &= a_{k,1} \ln T + \sum_{i=2}^5 \left( \frac{a_{k,i}}{i-1} T^{i-1} \right) + a_{k,7}.\end{aligned}\tag{2.18}$$

Формат данных подробно описан в руководствах [127] и [129]. На границе температурных интервалов при  $T = T_{k,med}$  соответствующие коэффициенты для каждого компонента  $k$  должны быть согласованы. Размерные термодинамические параметры с учетом дополнительных интегральных соотношений для каждого компонента смеси  $k$  получаются из безразмерных следующим образом:

$$C_{p,k} = R\hat{C}_k, H_k = RT\hat{H}_k = \int C_{p,k}(T)dT, S_k = R\hat{S}_k = \int \frac{C_{p,k}(T)}{T}dT, \tag{2.19}$$

где  $C_{p,k}$ ,  $H_k$  и  $S_k$  соответственно теплоемкость, энтальпия и энтропия единицы моля компонента  $k$ .

Вне температурного интервала  $[T_{k,min}, T_{k,max}]$ , в принципе, достаточно широкого, чтобы охватить область исследования, для расчета термодинамических функций использовалась гипотеза постоянной теплоемкости. Данная гипотеза оправдана тем, что теплоемкость газа, как правило, достаточно слабо отклоняется от постоянного значения на сравнительно большом интервале температур, что позволяет существенно расширить допустимые вычисления и за пределы интервала, на котором используется полиномиальная аппроксимация. Эта ги-

потеза приводит к следующим соотношениям:

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{C}_k(T) = \hat{C}_k(T_{min}), \\ \hat{H}_k(T) = \hat{H}_k(T_{min}) - \hat{C}_k(T_{min}) \left( \frac{T_{min}}{T} - 1 \right), \quad T < T_{min} \\ \hat{S}_k(T) = \hat{S}_k(T_{min}) - \hat{C}_k(T_{min}) \ln \frac{T_{min}}{T}, \\ \hat{C}_k(T) = \hat{C}_k(T_{max}), \\ \hat{H}_k(T) = \hat{H}_k(T_{max}) + \hat{C}_k(T_{max}) \left( 1 - \frac{T_{max}}{T} \right), \quad T > T_{max} \\ \hat{S}_k(T) = \hat{S}_k(T_{max}) + \hat{C}_k(T_{max}) \ln \frac{T}{T_{max}}, \end{array} \right. \quad (2.20)$$

Таким образом, теплоемкости, внутренняя энергия и энтальпия единицы объема смеси выражаются через безразмерные термодинамические функции и молярные плотности  $X_k$  следующим образом:

$$\begin{aligned} C_p &= R \sum_{k=1}^{N_c} \left( X_k \hat{C}_k(T) \right), \quad C_v = R \sum_{k=1}^{N_c} \left( X_k (\hat{C}_k(T) - 1) \right), \\ H &= RT \sum_{k=1}^{N_c} \left( X_k \hat{H}_k(T) \right), \quad E = RT \sum_{k=1}^{N_c} \left( X_k (\hat{H}_k(T) - 1) \right). \end{aligned} \quad (2.21)$$

Энтропия единицы объема газовой смеси зависит не только от температуры, но и от давления. Ее можно вычислить с помощью безразмерной функции энтропии с помощью следующего соотношения:

$$S = R \sum_{k=1}^{N_c} \left( X_k \hat{S}_k(T) \right) - R \sum_{k=1}^{N_c} \left( X_k \ln \frac{p X_k}{p_{ref} \sum_{j=1}^{N_c} X_j} \right). \quad (2.22)$$

В формулах (2.21), (2.22) обозначено:  $C_p$ ,  $C_v$  — удельная теплоемкость единицы объема смеси при постоянном давлении и при постоянном объеме соответственно,  $H$  — энтальпия единицы объема смеси,  $S$  — энтропия единицы объема смеси,  $p_{ref}$  — базовое давление, использующееся при составлении таблиц термодинамических данных (в работе используется  $p_{ref} = 10^5$  Па).

Соответствующие величины в расчете на единицу массы обозначены строчными буквами и получаются делением на плотность:

$$c_p = C_p/\rho, \quad c_v = C_v/\rho, \quad h = H/\rho, \quad e = E/\rho, \quad s = S/\rho. \quad (2.23)$$

Также был рассмотрен немного упрощенный механизм, содержащий в себе один достаточно широкий температурный интервал и аппроксимационный полином третьего порядка. Коэффициенты данного полинома  $a_{k,i}$ ,  $i = 0, 1, \dots, 3$ ,

а также значения  $a_{k,4}$ ,  $a_{k,5}$ , получаемые соответственно из энтальпии и энтропии формирования моля компонента, позволяют вычислить безразмерные функции теплоемкости  $\hat{C}_k$ , энтальпии  $\hat{H}_k$  и энтропии  $\hat{S}_k$  компонента  $k$  внутри интервала температур  $[T_{min}, T_{max}]$  с помощью схожих с (2.18) соотношений:

$$\begin{aligned}\hat{C}_k &= a_{k,0} + a_{k,1}T + a_{k,2}T^2 + a_{k,3}T^3, \\ \hat{H}_k &= a_{k,0} + \frac{a_{k,1}}{2}T + \frac{a_{k,2}}{3}T^2 + \frac{a_{k,3}}{4}T^3 + \frac{a_{k,4}}{T}, \\ \hat{S}_k &= a_{k,0} \ln T + a_{k,1}T + \frac{a_{k,2}}{2}T^2 + \frac{a_{k,3}}{3}T^3 + a_{k,5}.\end{aligned}\quad (2.24)$$

Коэффициенты для полинома на объединенном интервале температур вычислялись из коэффициентов оригинала [128] для двух интервалов с помощью регрессивного анализа на основе линейного метода минимальных квадратов.

Подборка коэффициентов в выражениях (2.24) обеспечивает автоматическое выполнение интегральных соотношений (2.19). Вне температурного интервала  $[T_{min}, T_{max}]$  также можно использовать соотношения (2.20).

В расчетах рассматривалась водородо-воздушная газовая смесь. При горении водорода с кислородом, помимо основного продукта реакции, водяного пара, образуется и несколько радикалов (компонент, не существующих при нормальных условиях в стабильном состоянии длительное время). Компоненты, из которых состоит рассматриваемая горючая смесь, представлены в Таблице 1. В ней приведены формула компонента, название и молярный вес в граммах на моль. Указанные молярные массы компонент строго согласованы с атомарными массами, приведенными в [130]. Ошибка подобного согласования ведет к нефизичным потокам массы компонент при расчете химических реакций. Должно соблюдаться равенство:

$$W_k = \sum_{j=1}^{N_E} w_j n_{j,k}, \quad (2.25)$$

где  $N_E$  — число элементов,  $n_{j,k}$  — матрица элементного состава, т.е. число атомов элемента  $j$  в молекуле компонента  $k$ ,  $w_j$  — атомная масса элемента  $j$ .

Коэффициенты  $a_{k,j}$ , служащие для расчета безразмерных термодинамических функций указанных компонентов, для однотемпературного интервала приведены в Таблице 2.

В расчетах стехиометрическая горючая водородо-воздушная смесь задавалась следующим соотношением молярных долей исходных компонент:

$$[\text{H}_2] : [\text{O}_2] : [\text{N}_2] = 2 : 1 : 3.76.$$

Таблица 1. Состав горючей смеси.

| № | Символ                        | Название           | W, г/моль |
|---|-------------------------------|--------------------|-----------|
| 1 | H <sub>2</sub> O              | водяной пар        | 18.0152   |
| 2 | ОН                            | гидроксил          | 17.0073   |
| 3 | H                             | атомарный водород  | 1.0079    |
| 4 | O                             | атомарный кислород | 15.9994   |
| 5 | HO <sub>2</sub>               | пергидроксил       | 33.0067   |
| 6 | H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> | перекись водорода  | 34.0146   |
| 7 | H <sub>2</sub>                | водород            | 2.0158    |
| 8 | O <sub>2</sub>                | кислород           | 31.9988   |
| 9 | N <sub>2</sub>                | азот               | 28.0134   |

Таблица 2. Коэффициенты для расчета термодинамических функций горючей смеси, полученные регрессивным анализом зависимостей [128] для интервала температур [250, 5000] К.

| k | Символ                        | $a_{k,0}$                   | $a_{k,1}$                  | $a_{k,2}$                  |
|---|-------------------------------|-----------------------------|----------------------------|----------------------------|
|   |                               | $a_{k,3}$                   | $a_{k,4}$                  | $a_{k,5}$                  |
| 1 | H <sub>2</sub> O              | 3.3840357                   | $2.0033207 \cdot 10^{-3}$  | $-3.6829569 \cdot 10^{-7}$ |
|   |                               | $2.3399126 \cdot 10^{-1}$   | $-3.0182213 \cdot 10^4$    | 2.8353205                  |
| 2 | ОН                            | 3.3750608                   | $3.9665179 \cdot 10^{-4}$  | $2.0963409 \cdot 10^{-9}$  |
|   |                               | $-6.3789280 \cdot 10^{-12}$ | $3.6650604 \cdot 10^3$     | 2.7346116                  |
| 3 | H                             | 2.5000000                   | 0.0                        | 0.0                        |
|   |                               | 0.0                         | $2.5471630 \cdot 10^4$     | -0.46011760                |
| 4 | O                             | 2.6372033                   | $-1.5817436 \cdot 10^{-4}$ | $5.2602610 \cdot 10^{-8}$  |
|   |                               | $-4.3663781 \cdot 10^{-12}$ | $2.9192005 \cdot 10^4$     | 4.3764980                  |
| 5 | HO <sub>2</sub>               | 3.6803497                   | $2.5247243 \cdot 10^{-3}$  | $-6.1128844 \cdot 10^{-7}$ |
|   |                               | $5.0853912 \cdot 10^{-11}$  | $5.3350475 \cdot 10^1$     | 5.8466265                  |
| 6 | H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> | 4.4196943                   | $4.1365421 \cdot 10^{-3}$  | $-1.1150640 \cdot 10^{-6}$ |
|   |                               | $1.0152347 \cdot 10^{-10}$  | $-1.7862045 \cdot 10^4$    | 1.6428333                  |
| 7 | H <sub>2</sub>                | 3.3210773                   | $3.4997810 \cdot 10^{-4}$  | $3.3868706 \cdot 10^{-8}$  |
|   |                               | $-8.3149796 \cdot 10^{-12}$ | $-1.0057236 \cdot 10^3$    | -3.3209086                 |
| 8 | O <sub>2</sub>                | 3.3284399                   | $1.0183012 \cdot 10^{-3}$  | $-2.4330505 \cdot 10^{-7}$ |
|   |                               | $2.2629747 \cdot 10^{-11}$  | $-1.0356335 \cdot 10^3$    | 5.4040962                  |
| 9 | N <sub>2</sub>                | 3.1988606                   | $9.5449170 \cdot 10^{-4}$  | $-2.3910740 \cdot 10^{-7}$ |
|   |                               | $2.0615249 \cdot 10^{-11}$  | $-9.9392126 \cdot 10^2$    | 4.5336727                  |

### 2.1.4 Кинетическая модель

Использованный в работе кинетический механизм описывается реакциями (обратимыми и необратимыми) следующего вида:

$$\sum_{k=1}^{N_c} \nu''_{r,k} A_k(+M_r) \Leftrightarrow \sum_{k=1}^{N_c} \nu'_{r,k} A_k(+M_r), \quad r = 1, 2, \dots, N_r, \quad (2.26)$$

где  $N_r$  — число реакций,  $A_k$  — символ  $k$ -го компонента,  $\nu''_{r,k}$ ,  $\nu'_{r,k}$  — стехиометрические коэффициенты компонента  $k$  в реакции  $r$ ,  $M_r$  — символ, указывающий возможность учета влияния третьего тела в реакции  $r$ .

Химические источники  $\dot{\omega}_k$  можно представить зависящими от температуры  $T$  и набора молярных плотностей  $\mathbf{X} = \{X_k\}$ . Сумма этих источников вследствие закона сохранения массы в химических взаимодействиях равна нулю:

$$\sum_{k=1}^{N_c} \dot{\omega}_k = 0, \quad \dot{\omega}_k = W_k \hat{\omega}_k(T, \mathbf{X}), \quad (2.27)$$

где  $\hat{\omega}_k$  — интенсивность производства одного моля компонента  $k$  в единице объема.

Имеются и более строгие законы химических взаимодействий (например, закон сохранения массы каждого элемента), которые учитываются в кинетическом механизме и которые могут учитываться в численной реализации модели для уменьшения объема расчетов и повышения точности. Общий вид химических источников довольно сложен и включает члены, нелинейные по всем аргументам. Типичным выражением для определения притока единицы моля компонента  $k$  в единице объема для каждой реакции вида (2.26) через закон действующих масс, является

$$\hat{\omega}_k = \sum_{r=1}^{N_r} \nu_{r,k} \omega_r, \quad (2.28)$$

$$\omega_r = M_r(\mathbf{X}) \left[ k_r^D(M_r, T) \prod_{k=1}^{N_c} X_k^{\alpha_{r,k}} - k_r^R(M_r, T) \prod_{k=1}^{N_c} X_k^{\beta_{r,k}} \right],$$

где  $\omega_r$  — интенсивность реакции  $r$ ,  $\nu_{r,k} = \nu''_{r,k} - \nu'_{r,k}$  — алгебраический стехиометрический коэффициент компонента  $k$  в реакции  $r$ ,  $M_r$  — коэффициент влияния третьих (не изменяемых) компонент в реакции  $r$ , который равен 1 при



отсутствии такого влияния,  $k_r^D$  — коэффициент скорости прямой реакции,  $k_r^R$  — коэффициент скорости обратной реакции,  $\alpha_{r,j}$  — степени компонент в прямой реакции (обычно, хотя не всегда, ненулевые степени только у входящих компонент),  $\beta_{r,j}$  — степени компонент в обратной реакции.

Если в реакции учитывается третье тело, то коэффициент  $M_r$  рассчитывается по формуле:

$$M_r = \sum_{k=1}^{N_C} \gamma_{r,k} X_k. \quad (2.29)$$

Константы  $\gamma_{r,k}$  являются коэффициентами влияния компонента  $k$  (третьего тела) в реакции  $r$  и называются коэффициентами Шаперона.

Произведения

$$\pi_r^D = \prod_{k=1}^{N_C} X_k^{\alpha_{r,k}}, \pi_r^R = \prod_{k=1}^{N_C} X_k^{\beta_{r,k}}, \quad (2.30)$$

называются множителями прямой и обратной реакций. В общем случае степени  $\alpha_{r,k}$ ,  $\beta_{r,k}$  не обязаны совпадать с  $\nu'_{r,k}$  и  $\nu''_{r,k}$  соответственно, хотя это имеет место для элементарных реакций.

Степени при компонентах в выражении (2.28) для элементарных реакций совпадают с входящими и исходящими стехиометрическими компонентами, для брутто-реакций могут и не совпадать, и быть дробными. Подробности подобных выражений можно видеть в [127].

Коэффициенты прямой и обратной реакции для большинства реакций зависят от температуры и могут быть аппроксимированы расширенной формулой Аррениуса. Например, для прямой реакции она имеет вид:

$$k_r^D = A_r T^{B_r} \exp\left(-\frac{\Theta_r}{T}\right). \quad (2.31)$$

Коэффициенты  $B_r$  и  $\Theta_r$  в формуле (2.31) могут быть равны нулю, множитель  $A_r > 0$ . Если присутствует зависимость не только от температуры, или если эта зависимость отличается от закона Аррениуса, то такие реакции согласно терминологии [127; 129] называются «выпадающими». Коэффициент обратной реакции помимо использования закона Аррениуса с другими коэффициентами может быть определен через константу равновесия, зависящую лишь от термодинамических свойств участвующих в реакции компонент. В работе коэффициенты обратной реакции рассчитывались так, чтобы динамика

кинетического механизма без учета влияния посторонних потоков, и с учетом постоянства плотности и внутренней энергии, приводила к состоянию химического равновесия при этих условиях. При этом выполняется соотношение:

$$k_r^R = k_r^D K_r^{-1}, \quad (2.32)$$

где  $K_r$  — константа равновесия. Данная формула имеет место как для невыпадающих реакций, так и для выпадающих.

Согласно [129] константа равновесия определяется из условия на энергию Гиббса единицы моля входящих и исходящих компонент:

$$K_r(T) = \exp \left[ - \sum_{k=1}^{N_c} \nu_{r,k} \hat{G}_k(T) \right] \times \left[ \frac{p_{ref}}{RT} \right]^{\sum_{k=1}^{N_c} \nu_{r,k}} \quad (2.33)$$

Однако использование энергии Гиббса связано с сохранением давления во время химической реакции. Условия же используемого метода расчета привязаны к сохранению объема, поэтому вместо безразмерной энергии Гиббса компонент  $\hat{G}_k$  следует использовать безразмерную энергию Гельмгольца, которая равна  $\hat{G}_k - 1$ . Очевидно, разница будет заметна в том случае, когда в реакции меняется число молей (не обменная элементарная реакция).

Важно также отметить, что константа с размерностью давления  $p_{ref}$  в (2.33) выглядит достаточно произвольно; в работе [129] это действительно атмосферное давление, но в работе [131] она принимается равной единице. Эффект проявляется для реакций, в которых число молей меняется.

Во многих работах предлагается не рассчитывать (2.33), а пользоваться заранее рассчитанным коэффициентом равновесия, зависимость которого от температуры имела бы форму Аррениуса (2.31). В этом случае  $K_r(T)$  аппроксимируется так, чтобы сумма квадратов разности логарифма выражения (2.33) и аппроксимации по Аррениусу для нескольких значений температуры была минимальной. Это приводит к линейной задаче минимальных квадратов, так как логарифм функции Аррениуса линеен относительно своих коэффициентов.

Для того, чтобы избавиться от возможного произвола при определении константы  $p_{ref}$  в формуле (2.33), а также выяснить, какую энергию следует использовать, Гиббса или Гельмгольца, можно заранее рассчитать состояние химического равновесия смеси, куда она придет из начального состояния (на основе только термодинамических параметров), а затем получить аналогичный

результат с помощью динамических уравнений без источников массы и энергии. Результаты должны совпадать, и тем самым параметры расчета будут откалиброваны.

Таким образом, для вычисления множителя обратной реакции через константу равновесия было получено следующее выражение:

$$k_r^R = k_r^D \exp \sum_{k=1}^{N_c} \left[ \nu_{r,k} \left( \hat{H}_k(T) - \hat{S}_k(T) - \sigma \right) \right] \left[ \frac{RT}{p_{ref}} \right]^{\sum_{k=1}^{N_c} \nu_{r,k}}, \quad (2.34)$$

где  $\sigma = 0$  или  $1$  в зависимости от использования энергии Гиббса или Гельмгольца соответственно при расчете константы равновесия.

Используемый элементарный кинетический механизм горения водорода состоит из 20 обратимых реакций и приведен в Таблице 3. В первом столбце Таблицы 3 помещен номер реакции, в следующем ее формула, далее — коэффициент скорости прямой реакции в виде обобщенного закона Аррениуса. В последнем столбце таблицы указан источник из которого взята реакция.

Рассмотренный механизм содержит два вида элементарных реакций. Обменные реакции первого рода:



и реакции рекомбинации второго рода:



Все реакции обратимые, так что рекомбинация может быть записана и в обратную сторону, став диссоциацией. Символ  $M$  в формуле реакции означает учет влияния третьих, не изменяемых в реакции, компонент. За основу данного кинетического механизма взят механизм, состоящий из 19 реакций и первоначально опубликованный в работе Ульриха Мааса и Юргена Варнаца [132] и позже перепечатанный с небольшим изменением в составе более сложного механизма в работе Мааса и Стивена Поупа [133]. В последней работе существенно уточнены данные по механизму первой реакции  $O_2 + H \rightleftharpoons OH + O$ , имеющей, как показывают исследования [134], критическое влияние на весь процесс, поскольку представляет собой разветвление цепного механизма по наиболее быстро идущей ветви. В ходе исследований и проведения сравнения с экспериментом было получено, что при использовании только кинетического

механизма Мааса—Поупа в некоторых случаях переход горения в детонацию получить не удалось; более того, ни возгорания, ни детонации в численном моделировании получено не было. Меняя только предэкспоненциальный множитель в критической реакции размножения радикалов  $O_2 + H \rightleftharpoons OH + O$ , удалось получить лишь прямое инициирование детонации. Поэтому часть обменных реакций размножения радикалов и реакций с получением конечного продукта, как указанная выше, так и три других:  $H_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + H$ ,  $OH + OH \rightleftharpoons H_2O + O$  и  $HO_2 + H \rightleftharpoons H_2 + O_2$ , были взяты из более современного механизма — диссертации Крины Хегеш [135]. Последняя из этих реакций фактически запускает механизм накопления радикалов, когда идет в обратном направлении (ее преимущественное направление при низких температурах). Кроме того, была добавлена реакция из еще более современного механизма Зекаи Хонга [136]:  $H + O + M_2 \rightleftharpoons OH + M_2$ , несколько уменьшающая количество свободных радикалов и позволяющая ускорить выход на конечный продукт. С таким гибридным механизмом и одновременно с увеличением скорости самой первой из упомянутых реакций за счет увеличения предэкспоненциального множителя удалось добиться горения за отраженной ударной волной без дальнейшего перехода к детонации в течение сравнительно долгого времени. В дальнейшем переход происходил в достаточно близком к эксперименту месте.

В Таблице 3 реакции 1 – 4 соответствуют обмену с участием «легких» радикалов O, H, OH, реакции 5 – 7 соответствуют рекомбинации «легких» радикалов, в реакциях 8 – 13 участвует еще и «тяжелый» радикал  $HO_2$ , в остальных реакциях 14 – 19 еще один «тяжелый» радикал  $H_2O_2$ . Реакция 20 представляет собой еще одну реакцию рекомбинация легких радикалов.

Стоит отметить, что механизм Мааса—Поупа не содержит выпадающих реакций. Примером аналогичного элементарного механизма с выпадающими реакциями служит механизм для кислородно-водородной смеси, приведенный в работе Формана Уильямса [137] и механизм [134]. Механизм Мааса—Поупа обладает еще одним свойством, упрощающим расчеты: влияние третьего тела в реакциях рекомбинации определяется одними и теми же коэффициентами для всех реакций, т.е.  $\gamma_{r,k} = \gamma_k$ ,  $r = 1, 2, \dots, 19$ . В кинетическом механизме в таких реакциях стоит символ "+M<sub>1</sub>". Последняя реакция имеет другие коэффициенты Шаперона [136]. Эти коэффициенты для компонентов используемой смеси указаны в Таблице 4. Влияние прочих компонентов имеет коэффициент 1, хотя в большинстве случаев влияние радикалов как третьего тела можно не рассмат-

Таблица 3. Используемый кинетический механизм горения водорода.

Единицы измерения: см, с, моль, К.

| №  | Реакция   | $A_r$                | $B_r$  | $\Theta_r$ | Источник   |
|----|---|----------------------|--------|------------|------------|
| 1  | $O_2 + H \rightleftharpoons OH + O$             | $2.00 \cdot 10^{14}$ | 0.0    | 8455       | Maas, Pope |
|    |   | $2.06 \cdot 10^{14}$ | -0.097 | 7560       | Hegheş     |
|    |   | $6.06 \cdot 10^{14}$ | -0.097 | 7560       | Hegheş mod |
| 2  | $H_2 + O \rightleftharpoons OH + H$             | $5.06 \cdot 10^4$    | 2.67   | 3163       | Maas, Pope |
| 3  | $H_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + H$          | $1.00 \cdot 10^8$    | 1.60   | 1660       | Maas, Pope |
|    |   | $2.17 \cdot 10^8$    | 1.52   | 9649       | Hegheş     |
| 4  | $OH + OH \rightleftharpoons H_2O + O$           | $1.50 \cdot 10^9$    | 1.14   | 48         | Maas, Pope |
|    |   | $3.35 \cdot 10^4$    | 2.42   | -969       | Hegheş     |
| 5  | $H + H + M_1 \rightleftharpoons H_2 + M_1$      | $1.80 \cdot 10^{18}$ | -1.00  | 0          | Maas, Pope |
| 6  | $O + O + M_1 \rightleftharpoons O_2 + M_1$      | $2.90 \cdot 10^{17}$ | -1.00  | 0          | Maas, Pope |
| 7  | $H + OH + M_1 \rightleftharpoons H_2O + M_1$    | $2.20 \cdot 10^{22}$ | -2.00  | 0          | Maas, Pope |
| 8  | $H + O_2 + M_1 \rightleftharpoons HO_2 + M_1$   | $2.30 \cdot 10^{18}$ | -0.80  | 0          | Maas, Pope |
| 9  | $HO_2 + H \rightleftharpoons OH + OH$           | $1.50 \cdot 10^{14}$ | 0.0    | 505        | Maas, Pope |
| 10 | $HO_2 + H \rightleftharpoons H_2 + O_2$         | $2.50 \cdot 10^{13}$ | 0.0    | 349        | Maas, Pope |
|    |   | $1.05 \cdot 10^{14}$ | 0.0    | 1024       | Hegheş     |
| 11 | $HO_2 + H \rightleftharpoons H_2O + O$          | $3.00 \cdot 10^{13}$ | 0.0    | 866        | Maas, Pope |
| 12 | $HO_2 + O \rightleftharpoons OH + O_2$          | $1.80 \cdot 10^{13}$ | 0.0    | -205       | Maas, Pope |
| 13 | $HO_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + O_2$       | $6.00 \cdot 10^{13}$ | 0.0    | 0          | Maas, Pope |
| 14 | $HO_2 + HO_2 \rightleftharpoons H_2O_2 + O_2$   | $2.50 \cdot 10^{11}$ | 0.0    | -625       | Maas, Pope |
| 15 | $OH + OH + M_1 \rightleftharpoons H_2O_2 + M_1$ | $3.25 \cdot 10^{22}$ | -2.00  | 0          | Maas, Pope |
| 16 | $H_2O_2 + H \rightleftharpoons H_2 + HO_2$      | $1.70 \cdot 10^{12}$ | 0.0    | 1888       | Maas, Pope |
| 17 | $H_2O_2 + H \rightleftharpoons H_2O + OH$       | $1.00 \cdot 10^{13}$ | 0.0    | 1804       | Maas, Pope |
| 18 | $H_2O_2 + O \rightleftharpoons OH + HO_2$       | $2.80 \cdot 10^{13}$ | 0.0    | 3223       | Maas, Pope |
| 19 | $H_2O_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + HO_2$    | $5.40 \cdot 10^{12}$ | 0.0    | 505        | Maas, Pope |
| 20 | $O + H + M_2 \rightleftharpoons OH + M_2$       | $4.71 \cdot 10^{18}$ | -1.00  | 0          | Hong       |

Таблица 4. Коэффициенты Шаперона в используемом кинетическом механизме. Для прочих компонент коэффициенты полагаются равными 1.0.

|       | $\gamma_{H_2}$ | $\gamma_{O_2}$ | $\gamma_{H_2O}$ | $\gamma_{N_2}$ | $\gamma_{H_2O_2}$ |
|-------|----------------|----------------|-----------------|----------------|-------------------|
| $M_1$ | 1.0            | 0.4            | 6.5             | 0.4            | 1.0               |
| $M_2$ | 2.5            | 1.0            | 12.0            | 1.0            | 12.0              |

ривать, так как их суммарная молярная доля в обычных условиях горения (то есть при температурах, практически никогда не превышающих 4000 К) не выше нескольких процентов. Следует обратить внимание на роль в реакциях азота как третьего тела, хотя этот компонент и не изменяется в химических взаимодействиях. В диссертации Хегеш [135] приведена значительно более широкая таблица коэффициентов Шаперона, взятая из работы [138].

### 2.1.5 Молекулярная вязкость

Молекулярная вязкость смеси  $\mu$ , учет которой весьма важен для постановки граничных условий для турбулентных параметров и для определения трения на твердой границе, рассчитывалась на основе молекулярной вязкости компонентов (заданных функций температуры) следующим образом:

$$\mu = \frac{\sum_{k=1}^{N_c} X_k \mu_k(T)}{\sum_{j=1}^{N_c} X_j \varphi_{k,j}(T)}. \quad (2.37)$$

Согласно (2.37), эффективная вязкость смеси ниже средневзвешенной вязкости за счет коэффициентов взаимности  $\varphi_{k,j}$ . Используется простой метод определения коэффициентов взаимности, опубликованный в (TRANSPORT) [127]:

$$\varphi_{k,j} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{W_k}{W_j}\right)^{-0.5} \left(1 + \left(\frac{\mu_k}{\mu_j}\right)^{0.5} \left(\frac{W_j}{W_k}\right)^{0.25}\right)^2. \quad (2.38)$$

Молекулярная вязкость компонентов рассчитывалась по физическим данным молекул (масса, диаметр столкновений, глубина потенциала Леннарда—Джонсона, дипольный момент) с помощью потенциала Штокмайера, после чего интерполировалась простой формулой на заданном диапазоне температуры. Соответствующие физические константы компонент брались из работы [139], а расчетные формулы из (TRANSPORT) [127]. Для сравнительно низких температур интерполяция формулой Сазерленда является лучшей среди простых выражений, но для более широкого диапазона лучше пользоваться модифицированной формулой:

$$\mu_k(T) = C_{1,k} \frac{T^{\vartheta_k}}{C_{0,k} + T}. \quad (2.39)$$

Для формулы Сазерленда  $\vartheta_k = 3/2$ , но для широкого диапазона температур свободный параметр  $\vartheta_k$  позволяет улучшить точность интерполяции на порядок по сравнению с этой формулой, обычно  $\vartheta_k \approx 1.6 \pm 0.5$ .

### 2.1.6 Граничные условия

В рассмотренных задачах ставились граничные условия двух видов: закрытая твердая стенка и свободный выход.

Замкнутая со всех сторон стенка соответствует в принятой модели либо условию скольжения вдоль нее, либо прилипанию; в обоих случаях соблюдается условие непротекания:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega, \quad (2.40)$$

где  $\partial\Omega$  — граница рабочей области,  $\mathbf{n}$  — вектор нормали в заданной точке. Для условия (2.40) не важно, нормаль внешняя или внутренняя. Условие (2.40) формально является достаточным для невязкого газа, но для численной реализации модели может потребоваться следующее из него и уравнений импульса (2.2) условие нулевой производной давления по нормали к стенке:

$$\mathbf{n} \cdot \nabla p = 0, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega, \quad (2.41)$$

В том случае, когда используется модель турбулентности, дополнительное граничное условие для уравнений импульса, необходимость которого следует из-за повышения порядка уравнений, сводится к расчету трения на стенке, а именно расположенного вдоль нее вектора напряжений  $\boldsymbol{\tau}_w$ , коллинеарного вектору скорости в ближайшей окрестности стенки и направленному противоположно последнему, так что:

$$\boldsymbol{\tau}_w = -\tau_w \frac{\mathbf{u}_\delta}{|\mathbf{u}_\delta|}, \quad (2.42)$$

где  $\mathbf{u}_\delta$  — скорость газа на малом расстоянии  $\delta$  внутрь рабочей области от стенки. На практике берется скорость в центре примыкающей к границе ячейки расчетной сетки; неопределенность в случае нулевой скорости отсутствует из-за того, что для нулевой скорости напряжение трения равно нулю.

Потоки массы и энергии на твердой стенке полагались равными нулю: стенка считалась адиабатической и некаталитической, это и определяло дополнительные граничные условия в уравнениях (2.1) и (2.3), которые также становились необходимы вследствие повышения их порядка.

Уравнения массы компонент, импульса и энергии турбулентной модели имеют повышенный порядок по сравнению с уравнениями невязкой модели, что требует дополнительных условий (на касательные компоненты скорости, температуру и массовые доли), а также условий для турбулентных параметров. Эти условия не тривиальны. Их строят с помощью нескольких гипотез о поведении параметров турбулентности в окрестности стенки. Обычно выделяют вязкий и турбулентный пристеночные слои, но уравнение импульса позволяет их смешивать, что сильно облегчает моделирование. В работе предполагалось, что в вязком и турбулентном пристеночных слоях можно пренебречь инерциальными членами уравнений, а также вторыми производными от параметров по направлениям вдоль стенки по сравнению с производными по направлению по нормали к стенке. Была введена локальная система координат у стенки с условием, что ось  $x$  была направлена вдоль касательной скорости, ось  $y$  направлена от стенки внутрь рабочей области по нормали. Компоненту скорости вдоль  $x$  была обозначена  $U$ . В работе использовался подход, изложенный в работах [140; 141]. На примере выбранной модели  $k-\omega$  ниже описано как строятся совместимые с моделью граничные условия для турбулентных параметров.

Использовался следующий вид уравнений в окрестности стенки:

$$\frac{\partial(\mu + \mu_T)}{\partial y} \frac{\partial U}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\rho}{2} \frac{\partial U^2}{\partial x}, \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left( \mu + \sigma^* \rho \frac{K}{\omega} \right) \frac{\partial K}{\partial y} + \rho \frac{K}{\omega} \left( \frac{\partial U}{\partial y} \right)^2 - \rho \beta^* K \omega = 0, \quad (2.44)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left( \mu + \sigma \rho \frac{K}{\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial y} + \alpha \rho \left( \frac{\partial U}{\partial y} \right)^2 - \rho \beta \omega^2 = 0. \quad (2.45)$$

Было принято, что в правой части продольный градиент давления и инерционные члены компенсируют друг друга (это верно для невязких течений), и в этом случае уравнение (2.43) при интегрировании дает:

$$(\mu + \mu_T) \frac{\partial U}{\partial y} = \rho u_T^2, \quad (2.46)$$

где справа стоит модуль касательного напряжения на стенке, записанный через константу  $u_T$  — характерная скорость трения. Подстановка (2.46) в (2.44)



и (2.45) приводит к замкнутой системе уравнений относительно турбулентных параметров (если плотность и вязкость смеси считать заданными), и если пренебречь эффектами температуры, то:

$$\frac{\partial}{\partial y} \left( \nu + \sigma^* \frac{K}{\omega} \right) \frac{\partial K}{\partial y} + \frac{K}{\omega} \left( \frac{u_T^2}{\nu + K/\omega} \right)^2 - \beta^* K \omega = 0, \quad (2.47)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left( \nu + \sigma \frac{K}{\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial y} + \alpha \left( \frac{u_T^2}{\nu + K/\omega} \right)^2 - \beta \omega^2 = 0. \quad (2.48)$$

Для уменьшения количества параметров в системе (2.47) и (2.48) эту систему следует обезразмерить, но при этом вначале оценить поведение турбулентных параметров у стенки.

Разбив пристеночный слой на 2 зоны, в примыкающей к стенке «вязкой» части подслоя и предположив, что производство турбулентности мало по сравнению с диссипацией (это связано с тем, что в окрестности стенки турбулентная вязкость стремится к нулю по определению) было получено:

$$\nu \frac{\partial^2 K_\nu}{\partial y^2} - \beta^* K_\nu \omega_\nu = 0, \quad \nu \frac{\partial^2 \omega_\nu}{\partial y^2} - \beta \omega_\nu^2 = 0, \quad y < y_\nu. \quad (2.49)$$

В результате решения уравнений (2.49) в «вязком» подслое получено:

$$\omega_\nu = \frac{6\nu}{\beta y^2}, \quad K_\nu = Ay^\delta, \quad \delta^2 - \delta - \frac{6\beta^*}{\beta} = 0, \quad \delta \approx 3.23. \quad (2.50)$$

Здесь  $A$  — произвольная константа, пока не известная. Решение (2.50) имеет место при малости производства по сравнению с диссипацией, и при малости турбулентной вязкости по сравнению с молекулярной, то есть при

$$K_\nu \ll \omega_\nu \nu, \quad \frac{u_T^2}{\sqrt{\beta^*}} \ll \nu \omega_\nu. \quad (2.51)$$

Вид зависимостей (2.50) показывает, что при достаточно малом значении  $y$  условия (2.51) должны выполняться.

Второй подслой характеризуется тем, что в нем турбулентная вязкость преобладает над молекулярной, он называется «логарифмическим» из-за того, что решение (2.46) с линейно зависящей от  $y$  турбулентной вязкостью (гипотеза Неймана) представляет собой логарифм от  $y$ . В логарифмическом подслое в уравнении (2.47) производство турбулентности уравнивается с диссипацией; для уравнения (2.48) в логарифмическом слое все три члена имеют

одинаковый порядок. Это совместимо с зависимостями:

$$K_{log} = \frac{u_T^2}{\beta^{*1/2}}, \omega_{log} = \frac{\sigma^{1/2} K_{log}^{1/2}}{\sqrt{\beta - \alpha \beta^* y}}. \quad (2.52)$$

В согласии с гипотезой Неймана в логарифмическом слое получено:

$$\nu_T = \kappa u_T y \Rightarrow \omega_{log} = \frac{K_{log}^{1/2}}{\beta^{*1/4} \kappa y}, \quad (2.53)$$

откуда наведенное моделью  $k$ — $\omega$  значение константы Кармана равно  $\kappa = 0.4182$ . Использование зависимости (2.52) в качестве условий Дирихле для  $K$  годится лишь в ограниченном количестве случаев, и совершенно неудовлетворительно для застойных зон у стенки, где турбулентность согласно (2.52) равна нулю, а на опыте — может быть максимальна. В этом смысле зависимость (2.52) для  $\omega$  более универсальна, поскольку не использует  $u_T$  для связи между  $K$  и  $\omega$ .

В результате в алгоритме зная в крайней ячейке у стенки значения скорости  $U_p$  и турбулентной энергии  $K_p$  с предыдущего шага по времени, с помощью молекулярной вязкости  $\nu$  и расстоянию до стенки  $y_p$  определялась  $u_T$ . Расчет  $u_T$  и в последующем напряжения на стенке производился оценкой этой величины по значению касательной скорости в центре крайней ячейки и проинтегрированному профилю скорости (2.46). Профиль скорости в вязком подслое не интегрировался в явном виде, так как более предпочтительным приближенным вариантом являлось использование для расчета профиля Сполдинга или Рейхардта. Профиль Рейхардта имеет вид:

$$U^+ = F_{Rei}(y^+) = \frac{1}{\kappa} \log(1 + \kappa y^+) + 7.8 \left( 1 - \exp\left(-\frac{y^+}{11}\right) - \frac{y^+}{11} \exp\left(-\frac{y^+}{3}\right) \right). \quad (2.54)$$

Итерационный расчет, например, с помощью профиля Рейхардта, выглядит как необходимость найти  $y^+$  для заданного числа Рейнольдса  $Re_\nu$ , вычисленного по скорости в крайней ячейке:

$$Re_\nu = \frac{U_p y_p}{\nu} = y^+ F_{Rei}(y^+). \quad (2.55)$$

Здесь не требуется определять, лежит ли ячейка в вязком или логарифмическом подслое; расчет методом Ньютона при правильном выборе начального приближения, зависящего от числа Рейнольдса, сходится очень быстро, для ускорения

же можно просто затабулировать зависимость  $y^+(\text{Re}_v)$  и вместо расчетов проводить поиск по таблице.

Критерием выбора между условиями Дирихле (2.49) или (2.50) для обоих турбулентных параметров и условием Неймана для турбулентной энергии является условие:

$$3u_T^2 \leq K_p. \quad (2.56)$$

В этом случае для крайней ячейки устанавливается на границе условия Неймана (нулевая нормальная производная) для  $K$ , а  $\omega$  в этой ячейке рассчитывается согласно (2.52). Для расчета  $K$  в крайней ячейке необходимо иметь средние по ячейке значения производства и диссипации турбулентной энергии; это не их значения в центре ячейки, поскольку обе величины сильно меняются у стенки. Необходимо вычислить интегралы:

$$P = \frac{1}{y_M} \int_0^{y_M} \nu_T \left( \frac{\partial U}{\partial y} \right)^2 dy, \quad \varepsilon = \frac{1}{y_M} \int_0^{y_M} \beta^* K \omega dy. \quad (2.57)$$

Здесь индексом  $M$  обозначено положение противоположного от стенки края ячейки. Если центр ячейки уже в логарифмическом подслое, то положение границы вязкого подслоя рассчитать как точку непрерывной состыковки профилей  $\omega_v$  (2.50) и  $\omega_{log}$  (2.53), откуда получается значение

$$y_v = \frac{6\nu\beta^{*1/4}\kappa}{\beta K_p^{1/2}} = 18.35 \frac{\nu}{K_p^{1/2}}, \quad \text{Re}_v = \frac{y_v \sqrt{K_v}}{\nu} = 18.35. \quad (2.58)$$

Эта величина очень близка к значению 20, рекомендованному для точки состыковки профилей в [141]. Профиль  $K$  в вязком подслое можно также продлить по непрерывности, что фиксирует константу  $A$ :

$$K = K_{log} \left( \frac{y}{y_v} \right)^\delta, \quad y < y_v. \quad (2.59)$$

Расчет средних значений производства и диссипации турбулентности в крайней ячейке проводился с учетом практически нулевого производства в вязком слое. Получено 2 случая: граница вязкого и логарифмического слоя проходит внутри

ячейки, т.е.  $y_M > y_v$ , и вся ячейка лежит в вязком слое. В первом случае:

$$\begin{aligned}
 y_M &= 2y_p > y_v : \\
 P &= \frac{1}{y_M} \int_{y_v}^{y_M} \nu_T \left( \frac{\partial U}{\partial y} \right)^2 dy = \frac{u_T^4}{y_M} \int_{y_v}^{y_M} \frac{\omega}{K_{log}} dy = \frac{u_T^4}{2K_{log}^{1/2} \beta^{*1/4} \kappa y_p} \log \frac{2y_p}{y_v}, \\
 \varepsilon &= \frac{1}{y_M} \int_0^{y_M} \beta^* K \omega dy = \frac{\beta^*}{y_M} \left( \int_0^{y_v} K \omega dy + \int_{y_v}^{y_M} K \omega dy \right) = \\
 &= \frac{\beta^* K_{log}}{2y_p} \left[ \frac{6\nu}{\beta} \frac{y_v^{-1}}{\delta - 1} + \frac{K_{log}^{1/2}}{\beta^{*1/4} \kappa} \log \frac{2y_p}{y_v} \right].
 \end{aligned} \tag{2.60}$$

Во втором случае:

$$y_M \leq y_v : P = 0, \varepsilon = \frac{1}{y_M} \int_0^{y_M} \beta^* K \omega dy = \frac{3 \cdot 2^\delta \nu \beta^* K_{log}}{\beta (\delta - 1) y_p} \left( \frac{y_p}{y_v} \right)^\delta. \tag{2.61}$$

Следует учесть при этом, что

$$K_{log} = \begin{cases} K_p \left( \frac{y_v}{y_p} \right)^\delta, & y_p < y_v, \\ K_p & y_p \geq y_v. \end{cases} \tag{2.62}$$

Граничное условие для  $\omega$  получается по вычисленному  $K$ , т.е. в крайней у стенки ячейке уравнение для  $\omega$  не рассчитывался.

### 2.1.7 Начальные условия

В начальный момент времени  $t = 0$  во всей расчетной области задавалось распределение температуры  $T^{ini} = T^{ini}(x, y, z)$ , давления  $P^{ini} = p^{ini}(x, y, z)$  и скоростей  $\mathbf{u}^{ini} = \mathbf{u}^{ini}(x, y, z)$ . Начальные концентрации компонент задавались через их ненормализованные молярные доли  $C_k^{ini} = C_k^{ini}(x, y, z)$ , что для совершенных газов эквивалентно объемным долям. Пересчет на парциальные плотности и на массовые доли производился с учетом начального давления и температуры с помощью следующих соотношений:

$$Y_k^{ini} = \frac{C_k^{ini} W_k}{\sum_j C_j^{ini} W_j}, \quad \rho^{ini} = \frac{P^{ini}}{RT^{ini} \sum_j Y_j^{ini} / W_j}, \quad \rho_k^{ini} = \frac{P^{ini} C_k^{ini} W_k}{RT^{ini} \sum_j C_j^{ini}}. \tag{2.63}$$

Чаще всего начальные функции распределения параметров среды представляли собой кусочно-постоянные функции.

При использовании модели турбулентности также задавались параметры турбулентности  $K$ ,  $\omega$ . Обычно при этом устанавливался параметр  $K^{ini} = K^{ini}(x, y, z)$ , легко оценивающийся по средней скорости хаотических пульсаций. Вторым параметром  $\omega^{ini} = \omega^{ini}(x, y, z)$  определялся на основе задания начального соотношения между турбулентной и молекулярной вязкостями смеси (турбулентного числа Рейнольдса):

$$\text{Re}_T = \frac{\mu_T}{\mu} = \frac{\rho K^{ini}}{\mu \omega^{ini}}. \quad (2.64)$$

Начальная молекулярная вязкость вычислялась на основе начальной температуры и концентраций компонент.

Заметим, что в окрестности стенки параметр  $\omega$  должен, как правило, корректироваться, чтобы граничные условия для турбулентных параметров были согласованы.

## 2.2 Вычислительная модель для описания турбулентных течений реагирующих газов

Решение описанной выше системы дифференциальных уравнений осуществлялось методом разделения по физическим процессам. Система была разбита на газодинамическую часть, содержащую конвективные и диффузионные члены, и химическую часть. Отдельно рассматривались турбулентные источники.

### 2.2.1 Расчет газовой динамики

При расчете газодинамической части системы уравнений были рассмотрены несколько разностных схем. Первоначально использовалась численная схема второго порядка по пространству и времени, предложенная в работе Гуан-

Шань Цзяня и Эйтана Тедмора (JT) [142], которая относится к семейству центральных схем и является двумерной модификацией одномерной схемы Хаима Нессьяху и Тедмора [143] (NT). Центральные схемы являются универсальными конечно-разностными методами для решения нелинейных конвективно-диффузионных уравнений, так как не зависят от внутренней структуры исходной системы. Родоначальником схем данного типа является схема первого порядка Лакса—Фридрихса [144—146]. Схема JT (как и NT) представляет собой метод типа предиктор-корректор. На первом этапе исходя из средних значений переменных в ячейках разностной сетки с помощью не осциллирующей кусочно-линейной аппроксимации определяются значения в угловых точках сетки. На шаге корректора с помощью «шахматного» усреднения по определенным на этапе предиктора значениям определяется эволюция средних значений. Данная схема является вычислительно довольно простой так как для достижения своей точности не требует, к примеру, использования каких-либо сложных и трудоемких решателей Римана, которые используются в противопотоковых схемах высокого порядка точности, и в ней нет необходимости вычислять точный якобиан системы уравнений. Также она является действительно многомерной и не требует применения методов расщепления по пространственным переменным (хотя и не исключает их использования). Данная схема показала довольно хорошие результаты при решении тестовых задач как авторами метода [142; 143], так и в ходе данного исследования. Однако, стоит отметить, что данный метод из-за своей шахматной структуры в программной реализации требует проведения дополнительных операций с данными, хранения некоторых вспомогательных переменных и проведения двух проходов метода со смещением, что затрудняет постановку граничных условий.

В связи с этим в дальнейшем были рассмотрены несколько относительно новых центральных схем, которые, обладая всеми описанными выше достоинствами центральных схем, вычислительно проще схемы JT, требуют меньше памяти под вспомогательные переменные, обладают меньшей численной вязкостью, а также, что является наиболее важным, в них проще реализуются граничные условия для областей со сложной геометрией. Среди них стоит отметить схему второго порядка по пространству Александра Курганова и Тедмора (КТ) [147] и схему третьего порядка по пространству Курганова и Дорона Леви (KL) [148]. Схема КТ является относительно новой в семействе центральных схем. Основная идея при ее построении — использование более точной инфор-

мации о локальной скорости распространения возмущений. Схема KL по сути является модификацией схемы КТ, направленной на повышение точности, так как в ней используется CWENO (Central Weighted Essentially Non-Oscillatory) аппроксимация высокого порядка точности значений параметров на границах ячеек. Данный тип интерполяции представляет собой комбинацию двух линейных функций и одной параболы и гарантирует третий порядок точности в области гладкого решения и автоматическое переключение ко второму порядку в области больших градиентов. Обе схемы показали неплохие результаты, однако, что будет показано ниже, лучше всего на тестовых задач поведение описывала схема KL, в тоже время вычислительный затраты на повышение точности были несущественны.

Поэтому рассмотрим, как использовалась данная схема для аппроксимации исходной системы законов сохранения (2.1) — (2.3), записанной в векторном виде:

$$\mathbf{U}_t + \mathbf{F}^x(\mathbf{U})_x + \mathbf{F}^y(\mathbf{U})_y + \mathbf{F}^z(\mathbf{U})_z + \mathbf{Q}_x^x + \mathbf{Q}_y^y + \mathbf{Q}_z^z = \mathbf{S}, \quad (2.65)$$

где  $\mathbf{U}$  — вектор консервативных переменных,  $\mathbf{F}^x$ ,  $\mathbf{F}^y$ ,  $\mathbf{F}^z$  — вектора конвективных потоков по пространственным направлениям,  $\mathbf{Q}^x$ ,  $\mathbf{Q}^y$ ,  $\mathbf{Q}^z$  — вектора диффузионных потоков по пространственным направлениям,  $\mathbf{S}$  — источники.

Вектор начальных условий можно записать в виде:

$$\mathbf{U}(x, y, z, t = 0) = \mathbf{U}_0(x, y, z).$$

Для аппроксимации решения была введена параллелепипедальная сетка с шагом по каждому пространственному измерению  $(\Delta x, \Delta y, \Delta z) = (h_x, h_y, h_z)$ . Интегрирование исходной системы уравнений производилось по полученным таким образом ячейкам:

$$I(x, y, z) = \{\xi, \varphi, \zeta \mid |\xi - x| \leq \Delta x/2, |\varphi - y| \leq \Delta y/2, |\zeta - z| \leq \Delta z/2\}.$$

Для того, чтобы аппроксимировать систему (2.65) центральной схемой KL вначале строилось кусочно-параболическое решение в каждой ячейке сетки  $I_{i,j,k}$  (CWENO). Для этого для каждой ячейки по каждому пространственному измерению для каждой консервативной переменной вводился квадратичный полином как комбинация трех полиномов:  $\mathbf{P}_L^{\{x,y,z\}}$ ,  $\mathbf{P}_R^{\{x,y,z\}}$  и  $\mathbf{P}_C^{\{x,y,z\}}$ . Для удобства координаты центра ячейки  $I_{i,j,k}$  обозначим  $x_{i,j,k}$ . Тогда, к примеру, для направления  $x$  в точке  $x_{i,j,k}$  квадратичный полином записывался следующим образом:

$$\mathbf{P}_{i,j,k}^x(x) = \mathbf{P}^x(x, x_{i,j,k}) = \omega_L^x \mathbf{P}_L^x(x, x_{i,j,k}) + \omega_R^x \mathbf{P}_R^x(x, x_{i,j,k}) + \omega_C^x \mathbf{P}_C^x(x, x_{i,j,k}), \quad (2.66)$$

где веса  $\omega_m^x \geq 0$ ,  $m \in \{C, R, L\}$  и  $\sum_m \omega_m^x = 1$ .

При этом под векторной структурой полиномов подразумевается отдельный полином для каждой компоненты вектора консервативных переменных  $\mathbf{U}$ . Полиномы  $\mathbf{P}_L^x(x)$  и  $\mathbf{P}_R^x(x)$  соответствуют левой и правой линейной аппроксимации соответственно, а  $\mathbf{P}_C^x(x)$  — парабола с центром в рассматриваемой точке  $x_{i,j,k}$ . Верхние индексы указывают пространственное направление к которому относятся данные переменные. Аппроксимационные функции для направления  $x$  могут быть записаны следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_L^x(x, x_{i,j,k}) &= \bar{\mathbf{u}}_{i,j,k} + \frac{\bar{\mathbf{u}}_{i,j,k} - \bar{\mathbf{u}}_{i-1,j,k}}{\Delta x} (x - x_{i,j,k}), \\ \mathbf{P}_R^x(x, x_{i,j,k}) &= \bar{\mathbf{u}}_{i,j,k} + \frac{\bar{\mathbf{u}}_{i+1,j,k} - \bar{\mathbf{u}}_{i,j,k}}{\Delta x} (x - x_{i,j,k}), \\ \mathbf{P}_C^x(x, x_{i,j,k}) &= \bar{\mathbf{u}}_{i,j,k} - \frac{1}{12} (\bar{\mathbf{u}}_{i+1,j,k} - 2\bar{\mathbf{u}}_{i,j,k} + \bar{\mathbf{u}}_{i-1,j,k}) - \\ &\quad - \frac{1}{12} (\bar{\mathbf{u}}_{i,j+1,k} - 2\bar{\mathbf{u}}_{i,j,k} + \bar{\mathbf{u}}_{i,j-1,k}) - \frac{1}{12} (\bar{\mathbf{u}}_{i,j,k+1} - 2\bar{\mathbf{u}}_{i,j,k} + \bar{\mathbf{u}}_{i,j,k-1}) + \\ &\quad + \frac{\bar{\mathbf{u}}_{i+1,j,k} - \bar{\mathbf{u}}_{i-1,j,k}}{2\Delta x} (x - x_{i,j,k}) + \frac{\bar{\mathbf{u}}_{i+1,j,k} - 2\bar{\mathbf{u}}_{i,j,k} + \bar{\mathbf{u}}_{i-1,j,k}}{\Delta x^2} (x - x_{i,j,k})^2, \end{aligned} \quad (2.67)$$

где  $\bar{\mathbf{u}}_{i,j,k}$  — среднее значение консервативных переменных в ячейке  $I_{i,j,k}$ . Аналогичным образом вводились полиномы по направлениям  $y$  и  $z$ .

Коэффициенты  $\omega_m^{\{x,y,z\}}$  выбирались таким образом, чтобы гарантировать в гладких областях максимальный порядок точности (в данном случае третий). В области разрыва они автоматически переключаются на лучший односторонний шаблон, обеспечивающий наименьшие осцилляции. Веса определялись следующим образом:

$$\begin{aligned} \omega_m^{\{x,y,z\}} &= \frac{\alpha_m}{\sum_l \alpha_l}, \alpha_m = \frac{c_m}{\left(\varepsilon + IS_m^{\{x,y,z\}}\right)^p}, \\ l, m &\in \{C, L, R\}, c_R = c_L = 1/4, c_C = 1/2. \end{aligned} \quad (2.68)$$

Константа  $\varepsilon$  устанавливалась неким малым числом  $\varepsilon \sim 10^{-6}$  для того, чтобы знаменатель не обратился в ноль. В общем значение параметра  $p$  выбирается в зависимости от решаемой задачи таким образом, чтобы обеспечить максимальный порядок точности в гладких областях и отсутствие осцилляций в местах разрывов. В расчетах рассматривался диапазон значений  $p \in [0.2, 2.0]$ . Показатели гладкости  $IS_m^x$  по направлению  $x$  определялись следующим образом:

$$\mathbf{IS}_m^x = \sum_{l=1}^2 \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \Delta x^{2l-1} \left( \mathbf{P}_m^{(l)}(x) \right)^2 dx. \quad (2.69)$$



В нашем случае для направления  $x$  было получено:

$$\begin{aligned} \mathbf{IS}_L^x &= (\bar{\mathbf{U}}_{i,j,k} - \bar{\mathbf{U}}_{i-1,j,k})^2, \mathbf{IS}_R^x = (\bar{\mathbf{U}}_{i+1,j,k} - \bar{\mathbf{U}}_{i,j,k})^2, \\ \mathbf{IS}_C^x &= \frac{13}{3}(\bar{\mathbf{U}}_{i+1,j,k} - 2\bar{\mathbf{U}}_{i,j,k} + \bar{\mathbf{U}}_{i-1,j,k})^2 + \frac{1}{4}(\bar{\mathbf{U}}_{i+1,j,k} - \bar{\mathbf{U}}_{i-1,j,k})^2. \end{aligned} \quad (2.70)$$

Аналогичным образом определялись показатели  $\mathbf{IS}_i^{y,z}$  и по другим пространственным направлениям.

Так у нас рассматривается система уравнений, то показатели гладкости необходимо задавать в виде нормированного среднего значения показателей для каждой переменной исходной системы [149], тем самым вводя единые показатели гладкости для всех консервативных переменных:

$$IS_m^x = \frac{1}{N_{eq}} \sum_{l=1}^{N_{eq}} \frac{\mathbf{IS}_m^{x(l)}}{\varepsilon + \|\mathbf{U}^{(l)}\|_2}, \quad m \in \{C, L, R\}, \quad (2.71)$$

где  $\mathbf{U}^{(l)}$  — компонента вектора  $\mathbf{U}$ ,  $N_{eq}$  — число уравнений в системе (2.65).

Норма  $\|\mathbf{U}^{(l)}\|_2$  определялась следующим образом:

$$\|\mathbf{U}^{(m)}\|_2 = \sqrt{\sum_{i,j,k} |\mathbf{U}_{i,j,k}^{(m)}|^2 \Delta x \Delta y \Delta z}. \quad (2.72)$$

Авторы метода предложили для исходной системы уравнений ввести следующую дискретизацию пространственных производных:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{\mathbf{U}}_{i,j,k}}{dt} &= -\frac{\mathbf{H}_{i+1/2,j,k}^x - \mathbf{H}_{i-1/2,j,k}^x}{\Delta x} - \frac{\mathbf{H}_{i,j+1/2,k}^y - \mathbf{H}_{i,j-1/2,k}^y}{\Delta y} - \\ &\quad - \frac{\mathbf{H}_{i,j,k+1/2}^z - \mathbf{H}_{i,j,k-1/2}^z}{\Delta z} + \mathbf{Q}_{i,j,k}^x + \mathbf{Q}_{i,j,k}^y + \mathbf{Q}_{i,j,k}^z, \end{aligned} \quad (2.73)$$

где  $\mathbf{H}_{i+1/2,j,k}^x$ ,  $\mathbf{H}_{i,j+1/2,k}^y$ ,  $\mathbf{H}_{i,j,k+1/2}^z$  — вектора конвективных потоков на гранях по направлениям  $x$ ,  $y$  и  $z$  соответственно,  $\mathbf{Q}_{i,j,k}^x$ ,  $\mathbf{Q}_{i,j,k}^y$ ,  $\mathbf{Q}_{i,j,k}^z$  — аппроксимация высокого порядка диффузионных членов по пространственным направлениям.

Конвективные потоки были определены следующим образом:

$$\begin{aligned}
\mathbf{H}_{i+1/2,j,k}^x &= \frac{1}{2} \left( \mathbf{F}^x(\mathbf{U}_{i+1/2,j,k}^+) + \mathbf{F}^x(\mathbf{U}_{i+1/2,j,k}^-) \right) - \\
&\quad - \frac{a_{i+1/2,j,k}^x}{2} \left[ \mathbf{U}_{i+1/2,j,k}^+ - \mathbf{U}_{i+1/2,j,k}^- \right], \\
\mathbf{H}_{i,j+1/2,k}^y &= \frac{1}{2} \left( \mathbf{F}^y(\mathbf{U}_{i,j+1/2,k}^+) + \mathbf{F}^y(\mathbf{U}_{i,j+1/2,k}^-) \right) - \\
&\quad - \frac{a_{i,j+1/2,k}^y}{2} \left[ \mathbf{U}_{i,j+1/2,k}^+ - \mathbf{U}_{i,j+1/2,k}^- \right], \\
\mathbf{H}_{i,j,k+1/2}^z &= \frac{1}{2} \left( \mathbf{F}^z(\mathbf{U}_{i,j,k+1/2}^+) + \mathbf{F}^z(\mathbf{U}_{i,j,k+1/2}^-) \right) - \\
&\quad - \frac{a_{i,j,k+1/2}^z}{2} \left[ \mathbf{U}_{i,j,k+1/2}^+ - \mathbf{U}_{i,j,k+1/2}^- \right].
\end{aligned} \tag{2.74}$$

Потоки (2.74) строятся с использованием значений консервативных переменных на границах вычислительных ячеек  $\mathbf{U}_{i+1/2,j,k}^\pm$ ,  $\mathbf{U}_{i,j+1/2,k}^\pm$ ,  $\mathbf{U}_{i,j,k+1/2}^\pm$ , которые определяются на основании введенной ранее кусочно-полиномиальной аппроксимации (2.66):

$$\begin{aligned}
\mathbf{U}_{i+1/2,j,k}^+ &= \mathbf{P}_{i+1,j,k}^x(x_{i+1/2,j,k}), \quad \mathbf{U}_{i+1/2,j,k}^- = \mathbf{P}_{i,j,k}^x(x_{i+1/2,j,k}), \\
\mathbf{U}_{i,j+1/2,k}^+ &= \mathbf{P}_{i,j+1,k}^y(y_{i,j+1/2,k}), \quad \mathbf{U}_{i,j+1/2,k}^- = \mathbf{P}_{i,j,k}^y(y_{i,j+1/2,k}), \\
\mathbf{U}_{i,j,k+1/2}^+ &= \mathbf{P}_{i,j,k+1}^z(z_{i,j,k+1/2}), \quad \mathbf{U}_{i,j,k+1/2}^- = \mathbf{P}_{i,j,k}^z(z_{i,j,k+1/2}).
\end{aligned} \tag{2.75}$$

Для получения более точных данных при интегрировании использовалась информация о скорости распространения возмущений на границах ячеек. Максимальное значение данной скорости по каждому направлению оценивалось следующим образом:

$$\begin{aligned}
a_{i+1/2,j,k}^x &= \max \left\{ \rho \left( \frac{\partial \mathbf{F}^x(\mathbf{U}_{i+1/2,j,k}^-)}{\partial \mathbf{U}} \right), \rho \left( \frac{\partial \mathbf{F}^x(\mathbf{U}_{i+1/2,j,k}^+)}{\partial \mathbf{U}} \right) \right\}, \\
a_{i,j+1/2,k}^y &= \max \left\{ \rho \left( \frac{\partial \mathbf{F}^y(\mathbf{U}_{i,j+1/2,k}^-)}{\partial \mathbf{U}} \right), \rho \left( \frac{\partial \mathbf{F}^y(\mathbf{U}_{i,j+1/2,k}^+)}{\partial \mathbf{U}} \right) \right\}, \\
a_{i,j,k+1/2}^z &= \max \left\{ \rho \left( \frac{\partial \mathbf{F}^z(\mathbf{U}_{i,j,k+1/2}^-)}{\partial \mathbf{U}} \right), \rho \left( \frac{\partial \mathbf{F}^z(\mathbf{U}_{i,j,k+1/2}^+)}{\partial \mathbf{U}} \right) \right\},
\end{aligned} \tag{2.76}$$

где  $\rho(A) = \max_i |\lambda_i|$  — спектральный радиус матрицы Якоби  $A$  исходной системы уравнений (2.65),  $\lambda_i$  — ее собственные числа.

Для решения полученной системы уже обыкновенных дифференциальных уравнений (2.73) может быть использован, в принципе, практически любой метод интегрирования. Однако, в работе использовался специально разработанный для решения такого рода задач SSP (Strong Stability Preserving) метод Рунге—Кутты [150] высокого порядка точности.

Если обозначить правую часть системы (2.73) как  $\mathbf{L}_{i,j,k}$ , то данный метод можно записать следующим образом:

для метода второго порядка

$$\begin{cases} \mathbf{U}_{i,j,k}^{(1)} = \mathbf{U}_{i,j,k}^n + \Delta t \cdot \mathbf{L}_{i,j,k}(\mathbf{U}_{i,j,k}^n), \\ \mathbf{U}_{i,j,k}^{(n+1)} = \frac{1}{2}\mathbf{U}_{i,j,k}^n + \frac{1}{2}\mathbf{U}_{i,j,k}^{(1)} + \frac{1}{2}\Delta t \cdot \mathbf{L}_{i,j,k}(\mathbf{U}_{i,j,k}^{(1)}), \end{cases} \quad (2.77)$$

для метода третьего порядка

$$\begin{cases} \mathbf{U}_{i,j,k}^{(1)} = \mathbf{U}_{i,j,k}^{(n)} + \Delta t \cdot \mathbf{L}_{i,j,k}(\mathbf{U}_{i,j,k}^{(n)}), \\ \mathbf{U}_{i,j,k}^{(2)} = \frac{3}{4}\mathbf{U}_{i,j,k}^{(n)} + \frac{1}{4}\mathbf{U}_{i,j,k}^{(1)} + \frac{1}{4}\Delta t \cdot \mathbf{L}_{i,j,k}(\mathbf{U}_{i,j,k}^{(1)}), \\ \mathbf{U}_{i,j,k}^{(n+1)} = \frac{1}{3}\mathbf{U}_{i,j,k}^{(n)} + \frac{2}{3}\mathbf{U}_{i,j,k}^{(2)} + \frac{2}{3}\Delta t \cdot \mathbf{L}_{i,j,k}(\mathbf{U}_{i,j,k}^{(2)}), \end{cases} \quad (2.78)$$

где верхние индексы  $n$  и  $n + 1$  соответствует номеру текущей итерации по времени.

### 2.2.2 Расчет химической кинетики

Как уже отмечалось ранее, для решения исходной системы уравнений (2.1) — (2.3) использовался метод расщепления по физическим процессам. При этом для химической стадии исходная система была сведена к следующей системе кинетических уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_k}{\partial t} &= \dot{\omega}_k + \dot{m}_k, \quad k = 1, 2, \dots, N_C, \\ \frac{\partial E}{\partial t} &= \dot{q} + \dot{q}_m. \end{aligned} \quad (2.79)$$

В данной системе, в отличие от исходной, были добавлены слагаемые, отвечающие за вброс в расчетную область дополнительной массы ( $\dot{m}_k$  — интенсивность притока  $k$ -го компонента из источника на единицу объема) и энергии  $\dot{q}$  на единицу объема, используемые в некоторых случаях для прямого инициирования горения или детонации. Слагаемое  $\dot{q}_m$  во втором уравнении системы (2.79) отвечает за энергию вбрасываемой в систему массы.

В виду отсутствия пространственных производных на данном этапе решение данной системы производилось для каждого узла вычислительной сетки независимо от соседних.

В системе (2.79) удобно перейти к молярным концентрациям на единицу объема  $X_k$ , используя соотношения (2.11):

$$\begin{aligned} \frac{dX_k}{dt} &= \hat{\omega}_k + \dot{m}_k/W_k, \quad k = 1, 2, \dots, N_C, \\ \frac{dE}{dt} &= \dot{q} + \dot{q}_m, \end{aligned} \quad (2.80)$$

где  $\hat{\omega}_k = \dot{\omega}_k/W_k$  — молярная интенсивность образования компонента  $k$ .

Внешние источники массы и энергии считались источниками постоянной интенсивности, которые действуют определенное время в определенном объеме. Формально модель можно записать следующим образом:

$$\dot{m}_k = \sum_s \dot{m}_{s,k}, \quad \dot{q} = \sum_s \dot{q}_s, \quad (2.81)$$

где  $s$  — номер источника (их может быть несколько). Каждый из источников определялся выражениями для своего источника массы компонент и энергии:

$$\begin{aligned} \dot{m}_{s,k} &= \frac{\Delta m_{s,k}}{t_{s,ign} \Omega_{s,ign}} \begin{cases} 1, & |\mathbf{x} - \mathbf{x}_{s,ign}| \leq r_{s,ign}, t_{s,start} \leq t \leq t_{s,start} + t_{s,ign} \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}, \\ \dot{q}_s &= \frac{\Delta q_s}{t_{s,ign} \Omega_{s,ign}} \begin{cases} 1, & |\mathbf{x} - \mathbf{x}_{s,ign}| \leq r_{s,ign}, t_{s,start} \leq t \leq t_{s,start} + t_{s,ign} \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}, \end{aligned} \quad (2.82)$$

где  $\Delta m_{s,k}$  — общая масса компоненты  $k$  из источника  $s$ ,  $\Delta q_s$  — общая дополнительная энергия из источника  $s$ ,  $\Omega_{s,ign} = \frac{4\pi}{3} r_{s,ign}^3$  — объем, занимаемый источником  $s$ .

Каждый из источников  $s$  представлял собой шар с центром в точке  $\mathbf{x}_{s,ign}$  и радиусом  $r_{s,ign}$ , который включался в момент времени  $t_{s,start}$  и действовал в течение времени  $t_{s,ign}$ . На дискретной расчетной сетке, а также в случае расположения вблизи края объем источника фактически уже корректировался так, чтобы сохранить значение общей подаваемой из источника массы и энергии. Подобное моделирование делает различные источники рассогласованными в пространстве и времени, при этом перекрывающиеся во времени и пространстве источники суммировались.

Энергия, приходящая вместе с массой, вычислялась на основе источников с помощью выражения:

$$\dot{q}_m = \sum_s \dot{q}_{s,m} = \sum_s \sum_{k=1}^{N_C} \dot{m}_{s,k} e_k(T_{q,s}) = R \sum_s T_{q,s} \sum_{k=1}^{N_C} \dot{m}_{s,k} \left( \hat{H}_k(T_{q,s}) - 1 \right), \quad (2.83)$$

где  $T_{q,s}$  — температура газа источника  $s$ ,  $e_k$  — внутренняя энергия  $k$ -го компонента источника на единицу массы.

## Учет закона сохранения массы элементов

В любом кинетическом механизме набор стехиометрических коэффициентов таков, что далеко не все значения  $\hat{\omega}_k$  независимы: в каждой реакции соблюдается закон сохранения элементов, т.е. масса элемента на кинетической стадии может меняться лишь за счет внешнего источника. Это значит, что для части компонент интенсивности их изменения в химических реакциях линейно выражаются через интенсивности изменения прочих, «независимых». Зависимые компоненты удобно разместить в списке компонент последними, эти компоненты и есть представители каждого из элементов, и порядок перечисления компонент в Таблице 1 этому соответствует. Имеем:

$$\hat{\omega}_k = \sum_{j=1}^{N_L} \lambda_{k-N_L,j} \hat{\omega}_j, \quad k = N_L + 1, \dots, N_C, \quad (2.84)$$

где  $N_L = N_C - N_E$  — число независимых уравнений.

Закон сохранения элементов в химических реакциях можно записать следующим образом:

$$\sum_{k=1}^{N_C} n_{j,k} \hat{\omega}_k = 0, \quad j = 1, \dots, N_E. \quad (2.85)$$

Редукция системы (2.85) удобнее всего проводится тогда, когда число зависимых компонент  $N_E$  располагаются позади списка. Чтобы из матрицы  $n_{j,k}$  получить матрицу  $\lambda_{k,j}$ , следует переписать систему (2.85) следующим образом:

$$\sum_{k=N_L+1}^{N_C} n_{j,k} \hat{\omega}_k = - \sum_{k=1}^{N_L} n_{j,k} \hat{\omega}_k, \quad j = 1, \dots, N_E. \quad (2.86)$$

В левой части (2.86) стоит произведение «правого» квадратного минора матрицы  $n_{j,k}$  на вектор интенсивности производства зависимых компонент, справа — линейная комбинация независимых компонент. Квадратный минор матрицы  $n_{j,k}$  имеет размер  $N_E$ , его компоненты вычисляются как:

$$z_{j,p} = n_{j,p+N_L}, \quad j, p = 1, \dots, N_E. \quad (2.87)$$

Обозначим  $\mathbf{A}$  — обратную к  $\mathbf{Z}$  квадратную матрицу. Умножая (2.86) слева на  $\mathbf{A}$ , получим:

$$\hat{\omega}_{p+N_L} = \sum_{j=1}^{N_E} a_{p,j} \sum_{k=N_L+1}^{N_C} n_{j,k} \hat{\omega}_k = - \sum_{j=1}^{N_E} a_{p,j} \sum_{k=1}^{N_L} n_{j,k} \hat{\omega}_k, \quad p = 1, \dots, N_E. \quad (2.88)$$

Выражение (2.88) представляет собой закон (2.84), причем для коэффициентов матрицы  $\lambda_{p,q}$  имеем:

$$\lambda_{p,k} = - \sum_{j=1}^{N_E} a_{p,j} n_{j,k}, \quad p = 1, \dots, N_C - N_L, \quad k = 1, \dots, N_L. \quad (2.89)$$

Матрица  $\lambda_{p,k}$  существенно зависит как от порядка размещения химических компонентов в списке, в частности, список должен быть таков, чтобы существовала матрица  $a_{p,j}$  — обратная к правому квадратному минору матрицы элементного состава  $n_{j,k}$ . Если это не так, порядок компонентов следует изменить. Порядок элементов менять не обязательно (от перестановки строк ранг «правого» минора не меняется).

Закон сохранения элементов фактически накладывает ограничения на кинетический механизм; он более сильный, чем закон сохранения массы: чтобы получить закон сохранения массы смеси из законов (2.85), нужно умножить каждое уравнение на атомную массу соответствующего элемента  $w_j$  и сложить.

Проведя указанные операции с элементным составом используемой горючей смеси водорода с воздухом, была получена следующая матрица коэффициентов (для порядка размещения, указанного в Таблице 1):

$$\lambda_{p,q} = \begin{cases} -1.0 & -0.5 & -0.5 & 0.0 & -0.5 & -1.0 \\ -0.5 & -0.5 & 0.0 & -0.5 & -1.0 & -1.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \end{cases}, \quad (2.90)$$

Число независимых компонент для этого механизма равно  $N_L = 6$ .

Подставляя закон (2.84) в уравнения (2.80), для зависимых компонент были получены следующие выражения:

$$\frac{dX_k}{dt} = \sum_{j=1}^{N_L} \lambda_{k-N_L,j} \frac{dX_j}{dt} + \left( \frac{\dot{m}_k}{W_k} - \sum_{j=1}^{N_L} \lambda_{k-N_L,j} \frac{\dot{m}_j}{W_j} \right), \quad k = N_L + 1, \dots, N_C. \quad (2.91)$$

Второй член в выражениях (2.91) связан с тем, что закон сохранения элементов и закон действующих масс к источникам массы  $\dot{m}_k$  не относятся.

В том случае, если интенсивность источников массы постоянна в течение шага по времени  $\tau$ , систему (2.91) можно проинтегрировать, и получить следующее выражение для новых значений зависимых концентраций:

$$X_k^+ = X_k + \sum_{j=1}^{N_L} \lambda_{k-N_L,j} (X_j^+ - X_j) + \tau \left( \frac{\dot{m}_k}{W_k} - \sum_{j=1}^{N_L} \lambda_{k-N_L,j} \frac{\dot{m}_j}{W_j} \right), \quad (2.92)$$

$$k = N_L + 1, \dots, N_C.$$

Следует отметить, что эта модификация является не линеаризацией или упрощением системы, а отделением ее линейной части от нелинейной, которое позволяет ускорить решение и, возможно, увеличить точность получающихся результатов.

### Частные производные скорости образования компонент

Для используемого метода расчета системы уравнений химической кинетики необходимо вычисление якобиана ее правой части. Для этого требуется рассчитать частные производные от  $\hat{\omega}_k$ :

$$\hat{\psi}_{k,j} = \frac{\partial \hat{\omega}_k}{\partial X_j} = \sum_{r=1}^{N_R} \nu_{r,k} \frac{\partial \omega_r}{\partial X_j}, \quad \hat{\psi}_{k,T} = \frac{\partial \hat{\omega}_k}{\partial T} = \sum_{r=1}^{N_R} \nu_{r,k} \frac{\partial \omega_r}{\partial T}. \quad (2.93)$$

Эти величины могут быть определены либо аналитически, либо якобиан правой части ОДУ может быть вычислен численно конечно-разностным методом. Как показала практика, аналитический расчет якобиана работает в общем случае быстрее, чем конечно-разностный (результат, впрочем, зависит от типа механизма). Аналитические формулы для выпадающей реакции элементарного механизма значительно сложнее формул конечно-разностных. Следует также заметить, что производная от функции, содержащей экспоненту, также содержит экспоненту от того же аргумента, и оба раза ее вычислять не рационально. Это говорит о том, что для расчета  $\hat{\psi}_{k,j}$  и  $\hat{\psi}_{k,T}$  лучше предварительно рассчитать для каждой реакции  $\omega_{r,j} = \frac{\partial \omega_r}{\partial X_j}$  и  $\omega_{r,T} = \frac{\partial \omega_r}{\partial T}$  (численно или аналитически), а затем воспользоваться формулами (2.93).

Поскольку реакции с учетом третьего тела, как и выпадающие реакции, явно зависят от коэффициента  $M_r$ , который может быть одинаковым для

множества реакций (нет смысла вычислять его индивидуально для каждой реакции), есть смысл для таких реакций вычислить производную  $\omega_{r,M} = \frac{\partial \omega_r}{\partial M_r}$ . В данном случае в силу сложности формул производные  $\omega_{r,T}$  и  $\omega_{r,M}$  целесообразно вычислять конечными разностями.

### Расчет частных производных от интенсивности реакции

Используя формулу интенсивности реакции (2.28) с учетом обозначений множителей реакций (2.30) и коэффициента влияния третьего тела (2.29), были получены для различных вариантов реакций следующие выражения.

Для элементарной реакции обмена (прямая реакция по Аррениусу, обратная задается через константу равновесия, отсутствие влияния третьего тела) формулы имеют следующий вид:

$$\omega_{r,T} = \frac{\partial k_r^D}{\partial T} \pi_r^D - \frac{\partial k_r^R}{\partial T} \pi_r^R, \quad \omega_{r,j} = \frac{k_r^D \alpha_{r,j} \pi_r^D - k_r^R \beta_{r,j} \pi_r^R}{X_j}. \quad (2.94)$$

Формулы (2.94) можно существенно упростить с учетом структуры химической реакции обмена (2.35), т.е.:

$$\begin{aligned} \omega_{r,T} &= \frac{\partial k_r^D}{\partial T} X_A X_B - \frac{\partial k_r^R}{\partial T} X_C X_D, \\ \omega_{r,A} &= k_r^D X_B, \quad \omega_{r,B} = k_r^D X_A, \quad \omega_{r,C} = -k_r^R X_D, \quad \omega_{r,D} = -k_r^R X_C. \end{aligned} \quad (2.95)$$

Для элементарной реакции рекомбинации (2.36), в которой прямая реакция по Аррениусу или Троу—Линдеману, а обратная вычисляется через константу равновесия, все это умножается на коэффициент влияния третьего тела. Формулы производных для такой реакции с учетом ее структуры выглядят как:

$$\begin{aligned} \omega_{r,T} &= M_r \left( \frac{\partial k_r^D}{\partial T} X_A X_B - \frac{\partial k_r^R}{\partial T} X_C \right), \\ \omega_{r,A} &= M_r k_r^D X_B, \quad \omega_{r,B} = M_r k_r^D X_A, \quad \omega_{r,C} = -M_r k_r^R. \end{aligned} \quad (2.96)$$

Для элементарной реакции диссоциации, которая символически имеет вид:





формулы производных выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned}\omega_{r,T} &= M_r \left( \frac{\partial k_r^D}{\partial T} X_A - \frac{\partial k_r^R}{\partial T} X_B X_C \right), \\ \omega_{r,A} &= M_r k_r^D, \quad \omega_{r,B} = -M_r k_r^R X_C, \quad \omega_{r,C} = -M_r k_r^R X_B.\end{aligned}\tag{2.98}$$

Элементарные реакции трансформации, присутствующие в некоторых кинетических механизмах и, как правило, соответствующие переходу какого-либо радикала на новый энергетический уровень (с иной термодинамикой), символически записываются так:



Формулы производных для таких реакции выглядят как:

$$\begin{aligned}\omega_{r,T} &= M_r \left( \frac{\partial k_r^D}{\partial T} X_A - \frac{\partial k_r^R}{\partial T} X_B \right), \\ \omega_{r,A} &= M_r k_r^D, \quad \omega_{r,B} = -M_r k_r^R.\end{aligned}\tag{2.100}$$

### Производные от обратной реакции

Обратная элементарная реакция, как выпадающая, так и не выпадающая, рассчитывалась через константу равновесия  $K_r$  по формуле (2.34), поэтому для производных от интенсивности обратных реакций были получены следующие формулы, сводящие все к зависимостям от  $k_r^D$  и от ее производных:

$$\frac{\partial k_r^R}{\partial T} = K_r^{-1} \left( \frac{\partial k_r^D}{\partial T} - \frac{k_r^D}{K_r} \frac{\partial K_r}{\partial T} \right) = K_r^{-1} \frac{\partial k_r^D}{\partial T} - k_r^R \frac{\partial \ln K_r}{\partial T}.\tag{2.101}$$

Если продифференцировать выражение для константы равновесия (2.34) по температуре и использовать тождество, следующее из определений безразмерных термодинамических величин (2.19):

$$\frac{\partial \hat{G}_k}{\partial T} = -\frac{\hat{H}_k}{T},$$

можно получить:

$$\frac{\partial \ln K_r}{\partial T} = \frac{1}{T} \left[ \sum_{k=1}^{N_C} \nu_{r,k} \hat{H}_k - \sum_{k=1}^{N_C} \nu_{r,k} \right]\tag{2.102}$$

## Производные от прямой реакции

Для производной функции Аррениуса (2.31) по температуре  $T$  было получено следующее выражение:

$$\frac{\partial k_r^D}{\partial T} = k_r^D \left( \frac{B_r}{T} + \frac{\Theta_r}{T^2} \right). \quad (2.103)$$

Для прямой невыпадающей реакции, а также для обратной брутто-реакции зависимость коэффициента интенсивности  $k_r^D$  имеет вид (2.31) (с различными параметрами). Ее производная рассчитывалась по формуле (2.103). При вычислении приращений для уменьшения объема вычислений следует использовать свойство (2.103) функции Аррениуса, и значение ее для измененной температуры рассчитывать по первому приближению ряда Тейлора следующим образом:

$$k_r^D(T + \Delta_T, A_r, B_r, \Theta_r) = k_r^D(T, A_r, B_r, \Theta_r) \left[ 1 + \left( B_r + \frac{\Theta_r}{T} \right) \frac{\Delta_T}{T} \right]. \quad (2.104)$$

## Частные производные внутренней энергии

Для определения производных от внутренней энергии единицы объема смеси, линейной по концентрациям и нелинейной по температуре

$$E = \sum_{k=1}^{N_C} X_k E_k(T),$$

использовались следующие выражения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial X_k} &= E_k(T) = RT \left( \hat{H}_k(T) - 1 \right), \\ \frac{\partial E}{\partial T} &= \sum_{k=1}^{N_C} X_k \frac{\partial E_k}{\partial T} = R \sum_{k=1}^{N_C} X_k \left( \hat{C}_k(T) - 1 \right) = C_V, \end{aligned} \quad (2.105)$$

где  $C_V$  — теплоемкость единицы объема смеси при постоянном объеме.

## Решение системы кинетических уравнений

Система уравнений (2.80), (2.84) решалась методом дробных шагов, на которые разбивался основной шаг  $\Delta t$ . Размер дробного шага  $\tau \leq \Delta t$  был таков, чтобы удовлетворить условиям положительности температуры и неотрицательности концентраций, а также условиям контроля точности решения, которые изложены ниже.

Система (с постоянными на шаге источниками и учетом закона сохранения массы элементов) имела следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{dX_k}{dt} &= \hat{\omega}_k + \dot{m}_k/W_k, \quad k = 1, \dots, N_L, \quad t_0 \leq t \leq t_0 + \tau, \\ X_k &= X_k^0 + \sum_{j=1}^{N_L} \lambda_{k-N_L,j} (X_j - X_j^0) + \tau \left( \frac{\dot{m}_k}{W_k} - \sum_{j=1}^{N_L} \lambda_{k-N_L,j} \frac{\dot{m}_j}{W_j} \right), \\ N_L + 1 &\leq k \leq N_C, \\ \sum_{k=1}^{N_C} X_k E_k(T) &= E(X_j^0, T^0) + \tau \left[ \dot{q} + \sum_{k=1}^{N_C} \frac{\dot{m}_k E_k(T_s)}{W_k} \right]. \end{aligned} \quad (2.106)$$

Энергия компонент, добавляемая вместе с массой, определялась температурой  $T_s$ , которая задавалась как дополнительный параметр наряду с  $\dot{m}_k$ . Если масса компоненты отнималась, то полагалось, что  $\dot{m}_k < 0$ ,  $T_s = T$ , так как энергия компоненты в этом случае определялась по текущей температуре газовой смеси.

Задача решалась одним из вариантов метода Розенброка для жестких систем [118]. Поскольку расчет якобиана системы является трудоемкой операцией был выбран метод, в котором он вычисляется лишь один раз (хотя сам метод при этом многостадийный).

### Метод Розенброка с однократным вычислением якобиана

Обозначив молярные концентрации независимых компонент из системы (2.106) как вектор  $\mathbf{X}$ , соответствующие им правые части уравнений как  $\mathbf{L}$ , и задав начальное состояние  $\mathbf{X}^{(n)} = \mathbf{X}(t_n)$  была рассмотрена задача о нахождении решения  $\mathbf{X}^{(n+1)} = \mathbf{X}(t_n + \tau)$ . Для решения жесткой системы в условиях

переменного шага  $\tau$  с использованием метода Розенброка согласно [118] были использованы следующие соотношения (указана форма, в которой коэффициенты метода преобразованы так, чтобы исключить матричное умножение в правой части систем уравнений):

$$\mathbf{J}^{(n)} = \left. \frac{\partial \mathbf{L}(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} \right|_n, \quad \mathbf{D}^{(n)} = \frac{1}{\tau\gamma} \mathbf{E} - \mathbf{J}^{(n)}, \quad (2.107)$$

$$\mathbf{D}^{(n)} \mathbf{Q}_i = \mathbf{L} \left( \mathbf{X}^{(n)} + \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j} \mathbf{Q}_j \right) + \sum_{j=1}^{i-1} \frac{c_{i,j}}{\tau} \mathbf{Q}_j, \quad i = 1, \dots, s, \quad (2.108)$$

$$\mathbf{X}^{(n+1)} = \mathbf{X}^{(n)} + \sum_{i=1}^s m_i \mathbf{Q}_i, \quad (2.109)$$

где  $\tau$  — значение внутреннего шага по времени,  $\mathbf{J}^n$  — якобиан правой части системы,  $\mathbf{D}^n$  — матрица линейной системы, которую необходимо решить на каждом шаге  $s$  раз с различной правой частью,  $\mathbf{Q}_i$  — поправки к переменным на каждом этапе. Константы  $s$ ,  $\gamma$ ,  $m_i$ ,  $a_{i,j}$ ,  $c_{i,j}$  определяют вид метода.

В работе использовался четырех стадийный метод  $s = 4$  со следующими коэффициентами [118]:

$$\begin{aligned} \gamma &= 0.5, a_{21} = 2.0, a_{31} = 48.0/25.0, a_{32} = 6.0/25.0, \\ c_{21} &= -8.0, c_{31} = 372.0/25.0, c_{32} = 12.0/5.0, \\ c_{41} &= -112.0/125.0, c_{42} = -54.0/125.0, c_{43} = -2.0/5.0, \\ m_1 &= 19.0/9.0, m_2 = 1.0/2.0, m_3 = 25.0/108.0, m_4 = 125.0/108.0. \end{aligned} \quad (2.110)$$

Таким образом, вначале вычислялся якобиан правой части системы по начальному состоянию переменных. Затем составлялась матрица  $\mathbf{D}^{(n)}$  из (2.107). Затем последовательно решалась  $s$  система линейных уравнений (2.108), после чего из решений собиралась линейная комбинация (2.109). Поскольку все уравнения решались с одной и той же матрицей, после ее построения для уменьшения вычислений было проведено ее LU-разложение.

Одним из вариантов контроля точности было использование разности решения между методом первого порядка и выбранным методом. Метод Розенброка первого порядка содержит одну стадию и имеет вид:

$$\mathbf{J}^{(n)} = \left. \frac{\partial \mathbf{L}(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} \right|_n, \quad \mathbf{D}^{(n)} \mathbf{Q}_1 = \tau \mathbf{L}(\mathbf{X}^{(n)}), \mathbf{U}^{(n+1)} = \mathbf{U}^{(n)} + \mathbf{Q}_1. \quad (2.111)$$

Разность результатов схем (2.107) – (2.109) и (2.111) равна, таким образом:

$$\Delta = \mathbf{Q}_1 - \sum_{i=1}^s m_i \mathbf{Q}_i \quad (2.112)$$

Далее требовалось выполнение следующего неравенства:

$$|\Delta_k| < \varepsilon_R |X_k| + \varepsilon_A, \quad (2.113)$$

где  $\varepsilon_R$  и  $\varepsilon_A$  — относительная и абсолютная ошибки, а  $k$  — номер уравнения.

Более строгим критерием адекватности шага  $\tau$ , чем критерий (2.113), служили следующие неравенства, которые проверялись после каждого восстановления полного набора переменных:

$$X_k \geq 0, \quad T \geq 0. \quad (2.114)$$

При этом не всегда необходимо сразу проводить процедуру измельчения шага по времени. Если отрицательная концентрация достаточно мала по модулю, то ее следует вначале просто обнулить:

$$-|\varepsilon_X| < X_k < 0 \Rightarrow X_k = 0. \quad (2.115)$$

Если хотя бы один из критериев не выполнялся, то шаг по времени уменьшался путем умножения текущего шага на  $\sigma_D < 1$ , и процесс расчета повторялся сначала. При этом якобиан повторно вычислять не требовалось. Было необходимо лишь построить и обратить (разложить) матрицу  $\mathbf{D}^{(n)}$  с уже готовым якобианом  $\mathbf{J}$ .

В критериях точности и управлении шагом по времени использовались следующие константы:

$$\varepsilon_X = 10^{-2}, \quad \varepsilon_R = 10^{-2}, \quad \varepsilon_A = 10^{-10}, \quad \sigma_D = 0.7, \quad \tau_{min} = 10^{-14}, \quad (2.116)$$

где  $\tau_{min}$  — минимально возможное значение шага по времени.

## Независимые переменные и расчет якобиана системы

В качестве независимых переменных метода были выбраны  $X_k$ ,  $k = 1, \dots, N_L$ . При расчете якобиана системы (2.106) необходимо учитывать, что

остальные переменные  $X_k$ ,  $k = N_L + 1, \dots, N_C$  и  $T$  зависят от них. Рассчитать якобиан можно двумя способами: аналитически и численно.

В случае аналитического варианта расчета якобиан рассчитывался с учетом линейных и алгебраических связей на основе ранее определенных частных производных интенсивности производства компонент по концентрациям  $\hat{\psi}_{k,j}$  и температуре  $\hat{\psi}_{k,T}$ , а также с помощью частных производных внутренней энергии смеси по этим величинам  $E_k$  и  $C_V$ .

В общем виде было получено следующее выражение:

$$J_{k,j} = \hat{\psi}_{k,j} + \sum_{i=N_L+1}^{N_C} \hat{\psi}_{k,i} \lambda_{i-N_L,j} - \hat{\psi}_{k,T} C_V^{-1} \left( E_j + \sum_{i=N_L+1}^{N_C} E_i \lambda_{i-N_L,j} \right). \quad (2.117)$$

Как для расчета якобиана, так и для расчета правой части ОДУ (это требовалось и на промежуточных этапах метода) из независимых переменных было необходимо вначале восстановить значения зависимых, для чего использовались формулы (2.106).

Численный расчет якобиана правой части ОДУ не требует расчета частных производных  $\hat{\omega}_k(X_j, T)$ . Вместо этого может быть применен алгоритм, использующий как конечно-разностный метод получения частных производных, так и встроенное туда восстановление зависимых переменных. Этот алгоритм выглядит проще, чем метод аналитического получения частных производных от интенсивности производства компонент и последующего расчета якобиана. В то же время он требует  $N_L + 1$  расчетов  $\hat{\omega}_k$ , каждый из которых также является «долгой» операцией (хотя повторного расчета функций Аррениуса удастся избежать). В общем случае при численном расчете якобиана и прочих равных условиях программа требует большего количества итераций, поэтому в расчетах использовался аналитический метод.

### Алгоритм для шага по времени на этапе расчета кинетических уравнений

Весь шаг по времени  $\Delta t$  при необходимости автоматически разбивался на малые шаги  $\tau$ , на каждом из которых производился расчет химического процесса методом Розенброка с учетом источников массы и энергии.

Сам алгоритм в общем можно представить в следующем виде:

- Задание начальных условий на входе алгоритма: начальные значения молярных концентрации  $\mathbf{X}$ , температура смеси  $T$ , основной шаг по времени  $\Delta t$ , а также параметры, управляющие алгоритмом:
  - начальное значение малого шага  $\tau(= \Delta_t)$ , оставшееся время  $t_{res} = \Delta_t$ ;
  - $\varepsilon_A, \varepsilon_R$  параметры критерия контроля точности малого шага;
  - $\varepsilon_X, \varepsilon_{Xt}$  дополнительные константы (первая для обнуления концентрации, вторая служит, чтобы избежать сингулярности при возведении в дробную или отрицательную степень);
  - $\sigma_D < 1$  коэффициент сокращения шага;
  - $\tau_{min}$  минимальный шаг по времени;
  - $i_{max}$  максимальное число итераций;
  - $i = 0$  начальный номер итерации.
- Переход к внешнему циклу, соответствующему малым шагам по времени  $\tau$  до исчерпания интервала  $\Delta_t$ . При этом на каждой итерации внешнего цикла выполняется:
  - при необходимости вычисления якобиана на текущем шаге:
    - производится проверка условий остановки программы: критически маленький шаг по времени, выход шага за интервал решения, превышение допустимого числа попыток решения, окончание счета для шага  $\Delta_t$ ;
    - вычисляется правая часть системы уравнений  $\mathbf{L}(\mathbf{X}^{(n)})$ ;
    - вычисляется якобиан системы по формуле (2.117);
  - подготавливаются коэффициенты метода, в которых есть зависимость от текущего временного шага  $\tau$ ;
  - вычисляется матрица  $\mathbf{D}^{(n)}$  по формуле (2.107);
  - производится проверка матрицы  $\mathbf{D}^{(n)}$  на сингулярность и ее LU-разложение;
  - в случае наличия каких-либо проблем с матрицей производится измельчение шага и повторение алгоритма в цикле с самого начала с учетом того, что якобиан уже вычислен; число сингулярностей матрицы записывается и проверяется;
  - производится четыре прохода метода, для каждого из которых:
    - вычисляется правая часть системы (2.108);
    - производится решение получившейся системы (2.108);

- сохраняется результат прохода и на его основании формируется новая правая часть системы;
- производится вычисление решения по формуле (2.109);
- производится оценка ошибки;
- на основании оценки ошибки рассчитывается новый шаг по времени  $\tau$ ;
- производится проверка условий (2.114);
- если оценка ошибки удовлетворительная, то:
  - сохраняются новые значения концентраций с учетом поправок;
  - увеличивается общее время на величину  $\tau$ ;
  - рассчитываются оставшиеся значения молярных концентраций, учитываются внешние источники энергии и энергию вброшенной массы, определяются новое значение температуры;
  - при необходимости устанавливается минимальный шаг по времени из нового и текущего;
  - считается, что шаг пройден успешно: устанавливается флаг расчета якобиана на следующем шаге, сбрасываются флаги ошибок;
- если оценка ошибки неудовлетворительная, то:
  - производится попытка повторить процедуру решения без пересчета якобиана с новым рассчитанным шагом;
  - если попытка решения оказалась неудачной, то шаг принудительно измельчается с помощью переменной  $\sigma_D$ ;
  - число попыток решения записывается;
- конец внешнего цикла и конец алгоритма.

Счетчик итераций подсчитывает число попыток LU-разложения матрицы линейной системы уравнений. Если при этом не происходит повторных попыток с уменьшением шага по времени, то на малом шаге происходит 1 разложение. Данная процедура является самым вычислительно затратным этапом решения СЛАУ. Наиболее трудоемким этапом расчета всего алгоритма, использующим специфику химической кинетики, является расчет якобиана системы, который выполняется хотя бы один раз за временной шаг.



### 2.2.3 Расчет шага по времени

Так как при расчетах конвективных потоков использовались явные схемы, то для шага по времени есть ограничение, накладываемое критерием устойчивости Куранта—Фридрихса—Леви (критерий КФЛ) [151]. Практически расчет шага основывался на этом критерии с заданным более строгим ограничением в связи с наличием диффузионных и турбулентных параметров. Число Куранта  $C$  в данном критерии варьировалось в зависимости от рассматриваемой задачи в широких пределах  $0.2 < C < 0.8$ .

Используемый в расчетах критерий можно записать в виде:

$$\Delta t = C \cdot \left[ \max_i \left( \frac{a + |u_i|}{h_i} + 2 \frac{k}{h_i^2} \right) \right]^{-1}, \quad i \in \{x, y, z\}, \quad (2.118)$$

где  $k$  — оценка максимального кинематического коэффициента переноса,  $a$  — скорость звука в среде,  $u_i$  — компонента вектора скорости по направлению  $i$ ,  $h_i$  — размер разностной сетки по измерению  $i$ .

### Глава 3. Тестирование вычислительного комплекса

В данной главе представлен анализ результатов работы созданного программного комплекса на примере решения нескольких тестовых задач: задачи Римана о распаде произвольного разрыва с различными наборами начальных условий, соответствующих различным волновым конфигурациям, задачи о прямом инициировании и распространении волны детонации в трубе с квадратным поперечным сечением. Также в данной главе представлен анализ параллельной составляющей реализованных программ.

#### 3.1 Задача Римана о распаде произвольного разрыва

Для тестирования работы численных схем использовалась в том числе довольно часто применяемая для этих целей задача Римана о распаде произвольного разрыва. Данная задача для случая динамики идеального газа в одномерной постановке имеет точное решение, с которым и проводилось сравнение. Суть задачи состоит в том, что расчетная область разделяется перегородкой на две подобласти с различными значениями термодинамических параметров. Далее рассматриваются процессы, протекающие после удаления перегородки. В зависимости от начальных значений параметров возможны различные волновые конфигурации, которые и должны верно отражаться расчетной программой.

Используемые для тестирования значения параметров среды были взяты из работ [152; 153] и представлены в Таблице 5. Переменные с индексом « $L$ » соответствуют состоянию с левой стороны от перегородки, с индексом « $R$ » — с правой стороны. При этом рассматривалась область  $x \in [0, 1]$ ,  $x_0$  — координата перегородки в начальный момент времени. Время окончания расчета  $t_{out}$ . Газ, заполняющий расчетную область, считался идеальным с показателем адиабаты  $\gamma = 1.4$  для случаев №1—9 и  $\gamma = 5/3$  для случая №10.

Первоначально для решения поставленных газодинамических задач была рассмотрена численная схема второго порядка по пространству и времени Цзяня и Тедмора (JT) [142]. В дальнейшем были рассмотрены несколько отно-

Таблица 5. Начальные условия для задачи Римана.

| №  | $\rho_L$  | $v_L$     | $p_L$     | $\rho_R$ | $v_R$     | $p_R$     | $x_0$ | $t_{out}$ |
|----|-----------|-----------|-----------|----------|-----------|-----------|-------|-----------|
| 1  | 0.445     | 0.698     | 3.528     | 0.5      | 0.0       | 0.571     | 0.5   | 0.16      |
| 2  | 0.1261192 | 8.9047029 | 782.92899 | 6.591493 | 2.2654207 | 3.1544874 | 0.5   | 0.0039    |
| 3  | 1.0       | 0.0       | 1.0       | 0.125    | 0.0       | 0.1       | 0.5   | 0.16      |
| 4  | 1.0       | 0.75      | 1.0       | 0.125    | 0.0       | 0.1       | 0.3   | 0.2       |
| 5  | 1.0       | -2.0      | 0.4       | 1.0      | 2.0       | 0.4       | 0.5   | 0.15      |
| 6  | 1.0       | 0.0       | 1000.0    | 1.0      | 0.0       | 0.01      | 0.5   | 0.012     |
| 7  | 1.0       | -19.59745 | 1000.0    | 1.0      | -19.59745 | 0.01      | 0.5   | 0.0039    |
| 8  | 1.0       | 0.0       | 0.01      | 1.0      | 0.0       | 100.0     | 0.5   | 0.012     |
| 9  | 5.99924   | 19.5975   | 460.894   | 5.99242  | -6.19633  | 46.0950   | 0.4   | 0.035     |
| 10 | 1.0       | 1.0       | $10^{-6}$ | 1.0      | -1.0      | $10^{-6}$ | 0.5   | 1.0       |

сительно новых центральных схем, которые вычислительно проще схемы JT, требуют меньше памяти под вспомогательные переменные, обладают меньшей численной вязкостью, а также, что является наиболее важным для решения рассматриваемых задач, в них проще реализуются граничные условия для областей со сложной геометрией. Среди них стоит отметить схему второго порядка по пространству Курганова и Тедмора (КТ) [147] и схему третьего порядка по пространству Курганова и Леви (KL) [148]. Несколько более подробное описание этих схем представлено в Главе 2.2.

Все из перечисленных выше схемы были модифицированы для работы с системой из Главы 2.1 в трехмерной постановке. Тестовые задачи Римана прогонялась по всем пространственным измерениям в двух направлениях.

Результаты расчетов для схем JT, КТ и KL, а также их сравнение с аналитическим решением, представлены на Рис. 3.1 — 3.7. При этом использовалось 200 ячеек по главному направлению, вдоль которого и рассматривались происходящие после удаления перегородки процессы. Аналитическое решение на графиках изображено черной кривой.

Результаты по тесту №1 из Таблицы 5, известному также как тест Лакса, приведены на Рис. 3.1. Видно, что все рассмотренные численные схемы неплохо соответствуют аналитическому решению, хотя и размывают контактный разрыв. Лучше всего показала себя схема KL, схема КТ несколько больше размывает фронты волн и контактную поверхность, а схема JT хуже описывает зону между ударной волной и контактным разрывом.

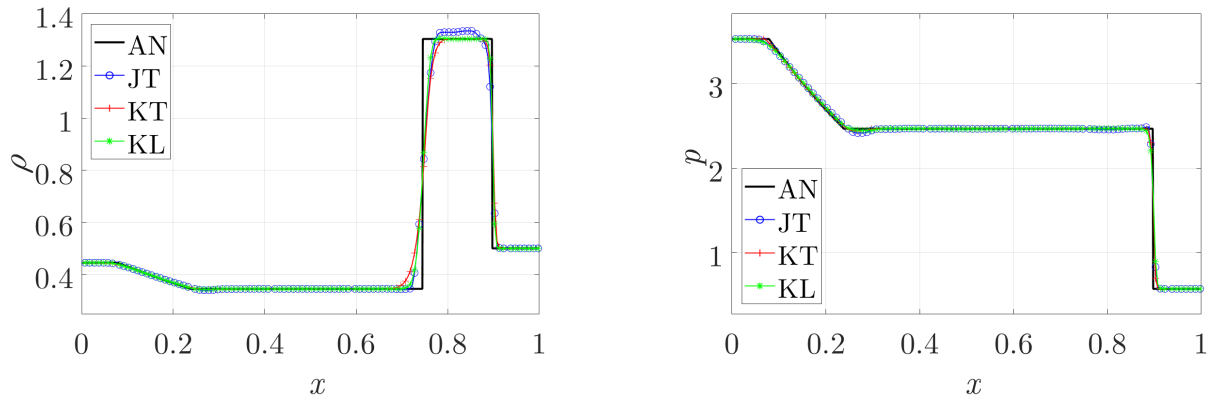


Рисунок 3.1. Результаты расчета для теста №1. Плотность (левый график) и давление (правый график).

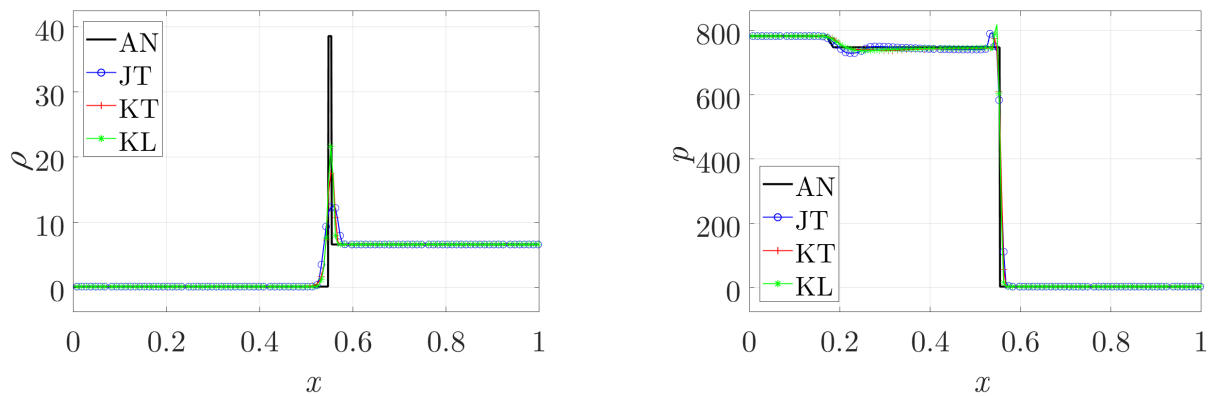


Рисунок 3.2. Результаты расчета для теста №2. Плотность (левый график) и давление (правый график).

Тест №2 в литературе именуется как «пик». В данной задаче возникает сильный узкий пик в плотности, который довольно сложно разрешить (Рис. 3.2). В этом случае лучше всего с его разрешением справилась схема KL, а схема JT больше других его размазывает. На графике давления видно, что в каждой схеме образуется небольшой пик перед фронтом ударной волны. Пик выше всего у схемы KL, однако он уже и ближе к фронту, тем самым сам фронт ударной волны описывается лучше.

Тест №3 известен как задача Сода, а тест №4 представляет собой его модернизированную версию. Так как поведение рассматриваемых численных схем на данных двух тестах достаточно близко, то в работе приведены результаты только по тесту №4 (Рис. 3.3). Несмотря на отсутствие сильных градиентов, данный тест позволяет оценить способность численной схемы разрешать ударные волны, контактный разрыв и волны разрежения. В данном случае было получено, что все рассмотренные схемы одинаково близко описывают решение задачи.

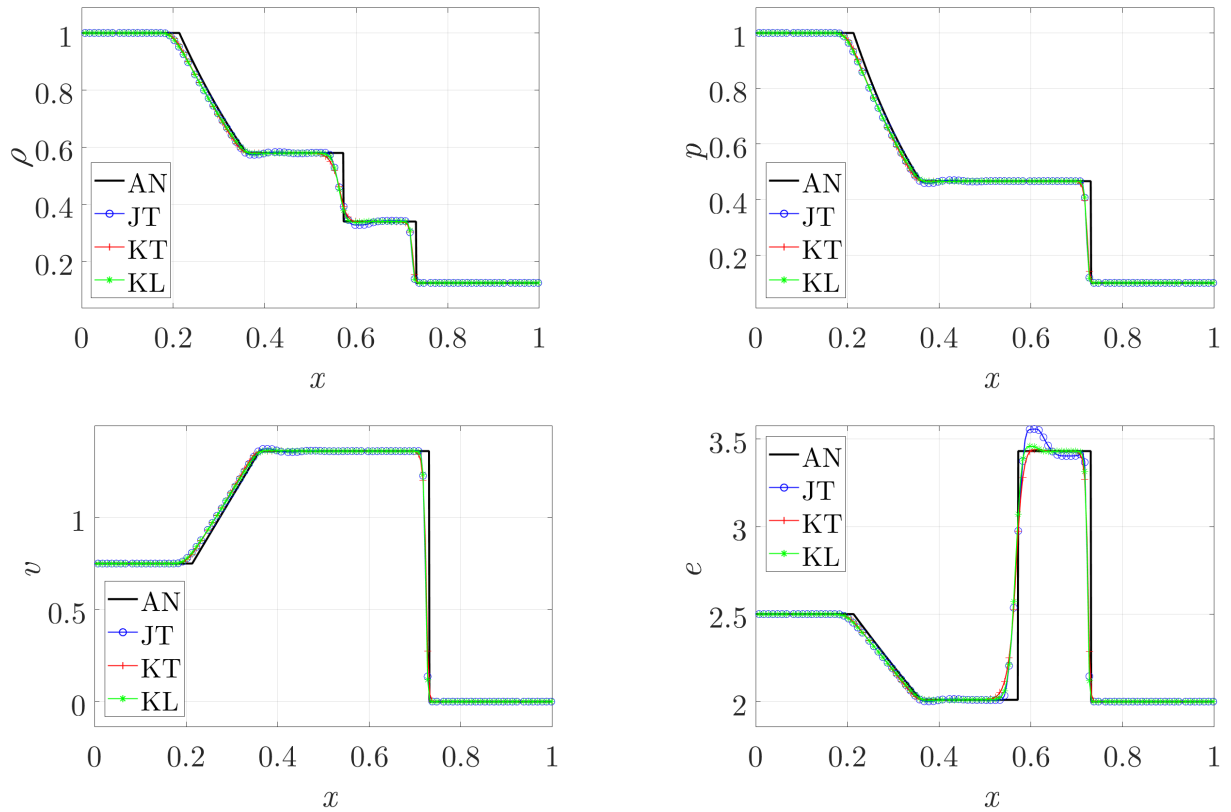


Рисунок 3.3. Результаты расчета для теста №4. Плотность (левый верхний график), давление (правый верхний график), скорость (левый нижний график) и энергия (правый нижний график).

Однако, методы КТ и КЛ несколько лучше описывают значения параметров в промежутках между волнами. В схеме JT довольно ярко выражена аппроксимация разрывов гладкими функциями, что особенно хорошо прослеживается на графике энергии на контактном разрыве.

В решении теста №5 возникают две симметричные волны разрежения и контактный разрыв. Состояние между зонами разрежения близко к вакууму. Такой вариант позволяет оценить поведение численного метода при условиях, когда плотность и давление близки к нулю. В целом рассмотренные схемы хорошо описывают поведение плотности и давления (Рис. 3.4), однако внутренняя энергия, как, в принципе, и большинством схем такого типа [153], в центральной области описывается плохо. Стоит отметить, что при использовании разных параметров у каждой схемы можно получить лучшее совпадение. Например, при использовании различных чисел Куранта у схемы JT центральный пик в энергии получается гораздо меньше, хотя и появляются возмущения в зоне разрежения, а в схеме КЛ при этих же параметрах пик увеличивается, как и

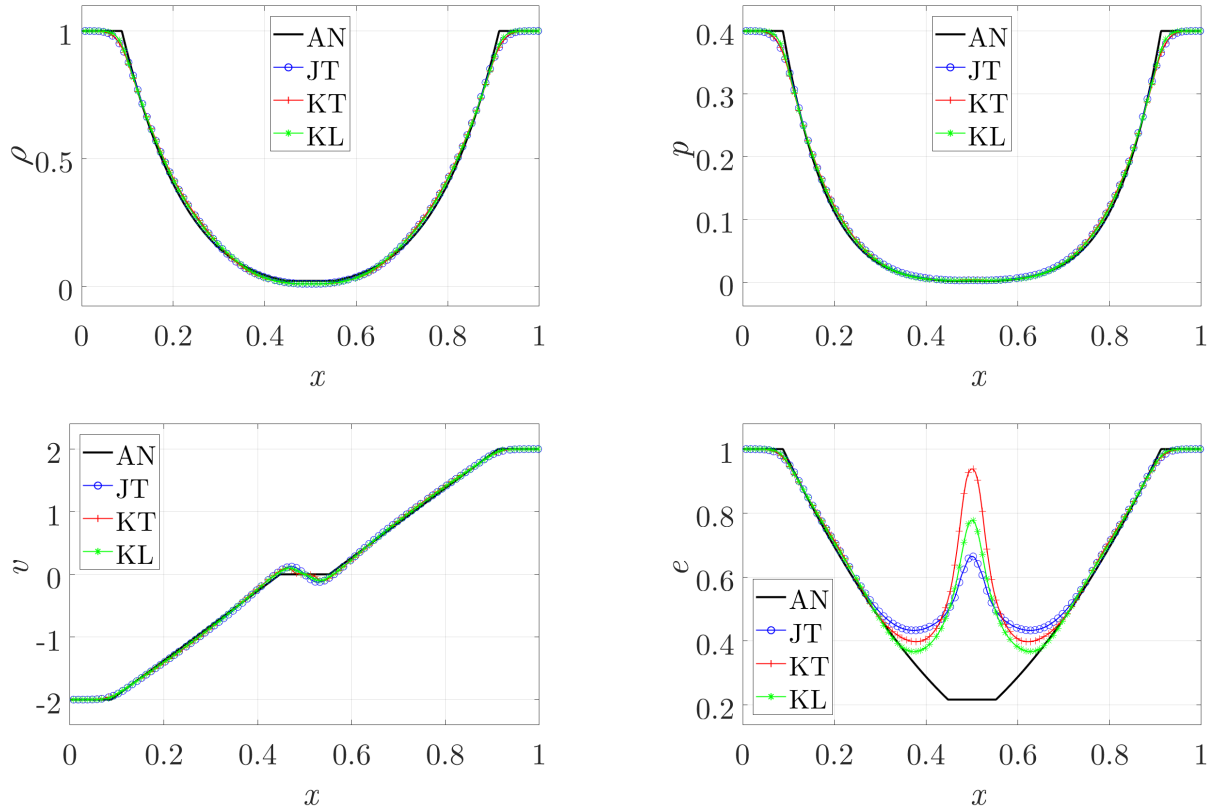


Рисунок 3.4. Результаты расчета для теста №5. Плотность (левый верхний график), давление (правый верхний график), скорость (левый нижний график) и энергия (правый нижний график).

размытие зоны разрежения. Однако, с целью сравнения были использованы одинаковые параметры, более-менее оптимальные для всех схем.

В случаях №6 и №7 возникает сильная ударная волна с числом Маха  $M = 198$ , контактный разрыв и волна разрежения. Данные тесты, как и тест №2, являются весьма серьезными тестами для оценки надежности и точности численной схемы. Отличие теста №7 от №6 заключается в наличии медленно движущегося (практически неподвижного) контактного разрыва. Тест №6 является левой частью задачи о взрывной волне Вудворда и Колеллы [154], а тест №8 — ее правой частью. На Рис. 3.5 представлены графики плотности и давления для этих вариантов. Видно, что во всех случаях фронты волн лучше всего разрешает метод KL, хотя контактный разрыв все равно остается смазанным. Причем, чем уже зона между контактным разрывом и ударной волной, тем лучшее ее описывают методы KT и KL, JT же больше размывает ее.

Тест №9 состоит из двух ударных волн, полученных из решения задач №6 и №8 и распространяющихся вправо и влево соответственно. В результате получается столкновение двух сильных ударных волн, возникает три сильных

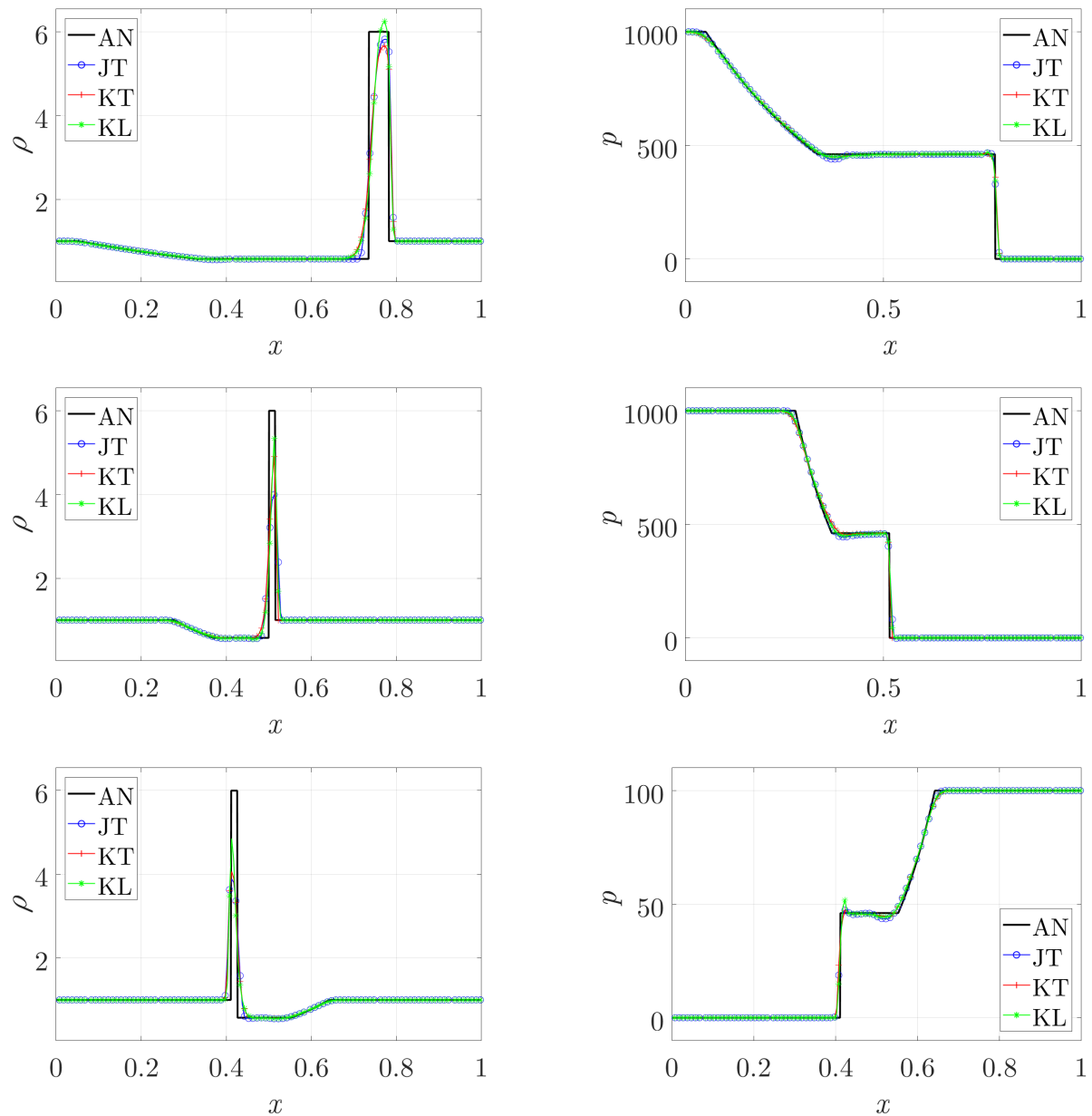


Рисунок 3.5. Результаты расчета для тестов №6 (верхний ряд), №7 (средний ряд) и №8 (нижний ряд). Слева представлены графики плотности, справа графики давления.

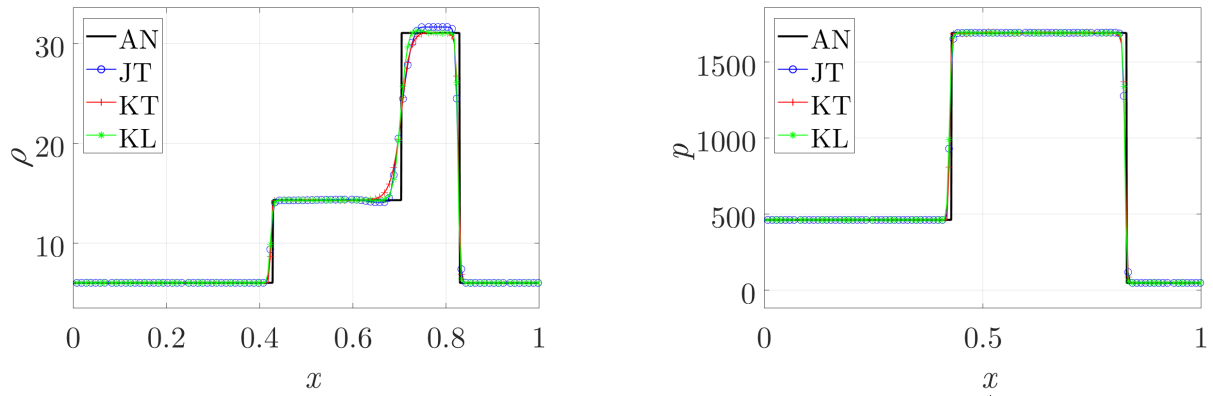


Рисунок 3.6. Результаты расчета для теста №9. Плотность (левый график) и давление (правый график).

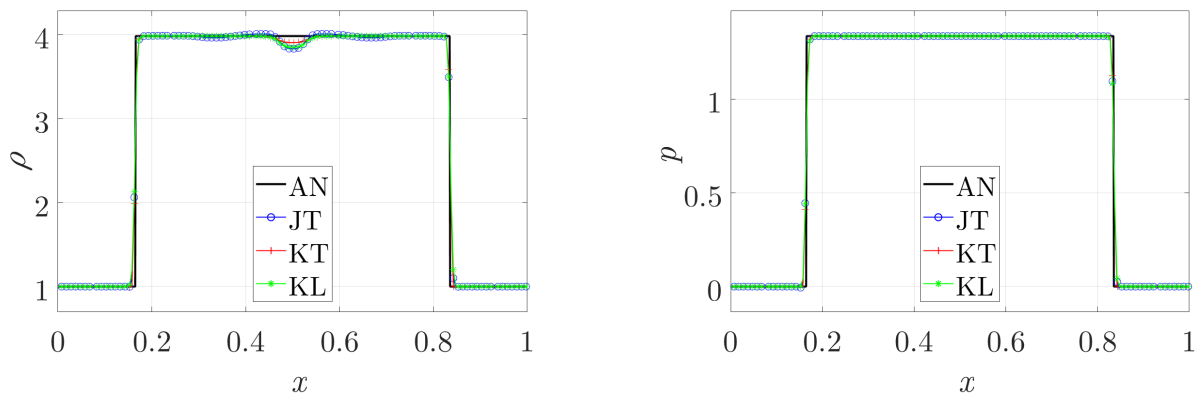


Рисунок 3.7. Результаты расчета для теста №10. Плотность (левый график) и давление (правый график).

разрыва, распространяющиеся вправо: левая ударная волна, перемещающаяся с небольшой скоростью, контактный разрыв и правая ударная волна. На Рис. 3.6 изображены распределение плотности и давления для данного случая. Из графиков видно, что все три схемы одинаково неплохо аппроксимируют ударные волны и размазывают контактный разрыв, причем на нем схемы JT и KL показывают близкое поведение, однако, JT опять выходит на несколько большее значение плотности между контактной поверхностью и правой ударной волной, а у KL возникает некое подобие осцилляции при аппроксимации разрывов, характерное для схемы JT. Схема KT демонстрирует большее размытие разрывов, однако, никаких колебаний не наблюдается.

Решение задачи №10, известной также как задача Ноха (англ. Noh problem, [155]) состоит из двух сильных ударных волн, распространяющихся от центра области к краям и оставляющим за собой постоянное значение плотности и давления. Результаты сравнения работы численных схем представлены на Рис. 3.7. Видно, что все методы хорошо описывают фронт ударных волн,



однако, также все методы имеют небольшой гладкий провал в центре плотности. Метод JT сильнее других демонстрирует некоторые слабые, едва заметные колебания между разрывами. Можно сказать, что на данном тесте лучше всего себя показывает метод KT.

В целом стоит отметить, что в большинстве тестовых задач лучше всего себя показал метод KL, хотя в некоторых случаях использование метода JT может дать лучшее совпадение с аналитическим решением. В принципе, все три расчетных схемы показали адекватное поведение на рассмотренных задачах.

### 3.2 Задача об инициировании и распространении детонационной волны в трехмерной постановке

Для тестирования используемой трехмерной нестационарной математической модели газовой смеси с химическими превращениями и соответствующих численных моделей, а также скорости выполнения расчетов в зависимости от размера расчетной сетки была рассмотрена следующая задача детонации в газовой водородно-воздушной смеси. Была выбрана расчетная область в форме прямоугольного параллелепипеда размерами  $[L_x, L_y, L_z] = [50, 5, 5]$  см, закрытая со всех сторон адиабатическими стенками, и заполненная однородно перемешанной покоящейся смесью водорода, кислорода и азота с заданными соотношениями молярных долей:  $C_{H_2} : C_{O_2} : C_{N_2} = 2 : 1 : 3.75$ , при заданной начальной температуре  $T_0 = 300$  К и давлении  $P_0 = 1$  бар.

Начало координат было установлено в один из углов рассматриваемой области, оси направлены параллельно её сторонам. Зажигание смеси осуществлялось одновременным подводом массы и энергии в течение короткого промежутка времени, что может моделировать использование твердого детонатора (без конкретизации процесса в самом детонаторе). Параметры зажигания были подобраны так, чтобы осуществить прямое инициирование детонации газовой смеси. Подвод энергии осуществлялся в области шарообразной формы радиусом  $r_{ign} = 2$  мм в течение  $\Delta t_{ign} = 2$  мкс с начала расчета в точке  $X_{ign} = (x_{ign}, y_{ign}, z_{ign}) = (1.0, 2.5, 2.5)$  см. Подводимая масса составила  $\Delta M_{ign} = 335$  мкг, дополнительная энергия  $\Delta Q_{ign} = 134$  мДж. Эти параметры

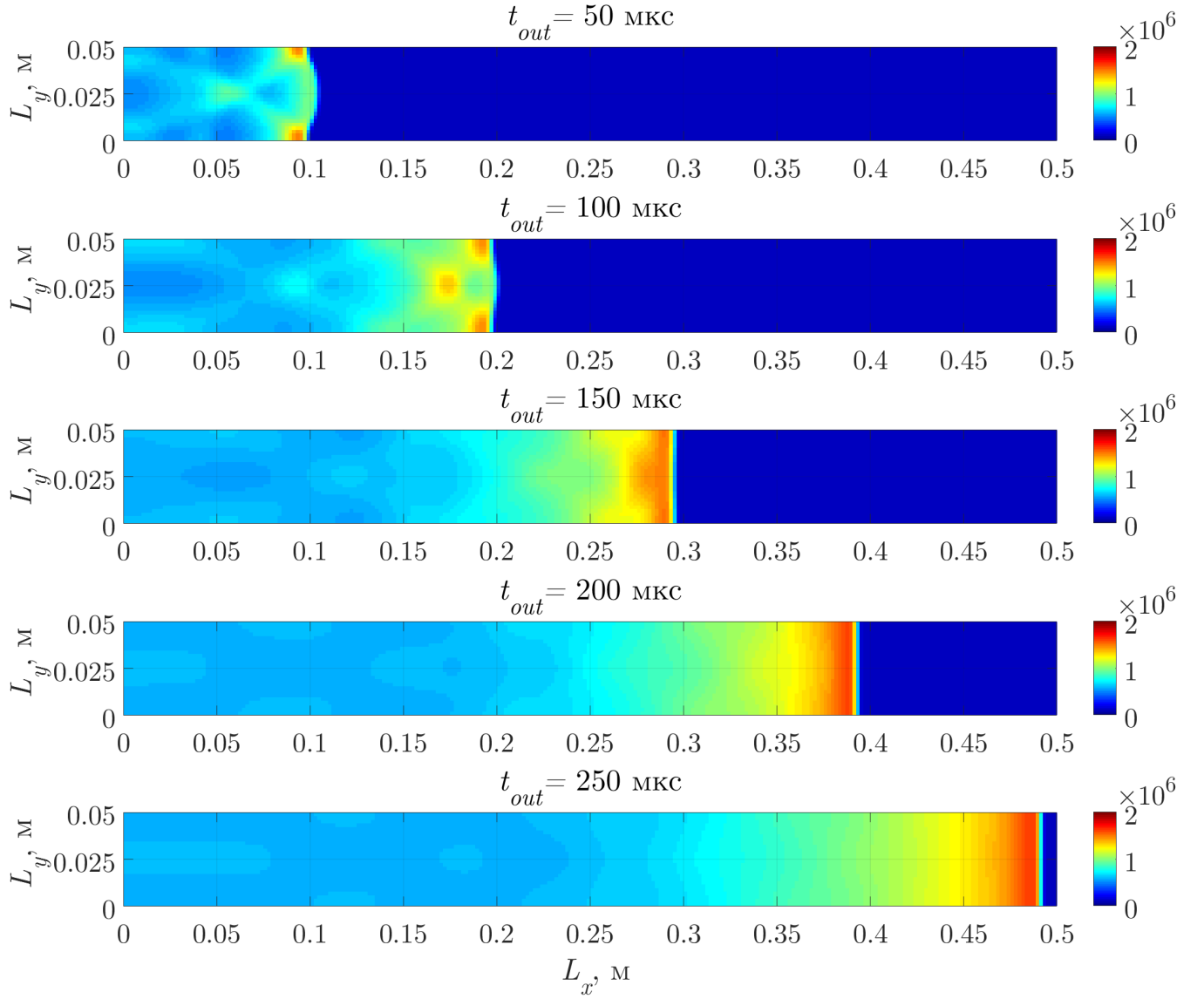


Рисунок 3.8. Распределение давления по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  для некоторых моментов времени для сетки  $260 \times 26 \times 26$ .

соответствуют, к примеру, детонатору, состоящему из 249.5 мкг азидата свинца, разбавленного 85.5 мкг хлорида натрия [156; 157].

Для выбранной смеси с указанными начальными условиями параметры детонации Чепмена—Жуге следующие: скорость детонации  $D_{CH} = 1957$  м/с, давление  $P_{CH} = 15.31$  бар. Давление в пике Неймана, движущемся по теории Зельдовича—Неймана—Дёринга перед волной детонации:  $P_N = 27.11$  бар.

При моделировании были рассмотрены сетки размером  $260 \times 26 \times 26$ ,  $500 \times 50 \times 50$ ,  $900 \times 90 \times 90$ ,  $1000 \times 100 \times 100$  и  $2000 \times 200 \times 200$  элементов. Для реализации граничных условий также дополнительно было использовано 2 или 3 (в зависимости от используемого метода и порядка точности) фиктивных ячейки на каждой границе области. Сетки состояли из одинаковых кубических

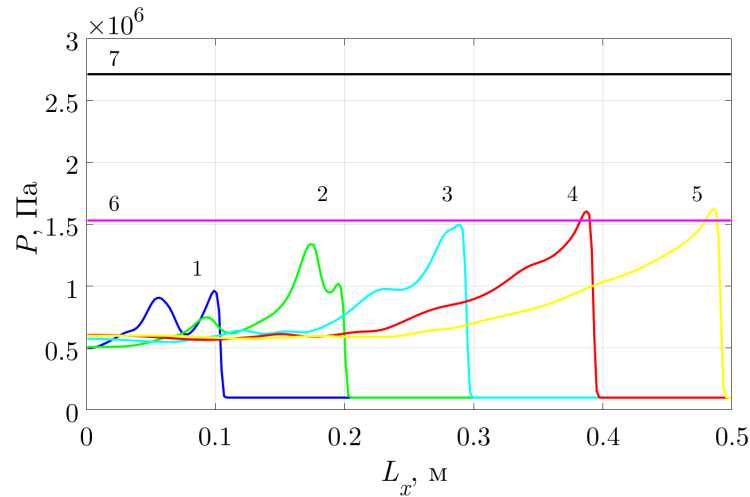


Рисунок 3.9. Профили давления по оси  $Ox$  по центру системы для моментов времени: 1 — 50 мск, 2 — 100 мск, 3 — 150 мск, 4 — 200 мск, 5 — 250 мск; 6 — давление Чепмена—Жуге; 7 — давление в пике Неймана. Сетка  $260 \times 26 \times 26$ .

элементов, длина стороны элемента была 1.92, 1.0, 0.556, 0.5 и 0.25 мм для каждой из сеток соответственно. На всех сетках расчет производился до момента времени  $t = 250$  мкс.

На Рис. 3.8, 3.10, 3.12 изображено давление в плоскости  $Oxy$ , проходящей через ось симметрии рабочей области, для сеток с размером ячеек 1.92, 1.0 и 0.25 мм соответственно. Давление приведено для моментов времени  $t = 50, 100, 150, 200$  и 250 мкс от начала инициирования. Ниже на Рис. 3.9, 3.11, 3.13 изображено давление вдоль оси симметрии системы для тех же сеток и моментов времени. На графиках изображены также уровни теоретического значения давления Чепмена—Жуге и давления в пике Неймана для рассматриваемого состава смеси при заданных условиях.

Картина развития давления показывает, как после начального инициирования развивается детонационный процесс: лидирующая волна с характерным для детонации профилем, а позади нее многочисленные вторичные ударные волны и волны разрежения, как следствие многократных отражений от стенок. В момент  $t = 50$  мкс от начала инициирования амплитуда давления вторичной волны, при ее фокусировке у центральной оси системы, близка по значению к величине давления в лидирующей волне. С развитием процесса вторичные волны, двигаясь по уже прореагировавшей газовой смеси, догоняют лидирующую волну, увеличивая ее амплитуду.

На более грубых сетках вторичная волновая картина и первичная волна детонации размыты сильнее, и их максимумы сглажены. Это особенно замет-

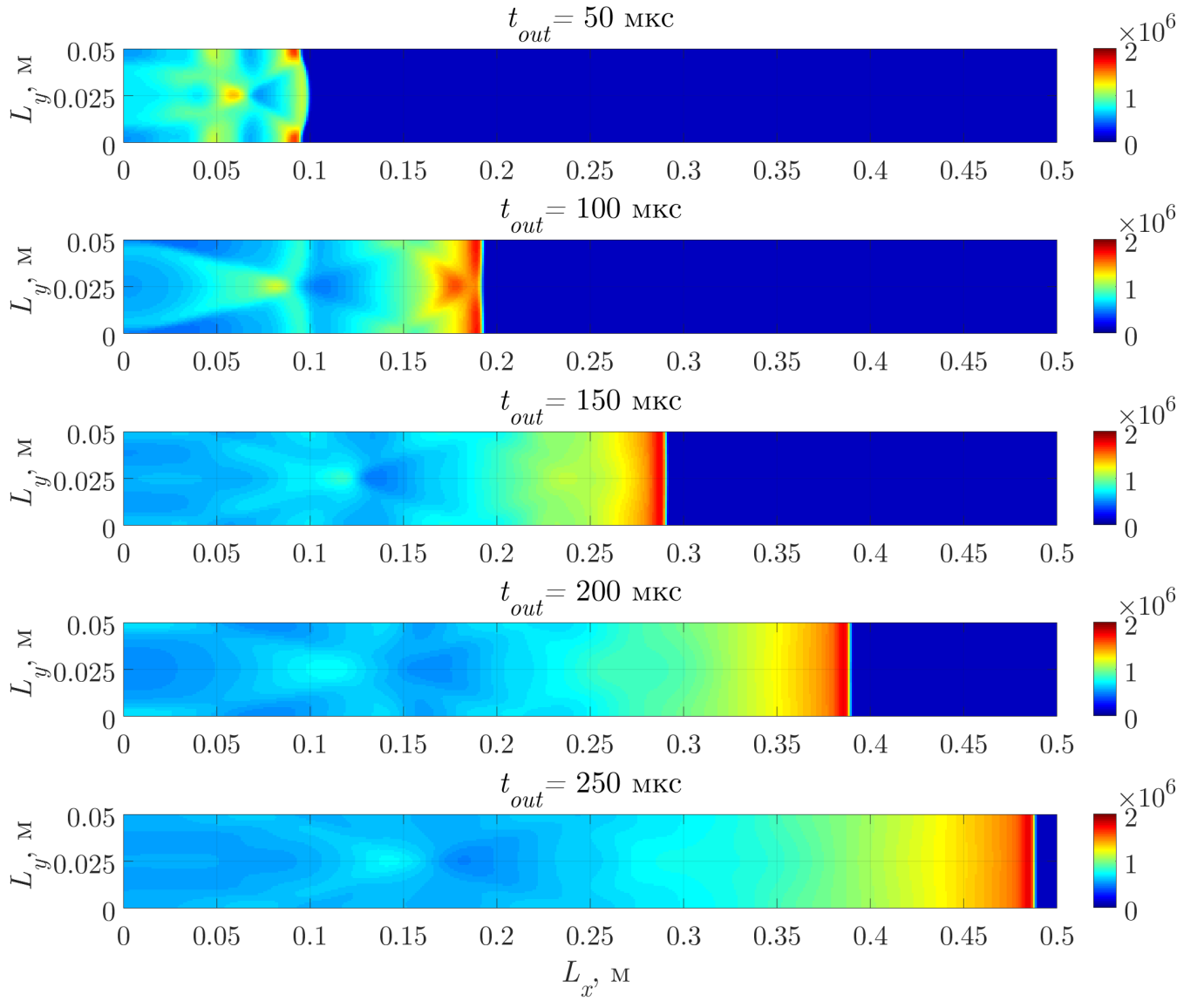


Рисунок 3.10. Распределение давления по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  для некоторых моментов времени для сетки  $500 \times 500 \times 50$ .

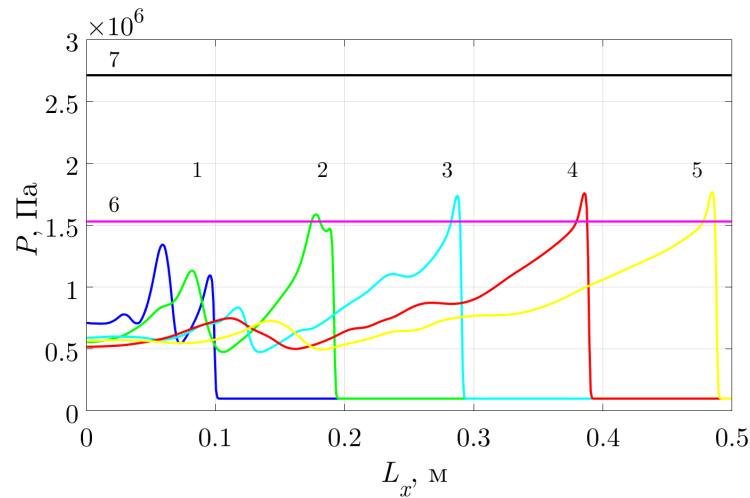


Рисунок 3.11. Профили давления по оси  $Ox$  по центру системы для моментов времени: 1 — 50 мкс, 2 — 100 мкс, 3 — 150 мкс, 4 — 200 мкс, 5 — 250 мкс; 6 — давление Чепмена—Жуге; 7 — давление в пике Неймана. Сетка  $500 \times 500 \times 50$ .

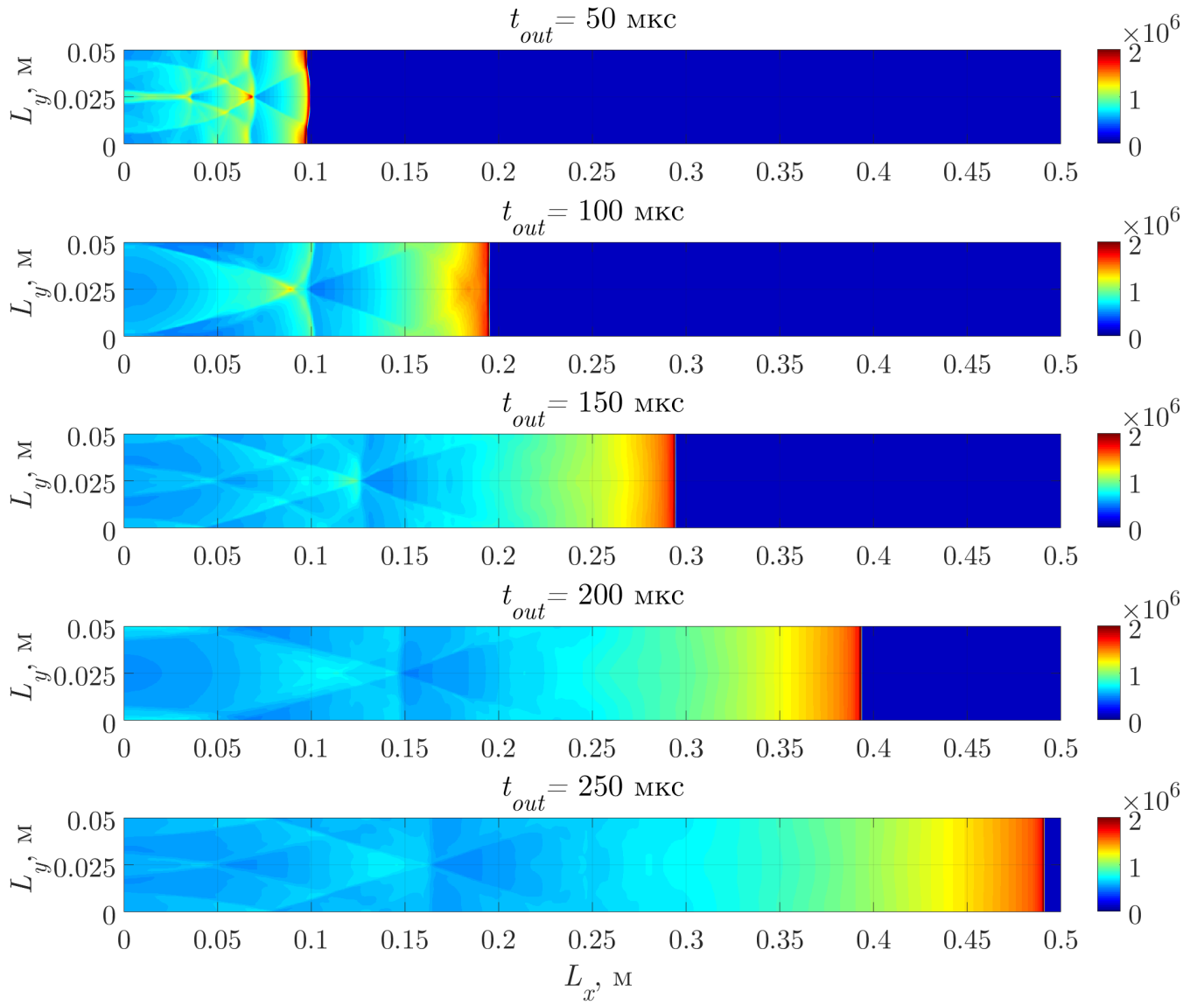


Рисунок 3.12. Распределение давления по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  для некоторых моментов времени для сетки  $2000 \times 200 \times 200$ .

но на самой грубой сетке: фронт лидирующей волны сильно размыт, гораздо меньше по амплитуде, чем вторичные волны. На более подробных сетках заметно все больше деталей волновой картины. Заметно также, как с увеличением разрешения сетки увеличивается по величине пик волны детонации, который, впрочем, на используемых сетках еще не достигает теоретического значения пика Неймана.

На Рис. 3.14 изображено развитие поля температуры в плоскости  $Oxy$  для тех же моментов времени, что и для давления на Рис. 3.12 и для такой же расчетной сетки. После прохождения детонационной волны в системе устанавливается (приблизительно вследствие наличия в ней динамики) химическое равновесие. Изменения температуры в пределах 2500 — 2800 К в этой области

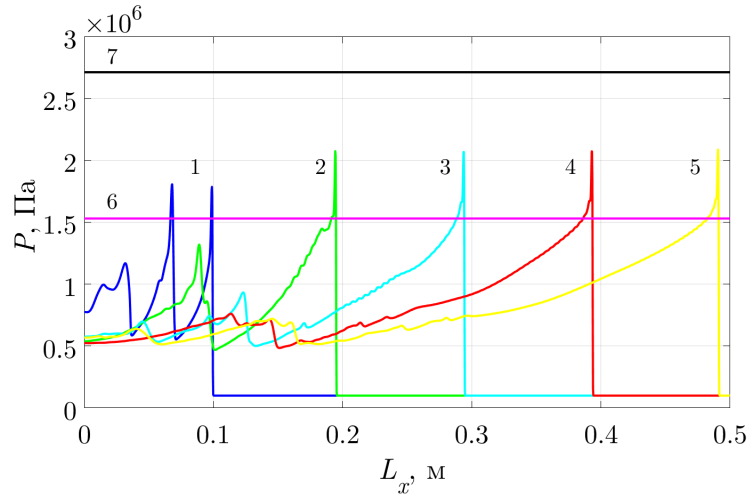


Рисунок 3.13. Профили давления по оси  $Ox$  по центру системы для моментов времени: 1 — 50 мск, 2 — 100 мск, 3 — 150 мск, 4 — 200 мск, 5 — 250 мск; 6 — давление Чепмена—Жуге; 7 — давление в пике Неймана. Сетка  $2000 \times 200 \times 200$ .

отслеживают волновую картину: в волнах сжатия температура смеси повышена, в волнах разрежения — понижена.

Чтобы лучше проследить за отраженными волнами, можно рассмотреть картину развития составляющей вектора скорости  $v_y$  со временем. На Рис. 3.15 изображено развитие поля поперечной компоненты скорости в плоскости  $Oxy$  для тех же моментов времени, которые рассматривались ранее. Отрицательная величина вектора скорости в данном случае соответствует направлению составляющей вектора скорости вниз, а положительная вверх.

Картина поперечной скорости показывает, как в системе развиваются и с течением времени затухают поперечные волны. Местоположение лидирующей волны детонации заметно только для моментов  $t = 50$  мкс и в меньшей степени  $t = 100$  мкс; в дальнейшем волна детонации становится практически плоской, и поперечная составляющая скорости становится достаточно малой. Заметно также затухание поперечных волн, возбужденных первичным инициированием, с течением времени.

В используемом кинетическом механизме горения водорода важную роль играет радикал пергидроксил  $\text{HO}_2$ . Данный компонент имеет важнейшую роль в первичной диссоциации исходных продуктов  $\text{H}_2$  и  $\text{O}_2$ . Другая его особенность состоит в том, что этот радикал при высокой температуре быстро разлагается. Тем самым концентрация пергидроксила хорошо подходит для отслеживания волн горения водорода в кислороде: на волне горения она на 2 порядка выше, чем в областях химического равновесия. В то же время это вещество присут-

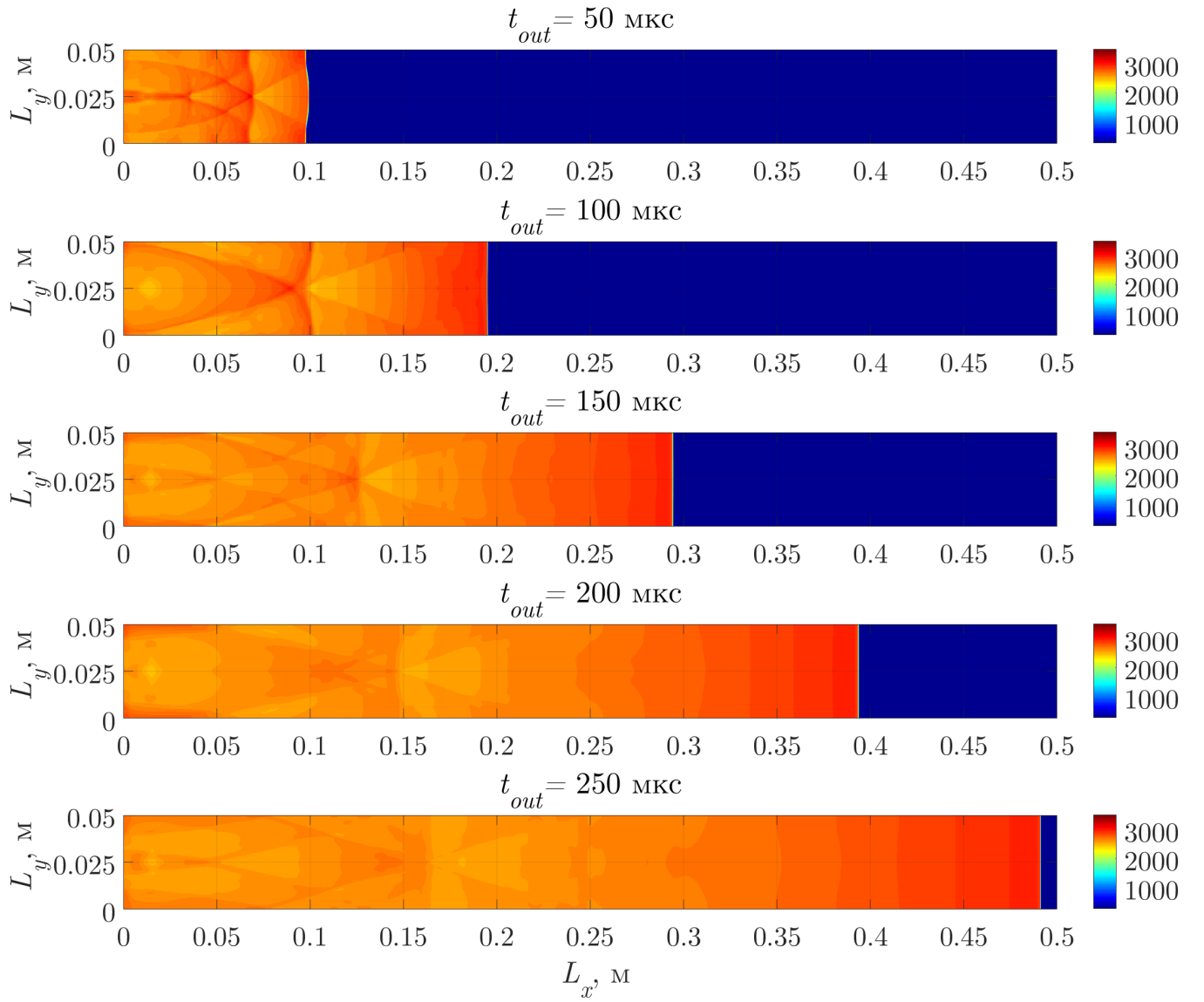


Рисунок 3.14. Распределение температуры по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  для некоторых моментов времени для сетки  $2000 \times 200 \times 200$ .

ствуется и в области химического равновесия, что позволяет также отслеживать детали волновой картины.

На Рис. 3.16 изображено развитие поля массовой доли  $\text{NO}_2$  в плоскости  $Oxy$  для рассматриваемых моментов времени. Заметно, что форма лидирующей детонационной волны в плоскости  $Oxy$  для момента времени  $t = 50$  мкс еще не является плоской. Также наблюдается заметное постепенное уменьшение доли  $\text{NO}_2$  позади волны детонации. Это связано с тем, что в равновесном состоянии она уменьшается с уменьшением давления, последнее же постепенно падает за волной.

На Рис. 3.17 приведено сравнение поля давления по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  в момент времени  $t = 50$  мкс для различных разме-

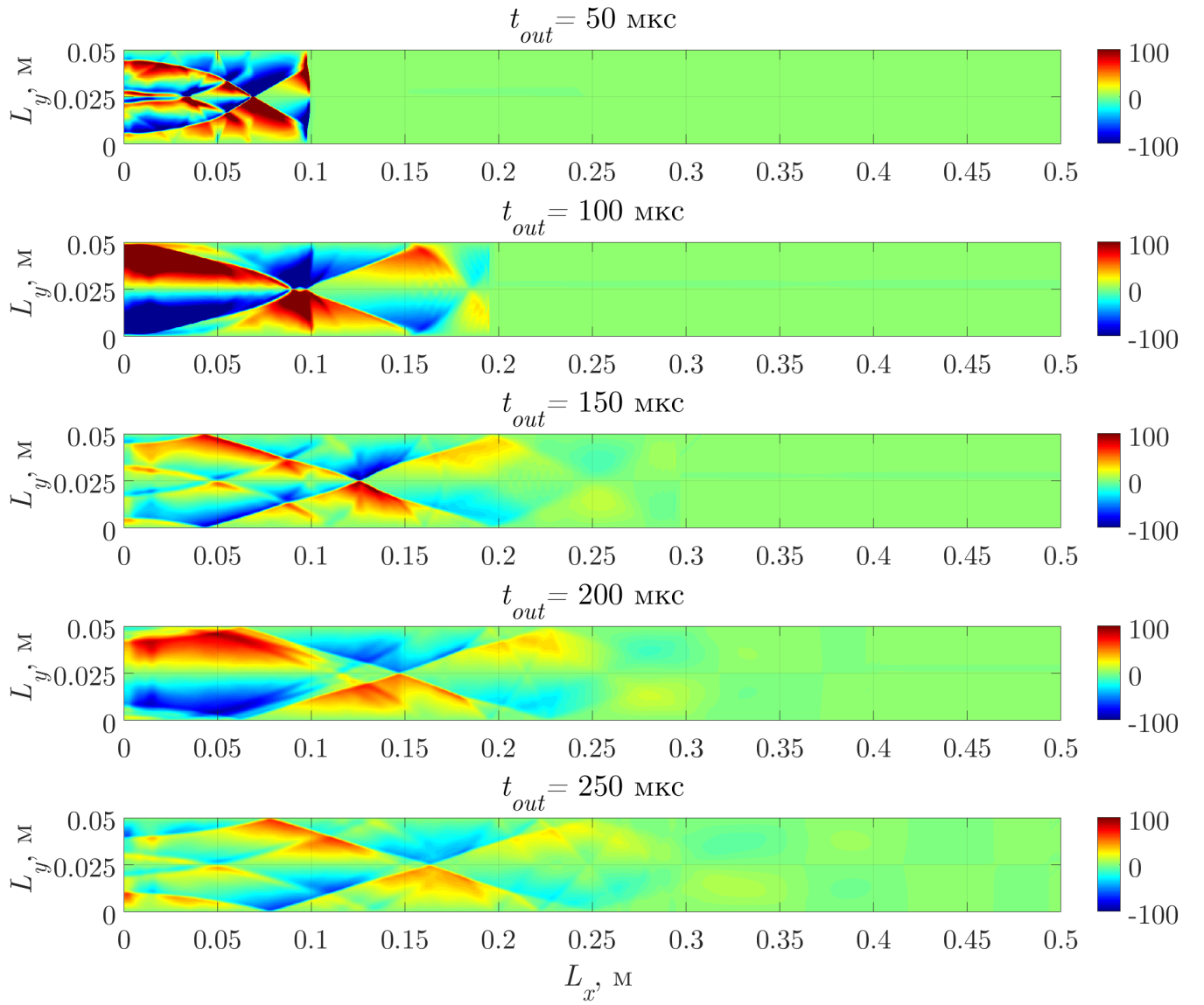


Рисунок 3.15. Распределение поперечной компоненты скорости по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  для некоторых моментов времени для сетки  $2000 \times 200 \times 200$ .

ров используемых сеток. Заметно, что на самой грубой сетке местоположение волны сильно размыто и немного смещено вправо. Как будет видно в дальнейшем, данное смещение не связано с увеличением скорости волны, а происходит скорее из-за увеличенной задержки начального инициирования детонации на более грубых сетках из-за численного размывания (диффузии) таких критических для условий инициирования детонации параметров, как температура и концентрации радикалов. Сдвиг на несколько расчетных ячеек в следствие большей скорости волны соответствовал бы существенно большему значению этой скорости, чего на дальнейших графиках ее оценки не наблюдается. По мере увеличения разрешимости сетки местоположение волны практически не



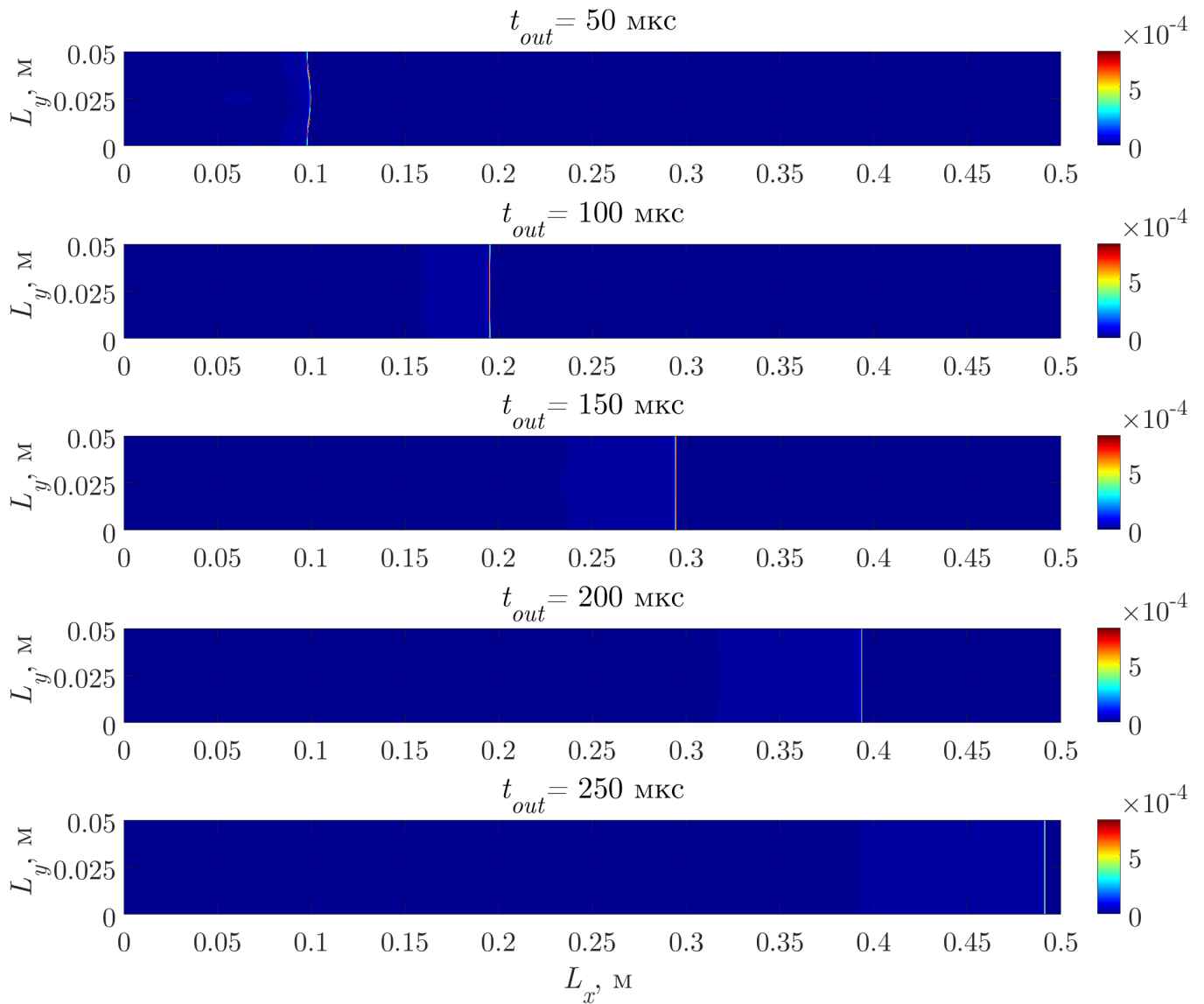


Рисунок 3.16. Распределение массовой доли радикала  $\text{NO}_2$  по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  для некоторых моментов времени для сетки  $2000 \times 200 \times 200$ .

изменяется, однако, фронт становится менее размытым и более плоским, давление на фронте увеличивается.

На Рис. 3.18 изображены профили массовых долей всех химических компонентов вдоль центральной оси рабочей области в момент времени  $t = 100$  мкс с начала процесса. Использована логарифмическая шкала для концентраций компонентов. Приведены данные по расчетам на четырех использовавшихся сетках. Можно заметить, как начальное состояние состава смеси (справа от скачкообразного перехода в окрестности 17 — 20 см от левого конца системы) переходит в состояние химического равновесия (слева от перехода), и как состояние равновесия изменяется за счет колебаний температуры в поперечных

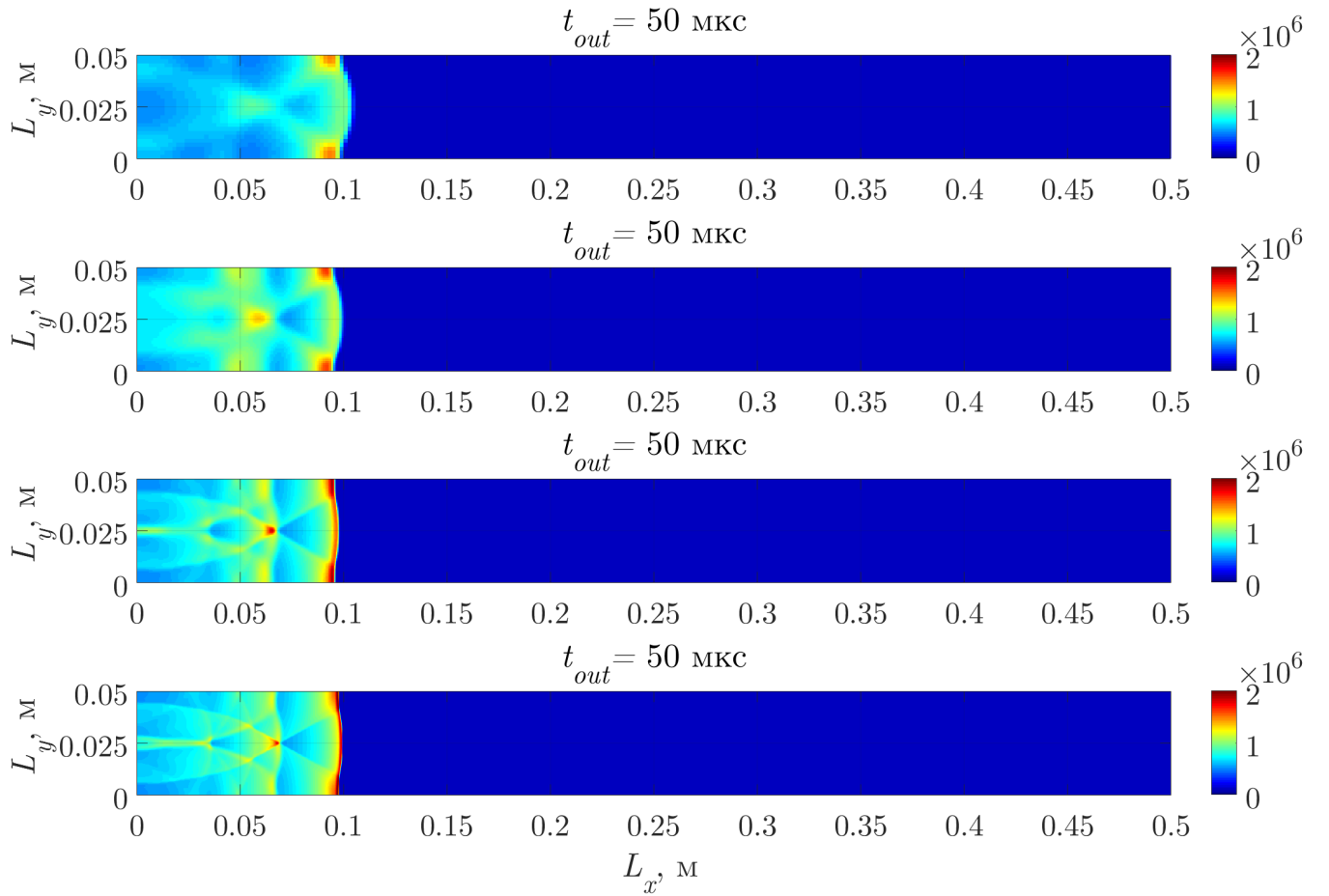


Рисунок 3.17. Распределение давления по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  в момент времени  $t = 50$  мкс для сеток  $260 \times 26 \times 26$ ,  $500 \times 50 \times 50$ ,  $1000 \times 100 \times 100$  и  $2000 \times 200 \times 200$  (сверху-вниз).

волнах позади лидирующей детонационной волны, и в окрестности начального инициирования. Видно, что при переходе к равновесному состоянию концентрация азота практически не меняется (малые ее отклонения, не заметные на данном масштабе, происходят за счет различной численной диффузии компонентов). Также концентрация кислорода, для данной (стехиометрической) смеси падает при сгорании значительно меньше (на порядок), чем концентрация водорода. Концентрация легкого радикала ОН (гидроксила) практически совпадает в равновесном состоянии с концентрацией кислорода, она самая высокая среди концентраций радикалов, около 1%. Концентрация атомарного кислорода в равновесном состоянии на порядок превышает концентрацию атомарного водорода, что скорее всего объясняется соответствующим соотношением молекулярных компонент. Концентрация тяжелого радикала  $\text{HO}_2$  имеет резкий максимум на волне детонации, спадая сразу на 2 порядка, а затем продолжает плавно уменьшаться. Причиной последнего спада является изменение давления

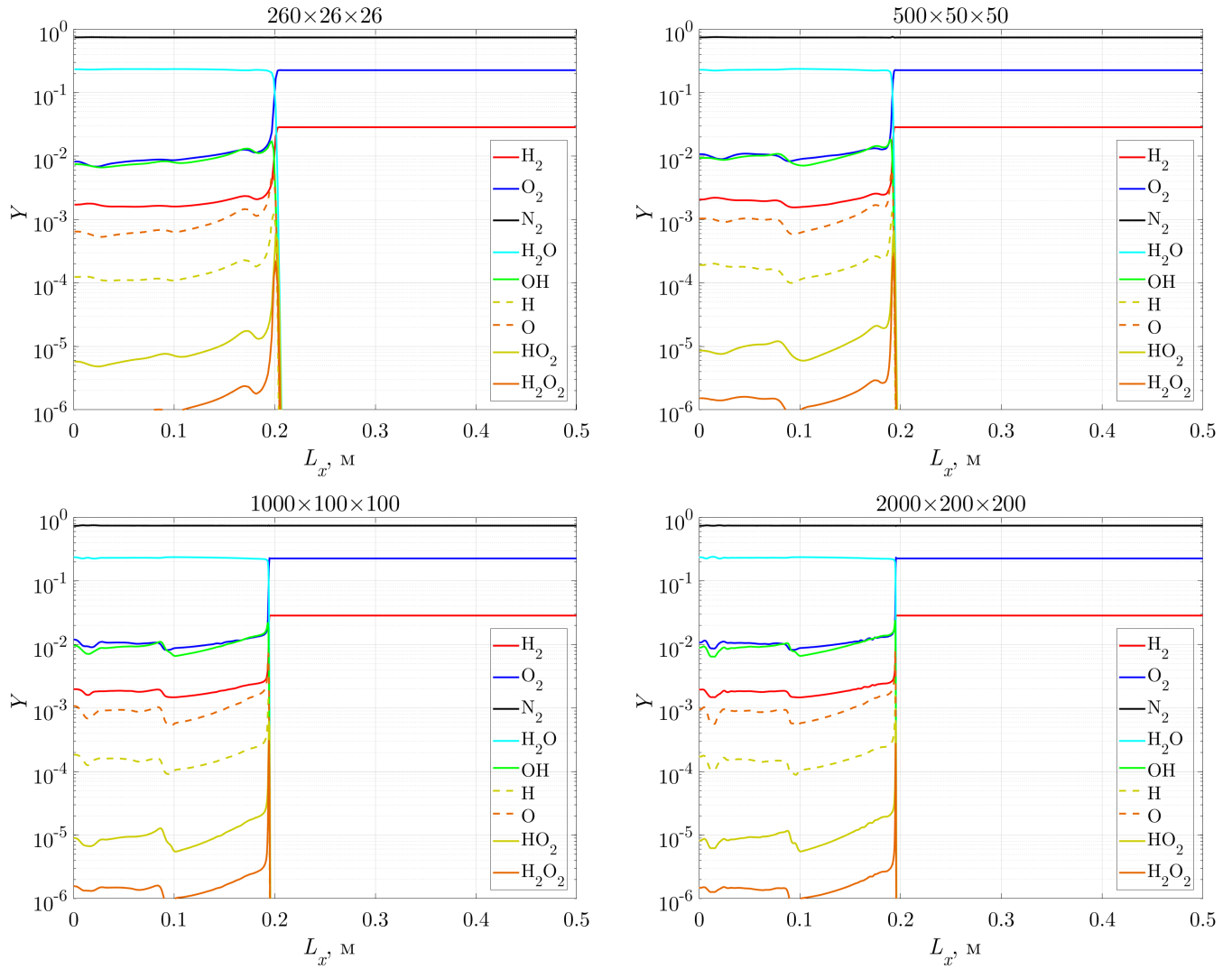


Рисунок 3.18. Профиль массовой доли всех химических компонентов вдоль центральной оси  $Ox$  в момент времени  $t = 100$  мкс для различных расчетных сеток.

позади детонационной волны: чем меньше давление, тем меньше концентрация этого радикала в равновесном состоянии. Она в равновесном состоянии на 2 порядка ниже, чем концентрация атомарного водорода. Концентрация  $H_2O_2$  в целом ведет себя аналогично концентрации  $HO_2$ , но на порядок ниже по значению.

Для разрешения окрестности волны детонации на Рис. 3.19 изображены массовые доли всех компонент в четырех сантиметровой области в окрестности волны детонации  $x \in [0.18, 0.22]$  м для данных, изображенных на Рис. 3.18. На Рис. 3.19 видны детали области перехода от неравновесного химически к равновесному состоянию в детонационной волне. В области перехода концентрация радикалов  $OH$ ,  $O$ ,  $H$  имеет небольшой максимум (для атомарного водорода

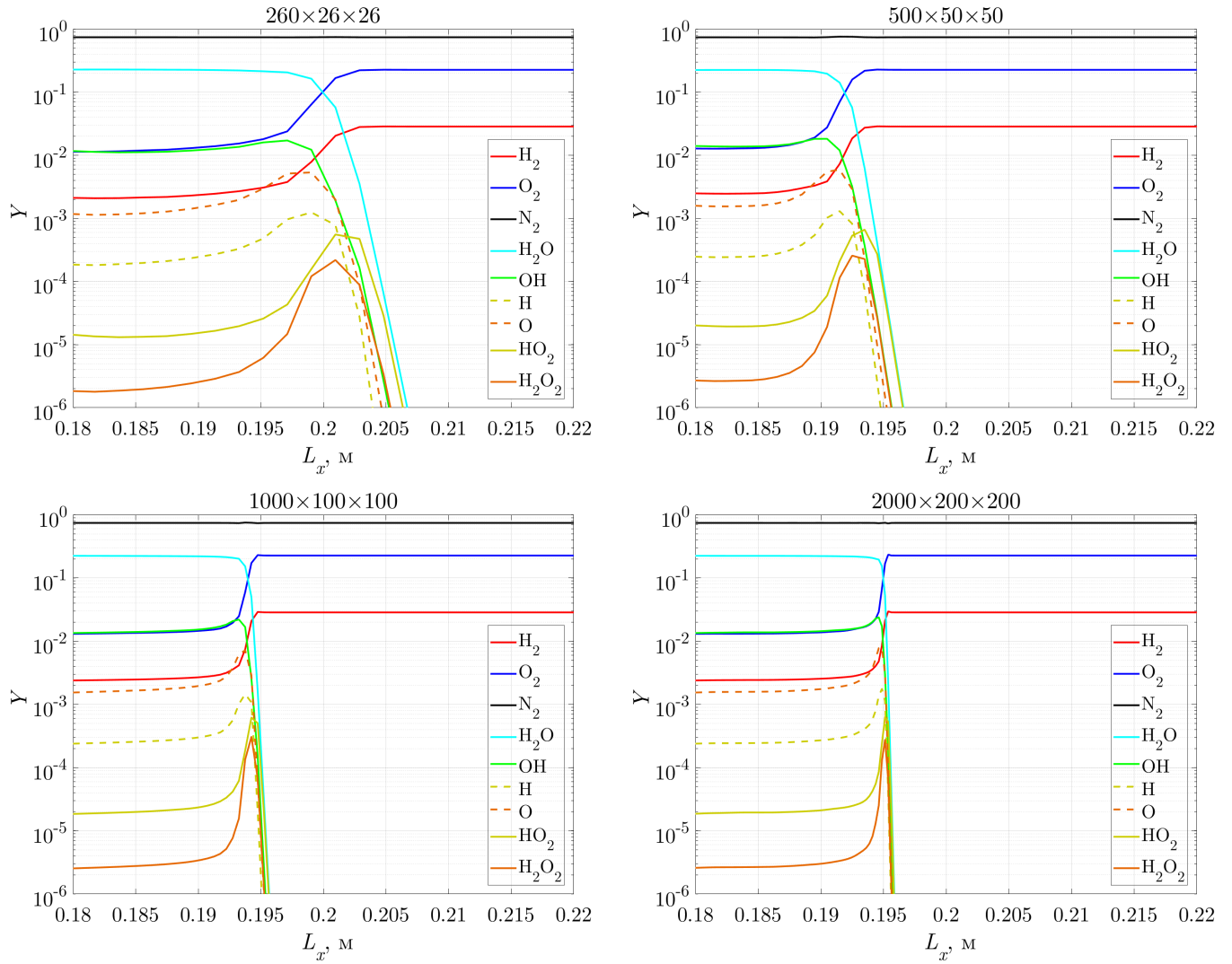


Рисунок 3.19. Профиль массовой доли всех химических компонентов вдоль центральной оси  $Ox$  в момент времени  $t = 100$  мкс для различных расчетных сеток.

превышение по сравнению с равновесным на полпорядка, для остальных — меньше). Концентрация тяжелых радикалов  $\text{H}_2\text{O}_2$  и  $\text{HO}_2$  имеет резкий максимум на 1.5 — 2 порядка выше равновесного. На одну ячейку впереди основного подъема радикалов идут концентрации  $\text{HO}_2$  и  $\text{H}_2\text{O}$ , что соответствует «запускающей» кинетической механизм реакции  $\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{H}$  и взаимодействию получившихся радикалов  $\text{HO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{O}$ . Реакции с этими радикалами — эндотермические, и они не ведут непосредственно к подъему температуры и тем самым к форсированию слабой детонации, даже на самой грубой сетке. С уменьшением размера ячейки область перехода пропорционально сужается. Это означает, что, во-первых, эффективность подавления численной диффузии компонент в области сильного градиента, а во-вторых, что с уменьшением раз-

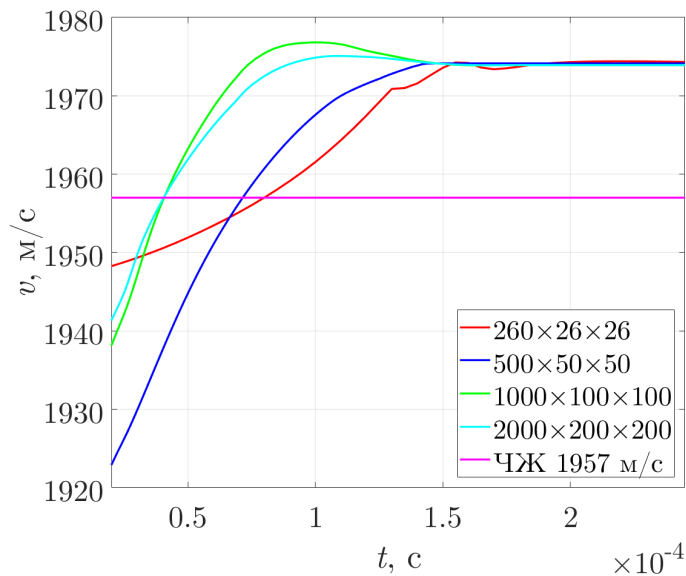


Рисунок 3.20. Динамика скорости волны детонации для различных расчетных сеток. Пурпурным цветом отмечена скорость детонации Чепмена—Жуге.

мера ячейки пропорционально уменьшается зона лидирующей ударной волны, что характерно для схем сквозного счета. Вместе с тем, при переходе от сетки  $1000 \times 100 \times 100$  к сетке  $2000 \times 200 \times 200$  видно, что область перед волной уменьшилась в 2 раза, но область выхода на равновесное состояние, хоть и уменьшилась, но меньше. Это говорит уже о том, что здесь работает задержка самого кинетического механизма, то есть физический, а не численный фактор. В то же время само по себе это уменьшение области за волной говорит о том, что фактор задержки химической реакции даже на самой мелкой из исследованных сеток работает пока недостаточно. Поскольку такое явление, как тонкая структура детонационной волны и соответствующее формирование детонационных ячеек напрямую связано с работой фактора задержки химической реакции, это говорит о том, что для численного расчета подобных явлений требуется еще лучшее разрешение.

На Рис. 3.20 изображена динамика скорости волны детонации в зависимости от времени. Положение волны детонации определялось по изменению концентраций компонентов в ходе протекания реакций за фронтом детонационной волны. Скорость определялась по отношению конечных разностей положения волны и времени, и проводилось дополнительное сглаживание для того, чтобы компенсировать неточности определения положения фронта.

Получено, что во всех случаях, скорость волны постепенно возрастает, выходя на значение, немного превышающее теоретическую скорость волны Че-

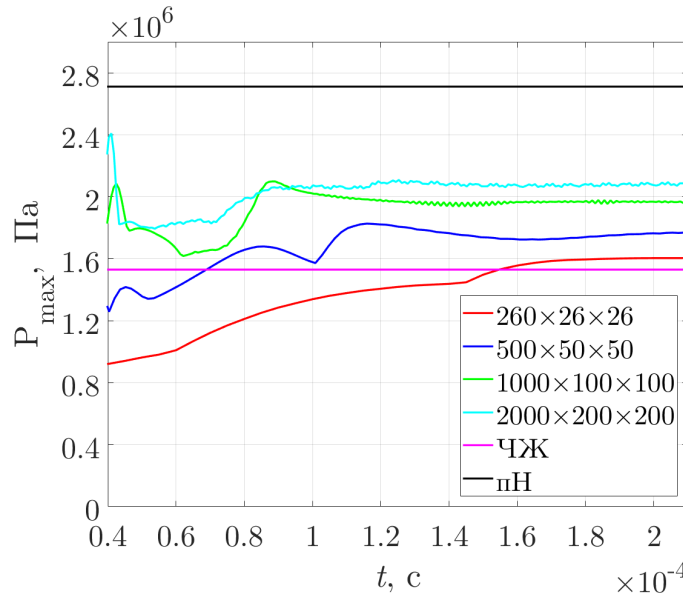


Рисунок 3.21. Динамика значения пика давления в волне детонации для различных расчетных сеток. Пурпурным цветом отмечено теоретическое значение давления в волне Чепмена—Жуге, черным — давление в пике Неймана.

пмена—Жуге ( $v_{CH} = 1957$  м/с). При этом превышение не превосходит 1% от теоретического значения. Отличие в скорости при использовании различных сеток находится в пределах нескольких долей процента, постепенной уменьшаясь при уменьшении размера расчетной ячейки. В целом было получено, что скорость волны существенно зависит от размера сетки только на начальном этапе. Однако, это скорее объясняется особенностями алгоритмов определения положения волны детонации и аппроксимации скорости. К примеру, после вычисления значения скорости конечными разностями присутствует приличная «болтанка», особенно заметная на начальном этапе. Её величина уменьшается при использовании более мелких сеток. Болтанка с течением времени уменьшается и, можно сказать, устанавливается в определенных пределах. На Рис. 3.20 зона установления соответствует времени  $t \geq 150$  мкс, в связи с этим оценка скорости наиболее точна именно на этом участке.

На Рис. 3.21 изображено изменение во времени значения пика давления в волне детонации, полученное для сеток с различным разрешением. Контрольные точки на рисунке располагаются через каждые 10 мкс, и тем самым тонкие осцилляции пика давления рисунок не разрешает.

Получено, что примерно до момента времени  $t = 100 - 150$  мкс пик давления во всех случаях увеличивается, затем он стабилизируется. Для всех сеток величина пика превосходит теоретическое значение давления в волне Чепме-

на—Жуге. Таким образом, можно отметить, что слабая детонация вследствие опережающего ударную волну поджигания горючей смеси численной диффузией энергии или концентрации радикалов, не возникает даже на самой грубой сетке. С уменьшением пространственного шага сетки величина пика растет каждый раз примерно на 2 бара (при уменьшении шага в 2 раза). В то же время, полученный численно пик на этих сетках еще примерно на 6 бар ниже теоретического значения в пике Неймана, также отмеченного на этом рисунке. Эта оценка говорит о том, что достижения близкого к пику Неймана значения при использовании этой сетки следует ожидать при дальнейшем уменьшении шага сетки не менее, чем на порядок. В то же время для получения необходимой скорости детонации достаточно и самой грубой из рассмотренных сеток с размером элементов в 1.92 мм.

### 3.3 Параллельная реализация вычислительного комплекса

С целью ускорения времени проведения расчетов была проведена параллелизация разработанного программного комплекса. Изначально планировалась адаптировать его под вычислительные узлы с общей памятью, укомплектованные специализированными сопроцессорами. Распараллеливание для работы на таких системах с общей памятью осуществлялось с помощью технологии OpenMP [158—160]. В качестве специализированных сопроцессоров использовались графические ускорители фирмы NVIDIA. Для их программирования была выбрана технология CUDA (Compute Unified Device Architecture) [161—165]. Тестирование проводилось на ряде двумерных и трехмерных задач, как с учетом химических превращений, так и без их учета. Некоторые из этих задач были описаны в предыдущих разделах.

В начале было проверено время исполнения на газодинамических задачах без учета химических реакций в двумерной постановке. При этом в расчетах рассматривались квадратные сетки с одинаковым количеством ячеек по всем пространственным измерениям. Зависимость ускорения, полученного на графическом сопроцессоре NVidia Tesla M2090 по сравнению с последовательным кодом, от количества расчетных ячеек представлено на Рис. 3.22 (левый график). По оси абсцисс указано количество ячеек по одному пространственному

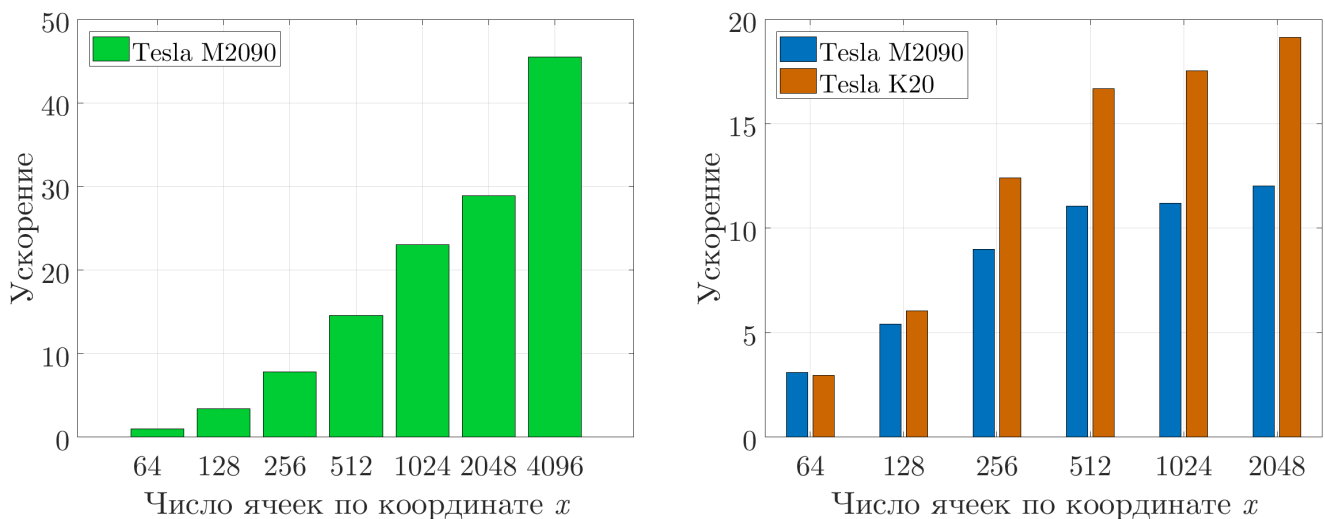


Рисунок 3.22. Графики ускорения расчетов, полученные на графическом сопроцессоре по сравнению с последовательным кодом без учета химических реакций (левый график) и с их учетом (правый график), в зависимости от размера разностной сетки.

измерению  $N$ . Суммарное число ячеек, используемое в расчетах, есть  $N^2$ . Из графика видно, что на самой грубой сетке из-за малого количества ячеек и, как следствие, слабой загрузки графической карты, скорость работы последней сопоставима с скоростью центрального процессора. С увеличением размера расчетной сетки и объема обрабатываемой информации наблюдается существенных рост относительной скорости расчета. На самой мелкой из рассмотренных сеток было получено более чем 40 кратное ускорение.

Результаты ускорения, полученные при рассмотрении прямого инициирования детонации в двумерной расчетной области, заполненной химически реагирующей водородно-воздушной газовой смесью, изображены на Рис. 3.22 (правый график). Используемый кинетических механизм (19 реакций, 9 компонент) был описан во второй главе данной работы. Видно, что несмотря на большее ускорение для грубых сеток (64, 128 ячеек по каждому пространственному измерению) по сравнению с чистой газодинамикой, с дальнейшим ростом объемов обработки происходит «насыщение», кривая ускорения выходит на некоторое постоянное значение. При этом объем данных, необходимых для хранения в памяти графического процессора возрастает. В связи с этим, при использовании алгоритма, который хранит все данные в памяти сопроцессора и не производит постоянные обмены с оперативной памятью центрального процессора, накладываются более жесткие ограничения на размеры использу-



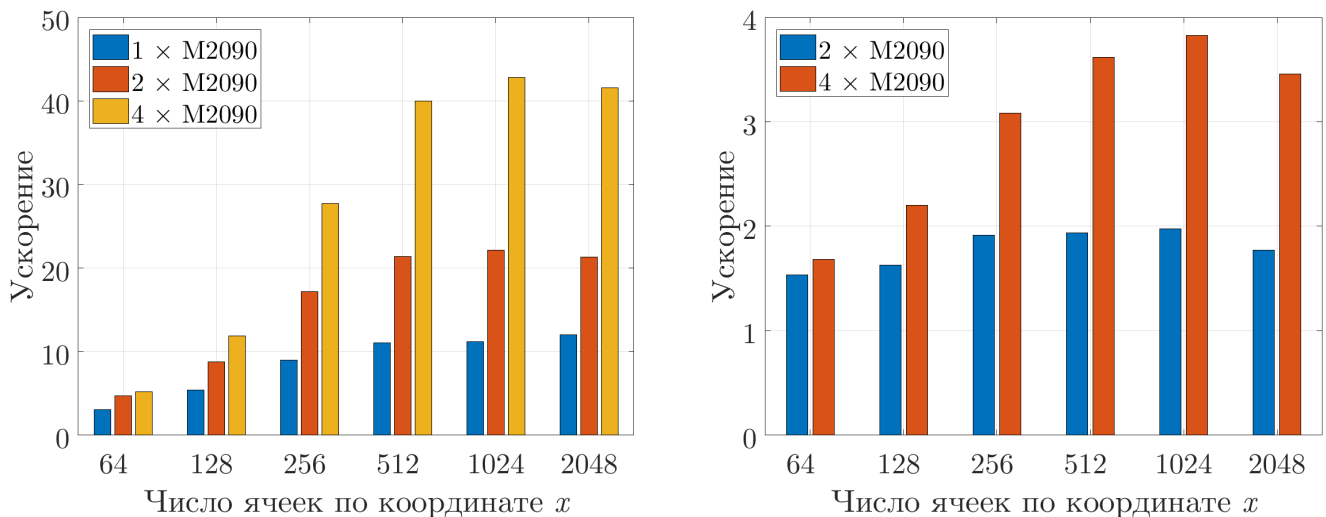


Рисунок 3.23. Графики ускорения расчетов, полученные на графических сопроцессорах по сравнению с последовательным кодом (левый график) и с относительно одной графической карты (правый график), в зависимости от размера разностной сетки.

емых сеток. Также на данном графике приведены расчеты с использованием нескольких типов графических сопроцессоров. Видно, что по сравнению с использовавшейся ранее картой NVidia Tesla M2090 применение более современной карты NVidia Tesla K20 с большим количеством элементарных ядер (и другой архитектурой), но, приблизительно, одинаковым энергопотреблением, позволяет получить 1.5 кратный прирост ускорения без каких-либо дополнительных изменений.

Также было рассмотрена работа программы на системе с несколькими однотипными графическими картами Рис. 3.23. При работе с двумя и четырьмя картами на сетках до  $1024^2$  ячеек наблюдается поведение, близкое к работе на одной карте с практически линейным ростом относительного ускорения. Однако, на самой большой из рассмотренных сеток в  $2048^2$  ячеек наблюдается «заваливание», т.е. относительное время работы увеличивается. Если рассмотреть работу на двух и четырех картах относительно одной карты (Рис. 3.23, правый график), то можно заметить, что максимумы на графиках достигаются при использовании сетки в  $1024^2$  ячеек и соответствуют практически линейному росту с увеличением числа карт. На большей сетке наблюдается падение относительной скорости работы, связанное, скорее всего, с увеличением объема данных, передаваемых между сопроцессорами.

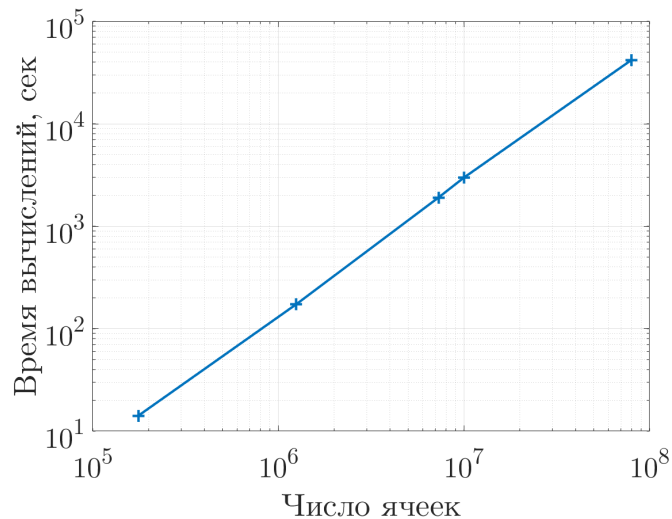


Рисунок 3.24. График времени расчета в зависимости от размера разностной сетки в логарифмическом масштабе.

При рассмотрении трехмерных задач и, как следствие, увеличении объема хранимых на графическом процессоре данных возникла необходимость изменения алгоритма передачи-расчета. На Рис. 3.24 представлено в логарифмическом масштабе время работы программы в зависимости от размера разностной сетки на 10 мкс для задачи из Раздела 3.2. В качестве сопроцессора использовалась специализированная графическая карта NVidia Tesla k40, обладающая 12 Гб общей памяти. Соответствующие значения времени расчета и размеров сеток представлены в Таблице 6. При этом для сеток, у которых размер ячеек был больше 0.05 мм ( $1000 \times 100 \times 100$  ячеек и меньше), все данные полностью помещались в память графического сопроцессора. Для более мелких сеток был использован алгоритм, при котором в асинхронном режиме производились следующие операции: запуск вычислительного ядра, копирование данных на сопроцессор и обратное копирование обработанных данных в память центрального процессора. Как видно из Рис. 3.24 существенной «просадки» времени счета, связанной с переходом на другой алгоритм, на мелких сетках не наблюдается. Из этого можно сделать вывод, что время, затрачиваемое на обработку данных на сопроцессоре, полностью перекрывает время, затрачиваемое на постоянный обмен данными между оперативной памятью центрального процессора и глобальной памятью сопроцессора.

На Рис. 3.25-3.26 представлены данные по времени выполнения и ускорению, полученные на той же задаче из Раздела 3.2, для аналогичных моментов времени и сетки  $500 \times 50 \times 50$  элементов при рассмотрении работы алгоритма,

Таблица 6. Время исполнения на графическом процессоре NVidia Tesla k40 при использовании различных разносных сеток.

| № | Размер сетки                 | Время расчета, сек |
|---|------------------------------|--------------------|
| 1 | $260 \times 26 \times 26$    | 14.14              |
| 2 | $500 \times 50 \times 50$    | 173.51             |
| 3 | $900 \times 90 \times 90$    | 1906.11            |
| 4 | $1000 \times 100 \times 100$ | 2984.13            |
| 5 | $2000 \times 200 \times 200$ | 42002.20           |

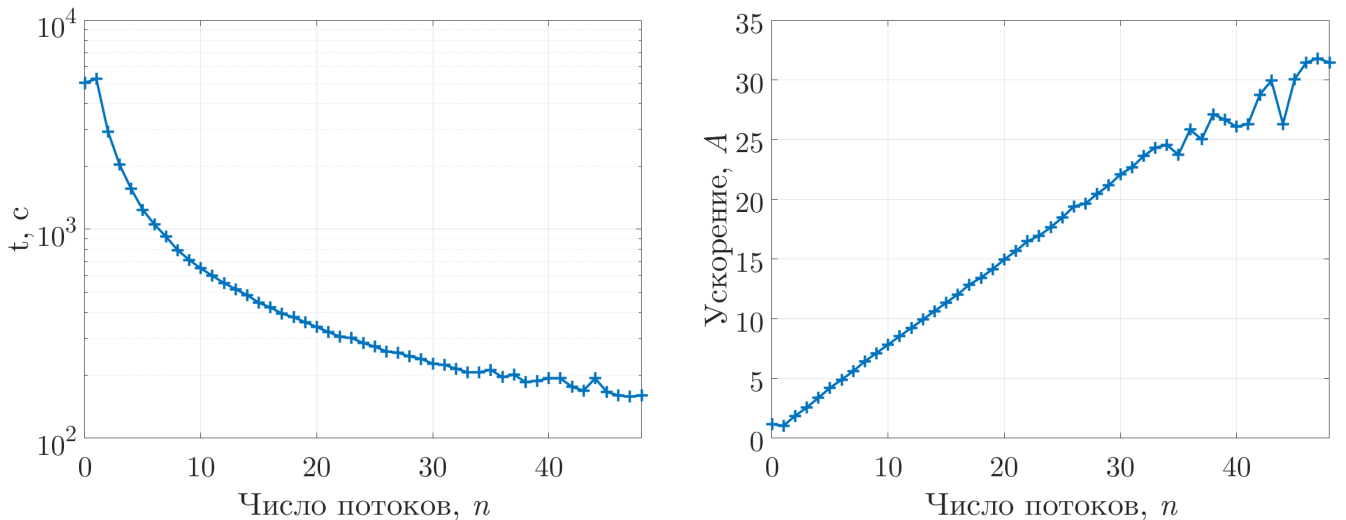


Рисунок 3.25. Графики времени (левый, логарифмический масштаб) и ускорения (правый) расчетов, полученные на многопроцессорной системе АПК-1, в зависимости от количества используемых потоков.

ориентированного на системы с общей памятью. Его построение осуществлялось с помощью технологии OpenMP. Расчеты производились на системе АПК-1 (Аппаратно-Программный Комплекс), узел которой снабжен четырьмя двенадцати ядерными процессорами AMD Opteron.

Из графика времени расчета (Рис. 3.25, левый) видно, что с ростом числа используемых потоков на многоядерной системе время исполнения задачи в большинстве случаев уменьшается. Исключения составляют только случай использования одного потока в параллельной реализации, время исполнения которого больше, чем последовательный код, что естественно, поскольку в серийном коде не тратится компьютерное время и прочие ресурсы на создание и обеспечение работы параллельных процессов, и варианты с числом потоков больше 40, в которых наблюдается немонотонный характер этой зависимости. Причиной немонотонности в данных случаях может служить как характер

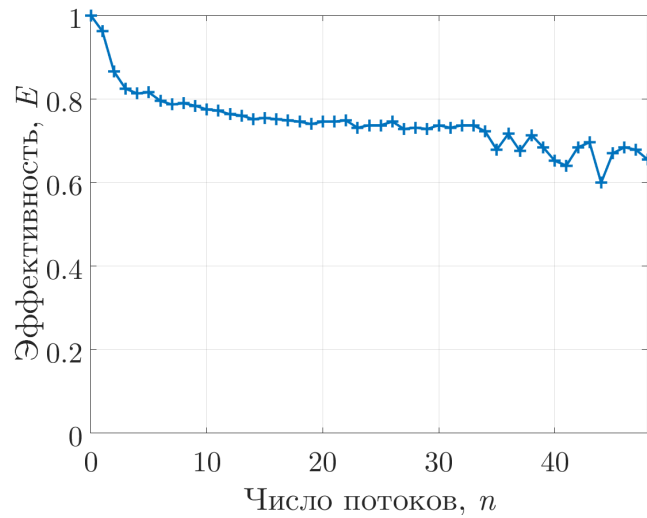


Рисунок 3.26. График эффективности ускорения в зависимости от количества используемых потоков.

пересылок, так и вмешательство конкурирующих системных процессов, замедляющих расчет при дефиците свободных ядер.

На графике ускорения (Рис. 3.25, правый) представлено ускорение  $A$  решения задачи в зависимости от количества использующихся потоков (ядер)  $n$  по сравнению с последовательным кодом. Видно, что ускорение вплоть до 33 потоков растет практически линейно (несколько проседая для 1 потока), затем линейность нарушается, восстанавливаясь для 36 и 38 потоков и подходя к линейному снова при 43 и 47 потоках. Последние близкие линейные значения не очень надежны в виду сделанных выше предположений о причинах просадки производительности. Впрочем, эффективность (или загрузка процессоров) меньше 1, поскольку наклон прямого участка ускорения меньше единицы.

На Рис. 3.26 изображен график коэффициента эффективности ускорения или коэффициента загрузки процессоров  $E$  в зависимости от количества потоков  $n$ . Для расчета величины  $E$  используются соотношения:

$$E(n) = A(n)/n, \quad E(0) = 1. \quad (3.1)$$

Из Рис. 3.26 видно, что эффективность на первых 6 ядрах быстро падает от 1 до 0.8, затем медленно снижается примерно до 0.73 и держится на данном уровне до 33 потоков, практически стабилизируясь. Затем поведение этой характеристики становится неустойчивым, начинаются колебания в пределах от 0.6 до 0.7. В целом, после использования 33 ядер эффективность в среднем уменьшается, но все же остается около 0.65 при максимальном числе потоков 48.

### 3.4 Заключение по главе

В данной главе представлены результаты тестирования и работы созданного программного комплекса в процессе решения ряда газодинамических задач. Приведены результаты расчета задачи Римана о распаде произвольного разрыва с помощью нескольких используемых в программном комплексе разностных схем для различных начальных условий, характеризующих возникновение возможных волновых конфигурации в расчетной области. Показано хорошее совпадение с аналитическим решением для всех рассмотренных разностных схем, обоснован выбор оптимального из используемых методов.

Представлены результаты работы программного комплекса при исследовании процессов, протекающих при прямом инициировании детонации в водородно-воздушных смесях в трубах квадратного поперечного сечения. Проведено исследование зависимости протекающих процессов от размера ячейки разностной сетки. Проведена оценка и сравнение скорости распространения возникающей детонационной волны с теоретическим значением скорости детонации Чепмена—Жуге в зависимости от размера расчетной ячейки разностной сетки. Получено хорошее совпадение с теоретическими значениями.

Представлены результаты расчетов и анализ параллельной реализации разработанного программного комплекса для технологий параллельного программирования CUDA и OpenMP. Получены данные по ускорению на графических сопроцессорах серии NVidia Tesla для различных размеров разностных сеток. Представлены данные и анализ ускорения на системе АПК-1, полученные с помощью технологии OpenMP.

## Глава 4. Исследование фокусировки ударных волн в конической и клинообразной областях в химически реагирующей газовой смеси

В данной главе представлены результаты моделирования процессов, протекающих в измерительной секции цилиндрической ударной трубы диаметром 76 миллиметров и длиной 720 миллиметров (Рис. 4.1), заполненной стехиометрической водородно-воздушной смесью. В конце трубы была установлена вставка с клиновидной либо конической полостью с углом при вершине  $\theta = 90^\circ$ . Далее задавалась прямая ударная волна, набегающая на вставку, и рассматривались процессы, протекающие в результате отражения и фокусировки ударных волн.

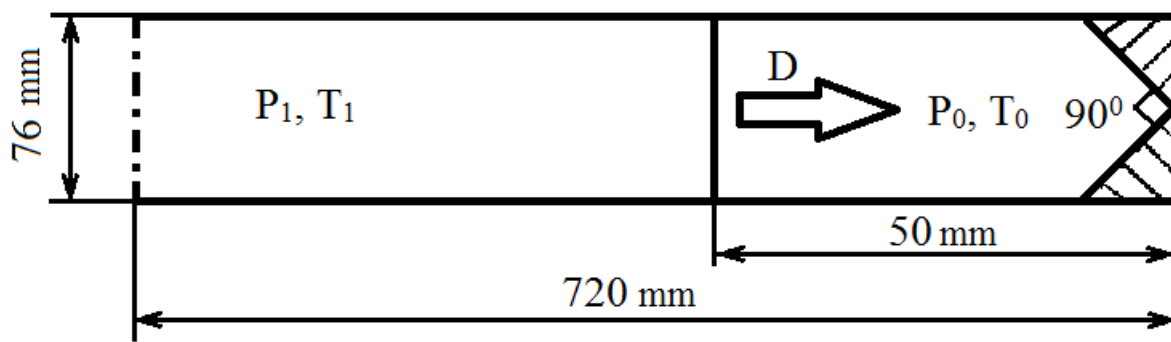


Рисунок 4.1. Схема рассматриваемой задачи.

Задача была рассмотрена в трехмерной постановке. Для определенности была введена следующая система координат: сторона, параллельная длине трубы, была обозначена как ось  $x$ , а оси  $y$  и  $z$  были выбраны в соответствии с расположением клинообразной вставки так, чтобы у любого сечения, параллельного плоскости  $Oxy$ , угол при вершине клина составлял  $90^\circ$ . Для конусообразной вставки выбор направления осей  $y$  и  $z$  не имеет значения, так как область обладает осевой симметрией.

Были рассмотрены следующие варианты начальных условий для вставок в форме клина и в форме конуса (Таблица 7). Во всех экспериментах труба была заполнена покоящейся стехиометрической водородно-воздушной смесью с молярными долями компонент:  $C_{H_2} : C_{O_2} : C_{N_2} = 2 : 1 : 3.76$ , температурой  $T_0$  и давлением  $P_0$ . Ударная волна, набегающая на вставку, двигалась со скоростью  $D$ . При этом параметры вещества за фронтом: температура, давление и скорость, были соответственно  $T$ ,  $P$  и  $v_x$ . Также в Таблице 7 представлены теоретически рассчитанные параметры детонации Чепмена—Жуге для

рассмотренных случаев: температура ( $T_{CH}$ ) и давление ( $P_{CH}$ ) за фронтом отраженной детонационной волны, а также ее скорость распространения ( $V_{CH}$ ). Все рассмотренные начальные параметры соответствуют данным физических экспериментов, проведенных в институте тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси, с которыми и проводилось сравнение.

Таблица 7. Начальные условия для рассмотренных случаев.

| №              | 1     | 2     | 3     | 4    |
|----------------|-------|-------|-------|------|
| Вставка        | клин  | конус | клин  | клин |
| $T_0$ , К      | 294   | 294   | 293   | 295  |
| $P_0$ , бар    | 0.28  | 0.35  | 0.37  | 0.12 |
| $T$ , К        | 593   | 491   | 421   | 559  |
| $P$ , бар      | 1.85  | 1.55  | 1.13  | 0.66 |
| $v_x$ , м/с    | 672   | 501   | 362   | 617  |
| $D$ , м/с      | 969   | 803   | 675   | 915  |
| $V_{CH}$ , м/с | 1933  | 1941  | 1942  | 1908 |
| $P_{CH}$ , бар | 14.47 | 14.59 | 12.36 | 5.35 |
| $T_{CH}$ , К   | 2978  | 2948  | 2913  | 2879 |

На Рис. 4.2 представлена схема измерительной секции ударной трубы, в которой проводились эксперименты по изучению фокусировки отраженных ударных волн [166; 167]. Геометрия данной измерительной секции и была взята за основу при проведении численного моделирования. При вычислительных экспериментах рассматривались значения газодинамических величин в точках, соответствующих изображенным на чертеже синим цветом датчикам давления. Сравнение с экспериментом производилось по показаниям этих датчиков, а также по оценкам скорости распространения возникающих в системе фронтов пламени.

#### 4.1 Возникновение детонации в клине

В данном случае (случай №1 из Таблицы 7) в результате фокусировки в клинообразной вставке возникла детонация. На Рис. 4.3 — 4.4 изображены

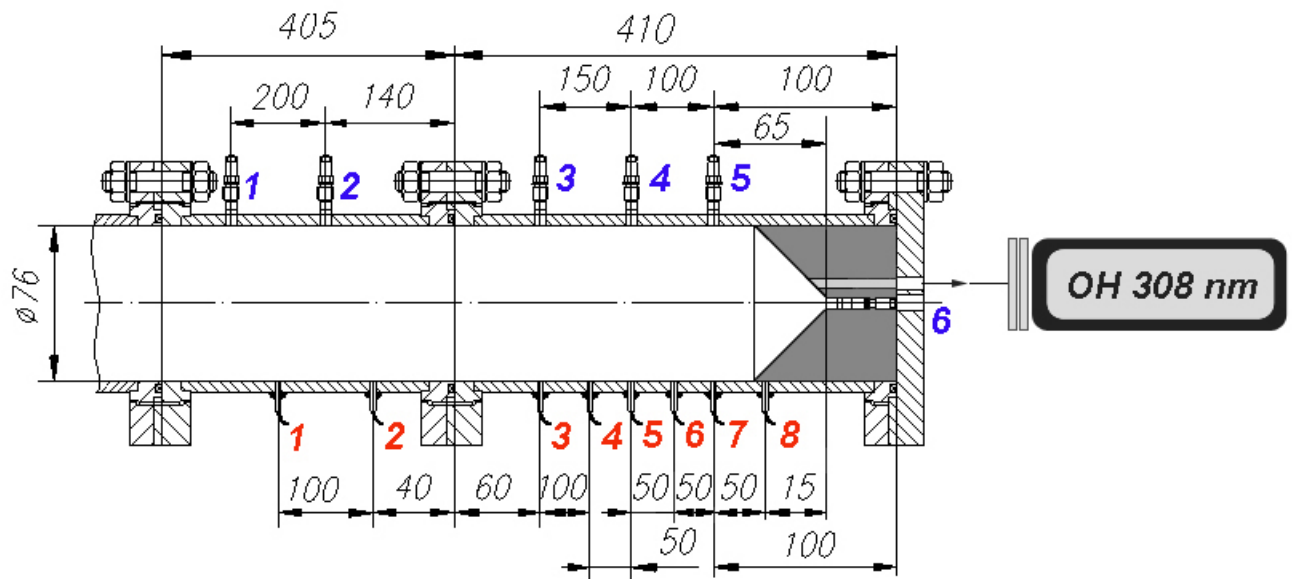


Рисунок 4.2. Чертеж измерительной секции для экспериментов по исследованию фокусировки в водородно-воздушных смесях. Синим цветом изображены высокочастотные датчики давления. Красным — ионизационные датчики. Все расстояния представлены в миллиметрах.

последовательные моменты развития процесса в окрестности правого конца цилиндрической трубы для участка расчетной области  $x \in [0.52, 0.72]$  м. Процесс на клиновидной вставке является существенно трехмерным, не близким к осесимметричному. Поэтому на рисунках представлены параметры как в плоскости  $Oxy$ , так и в плоскости  $Oxz$ , проходящие через ось цилиндрической трубы.

На Рис. 4.3 — 4.4 представлено распределение давления для некоторых последовательных моментов времени. Видны особенности возникновения детонации при фокусировке ударной волны на клиновидной вставке в цилиндрической трубе. Для времени  $t = 12$  мкс от начала расчета ударная волна достигает вставки и начинается отражение от нее, при  $t = 40$  мкс процесс отражения от вставки хорошо заметен, отраженные ударные волны подходят друг к другу ближе всего у лидирующих своих концов. При  $t = 55$  мкс видно усиление интенсивности отраженной волны выше 30 бар при приближении к углу вставки, при  $t = 60$  мкс в вершине вставки возникает детонационная волна, интенсивность же сфокусированной в окрестности оси волны снижается (волна расходится от оси), при  $t = 60 — 90$  мкс детонационная волна расходится от правого конца рабочей области, продвигаясь по среде с неравномерно повышенным давлением (следствие прошедшей фокусировки ударной волны),



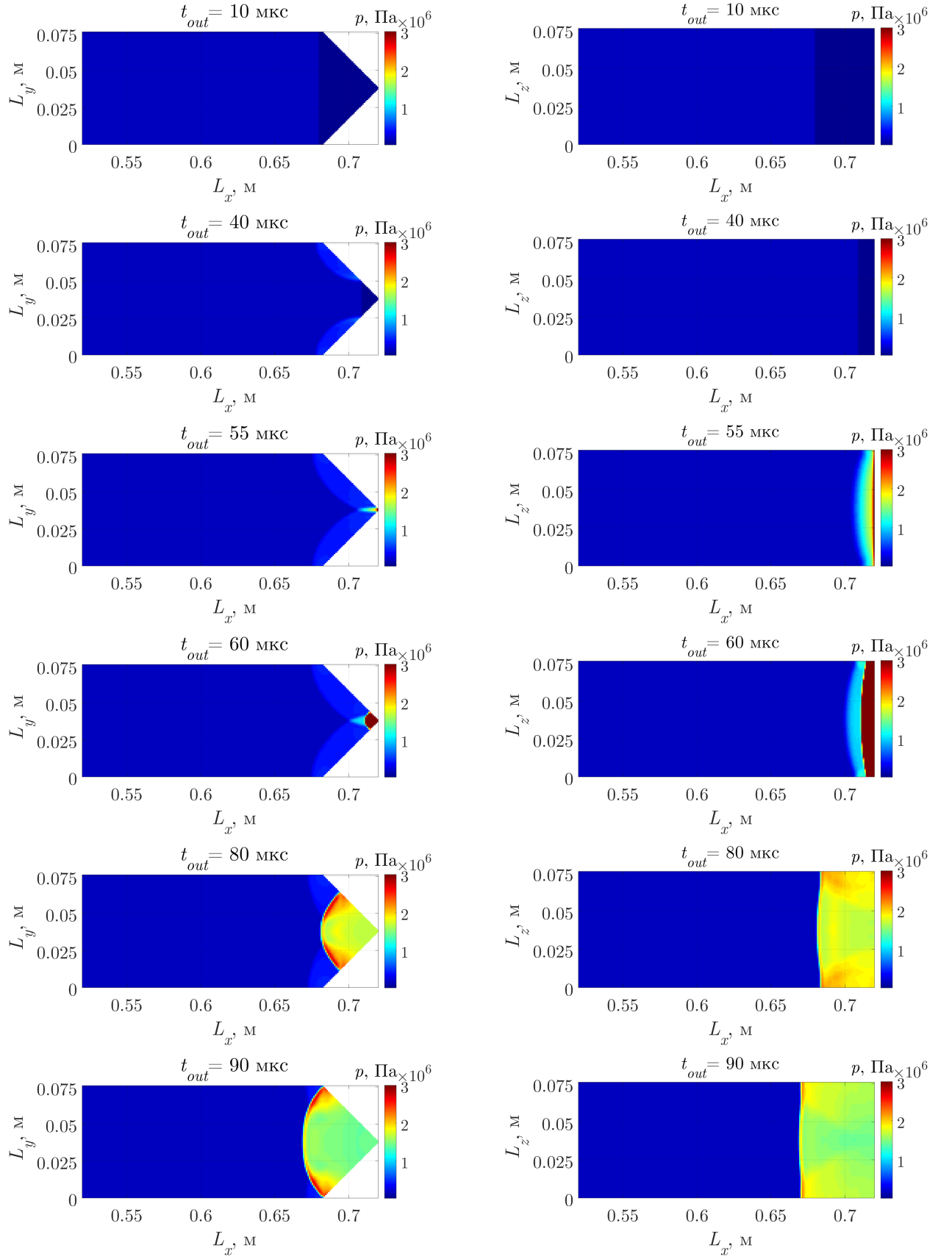


Рисунок 4.3. Распределение давления по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени. Случай детонации в клине.

далее детонационная волна достигает конца вставки, и на дальнейших временах видно, как позади волны детонации формируется сложной формы косое отражение внутри сгоревшей газовой смеси от стенок цилиндра, как отраженные волны сталкиваются и взаимодействуют друг с другом. Также заметно, как на временах  $t = 160—190$  мкс передний фронт волны детонации становится практически плоским.

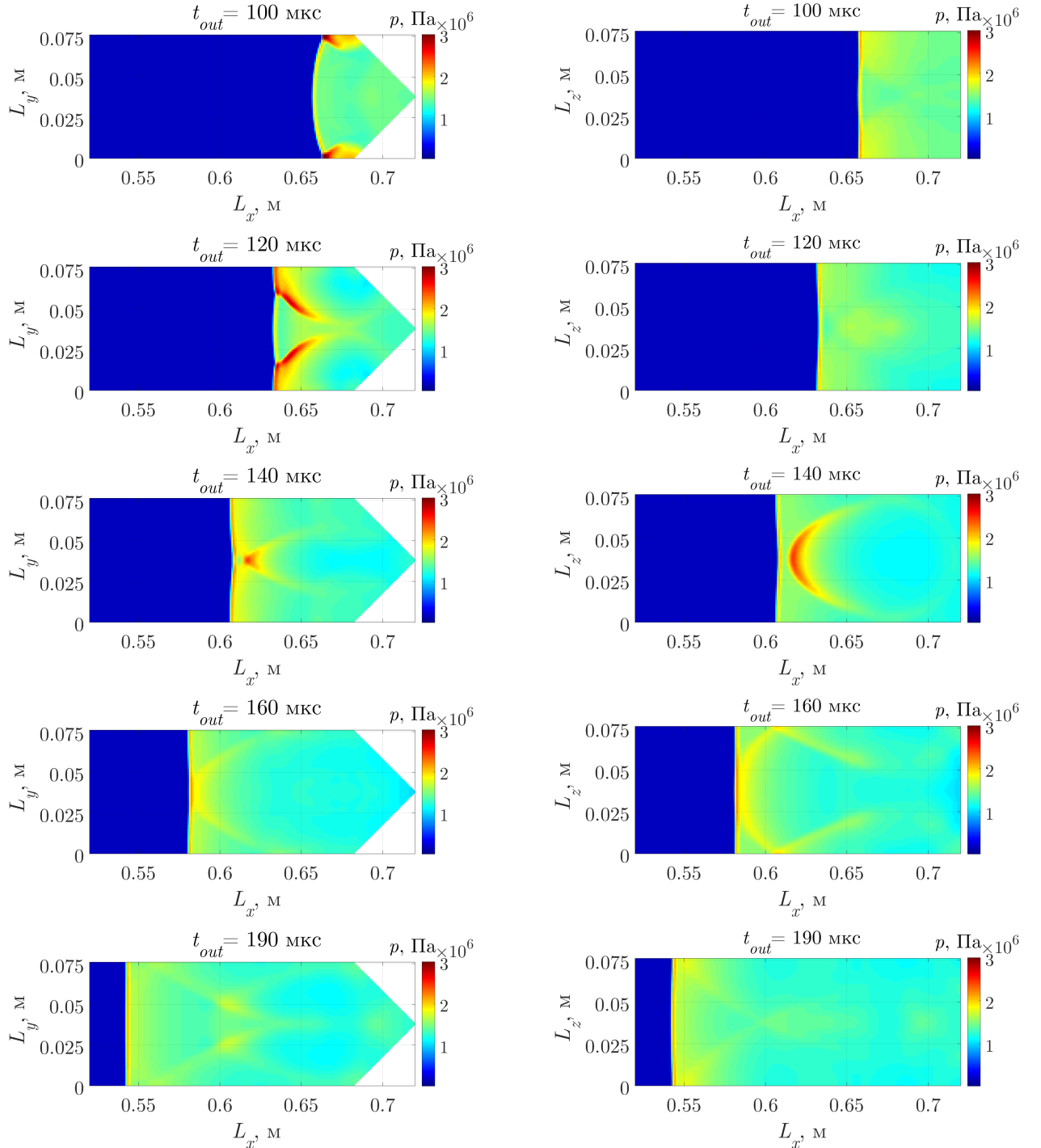


Рисунок 4.4. Распределение давления по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и плоскости  $Oxz$  (справа) для некоторых моментов времени. Случай детонации в клине.

На Рис. 4.5 изображено распределение температуры в плоскостях  $Oxy$  и  $Oxz$ . Видно, что в начальные моменты времени ( $t = 0 - 55$  мкс) температурное поле отслеживает положение первоначальной ударной волны и ее отражения от образующей конусообразной вставки. В момент  $t = 55$  мкс прошла фокусировка ударных волн, но смесь еще не загорелась. Практически сразу за этим ( $t = 60$  мкс) заметно возгорание в носике конической вставки, температура там сильно повышена — до 3500 К. При  $t = 90 - 110$  мкс видно, как распределена температура в расходящейся от носика вставки волны детонации: она максимальна (порядка 3200 К) на фронте волны, позади него падает. При  $t = 90$  мкс можно заметить, как после пересечения отраженной детонационной волной области, оставшейся позади волны, ранее отраженной от образующей конуса, сформировалась контактная поверхность, характеризующаяся скачком температуры: при прохождении детонационной волной по первичному потоку температура позади волны выше, чем при прохождении ее по газу позади отраженной волны. В дальнейшие моменты поле температуры в основном отслеживает уже рассмотренные особенности отражения ударных волн в сгоревшем газе, а также форму фронта лидирующей детонационной волны. Можно также заметить, что к моменту 190 мкс от начала расчета температура сгоревшей газовой смеси в окрестности носика конусообразной вставки падает до значений порядка 2500 К, хотя первоначально в том месте был самый высокий подъем температуры. Контактная поверхность постепенно смещается влево с потоком газа, но также и заметно размывается.

Особенности развития поля скорости вдоль оси цилиндра представлены на Рис. 4.6. Отрицательные значения скорости соответствуют движению газовой смеси справа налево, положительные — слева направо. В момент времени  $t = 20$  мкс от начала расчета состояние скорости практически идентично начальному, только волна сместилась к вставке. При  $t = 55$  мкс видны особенности поля скорости в отраженной от конической вставки ударной волне, имеющей искривленный профиль. При  $t = 60$  мкс видно, что впереди отраженной от образующей профиля волны скорость газа за волной увеличивается по мере подхода отраженных волн к оси цилиндра и клина, усилившийся поток фокусируется в носике конуса. При 60 мкс в вершине конуса возникает детонационная волна, заметная по значительной скорости газа в обратном направлении, но еще малая по размеру. При временах  $t = 90 - 110$  мкс детонационная волна расходится от правого конца рабочей области, причем скорость обратного потока у волны воз-

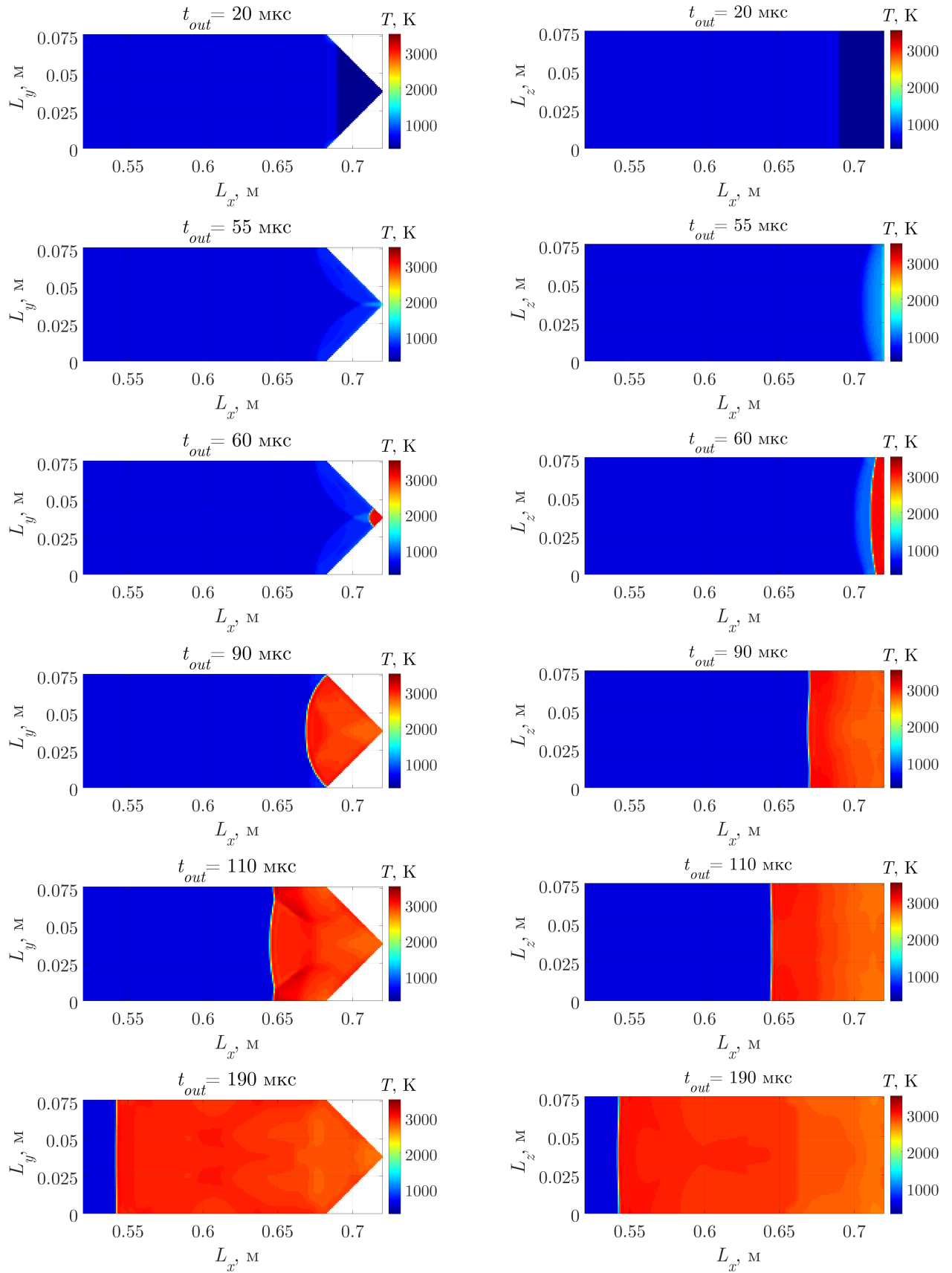


Рисунок 4.5. Распределение температуры по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени. Случай детонации в клине.

растает. Видно, что в дальнейшем поле скорости меняется, отслеживая волны, отраженные от образующей цилиндра внутри области сгоревшего газа.

На Рис. 4.7 представлено распределение массовой доли радикала  $\text{HO}_2$  по центру расчетной области. Данный радикал хорошо отслеживает фронт химических реакций на которых принимает свое максимальное значение. Далее под воздействие высоких температур он быстро распадается. Как видно, до момента времени  $t = 55$  мкс какие-либо реакции в расчетной области отсутствуют. После в момент  $t = 60$  мкс видно образование зоны реакции, отходящей от вершины клина с большой скоростью и соответствующей фронту детонационной волны. В дальнейшие моменты времени  $t = 90 - 110$  мкс видно распространение фронта волны детонации по рабочей области.

На Рис. 4.8 для рассматриваемого случая представлено сравнение результатов численных расчетов и данных экспериментов. Как уже было отмечено ранее, сравнение проводилось по давлению, выводимому в контрольных точках (датчиках). Номера датчиков показаны с правой стороны графиков и соответствуют номерам, изображенным на Рис. 4.2 синим цветом. Все представленные данные между собой были синхронизированы по времени прихода начальной ударной волны к расположенному в вершине вставки датчику (номер 6). Было рассмотрено два варианта численного счета: с использованием турбулентной модели (численная схема №1) и без турбулентности (численная схема №2). По времени регистрации датчиками прохождения возникшей детонационной волны была проведена оценка ее скорости распространения, как для численного счета, так и для экспериментальных данных (Рис. 4.9).

Как видно из представленных данных на первых 250 мкс от начала детонирования смеси (Рис. 4.8, датчики №6-3) оба численных варианта достаточно близки по своему поведению к экспериментальным данным как по времени подхода волны к датчикам, так и по уровню возникающих давлений. В случае отсутствия моделирования турбулентности детонационная волна начинает замедляться и подходит к следующим датчикам с небольшим запозданием по сравнению с экспериментом и с численной моделью, учитывающей турбулентность (Рис. 4.8, датчики №2,1). Это особенно хорошо заметно на графике скорости Рис. 4.9, на котором волна при использовании схемы №2 начинает тормозиться и выходить на теоретическую скорость детонации Чепмена—Жуге. При этом в эксперименте и схеме №1 скорость волны немного выше теоретической. Причина заключается в том, что данная скорость направлена в сторону,

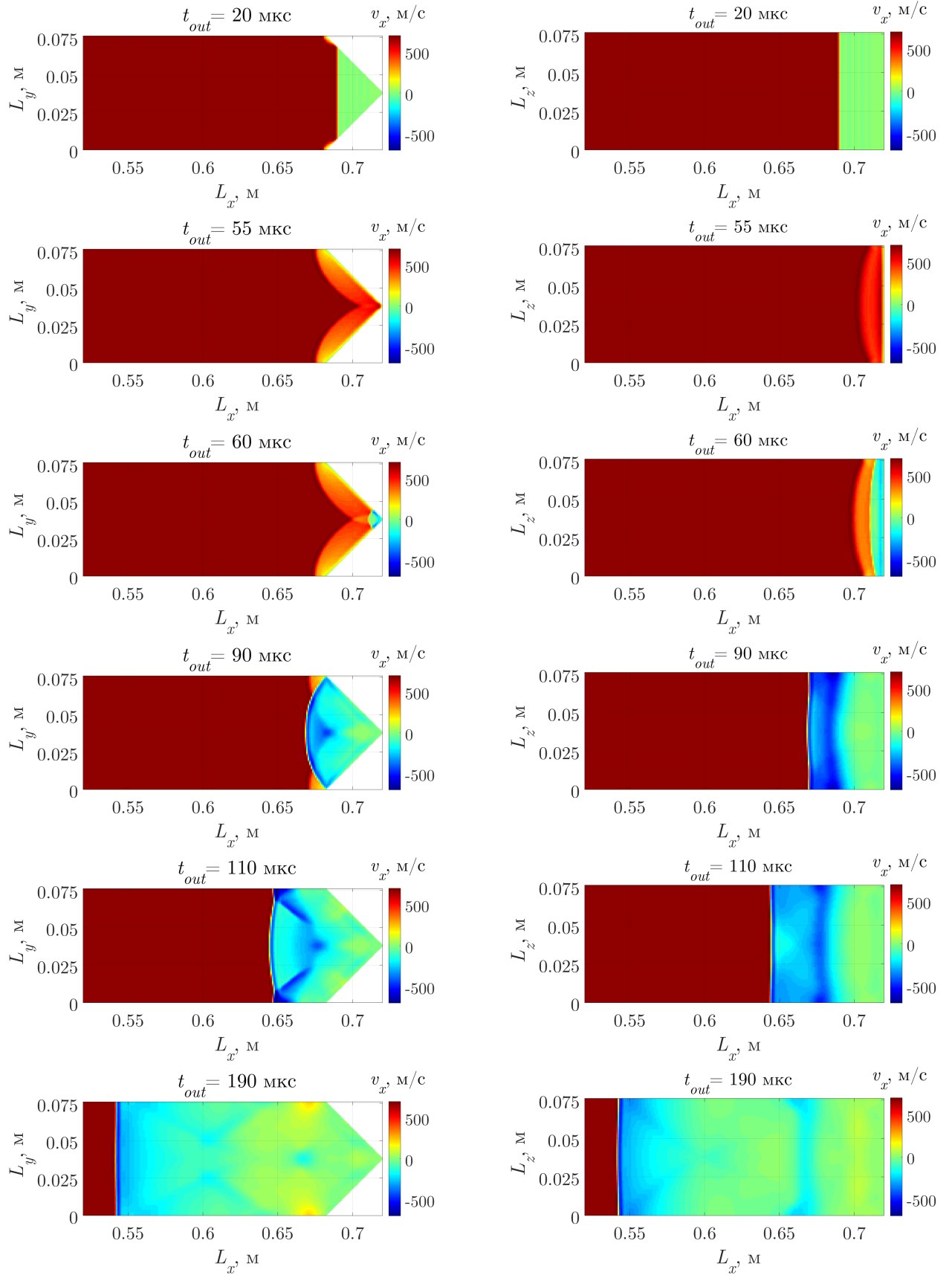


Рисунок 4.6. Распределение скорости вдоль оси  $x$  по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени. Случай детонации в клине.

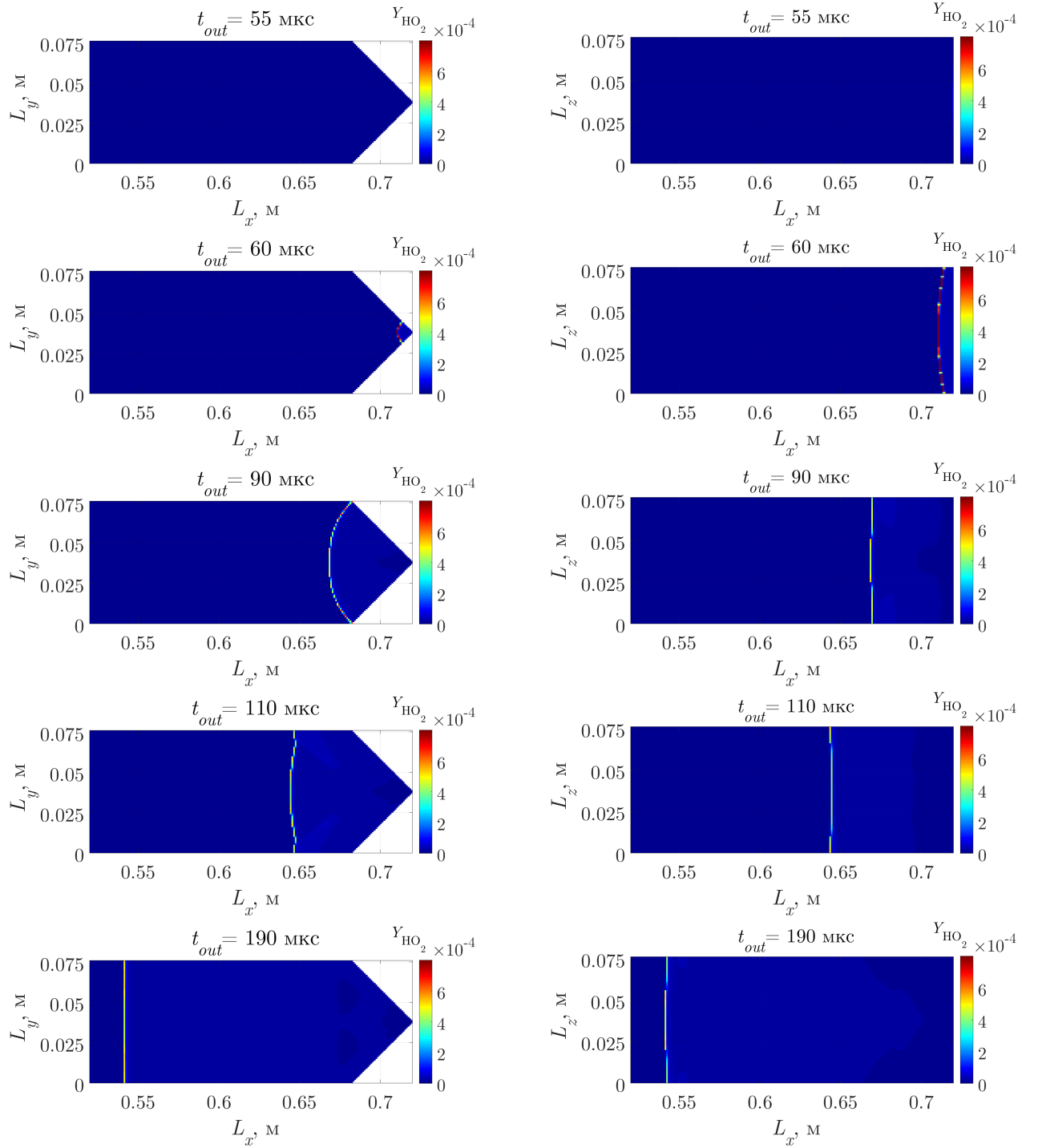


Рисунок 4.7. Распределение массовой доли радикала  $\text{HO}_2$  по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени. Случай детонации в клине.

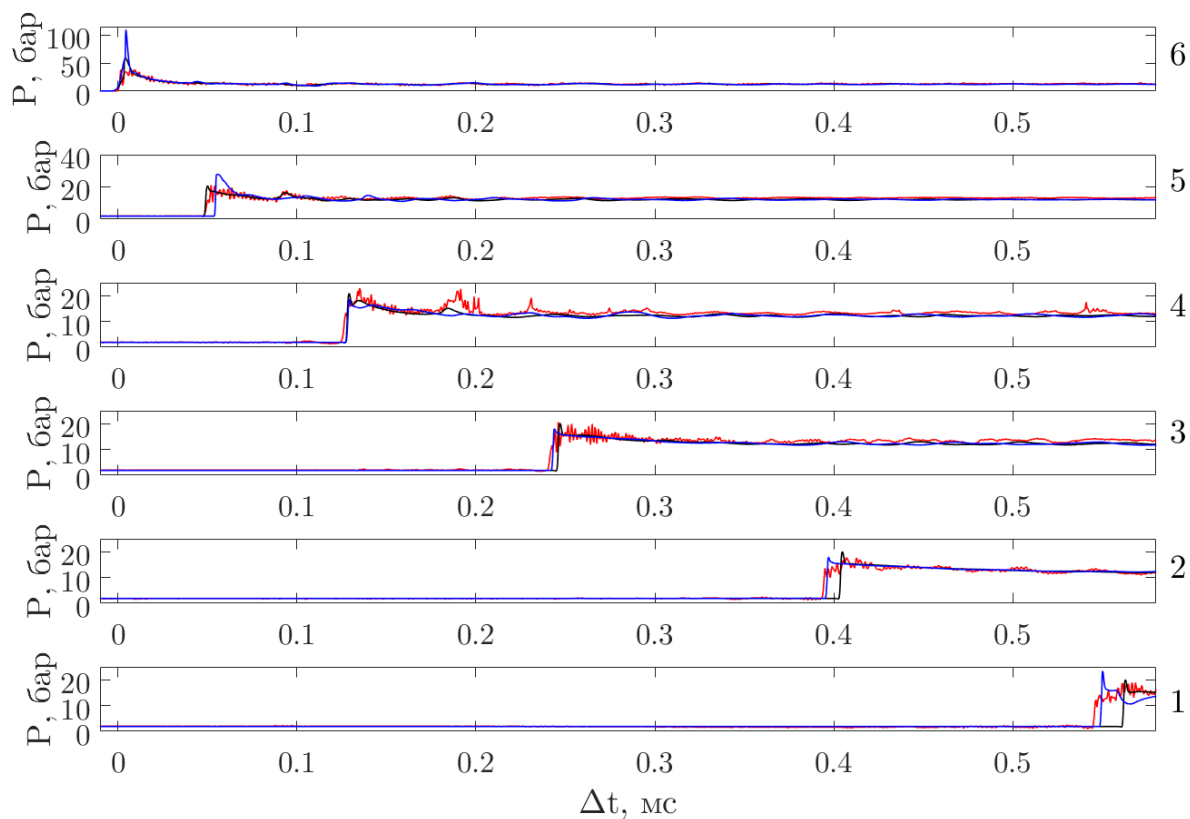


Рисунок 4.8. Давление (в барах) в контрольных точках (датчиках) в зависимости от времени: экспериментальные данные (красная линия), численная схема 1 (синяя линия) и численная схема 2 (черная линия). Случай детонации в клине.

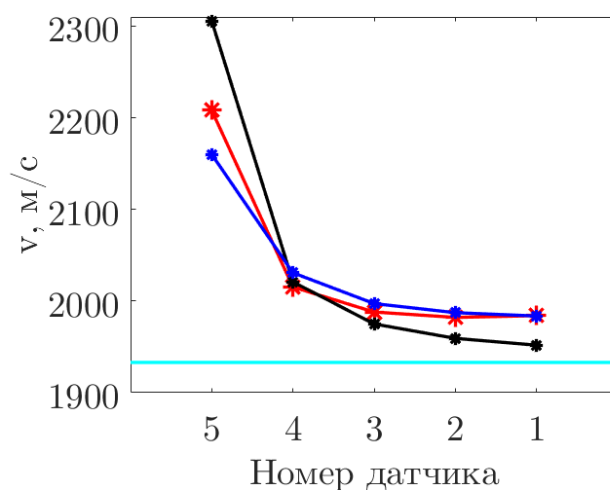


Рисунок 4.9. Скорость распространения волны около датчиков: экспериментальные данные (красная линия), численная схема 1 (синяя линия), численная схема 2 (черная линия) и теоретическая скорость детонации Чепмена—Жуге (бирюзовая прямая). Случай детонации в клине.



противоположную движению потока, а из-за наличия вязких сил, как в эксперименте, так и в численной модели, поток вблизи стенок замедляется, что способствует увеличению скорости детонационной волны и обгону волной ее центральной части. Таким образом, определенная средняя скорость детонации может быть выше, чем теоретическое значение скорости детонации Чепмена—Жуге.

## 4.2 Возникновение детонации в конусе

В случае №4 из Таблицы 7 для рассмотренных начальных параметров в результате фокусировки ударной волны в конусообразной вставке также возникла детонация. На Рис. 4.10 — 4.10 изображены последовательные моменты развития процесса в окрестности правого конца цилиндрической трубы для участка расчетной области  $x \in [0.52, 0.72]$  м. Процесс на конусообразной вставке является осесимметричным, поэтому на рисунках представлены параметры только в плоскости  $Oxy$ , проходящей через ось цилиндрической трубы.

На Рис. 4.10 — 4.10 представлено распределение давления для некоторых последовательным моментов времени. Видны особенности возникновения детонации при фокусировке ударной волны на конусообразной вставке в цилиндрической трубе. По сути, в данном случае процессы очень схожи со случаем возникновения детонации в клине. Для времени  $t = 15$  мкс от начала расчета ударная волна достигает вставки и начинается отражение от нее, при  $t = 55$  мкс процесс отражения от вставки хорошо заметен, отраженные ударные волны подходят друг к другу ближе всего у лидирующих своих концов. Ближе к моменту времени  $t = 60$  мкс отраженные волны начинают взаимодействовать друг с другом, при  $t = 65$  мкс видно усиление интенсивности отраженной волны выше 20 бар на фронте взаимодействующий отраженных волн и выше 30 бар в вершине конуса. При  $t = 70$  мкс в вершине вставки возникает детонационная волна, интенсивность же сфокусированной в окрестности оси волны снижается (волна расходится от оси), при  $t = 70 — 100$  мкс детонационная волна расходится от правого конца рабочей области, продвигаясь по среде с неравномерно повышенным давлением (следствие прошедшей фокусировки ударной волны), далее детонационная волна достигает конца вставки, и на дальнейших временах видно

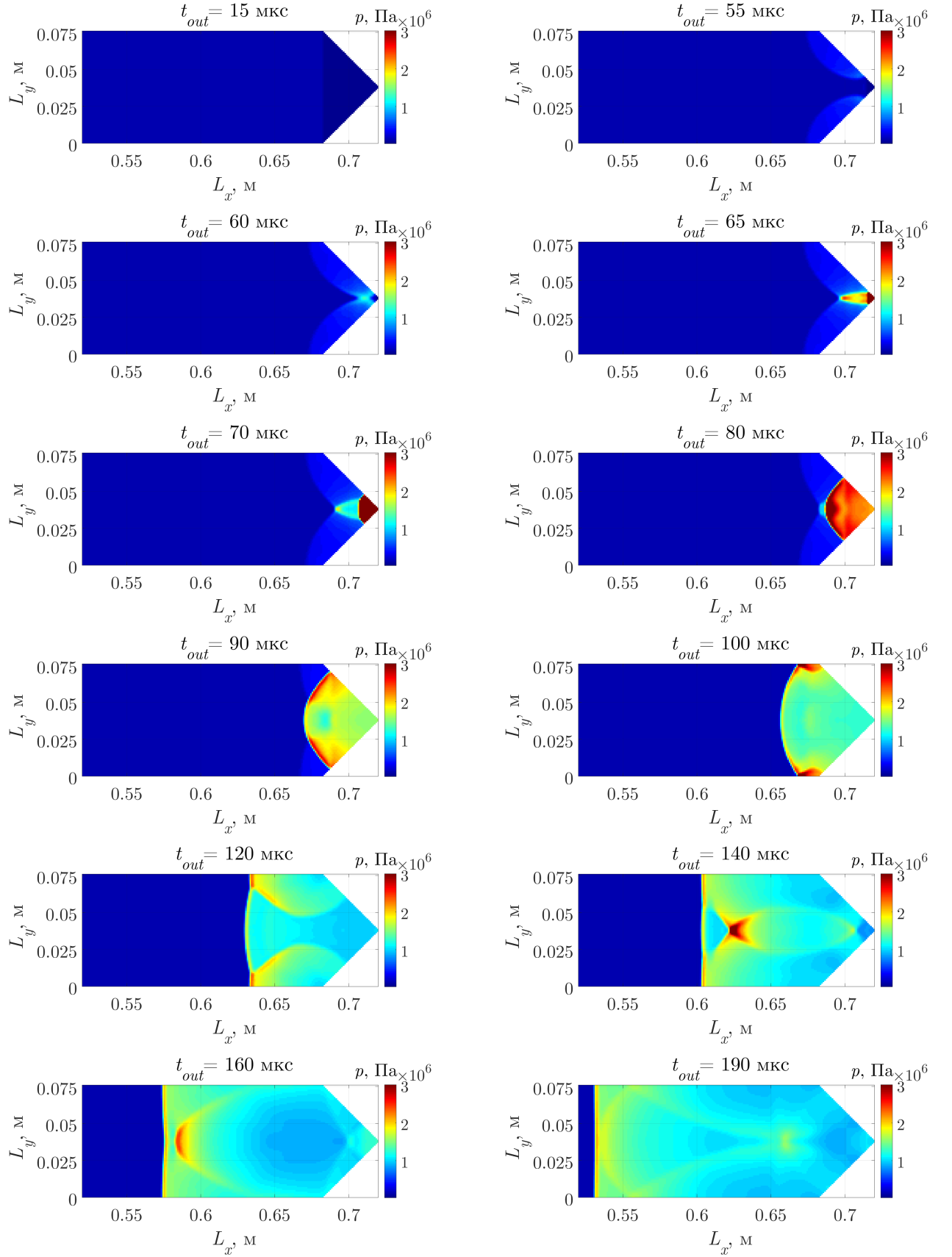


Рисунок 4.10. Распределение давления по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  для некоторых последовательных моментов времени (слева направо, сверху вниз). Случай детонации в конусе.

$t = 120 — 140$  мкс, как позади волны детонации формируется сложной формы косое отражение внутри сгоревшей газовой смеси от стенок цилиндра, как отраженные волны сталкиваются и взаимодействуют друг с другом. Также стоит отметить, что несмотря на меньшую интенсивность падающей ударной волны, чем в случае клинообразной вставки, что заметно в более поздних временах подхода ударной волны к вставке, передний фронт волны детонации становится практически плоским и выходит за пределы рассматриваемого сегмента трубы также при  $t = 160 — 190$  мкс, что является следствием более высокой скорости у детонационной волны и меньшей скорости у встречного потока.

На Рис. 4.11 изображено распределение температуры в плоскости  $Oxy$  для данного случая. Видно, что в начальные моменты времени ( $t = 0 — 60$  мкс) температурное поле, как в случае возникновения детонации в клине, отслеживает положение первоначальной ударной волны и ее отражения от образующей конусообразной вставки. В момент 60 мкс прошла фокусировка ударных волн, но смесь еще не дошла до вершины конуса и не загорелась. В момент  $t = 65$  мкс заметно возгорание в носике вставки после фокусировки, температура там сильно повышена — до 3500 К. При  $t = 70 — 95$  мкс видно распределение температуры в расходящейся волне детонации, максимальной на ее фронте и падающей позади него. При  $t = 95$  мкс также, как и в предыдущем случае, можно заметить образование контактной поверхности со скачков температуры после пересечения отраженной детонационной волной области, оставшейся позади волны, ранее отраженной от образующей конуса. В дальнейшие моменты поле температуры в основном продолжает отслеживать уже рассмотренные особенности отражения ударных волн в сгоревшем газе, а также форму фронта лидирующей детонационной волны. Можно также заметить, что в этом случае к моменту  $t = 125$  мкс от начала расчета температура сгоревшей газовой смеси в окрестности носика конусообразной вставки также падает до значений порядка 2500 К, хотя первоначально, опять же, в том месте был самый высокий подъем температуры.

Особенности развития поля скорости вдоль оси цилиндра представлены на Рис. 4.12. В момент времени  $t = 25$  мкс от начала расчета видны появляющиеся отраженные волны от начала вставки. При  $t = 60$  мкс видны особенности поля скорости в отраженной от конической вставки ударной волне, наблюдается сильное повышение скорости у вершины вставки за счет взаимодействия отраженных волн. При  $t = 70$  мкс видно, что впереди отраженной от образующей профиля волны скорость газа за волной увеличивается по мере подхода

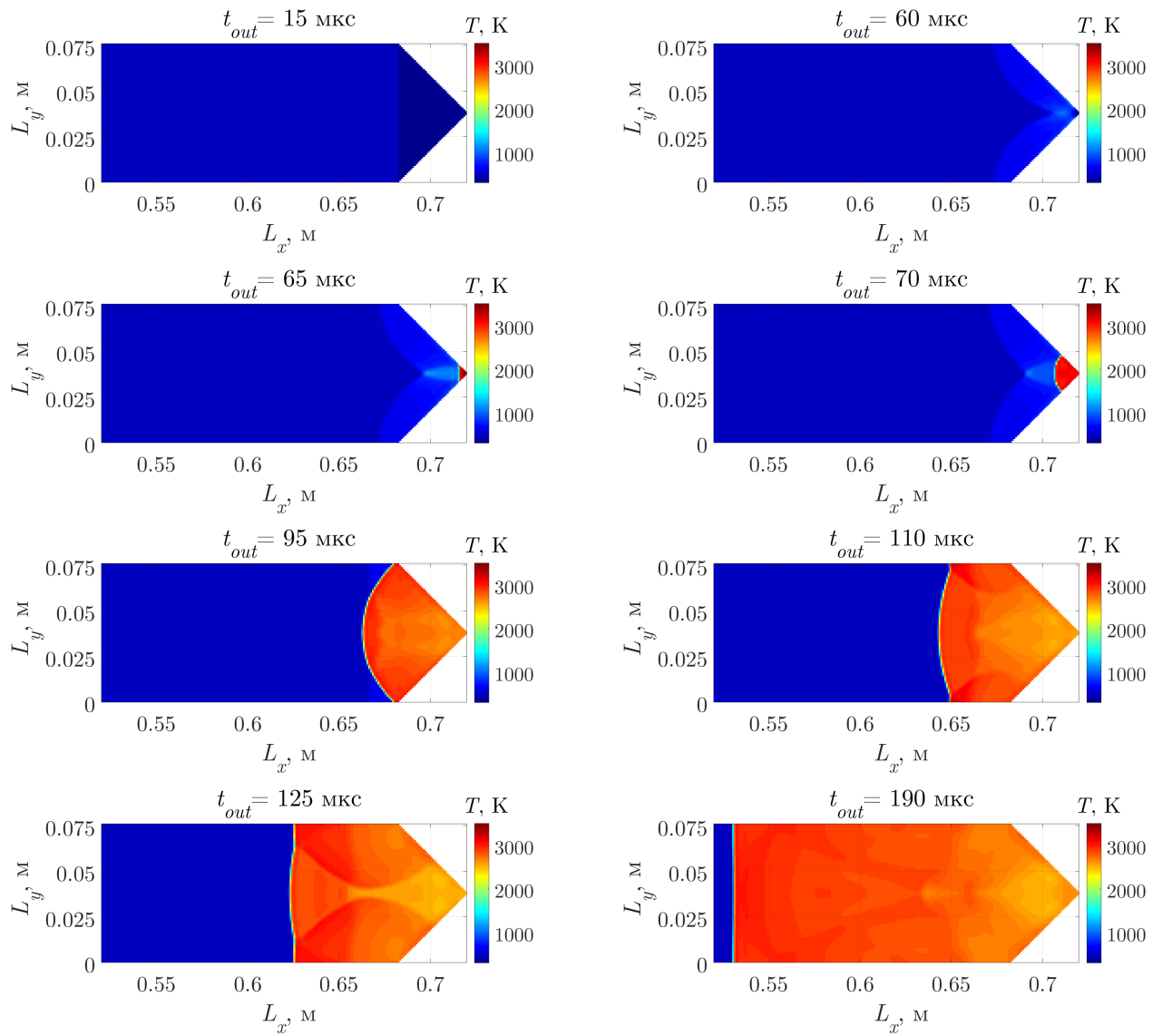


Рисунок 4.11. Распределение температуры по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  для некоторых моментов времени. Случай детонации в конусе.

отраженных волн к оси цилиндра и конуса, усилившийся поток фокусируется в носике конуса. При  $t = 70$  мкс хорошо заметна по значительной скорости газа в обратном направлении возникшая детонационная волна. При временах  $t = 70 — 125$  мкс детонационная волна расходится от правого конца рабочей области, причем скорость обратного потока у волны возрастает. Видно, что в дальнейшем поле скорости меняется, отслеживая волны, отраженные от образующей цилиндра внутри области сгоревшего газа.

На Рис. 4.13 представлено распределение массовой доли радикала  $\text{HO}_2$  по центру расчетной области, по концентрации которого можно отследить фронт химической реакции. Как видно, до момента времени  $t = 60$  мкс какие-либо реакции в расчетной области отсутствуют. В момент  $t = 65$  мкс появляется зона реакции, отходящая от вершины конуса с большой скоростью и соответ-

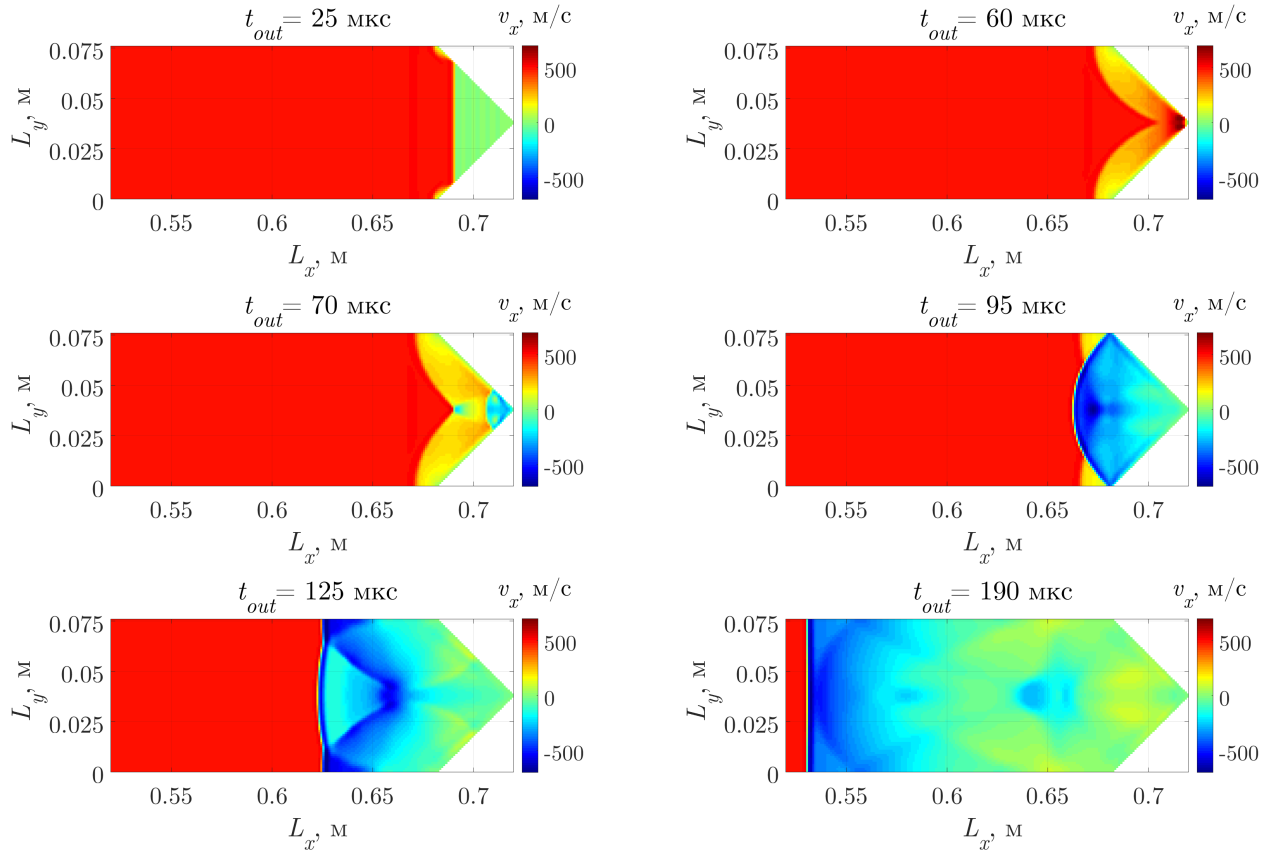


Рисунок 4.12. Распределение скорости вдоль оси  $x$  по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  для некоторых моментов времени. Случай детонации в конусе.

ствующей фронту появившейся детонационной волны. В дальнейшие моменты времени  $t = 70 — 190$  мкс фронт детонации распространяется по рассматриваемой рабочей области.

На Рис. 4.14 для рассматриваемого случая возникновения детонации в конусе представлено сравнение результатов численных расчетов и данных экспериментов. Все условия проведения сравнения аналогичны предыдущему рассмотренному случаю. Также было рассмотрено два варианта численного счета: с использованием турбулентной модели (численная схема №1) и без турбулентности (численная схема №2). Оценка скорости распространения возникшей детонационной волны представлена на Рис. 4.15.

Как видно из представленных данных на первых 220 мкс от начала детонирования смеси (Рис. 4.14, датчики №6-3) в случае детонации в клиновидной вставке оба численных варианта достаточно близки по своему поведению к экспериментальным данным как по времени подхода волны к датчикам, так и по уровню возникающих давлений. В случае отсутствия моделирования турбулентности детонационная волна начинает замедляться и подходит к сле-

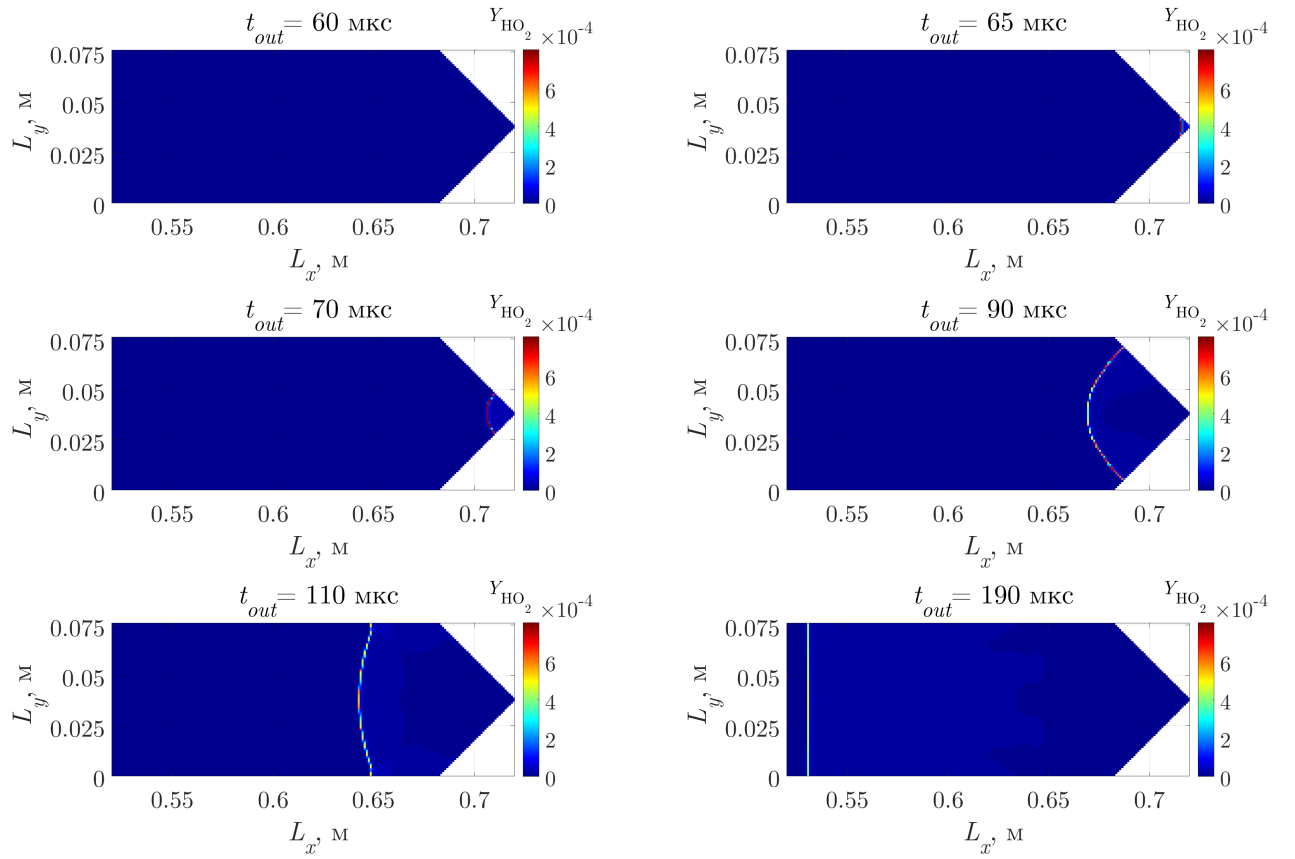


Рисунок 4.13. Распределение массовой доли радикала  $\text{HO}_2$  по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  для некоторых моментов времени. Случай детонации в конусе.

дующим датчикам с небольшим запозданием по сравнению с экспериментом и с численной моделью, учитывающей турбулентность (Рис. 4.14, датчики №2,1). Согласно экспериментальным данным скорость детонационной волны начинает возрастать, что физически при рассматриваемых условиях невозможно. Скорее всего, это связано с некоторой неточностью при проведении эксперимента, в котором, возможно, скорость за ударной волной со временем значительно падает, что не моделируется в численных расчетах. Это хорошо заметно как на диаграммах давления Рис. 4.14, так и на графике скорости Рис. 4.15, на котором волна при использовании схемы №2 начинает тормозиться и выходить на теоретическую скорость детонации Чепмена—Жуге, схема №1 при этом также тормозиться, но выходит на несколько большее значение, что полностью соответствует случаю возникновения детонации в клине.

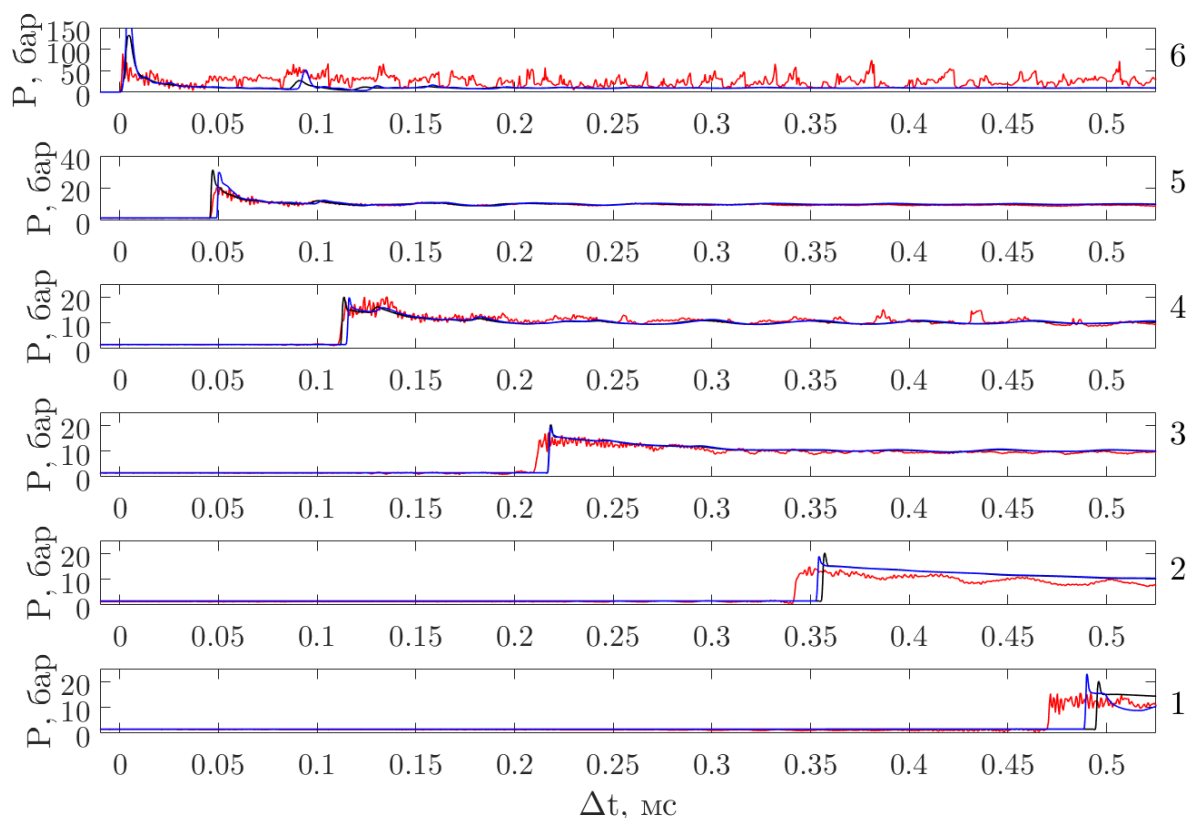


Рисунок 4.14. Давление (в барах) в контрольных точках (датчиках) в зависимости от времени: экспериментальные данные (красная линия), численная схема 1 (синяя линия) и численная схема 2 (черная линия). Случай детонации в конусе.

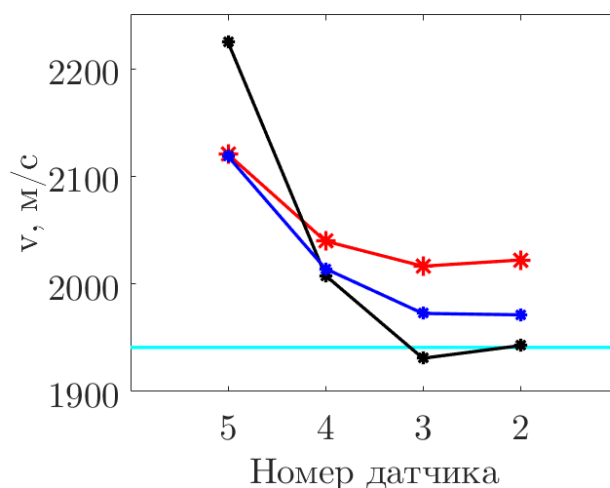


Рисунок 4.15. Скорость распространения волны около датчиков: экспериментальные данные (красная линия), численная схема 1 (синяя линия), численная схема 2 (черная линия) и теоретическая скорость детонации Чепмена—Жуге (бирюзовая прямая). Случай детонации в конусе.

### 4.3 Отражение ударной волны от внутренней поверхности клина

При рассмотрении начального состояния с параметрами, соответствующими случаю №2 из Таблицы 7, было получено, что фокусировки недостаточно для детонирования горючей газовой смеси. В результате было получено отражение, фокусировка и дальнейшее распространение в трубе обычных ударных волн. На Рис. 4.16—4.17 изображены некоторые моменты развития процесса в окрестности правого конца цилиндрической трубы для участка расчетной области  $x \in [0.52, 0.72]$  м в плоскости  $Oxy$  и плоскости  $Oxz$ .

На графиках распределения давления (Рис. 4.16—4.17) виден подход ударной волны к вставке в момент, близкий к  $t = 20$  мкс, ее отражение от боковой поверхности вставки ( $t = 60$  мкс), начало взаимодействия отраженных волн  $t = 75$  мкс и их фокусировка в вершине вставки с повышением давления в момент времени  $t = 80 — 85$  мкс выше 10 бар. Структура данных процессов аналогично начальной стадии у рассмотренных ранее случаев. Однако, фокусировки в данном случае недостаточно для прямого инициирования детонации. Давление за фронтом отраженной сфокусированной волны быстро понижается до уровня 5-6 бар ( $t = 100$  мкс), волна распространяется по среде с повышенным в результате прошедших ранее отраженных от боковых поверхностей вставки волн, догоняет их фронт и распространяется далее к открытому концу цилиндрической трубы  $t = 300 — 400$  мкс с относительно небольшой скоростью. Ее фронт при этом становится практически плоским.

На Рис. 4.18 для данного случая представлено сравнение результатов численных расчетов и данных экспериментов по величине давления в контрольных точках. На Рис. 4.19 приведена оценка скорости распространения отраженной ударной волны. Из графиков видно, что обе численные схемы, как с учетом турбулентности, так и без, дают довольно близкие к эксперименту результаты как по величине давления, так и по скорости отраженной волны. Однако, как и в предыдущих случаях, скорость распространения волны в случае моделирования турбулентности после установления немного выше и ближе к данным эксперимента, хотя на первых этапах после отражения результаты без учета турбулентности не уступают турбулентному варианту.



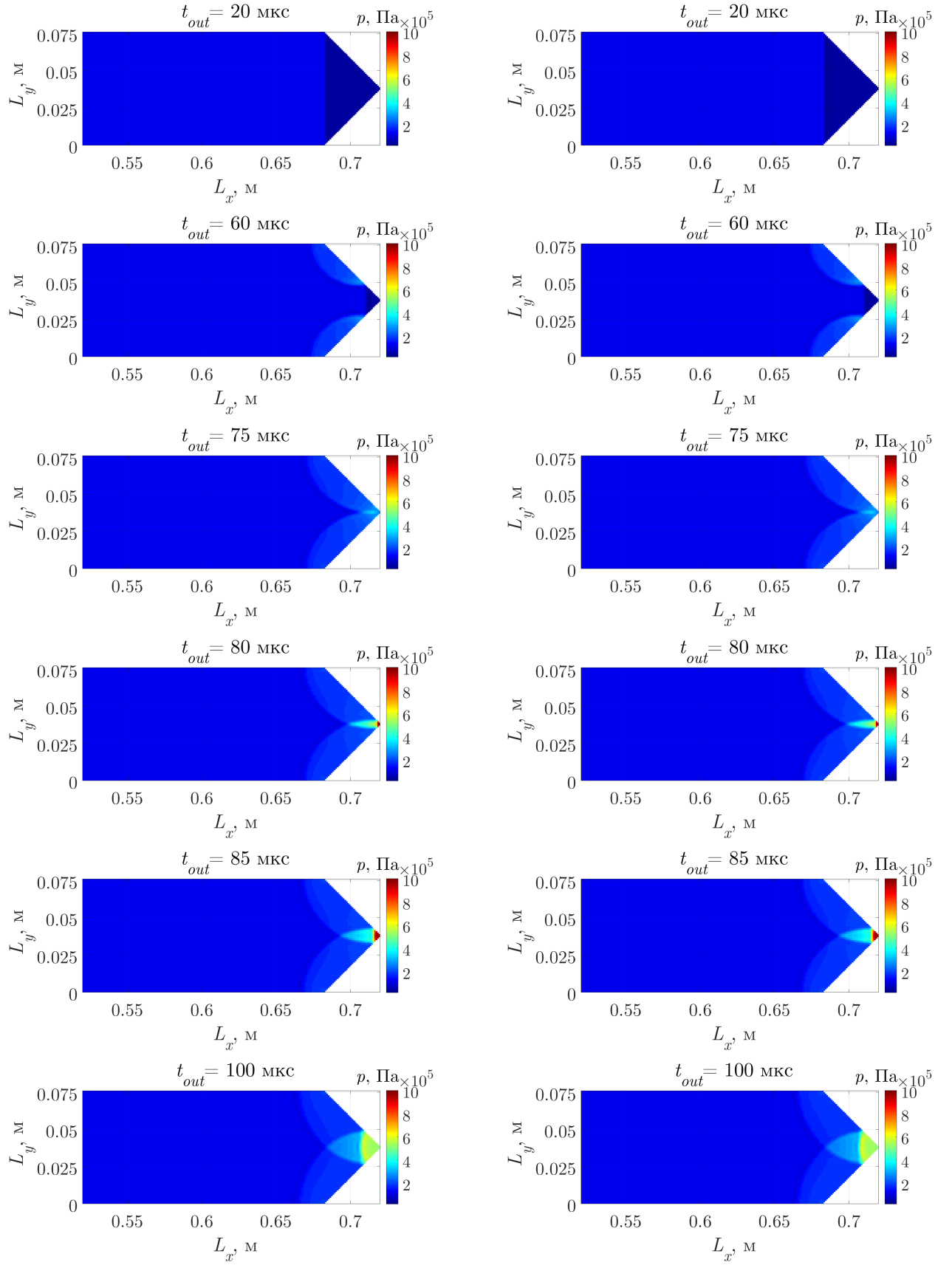


Рисунок 4.16. Распределение давления по центру расчетной области в плоскостях  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  (справа) для некоторых последовательных моментов времени. Случай отражения ударной волны от клина.

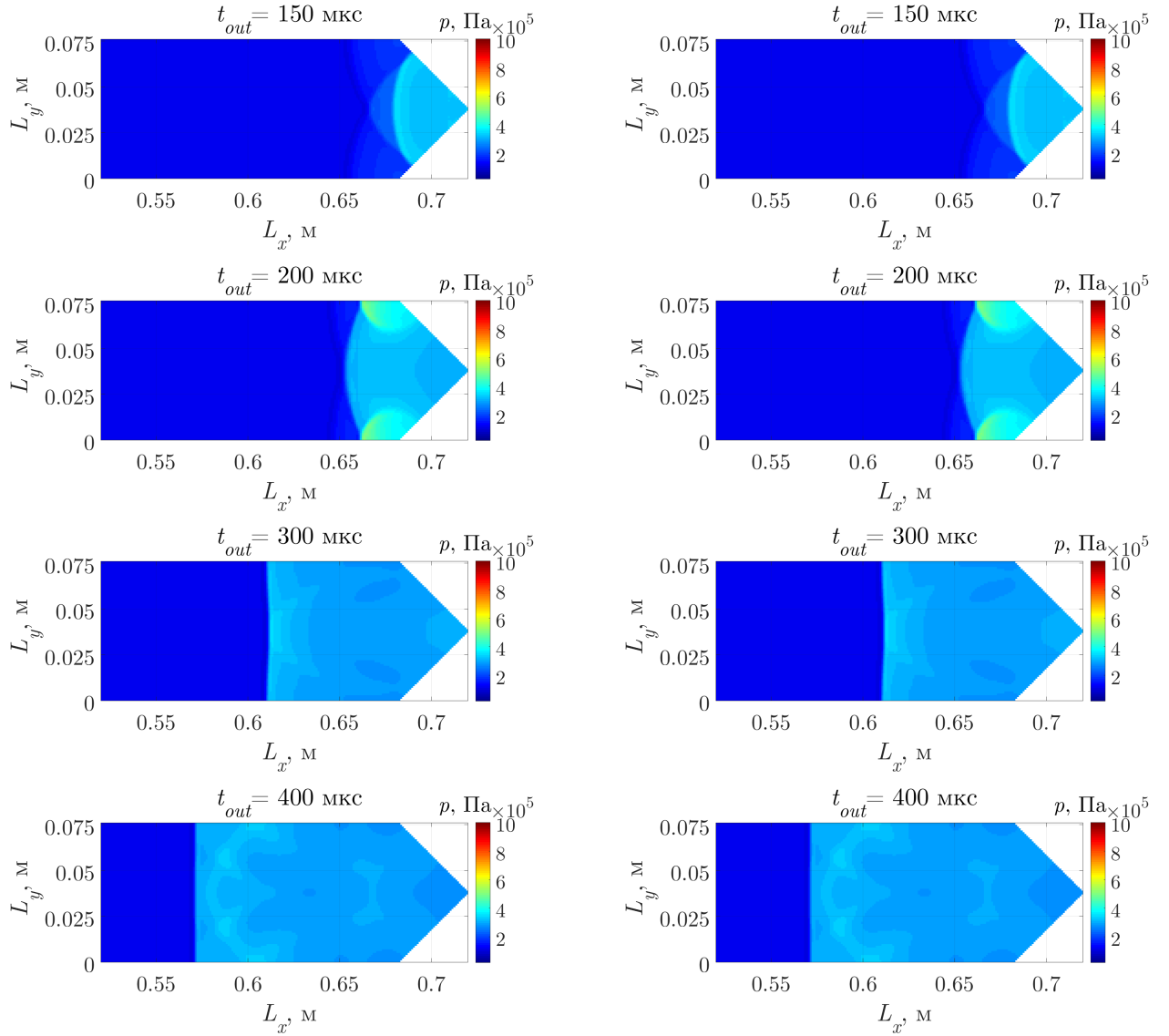


Рисунок 4.17. Распределение давления по центру расчетной области в плоскостях  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  (справа) для некоторых последовательных моментов времени. Случай отражения ударной волны от клина.

#### 4.4 Случай перехода горения в детонацию при отражении от внутренней поверхности клина

При данном наборе начальных условий (случай №4 из Таблицы 7) в ходе отражения и фокусировки ударной волны в клинообразной вставке произошло воспламенение горючей смеси, однако, детонация не возникла. При дальнейшем распространении фронта пламени дефлаграционного горения вслед за отраженной ударной волной в определенный момент времени на фронте пламени смесь детонирует. На Рис. 4.20 — 4.31 изображены распределения некоторых параметров системы в последовательные моменты времени, характеризующие развитие

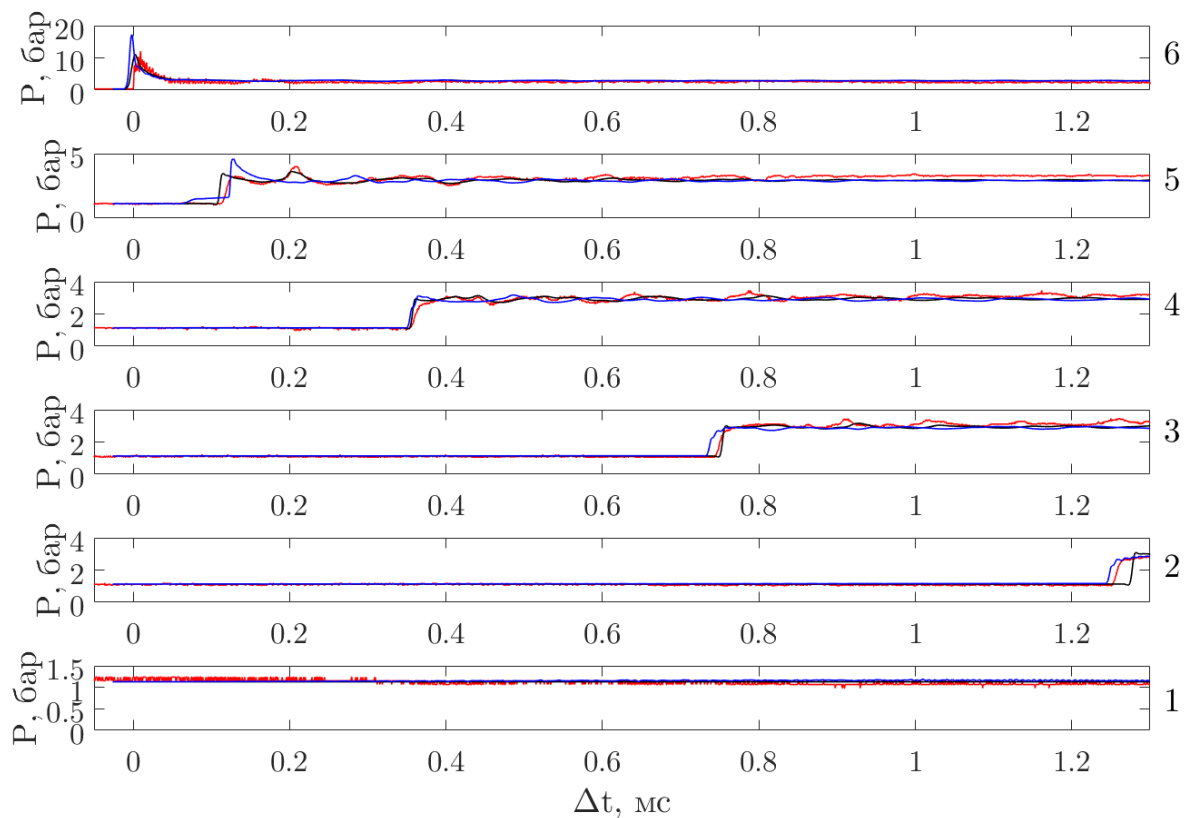


Рисунок 4.18. Давление (в барах) в контрольных точках (датчиках) в зависимости от времени: экспериментальные данные (красная линия), численная схема 1 (синяя линия) и численная схема 2 (черная линия). Случай отражения ударной волны от клина.

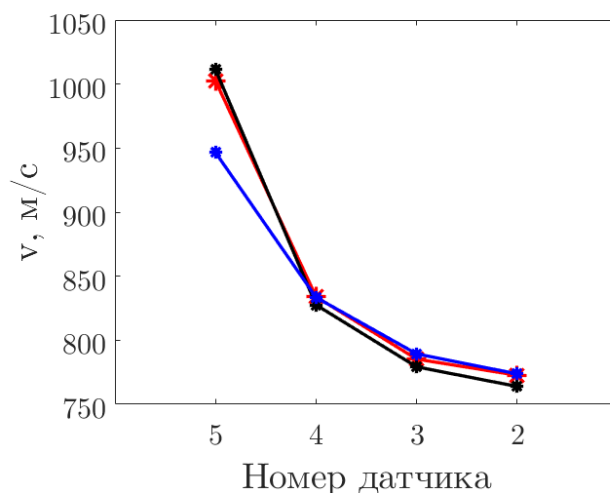


Рисунок 4.19. Скорость распространения волны около датчиков: экспериментальные данные (красная линия), численная схема 1 (синяя линия), численная схема 2 (черная линия). Случай отражения ударной волны от клина.

процессов в окрестности правого конца цилиндрической трубы для участка расчетной области  $x \in [0.42, 0.72]$  м. На рисунках представлены параметры как в плоскости  $Oxy$ , так и в плоскости  $Oxz$ , проходящие через ось цилиндрической трубы.

Как видно из графиков распределения давления Рис. 4.20 — 4.21, на начальном этапе процессы в области проходят аналогично ранее рассмотренному случаю отражения ударной волны от клина. Однако, стоит отметить, что в данном случае интенсивность набегающей волны выше. Волна подходит к вставке в момент времени около  $t = 15$  мкс и начинает отражаться от боковой поверхности клина. Отражение сфокусированной волны от носика происходит в момент времени  $t = 60$  мкс, видно локальное повышение давления в центра практически по всей длине вершины. В момент времени  $t = 80$  мкс наблюдается дальнейшее распространение отраженной от носика волны по уже возмущенной в результате бокового отражения смеси и ее взаимодействие с боковыми волнами. Давление за фронтом волны падает. Далее отраженная волна догоняет фронт отраженных ранее от боковых стенок волн, выходит за пределы вставки и распространяется к открытому концу цилиндрической трубы  $t = 160 — 400$  мкс. При этом на углах вставки формируются вторичные отражения в поперечном направлении, которые затем приводят к дополнительным фокусировкам. Уже в моменты времени  $t = 400 — 440$  мкс можно заметить локальное небольшое повышение давления, происходящее, как будет ниже показано, на фронте пламени по центру расчетной области примерно на половине расстояния между волной и закрытым концом системы. В момент времени  $t = 450$  мкс эта область становится отчетливо заметна, видно существенное повышение давления на фронте образовавшейся полусферической области, выгнутой в сторону несгоревшего газа. Это и есть начало формирования детонационной волны. В момент времени  $t = 460$  мкс волна резко увеличивается в размерах, к  $t = 460$  мкс боковая сторона волны достигают стенок трубы и начинает отражаться от них. Давление на стенках при этом превосходит  $p = 30$  бар. В обратную сторону около стенок цилиндра по несгоревшей смеси начинает распространяться волна ретонации, ближе к оси цилиндра она вырождается в ударную волну, идущую по уже сгоревшей смеси. В момент времени  $t = 480$  мкс фронт детонационной волны еще искривлен, максимальное значение давления при этом у стенок цилиндра. И скорость продвижения волны там значительно выше, поэтому к моменту  $t = 500$  мкс волна у стенок уже опережает волну по оси цилиндра, при

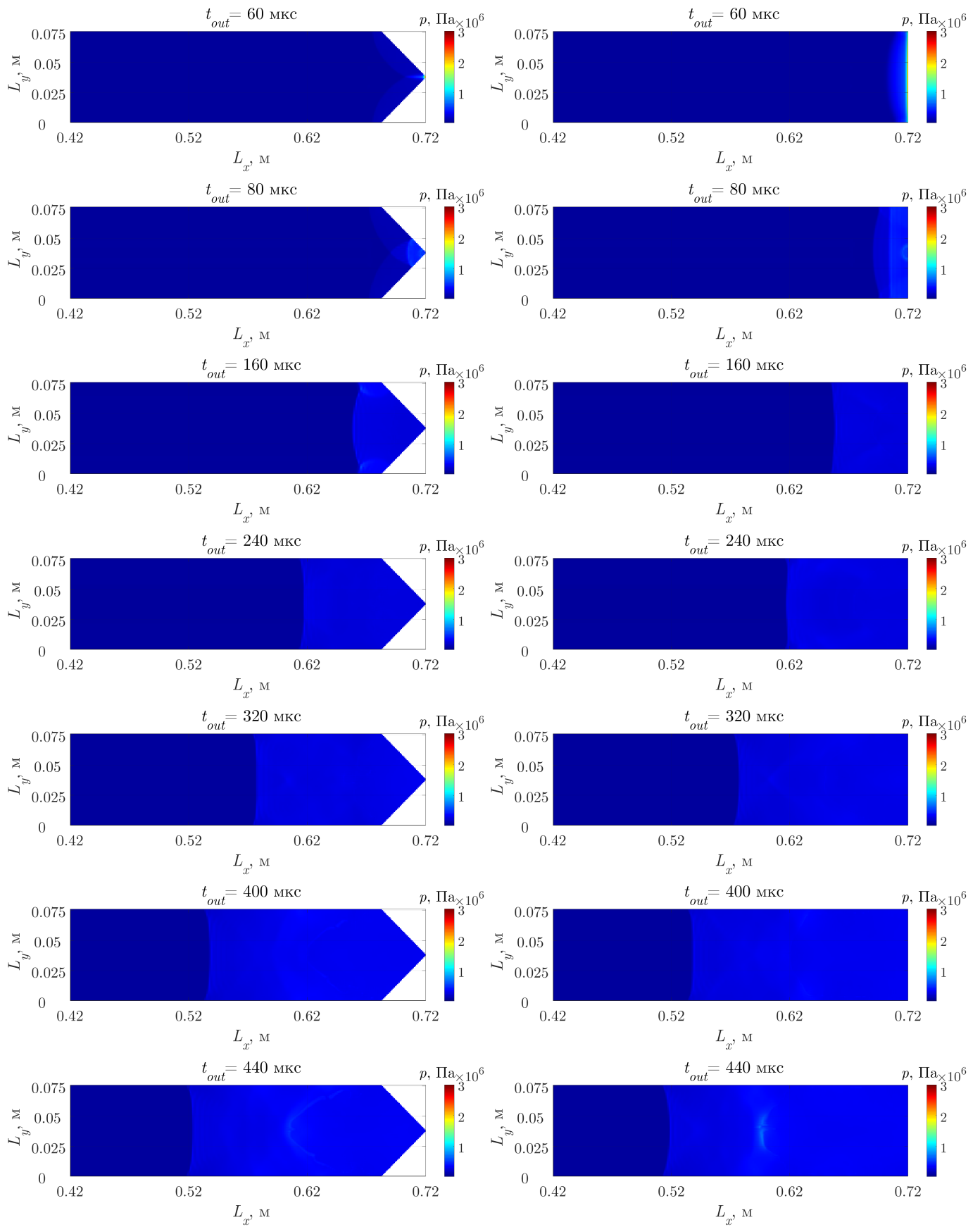


Рисунок 4.20. Распределение давления по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию.

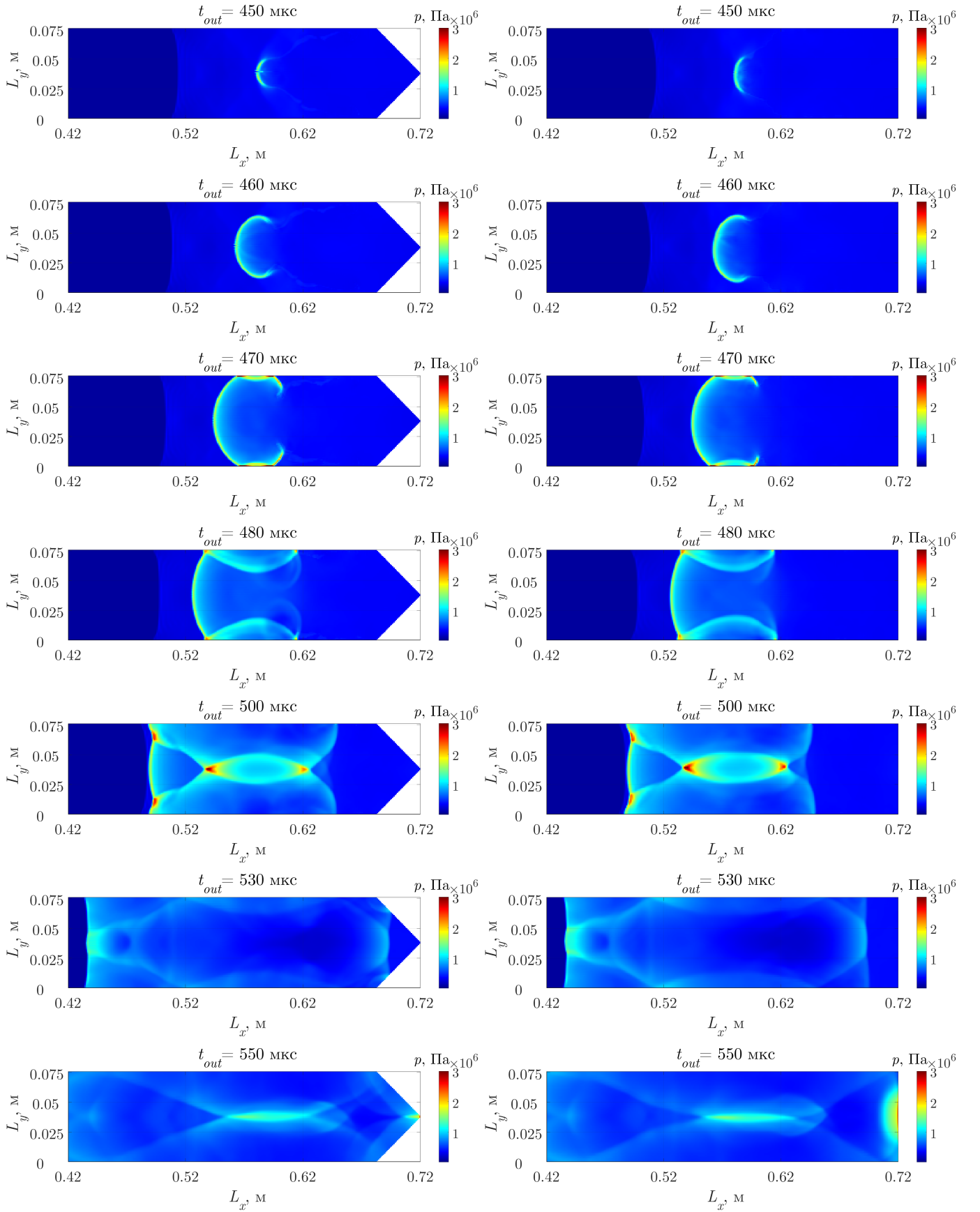


Рисунок 4.21. Распределение давления по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и плоскости  $Oxz$  (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию.

этом волна детонации почти достигает первичной ударной волны. К этому же моменту времени волна ретонации уже полностью выродилась в ударную волну. Также в центре области наблюдается фокусировка отраженных от боковых поверхностей ударных волн, что приводит к резкому локальному повышению давления. В момент  $t = 530$  мкс детонационная волна уже опередила ударную, ее интенсивность уменьшилась, поскольку она уже распространяется по смеси с начальными характеристиками. Вместо повышения давления по оси цилиндра на месте бывшей фокусировки ударных волн теперь сильное локальное разрежение, поперечные же волны снова идут к стенкам. Распространяющаяся в обратную сторону ударная волна продолжает двигаться к клиновидной вставке. К моменту времени  $t = 550$  мкс она фокусируется на ней, причем на этот раз значительно сильнее вблизи оси симметрии клина (т.е. плоскости  $Oxy$ ), головная детонационная волна выходит из показываемой области, наблюдается сложная волновая картина.

Стоит отметить, что передний фронт как ударной волны, так и детонационной после установления становится практически плоским, слегка изогнутым у стенок цилиндра. Причиной является то, что эти волны идут не по покоящемуся газу, а против турбулизованного потока горючей смеси. У стенок же скорость этой смеси уменьшена, что в целом приводит к тому, что там детонационная волна, как и отраженная ударная, имеют более высокую скорость в покоящейся системе координат, чем у оси. Этим объясняется то, что скорость перемещения детонационного комплекса как в расчетах, так и в опыте несколько выше, чем теоретическая скорость Чепмена—Жуге, причем при отключении моделирования турбулентности скорость волны выходит на скорость Чепмена—Жуге, а фронт становится плоским.

Если рассмотреть эволюцию температуры в области (Рис. 4.22 — 4.23), то она, по большей части, отражает эволюцию давления. Однако, в отличие от поля давления, поле температуры позволяет четко определить границу зоны горения. Можно заметить, что сгоревший газ в данном случае характеризуется температурой выше  $T = 2000$  К. В момент времени  $t = 60$  мкс видно повышение температуры до  $T = 1500$  К при фокусировке ударной волны в вершине вставки по всей ее длине. В момент времени  $t = 80$  мкс в центре вершины вставки смесь воспламеняется, образуется горячее пятно сгоревшего газа с повышенной температурой (более  $T = 2100$  К), которое затем быстро увеличивается во все стороны, тем не менее отставая от отраженной ударной волны. В

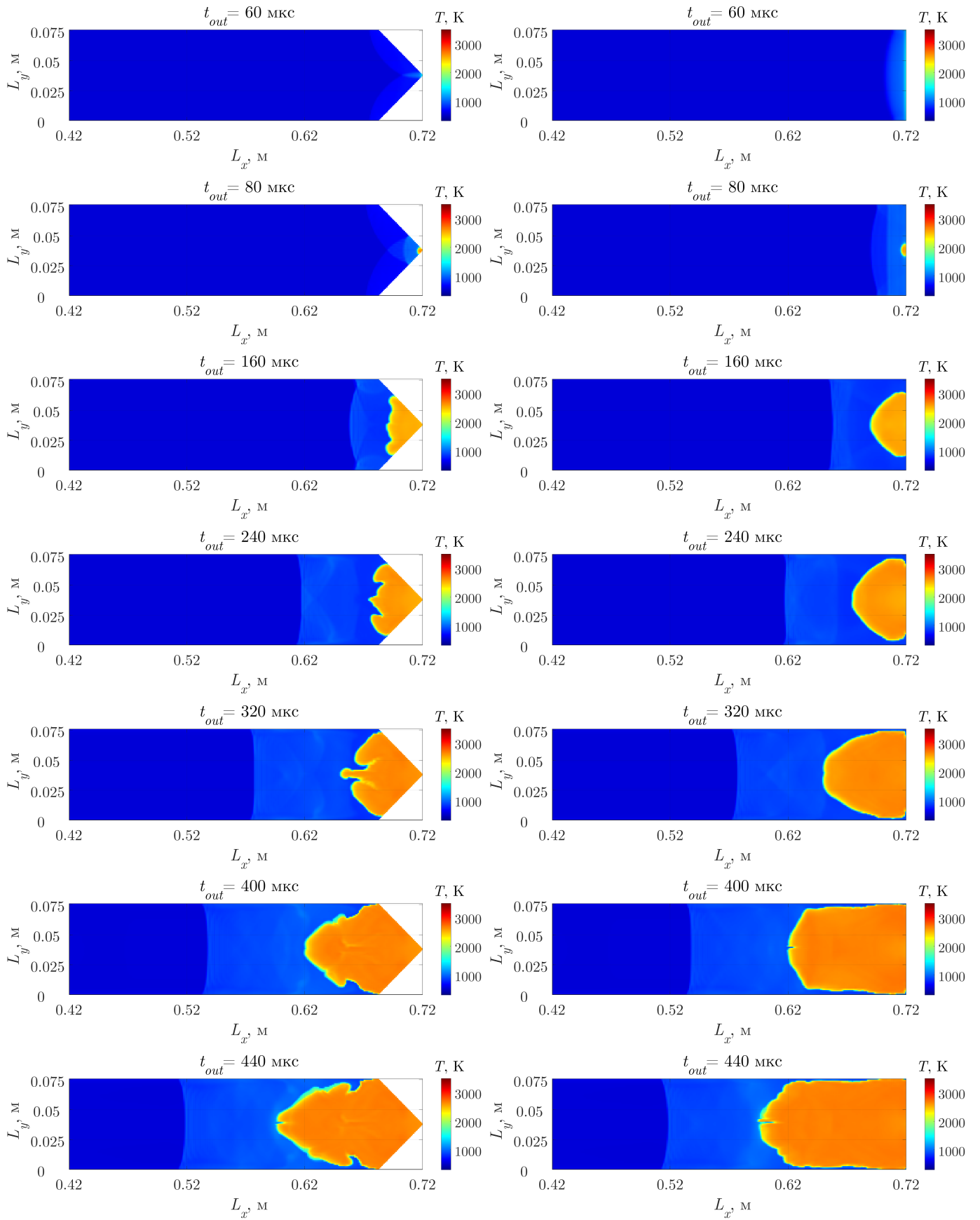


Рисунок 4.22. Распределение температуры по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию.



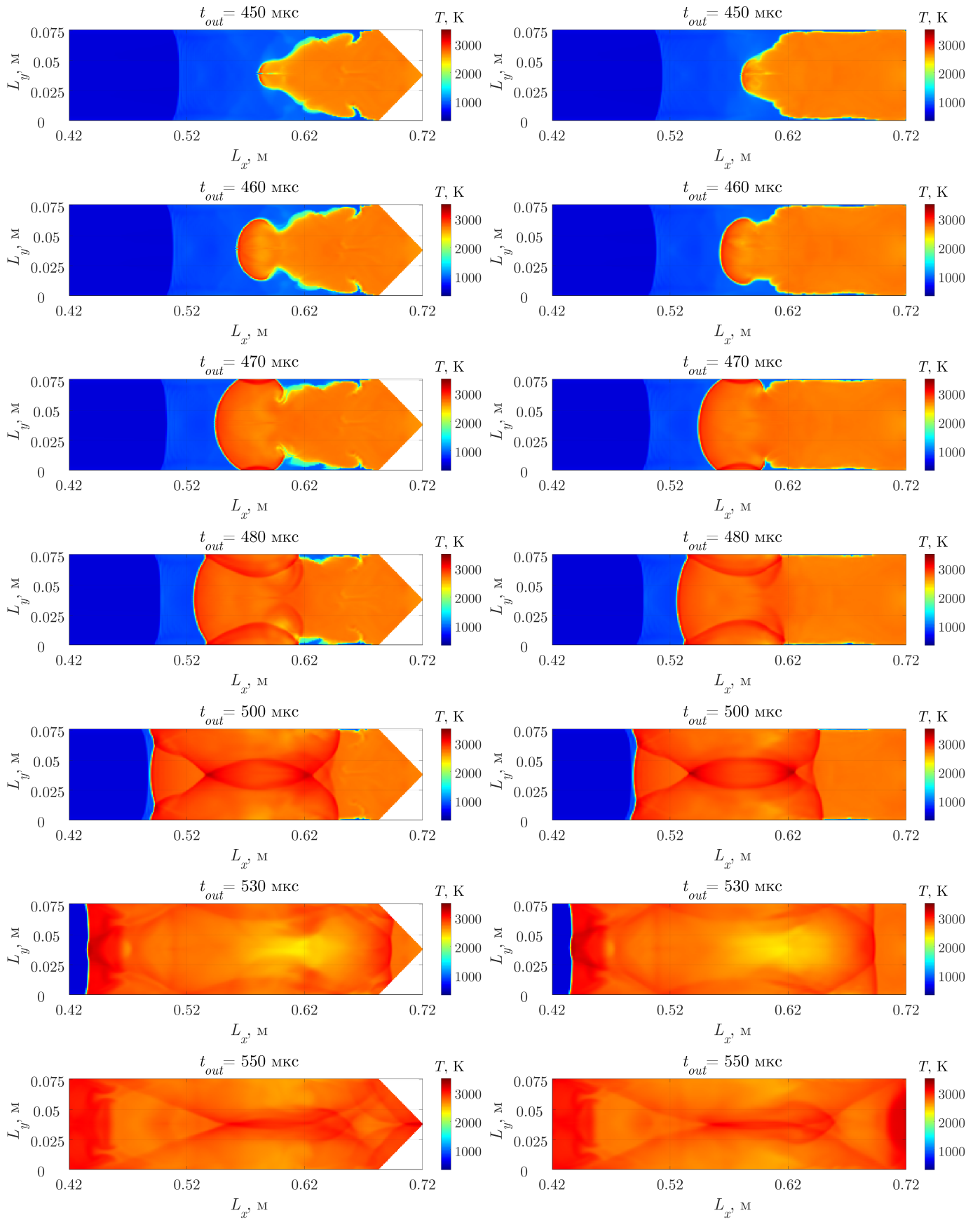


Рисунок 4.23. Распределение температуры по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию.

дальнейшем происходит неустойчивое распространение фронта горения, которое распространяется вслед за отраженной ударной волной  $t = 160 — 240$  мкс. Образуются ярко выраженные складки пламени с приоритетным распространением по центру области  $t = 240 — 440$  мкс, особенно заметные в плоскости  $Oxy$ . После  $t = 400$  мкс скорость волны горения быстро увеличивается, причем складки несгоревшего газа возникают весьма глубокие. В окрестности стенок образуется несгоревшие зоны, которые постепенно догорают. В момент времени  $t = 440$  мкс заметно, как носик области горения быстро вытягивается, а в момент времени  $t = 450$  мкс видно существенное повышение температуры на фронте пламени (около  $T = 2700$  К) и начало детонации: на вытянувшемся носике области горения возникает сферическая волна (не считая задней части, где уже сгоревший газ). В момент времени  $t = 470$  мкс волна начинает отражаться от боковой стенки. Передняя часть волны, распространяющаяся к открытому концу трубы, представляет собой волну детонации; часть волны,двигающаяся в обратном направлении к вставке по несгоревшему газу в окрестности стенки и дожигающая горючую смесь, является волной ретонации. Другая часть волны, распространяющаяся ближе к центральной оси, является ударной волной в сгоревшем газе. В дальнейшем детонационная волна догоняет впереди идущую ударную ( $t = 505$  мкс), а ударная волна в сгоревшем газе, хорошо заметная по адиабатическому подъему температуры в волне, доходит до вставки ( $t = 525$  мкс). Из рисунков также видна периодическая фокусировка волн сжатия у оси системы в результате отражений волн от боковых стенок.

На Рис. 4.24 — 4.25 изображено распределение модуля градиента плотности. Максимальное значение данной величины характерно для ударных и детонационных волн, на фронте горения, в связи с чем, наблюдение за ее изменением позволяет проследить за поверхностями разрыва в рассматриваемой области. Поля градиента плотности на Рис. 4.24 — 4.25 подтверждают тот факт, что в рассматриваемом случае при отражении ударной волны от поверхности клина кумуляции было недостаточно для возникновения детонации и произошло отражение ударной волны. Однако, несколько позже в кончике клина возникает еще одна поверхность разрыва, представляющая собой фронт пламени, который начинает распространяться во все стороны, но все же не догоняет отраженную ударную волну. В дальнейшем, область горения увеличивается, видно образование неустойчивостей на переднем фронте пламени. В момент времени  $t = 440 — 450$  мкс скорость фронта горения резко возрастает, величина

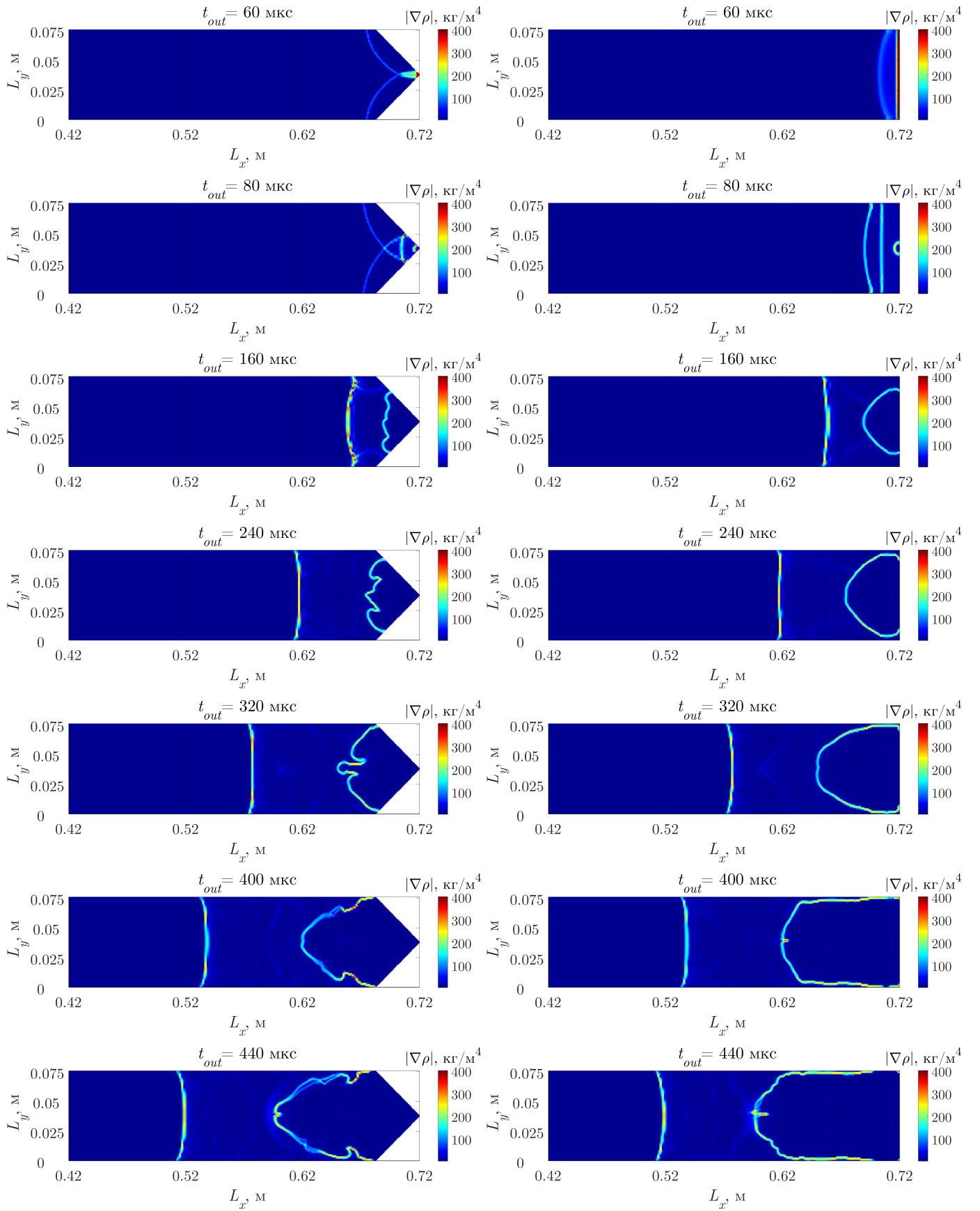


Рисунок 4.24. Модуль градиента плотности по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию.

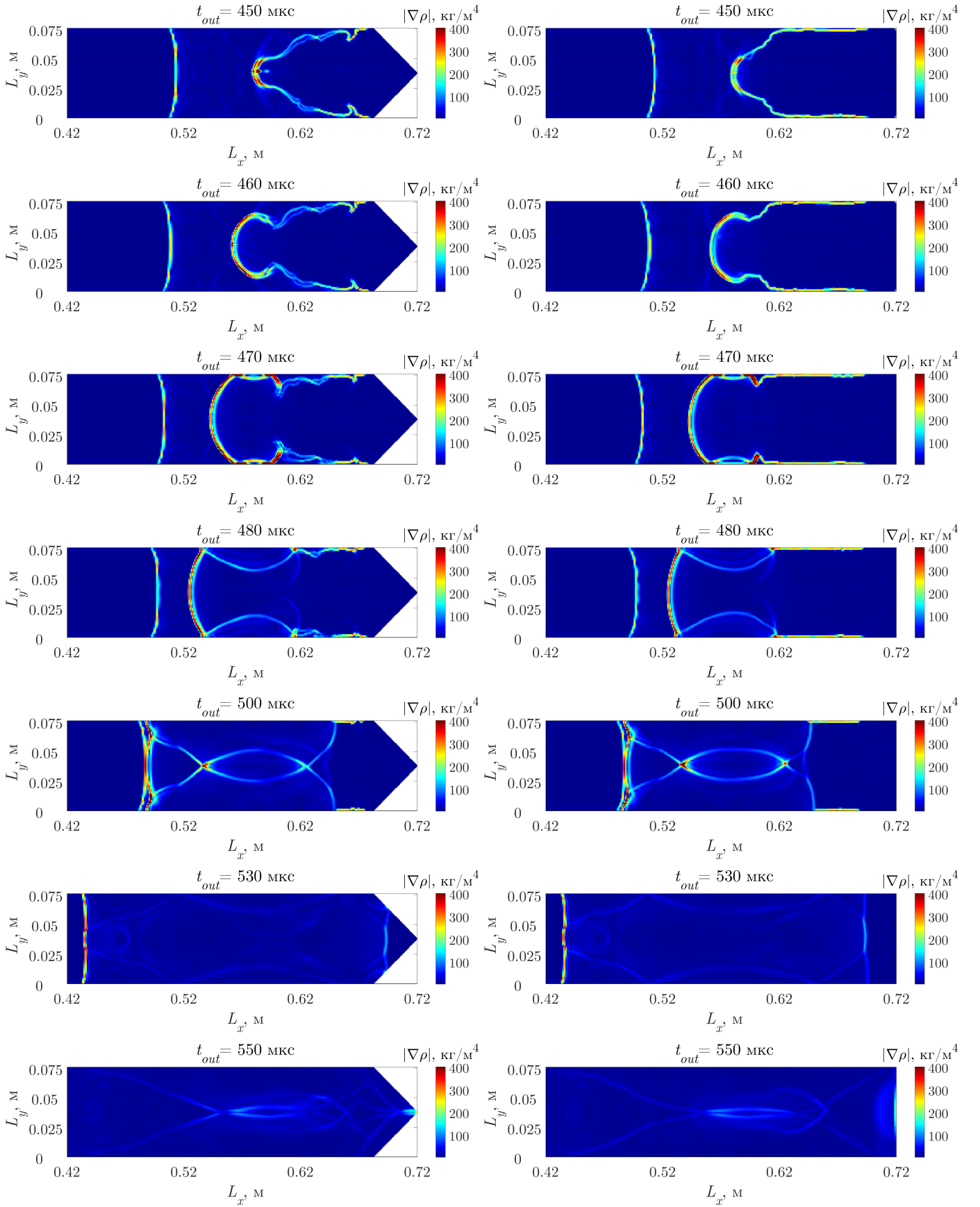


Рисунок 4.25. Модуль градиента плотности по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию.

модуля градиента плотности увеличивается, появляются карманы несгоревшей смеси, окруженные продуктами реакции с высокой температурой (Рис. 4.22 — 4.23). По центру рассматриваемой области в одном из карманов можно заметить возникновение «взрыва во взрыве», который ведет к формированию детонации. Видны отражения возникшей детонационной волны от боковых стенок трубы и ее распространение в виде детонационных и ретонационных волн во всех направлениях. В конце концов, детонационная волна, движущаяся в след за отраженной ударной, догоняет ее.

Распределение скорости вдоль координаты  $Ox$  изображено на Рис. 4.26 — 4.27. Отрицательные значения скорости соответствуют движению газовой смеси справа налево, положительные — слева направо. Поле скорости в основном отслеживает те же особенности течения при фокусировке ударной волны и переходе горения в детонацию, что и поле давления, описанное выше, но с некоторыми особенностями. На поле скорости видно, как газ, растекающийся от поверхности пламени, на временах  $t = 320 — 440$  мкс постепенно увеличивает скорость, двигаясь к открытому концу трубы (соответствует оттенкам голубого цвета). Затем при  $t = 440$  мкс наблюдается уже сформированная волна детонации. В обратную сторону идет волна ретонации, вырождающаяся в ударную волну в сгоревшем газе, причем скорость газа позади этой волны постепенно увеличивается ( $t = 480 — 530$  мкс). При  $t = 530$  мкс видно также, что волна детонации уже догнала отраженную ранее от вставки ударную волну. На последующих временах волна детонации уходит за пределы показываемой на рисунке области, а волна, направлявшаяся в сторону клиновидной вставки в сгоревшем газе, отражается от нее, создавая сложную картину вторичных волн.

На Рис. 4.28 — 4.29 представлено распределение массовой доли радикала  $H_2O_2$  по центру расчетной области. До момента времени  $t = 65$  мкс какие-либо реакции в расчетной области отсутствуют. После в видно образование зоны реакции в центре вершины клина. В дальнейшем распределение радикала хорошо выделяет фронт зоны горения. В момент  $t = 470$  мкс от начала расчета видно, что волна, идущая по цилиндрической трубе в сторону вставки вблизи стенок является волной ретонации, так как в ней в детонационном режиме дожигается несгоревшая смесь. Также можно заметить, что после того, как детонационная волна обгоняет первичную ударную, за ней концентрация радикала  $H_2O_2$  становится существенно выше ( $t = 530 — 550$  мкс).

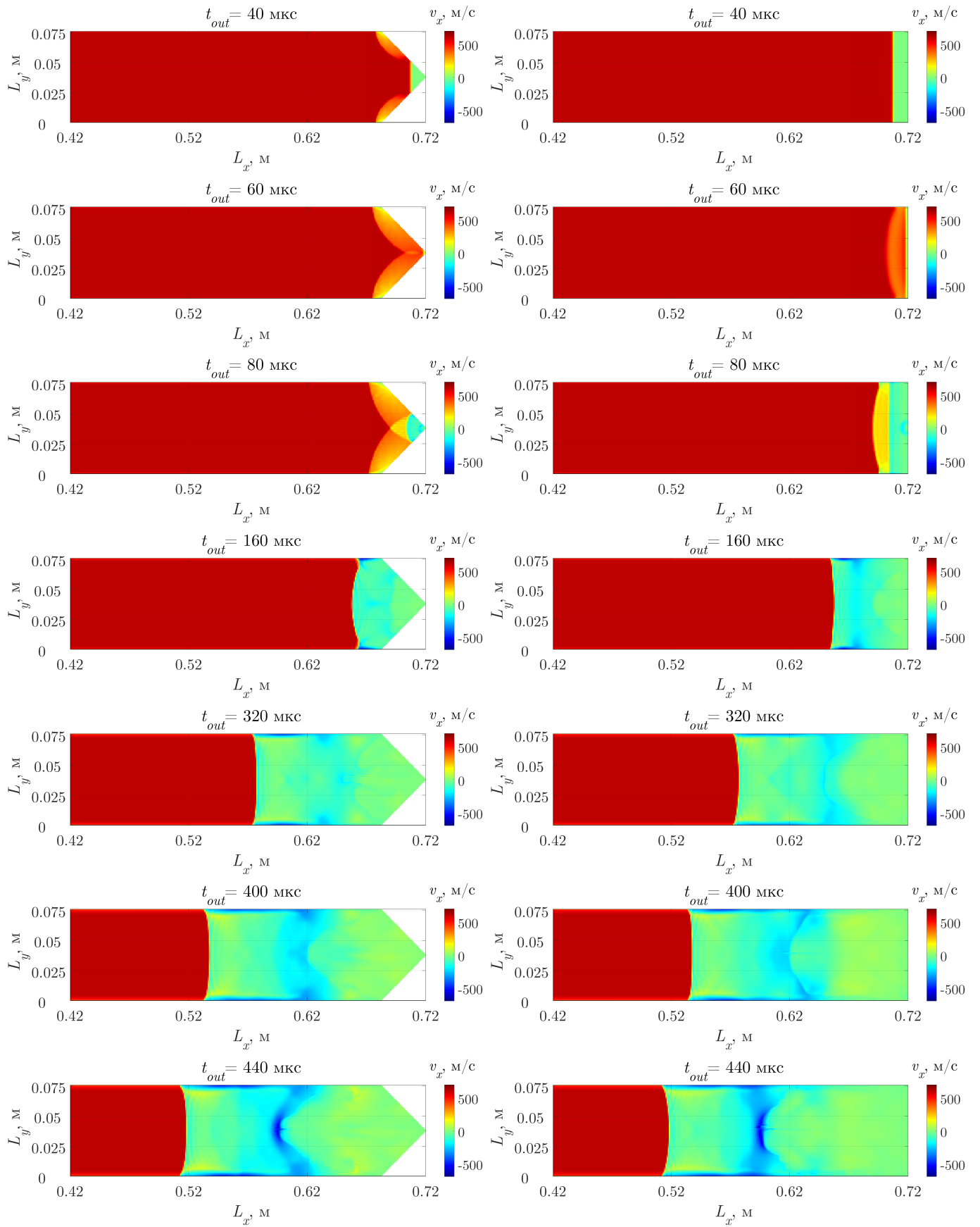


Рисунок 4.26. Распределение скорости вдоль оси  $x$  по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию.



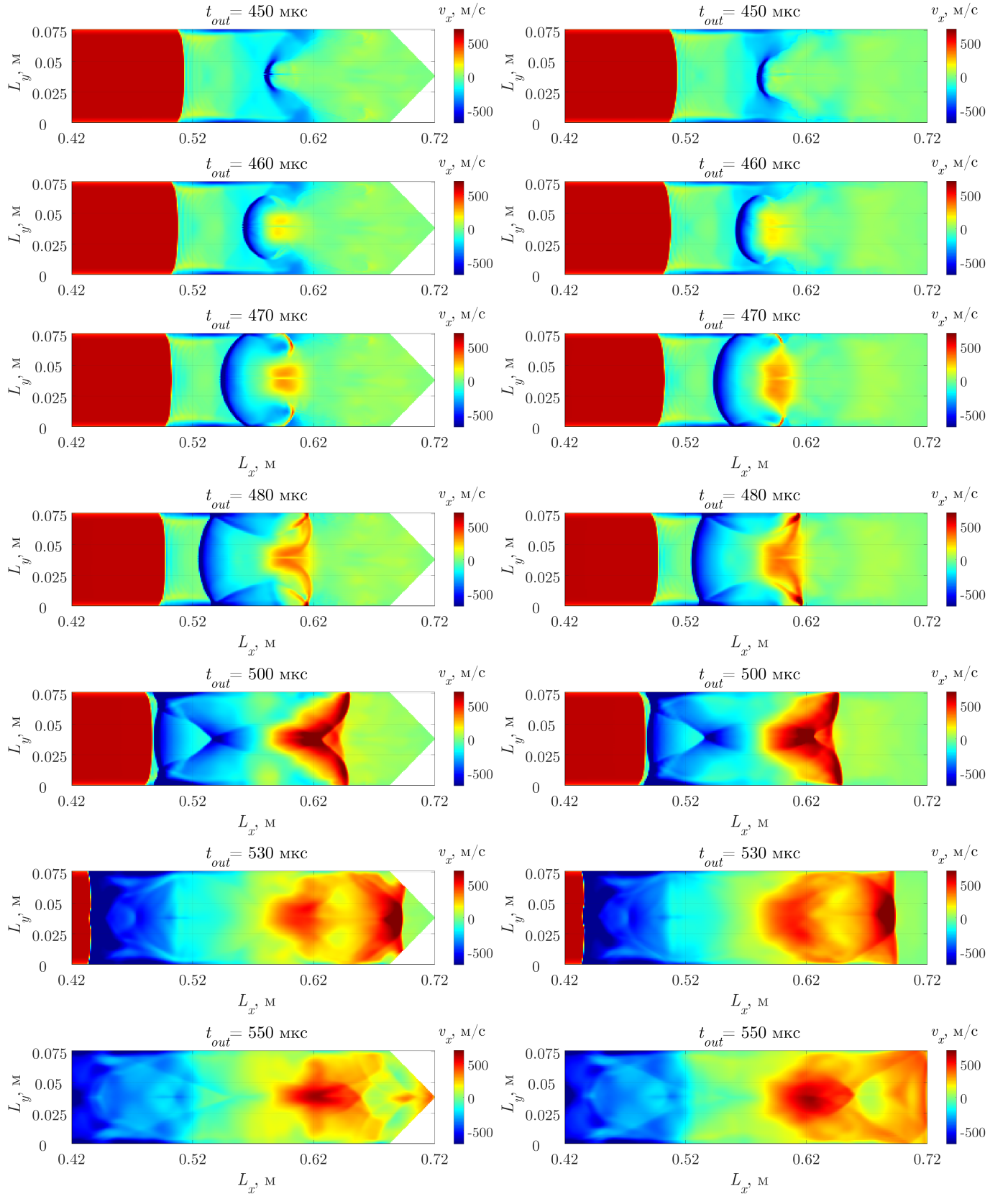


Рисунок 4.27. Распределение скорости вдоль оси  $x$  по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию.

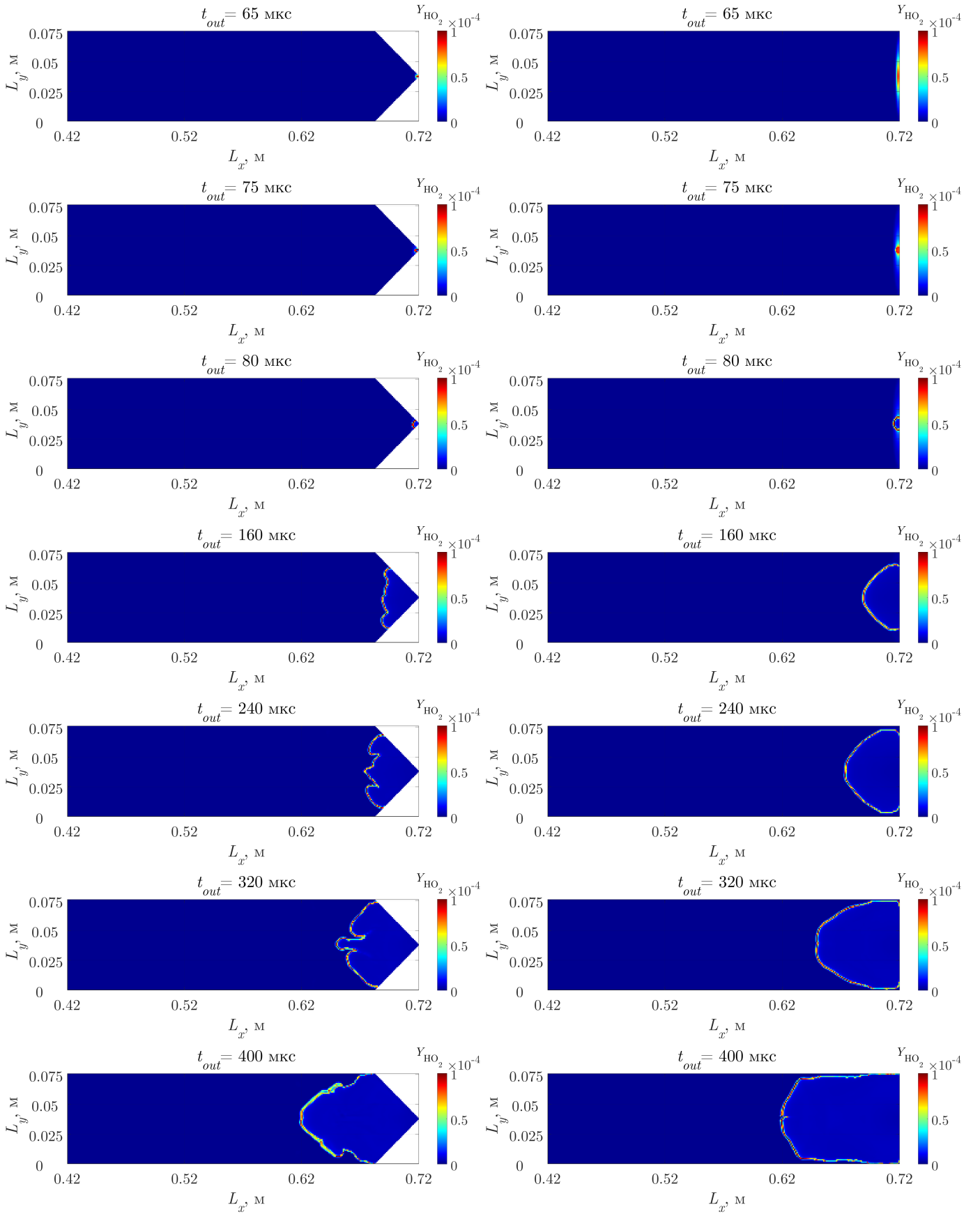


Рисунок 4.28. Распределение массовой доли радикала  $\text{HO}_2$  по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию.



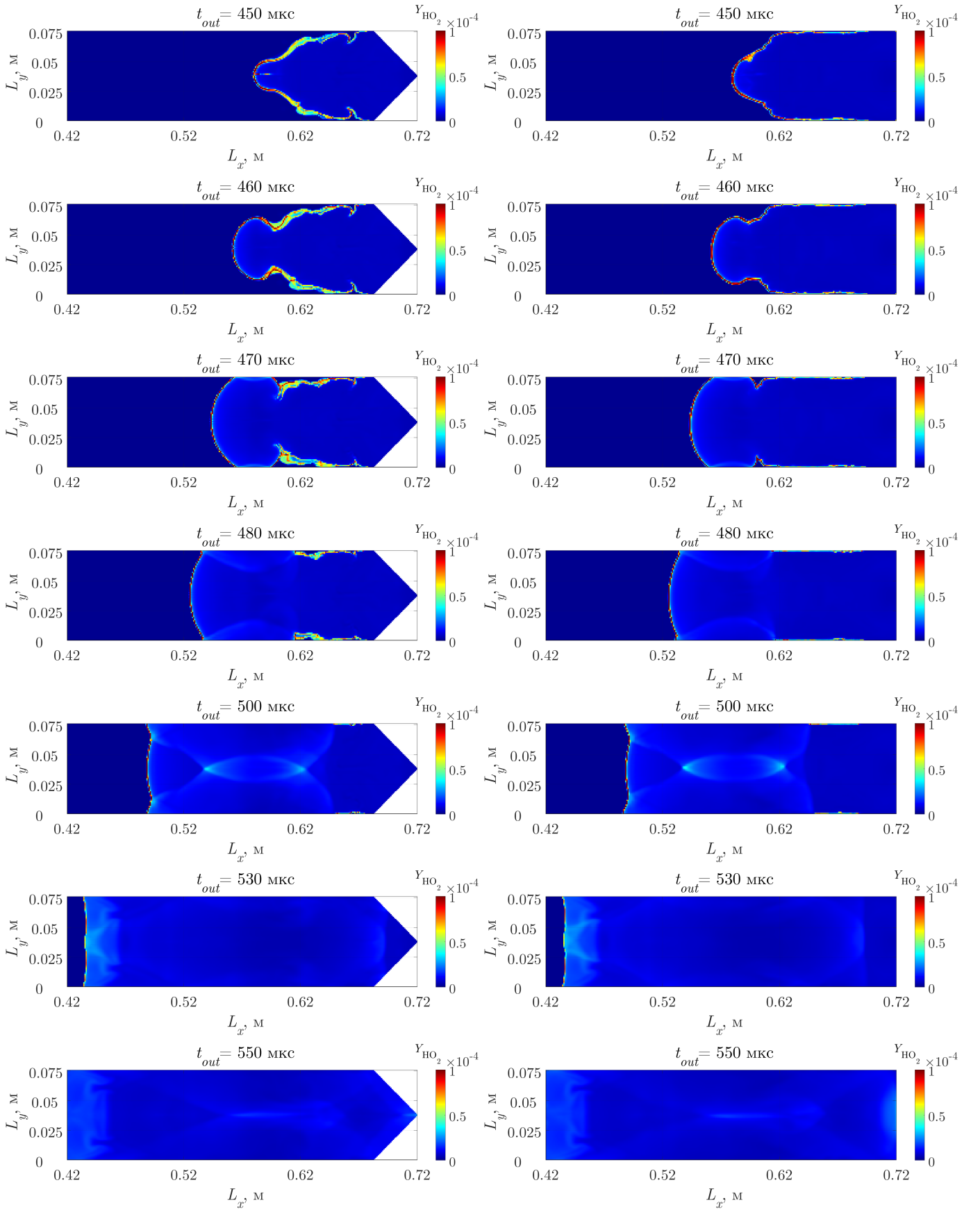


Рисунок 4.29. Распределение массовой доли радикала  $\text{HO}_2$  по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию.

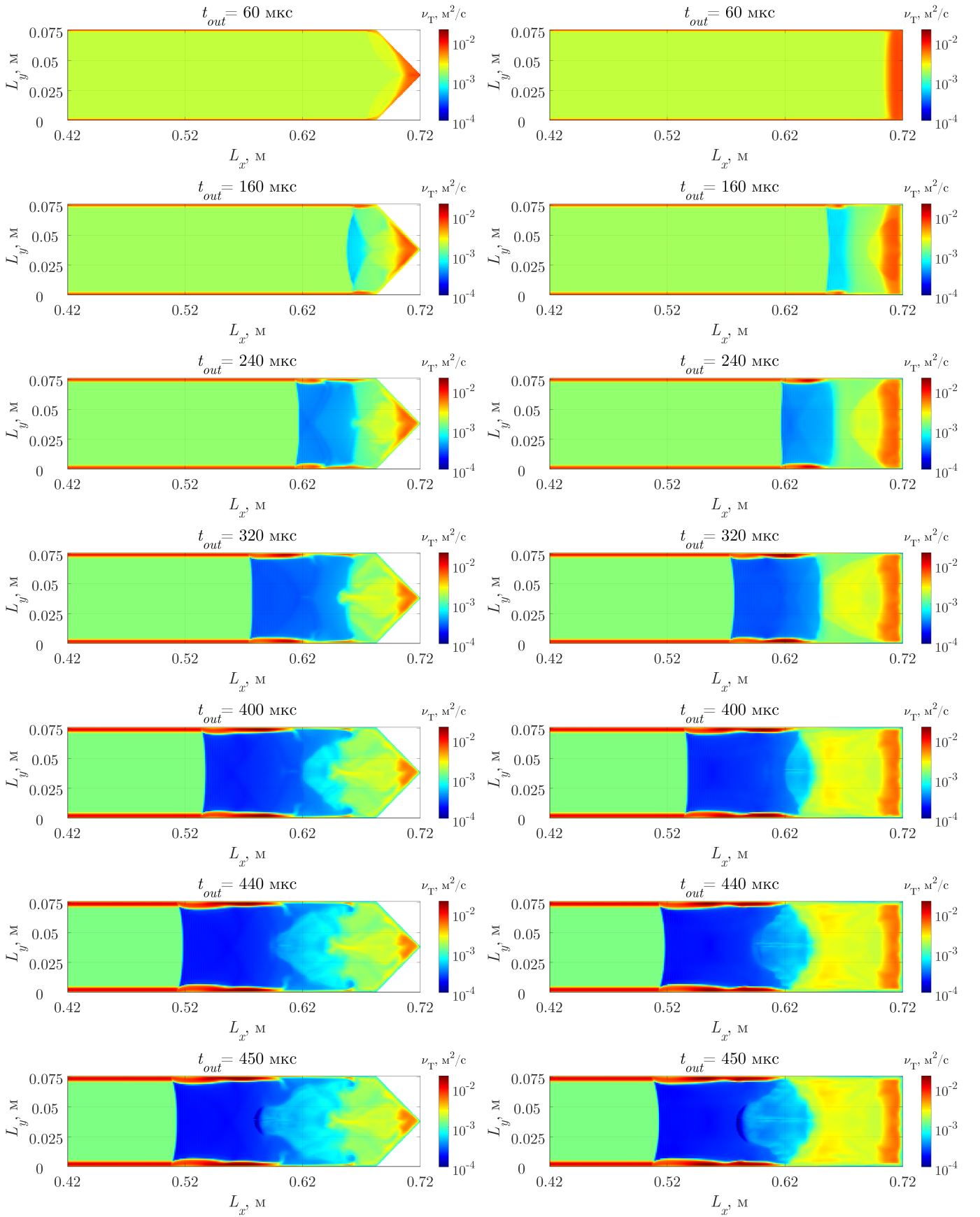


Рисунок 4.30. Распределение кинематической турбулентной вязкости (в  $\text{м}^2/\text{с}$ ) по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) в логарифмическом масштабе для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию.

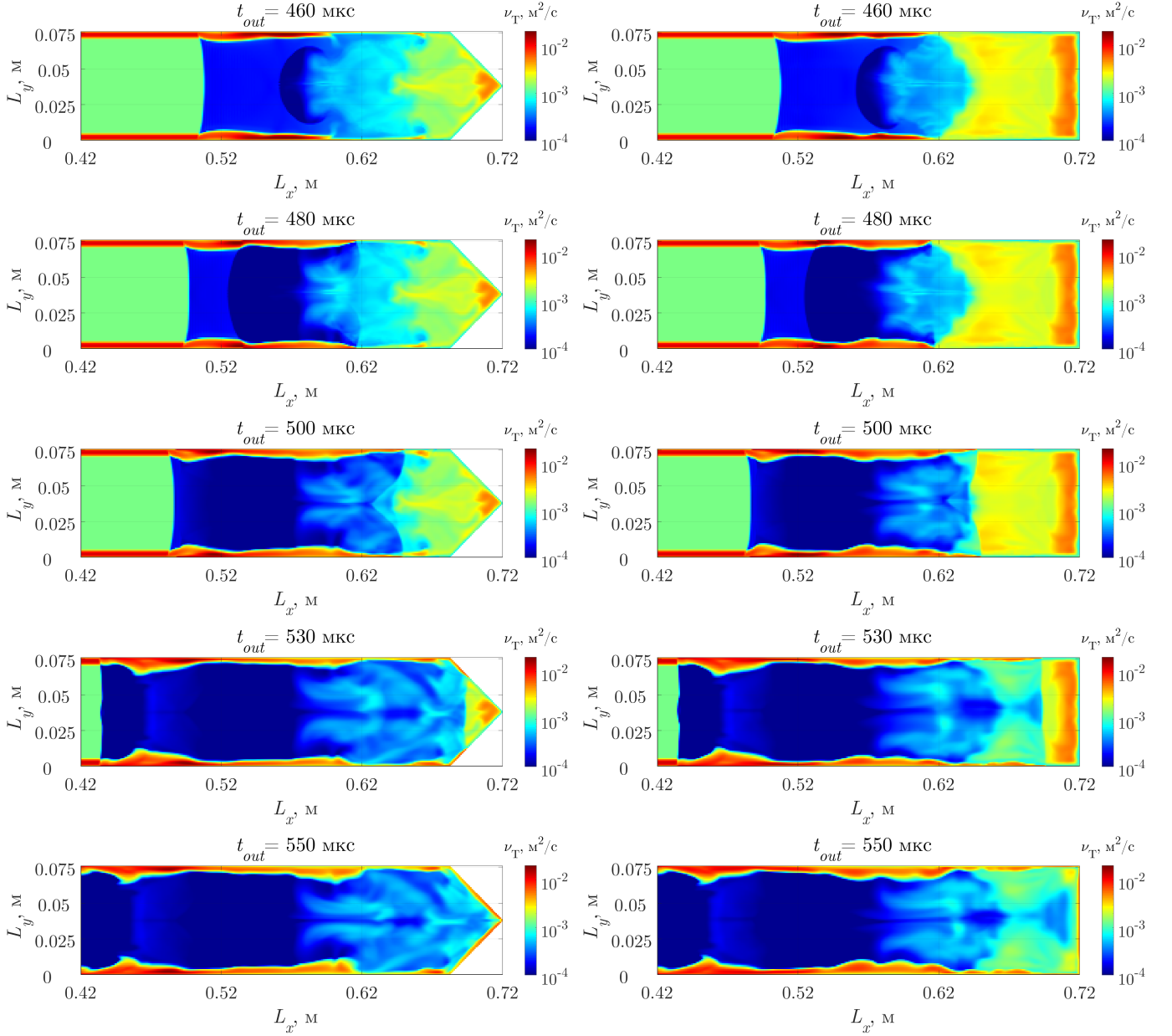


Рисунок 4.31. Распределение кинематической турбулентной вязкости (в  $\text{м}^2/\text{с}$ ) по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) в логарифмическом масштабе для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию.

На Рис. 4.30 — 4.31 изображено распределение кинематической турбулентной вязкости в плоскостях  $Oxy$  и  $Oxz$  в логарифмическом масштабе. Видно, как после отражения первичной волны и фокусировки ее на клине за отраженной волной вязкость постепенно усиливает падение. Это связано как с общим понижением уровня турбулентной вязкости со временем в толще рабочей области (естественное вырождение турбулентности), так и с тем, что в достаточно сильной ударной волне диссипация турбулентности значительно превышает ее производство. Тем самым турбулентная вязкость падает за сильной ударной (и детонационной) волной. Тем не менее, влияние стенок и вихрей на производство турбулентности — положительно. Сильнее всего турбулентная вязкость у стенок, особенно там, где вдоль стенки идет сильный поток или находятся достаточно сильные вихри. Можно заметить, что турбулентность также уменьшается позади волны ретонации и ударной волны, в которую последняя вырождается. Детонационная волна как раз хорошо заметна на этих рисунках по резкому снижению вязкости в ней.

На Рис. 4.32 для случая фокусировки ударной волны и последующего перехода горения в детонацию в клине представлены значения давления в контрольных точках для численных расчетов и для эксперимента. Данные, как и в предыдущих случаях, были синхронизированы по времени прихода начальной ударной волны к расположенному в вершине вставки датчику (номер 6). В данном случае представлен только вариант численного счета с использованием турбулентной модели (численная схема №1). При отключении турбулентности и учета вязких сил воспламенения смеси зафиксировать не удалось (численная схема №2). По времени регистрации датчиками прохождения ударной и возникшей детонационной волн была проведена оценка скорости их распространения (Рис. 4.33).

Как видно из представленных данных (Рис. 4.32) в численном счете наблюдается некоторая задержка при подходе отраженной ударной волны к 5-му датчику по сравнению с экспериментом. Однако, время подхода к 4-му у них уже практически идентично. В дальнейшем как в эксперименте, так и в численном счете детонация возникает между 3-м и четвертым датчиками, причем в численном счете переход происходит несколько раньше. Несмотря на это, время подхода детонационной волны к 3-му датчику в эксперименте немного меньше. Дальнейшее распространение детонационной волны в численном счете и эксперименте практически совпадают. Подход возникшей волны

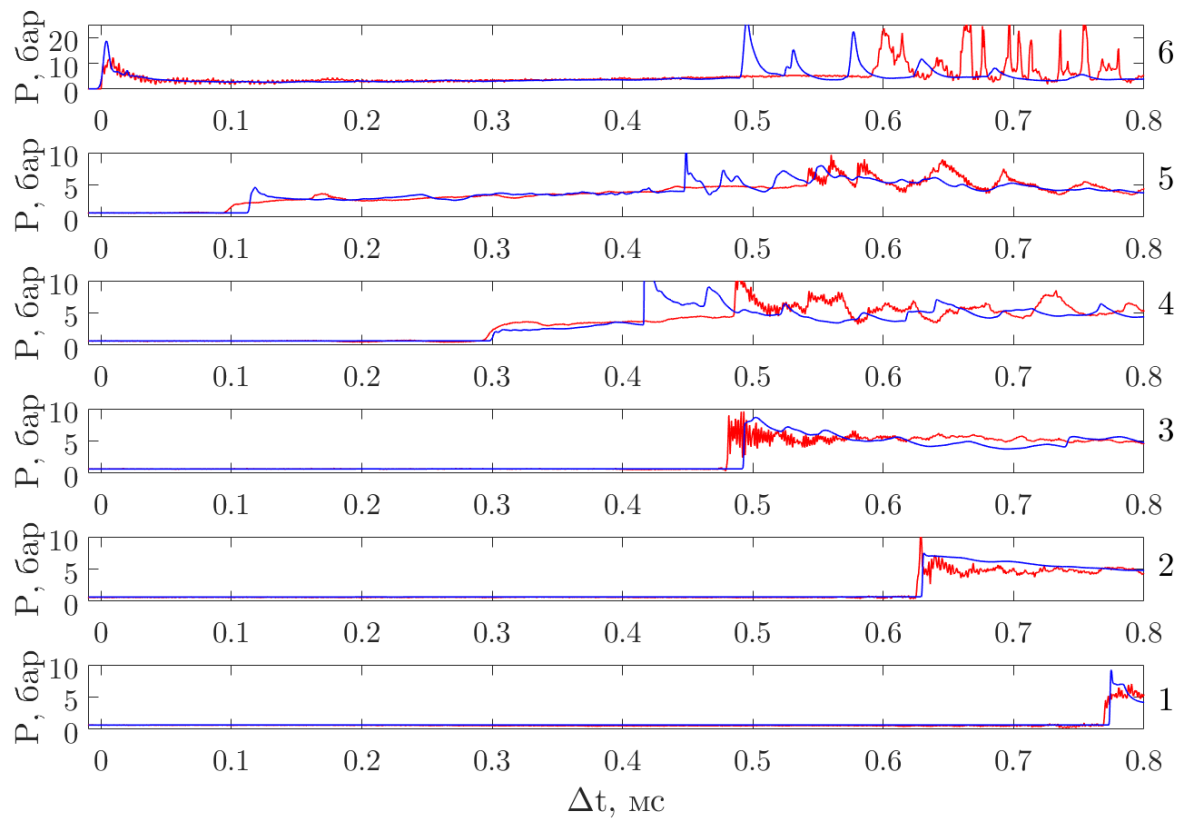


Рисунок 4.32. Давление в контрольных точках в зависимости от времени: экспериментальные данные (красная линия), численная схема 1 (синяя линия). Случай перехода горения в детонацию.

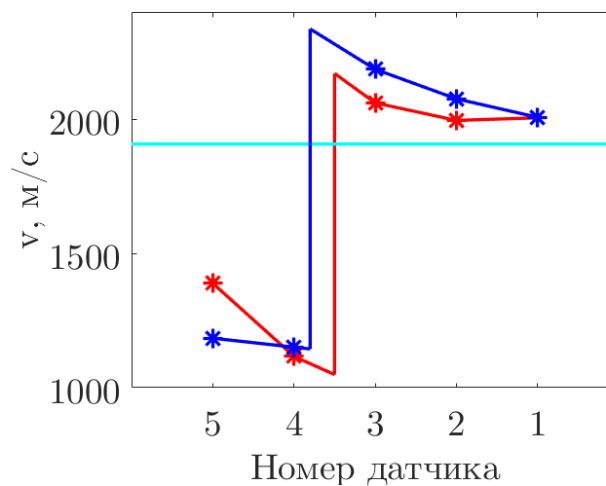


Рисунок 4.33. Скорость распространения волны около датчиков: экспериментальные данные (красная линия), численная схема 1 (синяя линия) и теоретическая скорость детонации Чепмена—Жуге (бирюзовая прямая). Случай перехода горения в детонацию.

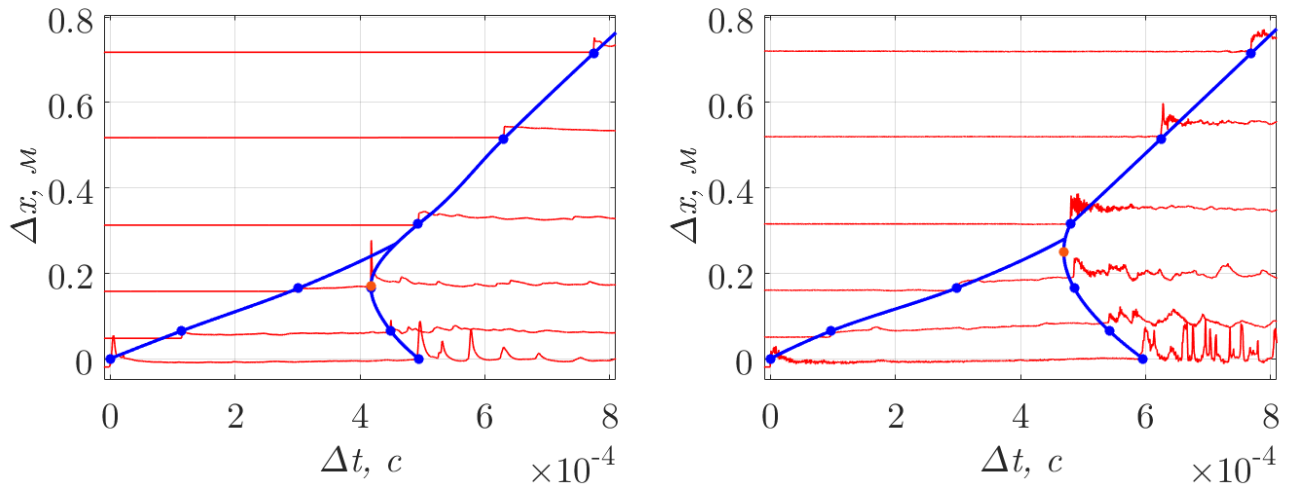


Рисунок 4.34. Положение фронта ударной и детонационной волн (синие кривые) для случая перехода горения в детонацию и давление в контрольных точках (красные кривые) для результатов численного моделирования (слева) и физического эксперимента (справа).

детонации, а в дальнейшем ударной волны к датчикам 4-6 по времени довольно сильно отличается в численном счете от эксперимента. Это связано с тем, что детонация в 1-м случае возникла немного раньше и, если рассмотреть  $x-t$  диаграммы положения фронтов головных волн (Рис. 4.34), немного ближе к вставке. При детальном разборе можно заметить, что детонация в численном счете возникла практически на против 4-го датчика, в тоже время в эксперименте переход произошел на четверти пути к 3-му датчику. Сама качественная структура множественных взаимодействий отраженных волн довольно близка, несмотря на свою сложность. Дальнейшее рассмотрение  $x-t$  диаграмм подтверждает сделанные ранее выводы о том, что после того, как детонационная волна догоняет ударную, в обоих вариантах подход к 3-му датчику происходит практически в одно и тоже время. График скорости (Рис. 4.33) показывает, что в обоих случаях скорости распространения отраженной ударной волны, а также возникшей позже детонационной волны довольно близки. Скорость детонации также немного превосходит теоретическую скорость Чепмена—Жуге. Момент перехода на графике скорости представлен скачком.

#### 4.5 Заключение по главе

В данной главе представлены результаты работы программного комплекса при исследовании процессов, протекающих в водородно-воздушных смесях при отражении плоской ударной волны от конуса и клина в цилиндрической трубе для нескольких вариантов начальных условий, характеризующих различные типы процессов, протекающих в области после отражения ударной волны.

Получено, что при отражении ударной волны в химически реагирующем газе от внутренней поверхности клина или конуса возможны различных сценария развития процесса: при слабой падающей волне отражение и фокусировка не приводят к зажиганию горючей смеси, при сильной падающей волне ее отражение и фокусировка приводят к возникновению детонационной волны в вершине, а при обладании падающей волной промежуточной интенсивности в результате воспламенения смеси в вершине возникает волна горения, распространяющийся за отраженной ударной волной, и дальнейшая эволюция области течения приводит к переходу горения в детонацию.

Проведено сравнение результатов вычислительного моделирования переходных процессов с экспериментальными данными, полученными в ударной трубе, и с теоретической скоростью распространения детонации для случая ее возникновения. На основании валидации проведена корректировка вычислительной модели разработанного программного комплекса. Получено хорошее совпадение с экспериментальными данными как по уровню давления в датчиках, так и по скорости распространения отраженной от вставки волны. Получено соответствие расчетов с результатами эксперимента по типу возникающих в области процессов, в том числе получен переход горения в детонацию.

## Заключение

1. В данной работе создана трехмерная вычислительная модель, позволяющая описать переходные процессы в химически реагирующей газовой смеси: переход горения в детонацию.
2. Созданы коды для решения трехмерных задач физико-химической газовой динамики на универсальных процессорах и на графических ускорителях.
3. Было проведено оригинальное исследование перехода горения в детонацию при отражении ударной волны от внутренней поверхности клина. Показано, что за отраженной ударной волной возможно возникновение волны горения, которая после воспламенения в вершине клина отстает от отраженной волны, затем ускоряется в результате турбулизации и приводит к возникновению детонации (взрыва во взрыве).
4. Показано, что при отражении ударной волны в химически реагирующем газе от внутренней поверхности клина или конуса возможны различные сценарии развития процесса: при слабой падающей волне отражение и фокусировка не приводят к зажиганию горючей смеси, при сильной падающей волне ее отражение и фокусировка приводят к возникновению детонационной волны в вершине, а при обладании падающей волной промежуточной интенсивности в результате воспламенения смеси в вершине возникает волна горения, которая затем ускоряется и приводит к переходу горения в детонацию.
5. Была осуществлена валидация трехмерного вычислительного комплекса физико-химической динамики вязкого газа путем сравнения результатов расчетов с экспериментами по отражению ударных волн в химически реагирующем газе от внутренней поверхности клина и конуса.

Автор выражает огромную благодарность всем тем, кто принимал участие в подготовке, представлении и обсуждении данной диссертационной работы и сделал ее возможной, в особенности, своему научному руководителю: д.ф.-м.н., профессору Смирнову Николаю Николаевичу и своему научному консультанту и соруководителю: д.ф.-м.н., профессору Рыбакину Борису Петровичу, за научное руководство, оказанную помощь и поддержку в выполнении данной работы на всех ее этапах, за обсуждение полученных результатов. Также автор благодарит к.ф.-м.н., доцента Никитина Валерия Федоровича за оказанную помощь



при разработке программного комплекса, обсуждение результатов и различных технических аспектов, и весь коллектив кафедры газовой и волновой динамики механико-математического факультета Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова. Также автор выражает благодарность создателям применяемого при оформлении данной работы шаблона диссертации \*Russian-Phd-LaTeX-Dissertation-Template\* за возможность его использования.

## Список сокращений и условных обозначений

|                   |  |
|-------------------|--|
| <b>АПК</b>        | Аппаратно-Программный Комплекс   |
| <b>ОДУ</b>        | Обыкновенное Дифференциальное Уравнение  |
| <b>ПГД</b>        | Переход Горения в Детонацию  |
| <b>ЗНД</b>        | модель Зельдовича—Неймана—Дёринга  |
| <b>ЭВМ</b>        | Электронно-Вычислительная Машина   |
| <b>CUDA</b>       | англ. Compute Unified Device Architecture, вычислительная унифицированная архитектура устройства             |
| <b>DES</b>        | англ. Detached Eddy Simulation, моделирование отсоединенных вихрей   |
| <b>DNS</b>        | англ. Direct Numerical Simulation, прямое численное моделирование  |
| <b>LES</b>        | англ. Large Eddy Simulation, моделирование крупных вихрей  |
| <b>OpenMP</b>     | англ. Open Multi-Processing, открытый, мультипроцессорная обработка  |
| <b>RANS</b>       | англ. Reynolds Averaged Navier—Stokes, система уравнений Навье—Стокса, осредненных по Рейнольдсу             |
| <b>SSP method</b> | англ. Strong Stability Preserving method, метод с сильным сохранением устойчивости                           |
| <b>WENO</b>       | англ. Weighted Essentially Non-Oscillatory, в основном не осциллирующая, с весами (семейство численных схем) |

## Список литературы

1. *Alexeev M. M., Semenov O. Y., Yakush S. E.* Experimental Study on Cellular Premixed Propane Flames in a Narrow Gap between Parallel Plates // *Combustion Science and Technology*. — 2019. — Vol. 191, no. 7. — P. 1256—1275.
2. *Wolanski P.* Detonative propulsion // *Proceedings of the Combustion Institute*. — 2013. — Vol. 34, no. 1. — P. 125—158.
3. *Anand V., Gutmark E.* Rotating detonation combustors and their similarities to rocket instabilities // *Progress in Energy and Combustion Science*. — 2019. — Vol. 73. — P. 182—234.
4. *Махвиладзе Г. М., Роберте Д. П., Якуш С. Е.* Образование и горение газовых облаков при аварийных выбросах в атмосферу // *Физика горения и взрыва*. — 1997. — Т. 33, вып. 2. — С. 23—38.
5. *Якуш С. Е.* Моделирование физико-химических явлений при промышленных авариях и пожарах // *Актуальные проблемы механики. 50 лет Институту проблем механики им. А.Ю.Ишлинского РАН*. — М.: Наука, 2015. — С. 223—235.
6. *Умнов А. Е., Голик А. С., Палеев Д. Ю., Шевцов Н. Р.* Предупреждение и локализация взрывов в подземных условиях. — М.: Недра, 1990. — С. 286.
7. *Кулешов А. А., Мышецкая Е. Е., Якуш С. Е.* Моделирование распространения лесных пожаров на основе модифицированной двумерной модели // *Матем. моделирование*. — 2016. — Т. 28, вып. 12. — С. 20—32.
8. *Kuleshov A. A., Myshetskaya E. E., Yakush S. E.* Numerical simulation of forest fire propagation based on modified two-dimensional model // *Mathematical Models and Computer Simulations*. — 2017. — July. — Vol. 9, no. 4. — P. 437—447.
9. *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.

10. *Berthelot M.* Sur la vitesse de propagation des phenomenes explosifs dans les gaz // Compt. Rend. Acad. Sci. — 1881. — Vol. 93. — P. 18—22.
11. *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.
12. *Мухельсон В. А.* О нормальной скорости воспламенения гремучих газовых смесей // Учен. записки Моск. ун-та, отд. физ.-мат. — 1893. — Вып. 10. — С. 1—92.
13. *Chapman D. L.* On the rate of explosion in gases // Philosophical Magazine. — 1899. — Vol. 47. — P. 90—104.
14. *Jouguet E.* Sur la propagation des reactions chimiques dans les gaz // Journal des Mathematiques Pures et Appliquees. — 1905. — Т. 1. — С. 347—425.
15. *Rankine W. J. M.* On the Thermodynamic Theory of Waves of Finite Longitudinal Disturbance // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. — 1870. — Vol. 160. — P. 277—288.
16. *Hugoniot P.-H.* Sur la propagation du mouvement dans les corps et specialement dans les gaz parfaits // Journal de l'Ecole Polytechnique. — 1887, 1889. — Vol. CLVII, CLVIII. — P. 3—98, 1—126.
17. *Гриб А. А.* О распространении плоской ударной волны при обыкновенном взрыве у твердой стенки // Прикладная математика и механика. — 1944. — Т. 8, № 3. — С. 160.
18. *Зельдович Я. Б.* К теории распространения детонации в газообразных системах // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1940. — Т. 10, вып. 5. — С. 542—568.
19. *Зельдович Я. Б., Ратнер С. Б.* Расчет скорости детонации в газах // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1941. — Т. 11. — С. 170—183.
20. *Зельдович Я. Б.* О распределении давления и скорости в продуктах детонационного взрыва, в частности при сферическом распространении детонационной волны // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1942. — Т. 12, № 9. — С. 389—406.

21. *Neumann J.* Theory of detonation waves // Progress Report to the National Defense Research Committee Div. B, OSRD-549. — 1942. — No. 549.
22. *Doring W.* Uber Detonationsvorgang in Gasen // Annalen der Physik. — 1943. — Vol. 435, issue 6/7. — P. 421—436.
23. *Седов Л. И.* Методы подобия и размерности в механике. — М.: Наука, 1977. — С. 440.
24. *Седов Л. И.* Плоские задачи гидродинамики и аэродинамики. — М.: Наука, 1980. — С. 448.
25. *Erpenbeck J. J.* Stability of Steady-State Equilibrium Detonations // The Physics of Fluids. — 1962. — Vol. 5, no. 5. — P. 604—614.
26. *Erpenbeck J. J.* Stability of Idealized One-Reaction Detonations // The Physics of Fluids. — 1964. — Vol. 7, no. 5. — P. 684—696.
27. *Fickett W., Wood W. W.* Flow Calculations for Pulsating One-Dimensional Detonations // The Physics of Fluids. — 1966. — Vol. 9, no. 5. — P. 903—916.
28. *Campbell C., Woodhead D.* // Journ. Chemical Society. — 1926. — Vol. 129. — P. 3010.
29. *Денисов Ю. Н., Трошин Я. К.* Пульсирующая и спиновая детонация газовых смесей в трубах // Доклады АН СССР. — 1959. — Т. 125, № 1. — С. 110—113.
30. *Денисов Ю. Н., Трошин Я. К.* Механизм детонационного сгорания // Прикладная механика и техническая физика. — 1960. — Т. 1, № 1. — С. 21—35.
31. *White D. R.* Turbulent Structure of Gaseous Detonation // The Physics of Fluids. — 1961. — Vol. 4, no. 4. — P. 465—480.
32. *Щёлкин К. И., Трошин Я. К.* Газодинамика горения. — М.: Издательство Академии наук СССР, 1963. — 254 с.
33. *Коробейников В. П., Левин В. А.* Сильный взрыв в горючей смеси газов // Известия Академии наук СССР. Механика жидкости и газа. — 1969. — № 6. — С. 48—51.

34. Бишимов Е., Коробейников В. П., Левин В. А., Черный Г. Г. Одномерные нестационарные течения горючей смеси газов с учетом конечной скорости химических реакций // Известия Академии наук СССР. Механика жидкости и газа. — 1968. — № 6. — С. 7—19.
35. Ларин О. Б., Левин В. А. Исследование ослабления волны детонации с двухфронтной структурой // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. — 1971. — № 3. — С. 59—65.
36. Левин В. А., Марков В. В. Возникновение детонации при концентрированном подводе энергии // Физика горения и взрыва. — 1975. — № 4. — С. 623—633.
37. Левин В. А., Марков В. В., Осинкин С. Ф. Прямое инициирование детонации в водородо-кислородной смеси, разбавленной азотом // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. — 1992. — № 6. — С. 151—151.
38. Nikiforakis N., Clarke J. Numerical studies of the evolution of detonations // Mathematical and Computer Modelling. — 1996. — Vol. 24, no. 8. — P. 149—164.
39. Мануйлович И. С. Формирование и стабилизация детонации в плоском изогнутом канале // Изв. РАН. МЖГ. — 2016. — № 1. — С. 84—91.
40. Мануйлович И. С. Детонация в трёхмерном изогнутом канале // Доклады Академии наук. — 2018. — Т. 479, № 1. — С. 25—28.
41. Левин В. А., Мануйлович И. С., Марков В. В. Инициирование и распространение многомерных волн детонации // Физика горения и взрыва. — 2015. — Т. 51, № 1. — С. 47—56.
42. Левин В. А., Мануйлович И. С., Марков В. В. Численное моделирование спиновой детонации в каналах круглого сечения // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2016. — Т. 56, № 6. — С. 1122—1137.
43. Oppenheim A. Gasdynamic analysis of the development of gaseous detonation and its hydraulic analogy // Symposium (International) on Combustion. — 1953. — Vol. 4, no. 1. — P. 471—480 ; — Fourth Symposium (International) on Combustion.

44. *Urtiew P. A., Oppenheim A. K.* Experimental Observations of the Transition to Detonation in an Explosive Gas // Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences. — 1966. — Vol. 295, no. 1440. — P. 13—28.
45. *Саламандра Г. Д.* О взаимодействии пламени с ударной волной // Физическая гидродинамика. — 1959. — С. 163—167.
46. *Солоухин Р. И.* Методы измерений и основные результаты в экспериментах на ударных трубах // 7-ой Международный Симпозиум по ударным трубам / под ред. Новосибирск. — 1969.
47. *Смирнов Н. Н., Бойченко А. П.* Переход горения в детонацию в бензиново-воздушных смесях // Физика горения и взрыва. — 1986. — Т. 22, № 2. — С. 65—68.
48. *Smirnov N. N., Tyurnikov M. V.* Experimental investigation of deflagration to detonation transition in hydrocarbon-air gaseous mixtures // Combustion and Flame. — 1995. — Vol. 100, issue 4. — P. 661—668.
49. *Зельдович Я. Б., Либрович В. Б., Махвиладзе Г. М., Сивашинский Г. М.* Развитие детонации в неравномерно нагретом газе // Журнал прикладной механики и технической физике. — 1970. — № 2. — С. 76—82.
50. *Merzhanov A. G.* On critical conditions for thermal explosion of a hot spot // Combustion and Flame. — 1966. — Vol. 10, issue 4. — P. 341—348.
51. *Kailasanath K., Oran E. S.* Ignition of Flamelets Behind Incident Shock Waves and the Transition to Detonation // Combustion Science and Technology. — 1983. — Vol. 34, no. 1—6. — P. 345—362.
52. *Zel'dovich Y. B., Gelfand B. E., Tsyganov S. A., Frolov S. M., Polenov A. N.* Concentration and Temperature Nonuniformities of Combustible Mixtures as Reason for Pressure Waves Generation // Dynamics of Explosions, Progress in Astronautics and Aeronautics / ed. by A. Borisov, A. L. Kuhl, J. R. Bowen, J.-C. Leyer. — 1988. — Vol. 114. — P. 99—123.
53. *Khokhlov A. M., Oran E. S.* Numerical simulation of detonation initiation in a flame brush: the role of hot spots // Combustion and Flame. — 1999. — Vol. 119, no. 4. — P. 400—416.
54. *Borisov A.* On the origin of exothermic centers in gaseous mixtures // Acta Astronautica. — 1974. — Vol. 1, no. 7. — P. 909—920.

55. *Smirnov N. N., Panfilov I. I.* Deflagration to detonation transition in combustible gas mixtures // *Combustion and Flame*. — 1995. — Vol. 101, no. 1. — P. 91—100.
56. *Khokhlov A. M., Oran E. S., Thomas G. O.* Numerical simulation of deflagration-to-detonation transition: the role of shock–flame interactions in turbulent flames // *Combustion and Flame*. — 1999. — Vol. 117, no. 1. — P. 323—339.
57. *Kasoy D. R., Kuehn J. A., Nabity M. W., Clarke J. F.* Detonation initiation on the microsecond time scale: DDTs // *Combustion Theory and Modelling*. — 2008. — Vol. 12, no. 6. — P. 1009—1047.
58. *Smirnov N. N., Nikitin V. F., Tyurnikov M. V., Boichenko A. P., Legros J. C., Shevisova V. M.* Control of detonation onset in combustible gases // *High-Speed Deflagration and Detonation: Fundamentals and Control* / G. D. Roy, S. M. Frolov, D. W. Netzer, A. A. Borisov. — Moscow: ELEX-KM Publishers, 2001. — P. 3—30.
59. *Clarke J. F., Kasoy D. R., Riley N.* On the direct initiation of a plane detonation wave // *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*. — 1986. — Vol. 408, no. 1834. — P. 129—148.
60. *Sileem A. A., Kasoy D. R., Hayashi A. K.* Thermally initiated detonation through deflagration to detonation transition // *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences*. — 1991. — Vol. 435, no. 1895. — P. 459—482.
61. *Lieberman M., Ivanov M., Kiverin A., Kuznetsov M., Chukalovsky A., Rakhimova T.* Deflagration-to-detonation transition in highly reactive combustible mixtures // *Acta Astronautica*. — 2010. — Vol. 67, no. 7. — P. 688—701.
62. *Иванов М. Ф., Киверин А. Д., Либерман М. А., Фортков В. Е.* Механизм ускорения пламени и переход в детонацию водородно кислородной смеси в канале // *Доклады Академии наук*. — 2010. — Т. 434, № 6. — С. 756—759.
63. *Gelfand B., Frolov S., Nettleton M.* Gaseous detonations—A selective review // *Progress in Energy and Combustion Science*. — 1991. — Vol. 17, no. 4. — P. 327—371.



64. *Oran E. S., Gamezo V. N.* Origins of the deflagration-to-detonation transition in gas-phase combustion // *Combustion and Flame*. — 2007. — Vol. 148, no. 1. — P. 4—47.
65. *Ciccarelli G., Dorofeev S.* Flame acceleration and transition to detonation in ducts // *Progress in Energy and Combustion Science*. — 2008. — Vol. 34, no. 4. — P. 499—550.
66. *Щёлкин К. И.* Возникновение детонации в газах в шероховатых трубах // *Журнал технической физики*. — 1947. — Т. 17. — С. 613—618.
67. *Саламандра Г. Д., Баженова Т. В., Набоко И. М.* Формирование детонационной волны при горении газа в трубах // *Журнал технической физики*. — 1959. — Т. 29. — С. 1354—1359.
68. *Солоухин Р. И.* Переход горения в детонацию в газах // *ПМТФ*. — 1961. — № 4. — С. 128—132.
69. *Lindstedt R., Michels H.* Deflagration to detonation transitions and strong deflagrations in alkane and alkene air mixtures // *Combustion and Flame*. — 1989. — Vol. 76, no. 2. — P. 169—181.
70. *Kuznetsov M., Alekseev V., Matsukov I., Dorofeev S.* DDT in a smooth tube filled with a hydrogen–oxygen mixture // *Shock Waves*. — 2005. — Nov. — Vol. 14, no. 3. — P. 205—215.
71. *Bychkov V., Petchenko A., Akkerman V., Eriksson L.-E.* Theory and modeling of accelerating flames in tubes // *Phys. Rev. E*. — 2005. — Oct. — Vol. 72, issue 4. — P. 046307.
72. *Bychkov V., Akkerman V., Fru G., Petchenko A., Eriksson L.-E.* Flame acceleration in the early stages of burning in tubes // *Combustion and Flame*. — 2007. — Vol. 150, no. 4. — P. 263—276.
73. *Wu M.-h., Burke M., Son S., Yetter R.* Flame acceleration and the transition to detonation of stoichiometric ethylene/oxygen in microscale tubes // *Proceedings of the Combustion Institute*. — 2007. — Vol. 31, no. 2. — P. 2429—2436.
74. *Smirnov N., Betelin V., Nikitin V., Phylippov Y., Koo J.* Detonation engine fed by acetylene–oxygen mixture // *Acta Astronautica*. — 2014. — Vol. 104, no. 1. — P. 134—146.

75. *Lee J. H., Knystautas R., Chan C. K.* Turbulent flame propagation in obstacle-filled tubes // Symposium (International) on Combustion. — 1985. — Vol. 20, no. 1. — P. 1663—1672 ; — Twentieth Symposium (International) on Combustion.
76. *Knystautas R., Lee J., Shepherd J., Teodorczyk A.* Flame acceleration and transition to detonation in benzene–air mixtures // Combustion and Flame. — 1998. — Vol. 115, no. 3. — P. 424—436.
77. *A. Vesper, W. Breitung, S.B. Dorofeev.* Run-up distances to supersonic flames in obstacle-laden tubes // J. Phys. IV France. — 2002. — Vol. 12, no. 7. — P. 333—340.
78. *Kuznetsov M., Ciccarelli G., Dorofeev S., Alekseev V., Yankin Y., Kim T. H.* DDT in methane-air mixtures // Shock Waves. — 2002. — Nov. — Vol. 12, no. 3. — P. 215—220.
79. *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.
80. *Смирнов Н. Н., Никитин В. Ф., Шуреждели Ш. А.* Переходные режимы распространения волн в метастабильных системах // Физика горения и взрыва. — 2008. — Т. 44, № 5. — С. 25—37.
81. *Smirnov N. N., Nikitin V. F., Shurekhdeli S. A.* Investigation of Self-Sustaining Waves in Metastable Systems: Deflagration to Detonation Transition // Journal of Propulsion and Power. — 2009. — Vol. 25, no. 3. — P. 593—608.
82. *Smirnov N. N., Nikitin V. F., Phylippov Y. G.* Deflagration-to-detonation transition in gases in tubes with cavities // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. — 2010. — Dec. — Vol. 83, no. 6. — P. 1287—1316.
83. *Chan C., Greig D.* The structures of fast deflagrations and quasi-detonations // Symposium (International) on Combustion. — 1989. — Vol. 22, no. 1. — P. 1733—1739.
84. *Bychkov V., Valiev D., Eriksson L.-E.* Physical Mechanism of Ultrafast Flame Acceleration // Phys. Rev. Lett. — 2008. — Oct. — Vol. 101, issue 16. — P. 164501.

85. *Valiev D., Bychkov V., Akkerman V., Law C. K., Eriksson L.-E.* Flame acceleration in channels with obstacles in the deflagration-to-detonation transition // *Combustion and Flame*. — 2010. — Vol. 157, no. 5. — P. 1012—1021.
86. *Ugarte O. J., Bychkov V., Sadek J., Valiev D., Akkerman V.* Critical role of blockage ratio for flame acceleration in channels with tightly spaced obstacles // *Physics of Fluids*. — 2016. — Vol. 28, no. 9. — P. 093602.
87. *Абдуллин Р. Х., Бабкин В. С., Борисенко А. В., Сеначин П. К.* Горение газа в линейных системах сообщающихся сосудов // *Препринт Алт. ГТУ*. — 1997. — С. 3—55.
88. *Ciccarelli G., Witt B. de.* Detonation Initiation by Shock Reflection from an Orifice Plate // *Shock Waves*. — 2006. — July. — Vol. 15, no. 3. — P. 259—265.
89. *Борисов А. А., Гельфанд Б. Е., Заманский В. М., Лисянский В. В., Скачков Г. И., Трошин К. Я.* Воспламенение горючих газовых смесей в условиях фокусировки отраженных ударных волн // *Химическая физика*. — 1988. — Т. 7, № 10. — С. 1387—1391.
90. *Chan C. K., Lau D., Thibault P. A., Penrose J. D.* Ignition and detonation initiation by shock focussing // *AIP Conference Proceedings*. — 1990. — Vol. 208, no. 1. — P. 161—166.
91. *Ачасов О. В., Лабуда С. А., Пенязьков О. Г., Пушкин Р. М., Тарасов А. И.* Инициирование детонации при отражении ударной волны от вогнутой криволинейной поверхности // *Инженерно-физический журнал*. — 1994. — Т. 67, № 1/2. — С. 66—72.
92. *Rose M., Uphoff U., Roth P.* Ignition of a reactive gas by focusing of a shock wave // *Ram Accelerators* / ed. by K. Takayama, A. Sasoh. — Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 1998. — P. 333—339.
93. *Хомик С. В., Медведев С. П., Поленов А. Н., Гельфанд Б. Е.* Условия инициирования детонации при фокусировке ударных волн в горючей газовой смеси // *Физика горения и взрыва*. — 2007. — Т. 43, № 6. — С. 84—89.

94. *Гельфанд Б. Е., Бартенев А. М., Медведев С. П., Поленов А. Н., Хомик С. В.* Газодинамические явления при воспламенении и горении однородных смесей вблизи неплоских поверхностей // Российский Химический Журнал. — 2001. — Т. XLV, № 3. — С. 5—14.
95. *Gelfand B., Khomik S., Bartenev A., Medvedev S., Grönig H., Olivier H.* Detonation and deflagration initiation at the focusing of shock waves in combustible gaseous mixture // Shock Waves. — 2000. — Vol. 10. — P. 197—204.
96. *Bartenev A., Khomik S., Gelfand B., Grönig H., Olivier H.* Effect of reflection type on detonation initiation at shock-wave focusing // Shock Waves. — 2000. — Vol. 10. — P. 205—215.
97. *Markstein G. H.* Nonsteady flame propagation. — Macmillan, New York, 1964. — P. 328.
98. *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.
99. *Thomas G., Bambrey 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.
100. *Гостинцев Ю. А., Истратов А. Г., Кидин Н. И., Фортков В. Е.* Автотурбулизация газовых пламен. Анализ экспериментальных результатов // ТВТ. — 1999. — Т. 37, вып. 2. — С. 306—312.
101. *Гостинцев Ю. А., Истратов А. Г., Кидин Н. И., Фортков В. Е.* Автотурбулизация газовых пламен. Теоретические трактовки // ТВТ. — 1999. — Т. 37, вып. 4. — С. 633—637.
102. *Ivanov M. F., Kiverin A. D., Liberman M. A.* Flame acceleration and DDT of hydrogen-oxygen gaseous mixtures in channels with no-slip walls // International Journal of Hydrogen Energy. — 2011. — Vol. 36, no. 13. — P. 7714—7727.

103. *Ivanov M. F., Kiverin A. D., Yakovenko I. S., Liberman M. A.* Hydrogen–oxygen flame acceleration and deflagration-to-detonation transition in three-dimensional rectangular channels with no-slip walls // International Journal of Hydrogen Energy. — 2013. — Vol. 38, no. 36. — P. 16427—16440.
104. *Dounia O., Vermorel O., Misdariis A., Poinso T.* Influence of kinetics on DDT simulations // Combustion and Flame. — 2019. — Vol. 200. — P. 1—14.
105. *Wilcox D. C.* Turbulence Modeling for CFD, 3rd edition. — DCW Industries, Inc., La Canada CA, 2006.
106. *Роду В.* Модели турбулентности окружающей среды // Методы расчёта турбулентных течений. — М.: Мир, 1984. — С. 227—322.
107. *Белов И. А., Исаев С. А.* Моделирование турбулентных течений: Учебное пособие. — Балт. гос. техн. ун-т. СПб., 2001. — С. 108.
108. *Prandtl L.* Uber die ausgebildete Turbulenz // ZAMM. — 1925. — Vol. 5. — P. 136—139.
109. *Колмогоров А. Н.* Уравнения турбулентного движения несжимаемой жидкости // Известия АН СССР, Серия физика. — 1942. — Т. 6, № 1/2. — С. 56—58.
110. *Chou P. Y.* On the Velocity Correlations and the Solution of the Equations of Turbulent Fluctuation // Quart. Appl. Math. — 1945. — Vol. 3.
111. *Lauder B. E., Spalding D. B.* Mathematical models of turbulence // Academic press. — 1972.
112. *Saffman P. G.* A model for inhomogeneous turbulent flow // Proc. Roy. Soc. Lond. — 1970. — Vol. A317. — P. 417—433.
113. *Wilcox D. C.* Formulation of the  $k$ - $\omega$  Turbulence Model Revisited // AIAA Journal. — 2008. — Vol. 46, no. 11. — P. 2823—2838.
114. *Menter F. R.* Zonal Two Equation  $k$ - $\omega$  Turbulence Models for Aerodynamic Flows // AIAA Paper. — 1993. — No. 93—2906. — P. 21.
115. *Rotta J.* Statistische Theorie nichthomogener Turbulenz // Zeitschrift fur Physik. — 1951. — Vol. 129, issue 6. — P. 547—572.

116. *Deardorff J. W.* A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds numbers // *Journal of Fluid Mechanics*. — 1970. — Vol. 41, issue 2. — P. 453—480.
117. *Spalart P. R., Jou W.-H., Strelets M., Allmaras S.* Comments on the feasibility of LES for wings, and on a hybrid RANS/LES approach // *Proc. of First AFOSR International Conference on DNS/LES*. Ruston, Louisiana: Greyden Press. — 1997. — P. 137—147.
118. *Хайпер Э., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. Пер. с англ. — М.: Мир, 1999. — С. 685.
119. *Curtis A. R.* Solution of large stiff initial value problems - the state of the art // *Numerical Software - Need and Availability* / ed. by D. Jacobs. — Academic Press, New York, 1978. — P. 257—278.
120. *Gear C. W.* Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations. — Upper Saddle River, NJ, USA : Prentice Hall PTR, 1971.
121. *Самарский А. А., Гулин А.* Численные методы: Учеб. пособие для вузов. — М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит., 1989. — 432 с.
122. *May R., Noye J.* The Numerical Solution of Ordinary Differential Equations: Initial Value Problems // *Computational Techniques for Differential Equations*. Vol. 83 / ed. by J. Noye. — North-Holland, 1984. — P. 1—94. — (North-Holland Mathematics Studies).
123. *Полак Л. С., Гольденберг М. Я., Левицкий А. А.* Вычислительные методы в химической кинетике. — М.: Наука, 1984.
124. *Oran E. S., Boris J. P.* Numerical Simulation of Reactive Flow. — 1st ed. — Elsevier, 1987.
125. *Rosenbrock H. H.* Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // *The Computer Journal*. — 1963. — Vol. 5, issue 4. — P. 329—330.
126. *Новиков Е. А.* L-устойчивый (4,2)-метод четвертого порядка для решения жестких задач // *Вестник СамГУ – Естественнонаучная серия*. — 2011. — 8(89). — С. 59—68.

127. *Kee R. J., Rupley F. M., Miller J. A., Coltrin M. E., Grcar J. F., Meeks E., Moffat H. K., Lutz A. E., Dixon-Lewis G., Smooke M. D., Warnatz J., Evans G. H., Larson R. S., Mitchell R. E., Petzold L. R., Reynolds W. C., Caracotsios M., Stewart W. E., Glarborg P., Wang C., Adigun O.* CHEMKIN Collection, Release 3.6, Reaction Design, Inc., San Diego, CA. — 2000.
128. *Marinov N. M., Pitz W. J., Westbrook C. K., Hori M., Matsunaga N.* An Experimental and Kinetic Calculation of the Promotion Effect of Hydrocarbons on the NO-NO<sub>2</sub> Conversion in a Flow Reactor // Proceedings of the Combustion Institute. Vol. 27. — 1998. — P. 389—396.
129. *Kee R. J., Rupley F. M., Meeks E., Miller J. A.* CHEMKIN-III: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical and Plasma Kinetics, Sandia National Laboratories Report. — 1996.
130. *Burcat A.* Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion. Report TEA867. — 2001.
131. *Frassoldati A., Cuoci A., Faravelli T., Ranzi E., Candusso C., Tolazzi D.* Simplified kinetic schemes for oxy-fuel combustion // 1<sup>st</sup> International Conference on Sustainable Fossil Fuels for Future Energy – S4FE. — 2009.
132. *Maas U., Warnatz J.* Ignition processes in hydrogen-oxygen mixtures // Combustion and Flame. — 1988. — Vol. 74, no. 1. — P. 53—69.
133. *Maas U., Pope S. B.* Simplifying chemical kinetics: Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space // Combustion and Flame. — 1992. — Vol. 88, no. 3. — P. 239—264.
134. *Li J., Zhao Z., Kazakov A., Dryer F. L.* An updated comprehensive kinetic model of hydrogen combustion // International Journal of Chemical Kinetics. — 2004. — Vol. 36, issue 10. — P. 566—575.
135. *Heghes C. I.* C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> Hydrocarbon Oxidation Mechanism : PhD thesis / Heghes Crina I. — Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2006.
136. *Hong Z.* An improved hydrogen/oxygen mechanism based on shock tube/laser absorption measurements : PhD thesis / Hong Zekai. — Stanford University, 2010.
137. *Williams F. A.* Short Chemical Mechanisms for Deflagrations and Detonations // WSS/CI 2004 SPRING MEETING: PAPERS. — 2004.

138. *Lissianski V. V., Zamansky V. M., Gardiner Jr. W. C.* Combustion Chemistry Modeling // Gas-Phase Combustion Chemistry / ed. by J. Gardiner W.C. — Springer-Verlag, New York, 2000. — P. 1—123.
139. *Connaire M. O., Curran H. J., Simmie J. M., Pitz W. J., Westbrook C. K.* A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation // International Journal of Chemical Kinetics. — 2004. — Vol. 36, issue 11. — P. 603—622.
140. *Kalitzin G., Medic G., Iaccarino G., Durbin P.* Near-wall behavior of RANS turbulence models and implications for wall functions // Journal of Computational Physics. — 2005. — Vol. 204, no. 1. — P. 265—291.
141. *Bredberg J., Peng S.-H., Davidson L.* On the wall boundary condition for computing heat transfer with  $k - \omega$  models // Proceedings of the ASME Heat Transfer Division, Nov 5-10, 2000, Orlando, Florida, USA. Vol. 5. — 2000. — P. 243—250.
142. *Jiang G., Tadmor E.* Nonoscillatory Central Schemes for Multidimensional Hyperbolic Conservation Laws // SIAM Journal on Scientific Computing. — 1998. — Vol. 19, no. 6. — P. 1892—1917.
143. *Nessyahu H., Tadmor E.* Non-oscillatory central differencing for hyperbolic conservation laws // Journal of Computational Physics. — 1990. — Vol. 87, no. 2. — P. 408—463.
144. *Lax P. D.* Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation // Communications on Pure and Applied Mathematics. — 1954. — Vol. 7, no. 1. — P. 159—193.
145. *Friedrichs K. O.* Symmetric hyperbolic linear differential equations // Communications on Pure and Applied Mathematics. — 1954. — Vol. 7, no. 2. — P. 345—392.
146. *Friedrichs K. O., Lax P. D.* Systems of Conservation Equations with a Convex Extension // Proceedings of the National Academy of Sciences. — 1971. — Vol. 68, no. 8. — P. 1686—1688.
147. *Kurganov A., Tadmor E.* New High-Resolution Central Schemes for Non-linear Conservation Laws and Convection–Diffusion Equations // Journal of Computational Physics. — 2000. — Vol. 160, no. 1. — P. 241—282.



148. *Kurganov A., Levy D.* A Third-Order Semidiscrete Central Scheme for Conservation Laws and Convection-Diffusion Equations // SIAM Journal on Scientific Computing. — 2000. — Vol. 22, no. 4. — P. 1461—1488.
149. *Guarendi A. N., Chandy A. J.* Nonoscillatory Central Schemes for Hyperbolic Systems of Conservation Laws in Three-Space Dimensions // The Scientific World Journal. — 2013. — Vol. 2013. — P. 14.
150. *Gottlieb S., Shu C., Tadmor E.* Strong Stability-Preserving High-Order Time Discretization Methods // SIAM Review. — 2001. — Vol. 43, no. 1. — P. 89—112.
151. *Флетчер К.* Вычислительные методы в динамике жидкостей. В 2-х томах. — М.: Мир, 1991. — С. 1056.
152. *Toro E. F.* Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics. — 3rd ed. — Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009. — P. 724.
153. *Liska R., Wendroff B.* Comparison of Several Difference Schemes on 1D and 2D Test Problems for the Euler Equations // SIAM Journal on Scientific Computing. — 2003. — Vol. 25, no. 3. — P. 995—1017.
154. *Woodward P., Colella P.* The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks // Journal of Computational Physics. — 1984. — Vol. 54, no. 1. — P. 115—173.
155. *Noh W.* Errors for calculations of strong shocks using an artificial viscosity and an artificial heat flux // Journal of Computational Physics. — 1987. — Vol. 72, no. 1. — P. 78—120.
156. *Поздняков З. Г., Росси Б. Д.* Справочник по промышленным взрывчатым веществам и средствам взрыва. Изд. 2, перераб. и доп. — М.: Недра, 1977. — С. 253.
157. *Орлова Е. Ю.* Химия и технология бризантных взрывчатых веществ. Учебник для вузов. 3-е изд., перераб. — Л.: Химия, 1981. — С. 312.
158. OpenMP Application Programming Interface. Version 5.0 November 2018. — 2018.
159. *Антонов А. С.* Параллельное программирование с использованием технологии OpenMP: Учебное пособие. — М.: Изд-во МГУ, 2009. — С. 77.

160. *Рыбакин Б.* Численные методы для многопроцессорных ЭВМ. — Чл.: СЕР USM, 2008. — 337 с.
161. CUDA C PROGRAMMING GUIDE. v10.1. March 2019. — 2019.
162. CUDA Fortran Programming Guide and Reference. Version 2014. — 2014.
163. *Рыбакин Б. П.* Параллельное программирование для графических ускорителей. — М.: ООО «Фирма Филомат», 2011. — 262 с.
164. *Сандерс Д., Кэндрот Э.* Технология CUDA в примерах. Введение в программирование графических процессоров. — М.: ДМК Пресс, 2011. — С. 232.
165. *Рутм Г., Фатика М.* CUDA Fortran для ученых и инженеров. — М.: ДМК Пресс, 2014. — С. 364.
166. *Martynenko V. V., Penyazkov O. G., Ragotner K. A., Shabunya S. I.* High-Temperature Ignition of Hydrogen and Air at High Pressures Downstream of the Reflected Shock Wave // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. — 2004. — July. — Vol. 77, no. 4. — P. 785—793.
167. *Penyazkov O., Ragotner K., Dean A., Varatharajan B.* Autoignition of propane-air mixtures behind reflected shock waves // Proceedings of the Combustion Institute. — 2005. — Vol. 30, no. 2. — P. 1941—1947.

## Список рисунков

|      |  |    |
|------|--|----|
| 3.1  | Результаты расчета для теста №1. Плотность (левый график) и давление (правый график). . . . .  | 72 |
| 3.2  | Результаты расчета для теста №2. Плотность (левый график) и давление (правый график). . . . .  | 72 |
| 3.3  | Результаты расчета для теста №4. Плотность (левый верхний график), давление (правый верхний график), скорость (левый нижний график) и энергия (правый нижний график). . . . .  | 73 |
| 3.4  | Результаты расчета для теста №5. Плотность (левый верхний график), давление (правый верхний график), скорость (левый нижний график) и энергия (правый нижний график). . . . .  | 74 |
| 3.5  | Результаты расчета для тестов №6 (верхний ряд), №7 (средний ряд) и №8 (нижний ряд). Слева представлены графики плотности, справа графики давления. . . . .   | 75 |
| 3.6  | Результаты расчета для теста №9. Плотность (левый график) и давление (правый график). . . . .  | 76 |
| 3.7  | Результаты расчета для теста №10. Плотность (левый график) и давление (правый график). . . . .   | 76 |
| 3.8  | Распределение давления по центру расчетной области в плоскости $Oxy$ для некоторых моментов времени для сетки $260 \times 26 \times 26$ . . . .  | 78 |
| 3.9  | Профили давления по оси $Ox$ по центру системы для моментов времени: 1 — 50 мск, 2 — 100 мск, 3 — 150 мск, 4 — 200 мск, 5 — 250 мск; 6 — давление Чепмена—Жуге; 7 — давление в пике Неймана. Сетка $260 \times 26 \times 26$ . . . . . | 79 |
| 3.10 | Распределение давления по центру расчетной области в плоскости $Oxy$ для некоторых моментов времени для сетки $500 \times 50 \times 50$ . . . .  | 80 |
| 3.11 | Профили давления по оси $Ox$ по центру системы для моментов времени: 1 — 50 мск, 2 — 100 мск, 3 — 150 мск, 4 — 200 мск, 5 — 250 мск; 6 — давление Чепмена—Жуге; 7 — давление в пике Неймана. Сетка $500 \times 50 \times 50$ . . . . . | 80 |
| 3.12 | Распределение давления по центру расчетной области в плоскости $Oxy$ для некоторых моментов времени для сетки $2000 \times 200 \times 200$ . .   | 81 |

|      |   |    |
|------|---|----|
| 3.13 | Профили давления по оси $Ox$ по центру системы для моментов времени: 1 — 50 мкс, 2 — 100 мкс, 3 — 150 мкс, 4 — 200 мкс, 5 — 250 мкс; 6 — давление Чепмена—Жуге; 7 — давление в пике Неймана. Сетка $2000 \times 200 \times 200$ . . . . .           | 82 |
| 3.14 | Распределение температуры по центру расчетной области в плоскости $Oxy$ для некоторых моментов времени для сетки $2000 \times 200 \times 200$ . . . . .   | 83 |
| 3.15 | Распределение поперечной компоненты скорости по центру расчетной области в плоскости $Oxy$ для некоторых моментов времени для сетки $2000 \times 200 \times 200$ . . . . .  | 84 |
| 3.16 | Распределение массовой доли радикала $\text{HO}_2$ по центру расчетной области в плоскости $Oxy$ для некоторых моментов времени для сетки $2000 \times 200 \times 200$ . . . . .  | 85 |
| 3.17 | Распределение давления по центру расчетной области в плоскости $Oxy$ в момент времени $t = 50$ мкс для сеток $260 \times 26 \times 26$ , $500 \times 50 \times 50$ , $1000 \times 100 \times 100$ и $2000 \times 200 \times 200$ (сверху-вниз). . . | 86 |
| 3.18 | Профиль массовой доли всех химических компонентов вдоль центральной оси $Ox$ в момент времени $t = 100$ мкс для различных расчетных сеток. . . . .  | 87 |
| 3.19 | Профиль массовой доли всех химических компонентов вдоль центральной оси $Ox$ в момент времени $t = 100$ мкс для различных расчетных сеток. . . . .  | 88 |
| 3.20 | Динамика скорости волны детонации для различных расчетных сеток. Пурпурным цветом отмечена скорость детонации Чепмена—Жуге. . . . .   | 89 |
| 3.21 | Динамика значения пика давления в волне детонации для различных расчетных сеток. Пурпурным цветом отмечено теоретическое значение давления в волне Чепмена—Жуге, черным — давление в пике Неймана. . . . .  | 90 |
| 3.22 | Графики ускорения расчетов, полученные на графическом сопроцессоре по сравнению с последовательным кодом без учета химических реакций (левый график) и с их учетом (правый график), в зависимости от размера разностной сетки. . . . .              | 92 |

|      |   |     |
|------|---|-----|
| 3.23 | Графики ускорения расчетов, полученные на графических сопроцессорах по сравнению с последовательным кодом (левый график) и с относительно одной графической карты (правый график), в зависимости от размера разностной сетки. . . . .                 | 93  |
| 3.24 | График времени расчета в зависимости от размера разностной сетки в логарифмическом масштабе. . . . .  | 94  |
| 3.25 | Графики времени (левый, логарифмический масштаб) и ускорения (правый) расчетов, полученные на многопроцессорной системе АПК-1, в зависимости от количества используемых потоков. . . . .  | 95  |
| 3.26 | График эффективности ускорения в зависимости от количества используемых потоков. . . . .  | 96  |
| 4.1  | Схема рассматриваемой задачи. . . . .   | 98  |
| 4.2  | Чертеж измерительной секции для экспериментов по исследованию фокусировки в водородно-воздушных смесях. Синим цветом изображены высокочастотные датчики давления. Красным — ионизационные датчики. Все расстояния представлены в миллиметрах. . . . . | 100 |
| 4.3  | Распределение давления по центру расчетной области в плоскости $Oxy$ (слева) и $Oxz$ плоскости (справа) для некоторых моментов времени. Случай детонации в клине. . . . .   | 101 |
| 4.4  | Распределение давления по центру расчетной области в плоскости $Oxy$ (слева) и плоскости $Oxz$ (справа) для некоторых моментов времени. Случай детонации в клине. . . . .   | 102 |
| 4.5  | Распределение температуры по центру расчетной области в плоскости $Oxy$ (слева) и $Oxz$ плоскости (справа) для некоторых моментов времени. Случай детонации в клине. . . . .  | 104 |
| 4.6  | Распределение скорости вдоль оси $x$ по центру расчетной области в плоскости $Oxy$ (слева) и $Oxz$ плоскости (справа) для некоторых моментов времени. Случай детонации в клине. . . . .   | 106 |
| 4.7  | Распределение массовой доли радикала $\text{HO}_2$ по центру расчетной области в плоскости $Oxy$ (слева) и $Oxz$ плоскости (справа) для некоторых моментов времени. Случай детонации в клине. . . . .   | 107 |

- 4.8 Давление (в барах) в контрольных точках (датчиках) в зависимости от времени: экспериментальные данные (красная линия), численная схема 1 (синяя линия) и численная схема 2 (черная линия). Случай детонации в клине. . . . . 108
- 4.9 Скорость распространения волны около датчиков: экспериментальные данные (красная линия), численная схема 1 (синяя линия), численная схема 2 (черная линия) и теоретическая скорость детонации Чепмена—Жуге (бирюзовая прямая). Случай детонации в клине. . . . . 108
- 4.10 Распределение давления по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  для некоторых последовательных моментов времени (слева направо, сверху вниз). Случай детонации в конусе. . . . . 110
- 4.11 Распределение температуры по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  для некоторых моментов времени. Случай детонации в конусе. . . . . 112
- 4.12 Распределение скорости вдоль оси  $x$  по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  для некоторых моментов времени. Случай детонации в конусе. . . . . 113
- 4.13 Распределение массовой доли радикала  $\text{HO}_2$  по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  для некоторых моментов времени. Случай детонации в конусе. . . . . 114
- 4.14 Давление (в барах) в контрольных точках (датчиках) в зависимости от времени: экспериментальные данные (красная линия), численная схема 1 (синяя линия) и численная схема 2 (черная линия). Случай детонации в конусе. . . . . 115
- 4.15 Скорость распространения волны около датчиков: экспериментальные данные (красная линия), численная схема 1 (синяя линия), численная схема 2 (черная линия) и теоретическая скорость детонации Чепмена—Жуге (бирюзовая прямая). Случай детонации в конусе. . . . . 115
- 4.16 Распределение давления по центру расчетной области в плоскостях  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  (справа) для некоторых последовательных моментов времени. Случай отражения ударной волны от клина. . . . 117

- 4.17 Распределение давления по центру расчетной области в плоскостях  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  (справа) для некоторых последовательных моментов времени. Случай отражения ударной волны от клина. . . . 118
- 4.18 Давление (в барах) в контрольных точках (датчиках) в зависимости от времени: экспериментальные данные (красная линия), численная схема 1 (синяя линия) и численная схема 2 (черная линия). Случай отражения ударной волны от клина. . . . 119
- 4.19 Скорость распространения волны около датчиков: экспериментальные данные (красная линия), численная схема 1 (синяя линия), численная схема 2 (черная линия). Случай отражения ударной волны от клина. . . . . 119
- 4.20 Распределение давления по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию. . . . . 121
- 4.21 Распределение давления по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и плоскости  $Oxz$  (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию. . . . . 122
- 4.22 Распределение температуры по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию. . . . . 124
- 4.23 Распределение температуры по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию. . . . . 125
- 4.24 Модуль градиента плотности по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию. . . . . 127
- 4.25 Модуль градиента плотности по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию. . . . . 128

- 4.26 Распределение скорости вдоль оси  $x$  по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию. . . . . 130
- 4.27 Распределение скорости вдоль оси  $x$  по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию. . . . . 131
- 4.28 Распределение массовой доли радикала  $\text{HO}_2$  по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию. . . . . 132
- 4.29 Распределение массовой доли радикала  $\text{HO}_2$  по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию. . . . . 133
- 4.30 Распределение кинематической турбулентной вязкости (в  $\text{м}^2/\text{с}$ ) по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) в логарифмическом масштабе для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию. . . . . 134
- 4.31 Распределение кинематической турбулентной вязкости (в  $\text{м}^2/\text{с}$ ) по центру расчетной области в плоскости  $Oxy$  (слева) и  $Oxz$  плоскости (справа) в логарифмическом масштабе для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию. . . . . 135
- 4.32 Давление в контрольных точках в зависимости от времени: экспериментальные данные (красная линия), численная схема 1 (синяя линия). Случай перехода горения в детонацию. . . . . 137
- 4.33 Скорость распространения волны около датчиков: экспериментальные данные (красная линия), численная схема 1 (синяя линия) и теоретическая скорость детонации Чепмена—Жуге (бирюзовая прямая). Случай перехода горения в детонацию. . . . . 137



- 4.34 Положение фронта ударной и детонационной волн (синие кривые) для случая перехода горения в детонацию и давление в контрольных точках (красные кривые) для результатов численного моделирования (слева) и физического эксперимента (справа). . . . 138

## Список таблиц

|   |   |    |
|---|---|----|
| 1 | Состав горючей смеси. . . . .   | 35 |
| 2 | Коэффициенты для расчета термодинамических функций горючей смеси, полученные регрессивным анализом зависимостей [128] для интервала температур [250, 5000] К. . . . . | 35 |
| 3 | Используемый кинетический механизм горения водорода. Единицы измерения: см, с, моль, К. . . . .   | 41 |
| 4 | Коэффициенты Шаперона в используемом кинетическом механизме. Для прочих компонент коэффициенты полагаются равными 1.0. . . . .  | 41 |
| 5 | Начальные условия для задачи Римана. . . . .  | 71 |
| 6 | Время исполнения на графическом процессоре NVidia Tesla k40 при использовании различных разносных сеток. . . . .  | 95 |
| 7 | Начальные условия для рассмотренных случаев. . . . .  | 99 |