

На правах рукописи

Мартюшов Сергей Николаевич

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЗАДАЧАХ
ГОРЕНИЯ И ДИФРАКЦИИ УДАРНЫХ ВОЛН.
АЛГОРИТМЫ НА ОСНОВЕ МЕТОДА КОНЕЧНОГО
ОБЪЕМА**

05.13.18 - математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени доктора физико-
математических наук

Новосибирск – 2011

Работа выполнена в Учреждении Российской академии наук Институте
вычислительных технологий Сибирского отделения РАН

Научный консультант: доктор физико-математических наук, профессор
академик РАН,
Шокин Юрий Иванович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Куропатенко Валентин
Федорович

доктор физико-математических наук,
профессор Хакимзянов Гаяз Салимович

доктор физико-математических наук,
профессор Баутин Сергей Петрович

Ведущая организация: Государственный научный центр
Российской Федерации – Федеральное
государственное унитарное предприятие
«Центральный институт авиационного
моторостроения им. П.И.Баранова»

Защита состоится « 1 » февраля 2012 г. в 15-00 часов на заседании
диссертационного совета ДМ 003.046.01 по защите диссертаций на соискание
ученой степени доктора наук при Учреждении Российской академии наук
Институте вычислительных технологий Сибирского отделения РАН по
адресу 630090, Новосибирск, проспект Академика М.А. Лаврентьева, 6
(dsomet@ict.nsc.ru).

С диссертацией можно ознакомиться в специализированном читальном зале
вычислительной математики и информатики ГПНТБ СО РАН.

Автореферат разослан «26» декабря 2011 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
доктор физико-математических наук



Л.Б.Чубаров

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. К числу задач газовой динамики, которые традиционно исследуются методами численного моделирования, относятся задачи инициации и распространения детонационных волн в реагирующей газовой среде. Причина этого в том, что механизм возникновения и распространения детонации, перехода горения в детонацию сложен и до конца не изучен, несмотря на значительный объем натуральных экспериментов.

Источником получения новой информации о детонационных и дифракционных явлениях в газовых смесях являются лабораторные эксперименты, однако инструментальные измерения в условиях быстропротекающих процессов с огромными перепадами плотности, давления и температуры характеризуются сложностью подготовки, дороговизной и трудоемкостью их проведения. Поэтому в настоящее время возрастающую роль при исследовании газодинамических течений со сложной динамически меняющейся структурой приобретает метод вычислительного эксперимента, для успешной реализации которого вместе с созданием адекватных математических моделей необходима разработка экономичных численных алгоритмов с высокой разрешающей способностью и программного обеспечения расчета и обработки его результатов.

Этой актуальной в научном и практическом плане теме – выбору и анализу математической модели течений горения и детонации, конструированию новых конечно-объемных TVD-схем с высокой разрешающей способностью, построению на их основе алгоритмов численного решения жестких систем уравнений гиперболического типа с источниками членами, разработке алгоритмов конструирования криволинейных эллиптических структурированных сеток, созданию научно-исследовательских комплексов прикладных программ и применению разработанных методик для решения важных для приложений многомерных

задач быстрого горения газовых смесей и дифракции ударных волн в каналах сложной конфигурации посвящена диссертационная работа.

При конструировании численных алгоритмов автором были проведены исследования математических моделей нескольких уровней. На первом уровне сравнивались математические модели физических процессов горения и детонации, начиная с наиболее простой одностадийной модели – гипотезы Аррениуса о виде зависимости концентрации одной горючей компоненты. Далее автором была выбрана достаточно простая двухстадийная математическая модель горения и детонации, учитывающая, однако, период накопления в реагирующей смеси радикалов (период индукции) и наличие обратных реакций по образованию реагирующих компонент. Разработанные автором численные алгоритмы могут без изменения быть использованы для математических моделей многокомпонентных реагирующих газовых смесей с полной цепочкой кинетических уравнений. Данные модели и алгоритмы описаны в главе 2 диссертации. В дальнейшем автор предполагает совершить такой переход и модернизировать разработанные программы для математических моделей многокомпонентных реагирующих сред.

Вторым уровнем определения математической модели был выбор автором метода конечного объема и последовательная его реализация в разработанных алгоритмах. Конечно-объемная аппроксимация, основанная на прямой аппроксимации законов сохранения, имеет ряд преимуществ перед конечно-разностной аппроксимацией, основным из которых является точное выполнение в процессе сквозного счета законов сохранения на сильных разрывах: ударных и детонационных волнах, фронтах горения. Сравнение конечно-объемного и конечно-разностного подхода в численном моделировании, проведенное в главе 4 работы, имеет принципиальный характер, реализация численных алгоритмов может представлять собой некий компромисс между этими двумя подходами. Автор поставил своей целью реализацию разработанных алгоритмов последовательно в рамках метода конечного объема.

Наконец, при реализации численного алгоритма была выбрана математическая модель в виде системы уравнений эллиптического типа со специальными правыми частями для конструирования расчетных сеток. Вид контрольных функций (правых частей системы уравнений) для трехмерного случая предложен автором.

Целью работы являются

- разработка численных алгоритмов для проведения вычислительного эксперимента в задачах горения и детонации и дифракции ударных волн путем использования последовательно усложняющихся моделей течений горения и детонации на основе применения современных численных схем и методов;

- создание алгоритмов и программ построения эллиптических двух- и трехмерных структурированных сеток, в том числе блочных;

- создание на основе этих методов программ, позволяющих проводить численные исследования в рамках моделей горения и детонации, организации на основе созданных программ долговременного комплекса программ для научных исследований, адаптирующегося под новые классы задач и используемой вычислительной техники.

Достоверность полученных результатов вытекает из использования разностных схем и алгоритмов, являющихся модификациями известных разностных схем и алгоритмов, прошедших всестороннее теоретическое тестирование и проверенных в многочисленных работах различных авторов. Полученные результаты соответствуют общепринятым представлениям об особенностях течений газовых смесей с горением и детонацией и газодинамических течений дифракции ударных волн.

Научная новизна.

В диссертации предлагаются разработанные автором модификации разностных схем Хартена и метода коррекции потоков, а также реализация схемы Чакраварти-Ошера совместно с временной аппроксимацией по методу Рунге-Кутты для численного моделирования течений горения и детонации.

Автором разработан алгоритм расщепления по физическим процессам газовой динамики и кинетики, сохраняющий полную консервативность и порядок аппроксимации алгоритма в целом. Эти модификации известных разностных схем и разработанные на их основе численные алгоритмы являются новыми.

Предложенные автором алгоритмы построения двух и трехмерных эллиптических сеток ко времени их разработки являлись новыми. Алгоритм конструирования блочных структурированных сеток с сохранением свойства гладкости сеточных линий является новым.

Созданный на основе этих алгоритмов комплекс программ на момент создания являлся новым. Этот комплекс позволяет проводить численные исследования широкого круга задач горения и детонации реагирующих газовых смесей, дифракции ударных волн, и является перспективным для дальнейшего развития.

Практическая значимость результатов исследований, вошедших в диссертационную работу, определяется возможностью использования созданных автором алгоритмов и комплекса программ для исследования различных задач газовой динамики, в особенности, крайне актуальных для современной экономики и недостаточно изученных задач с детонацией газовых смесей, численном моделировании течений в детонационных водородных двигателях и задач с прогнозированием возникновения и развития аварийных ситуаций на промышленных объектах.

Идея энергетического использования детонационного горения начала разрабатываться в 40-гг. прошлого века. Я.Б. Зельдович [1] впервые указал на то, что детонационное сгорание топлива способствует более эффективному использованию энергии сжигаемого топлива.

Одним из преимуществ водорода по сравнению в обычными видами топлива является широкий диапазон детонационных режимов его горения . Использование водорода в качестве экологически чистого вторичного энергоносителя, аккумулятора энергии и топлива в энергетике и транспорте

будущего является одним из наиболее вероятных сценариев развития энергетики. Концепция водородной энергетики возникла в 70-х годах прошлого века как естественная реакция на надвигающуюся "экологическую катастрофу" и на ограниченность мировых запасов углеводородного топлива.

В последние годы за рубежом, в первую очередь в США, в Японии, странах ЕЭС, развернуты крупномасштабные исследовательские работы по применению водорода в качестве альтернативного топлива, создаются структуры управления, выделяются необходимые средства для масштабных исследований. В Российской Федерации, благодаря исследованиям 70-80 - х годов прошлого века, существует серьезный задел научных и конструкторско-технологических разработок в области водородных технологий. Энергетической стратегией РФ до 2030 г. предусмотрено создание систем производства водорода за счет энергии АЭС и ТЭС, и создание систем водородного аккумулирования электроэнергии на АЭС и ТЭС. Использование водорода в качестве моторного топлива требует решения трех основных проблем: энергетически выгодного получения дешевого водорода, безопасного хранения и транспортировки больших объемов водорода и конструирования перспективных конструкций водородных двигателей. Одним из перспективных решений третьей проблемы, наряду с использованием топливных элементов, является разработка детонационных двигателей.

В соответствии с изложенным результаты предлагаемой работы по численному моделированию работы детонационных двигателей и моделированию аварийных ситуаций, связанных со взрывами водорода, служат выработке будущих технологических решений в области водородной энергетики, внедрение которых должно внести значительный вклад в развитие энергетики и экономики страны в целом.

Представление результатов.

Результаты диссертации докладывались на следующих конференциях:

Всесоюзной конференции "Теоретические основы конструирования алгоритмов задач математической физики", Горький, 1986 г., конференции "Фундаментальные проблемы физики ударных волн", Черногловка, 1988 г., Школе по комплексам программ Красноярск, ИВТ Красноярского НЦ СО АН СССР, 1990 г., Всесоюзной конференции "Актуальные задачи прикладной математики", Саратовский ун-т, Саратов 1991 г., конференции "Вычислительные технологии" Ростовский университет, Ростов -на Дону 1992 г., Третьем российско-японском симпозиуме по вычислительной гидродинамике, Владивосток 1992 г., 15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics Berlin 1997 г., 6-th International Conference Grid generation in Computational Field Simulation, University of Greenwich, 1998 г., 2-м Всероссийском семинаре «Сеточные методы для краевых задач и приложения», Казань 1998 г., 5-м Всероссийском семинаре «Сеточные методы для краевых задач и приложения», Казань, 2004 г., Международной конференции «Вычислительные и информационные технологии в науке, технике и образовании» 2004 г. Алматы, Международной конференции «Вычислительные и информационные технологии в науке, технике и образовании» 2008 г. Алматы, Казахстан, Third International Conference on Finite Difference methods: Theory and Applications, Rouse, Bulgaria, 2006 г., Fourth Conference on Numerical Analysis and Application, Rouse, Bulgaria, 2008 г., Международной конференции МИТ-2009 "Математические и информационные технологии" Копаоник, Сербия 2009 г., 27 International Symposium on Shock Waves – Москва 2009 г., 22 International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems – Минск 2009 г., 19-th International Shock Interaction Symposium – Москва 2010 г., Международной конференции «Современные проблемы прикладной математики и механики: теория, эксперимент и практика», посвященная 90-летию со дня рождения академика Н.Н.Яненко., 2011 г., 23 International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems – Los Angeles 2011 г.,

8-th Pacific Symposium on Flow Visualization and Image Processing. Moscow. 2011, Международной конференции МИТ-2011 "Математические и информационные технологии" Врнячка Баня, Сербия 2011 г.

Публикации. Результаты диссертации опубликованы в монографии, 8 статьях в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК, 7 статьях в реферируемых журналах и сборниках, 1 препринте, 6 полнотекстовых докладах на международных конференциях и 8 тезисах всероссийских и международных конференций.

Структура и объем работы.

Диссертация состоит из введения, 7 глав, заключения, приложения и перечня цитируемой литературы. Диссертация содержит 256 страниц, в общей сложности 54 рисунков и 3 таблицы. Список цитируемой литературы содержит 208 наименований.

Личный вклад автора. Основные результаты диссертации получены автором лично. Автор выражает глубокую признательность Мартюшовой Янине Германовне, супруге и соавтору, за помощь в подготовке и оформлении совместных работ.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Введение начинается с краткого обзора нелинейных разностных схем. Для решения нестационарных задач механики сплошной среды естественными преимуществами обладают разностные алгоритмы, основанные на моделировании распада разрыва - схемы типа Годунова (Godunov-type schemes в международной терминологии) высокого порядка аппроксимации, реализованные в рамках метода конечного объема. Наиболее перспективными среди существующих разностных схем сквозного счета являются нелинейные противопоточные методы повышенного (второго и выше) порядка аппроксимации, при построении которых так или иначе, используются характеристические свойства решаемой системы уравнений. Для обеспечения квазимонотонности решения подавляющее большинство этих схем построены с использованием принципа невозрастания полной

вариации решения, т.е. принадлежат к семейству TVD (Total variation diminishing). Последний термин, предложенный А. Хартемом, объединяет алгоритмы, которые, будучи примененными к решению нелинейных скалярных уравнений или систем уравнений с постоянными коэффициентами, обеспечивают невозрастание полной вариации численного решения; иными словами, исключают возможность как возникновения новых, так и усиления существующих экстремумов решения.

Далее во введении дается краткий обзор разностных методов и алгоритмов, используемых для численного моделирования течений горения и детонации в газовых смесях. Задачи инициации и распространения детонационных волн в реагирующей газовой среде относятся к числу задач газовой динамики, которые традиционно исследуются методами численного моделирования. Механизм возникновения и распространения детонации, перехода горения в детонацию и обратно сложен и до конца не изучен, несмотря на значительный объем натуральных экспериментов. Численные эксперименты в этих условиях служат для дополнения данных натуральных экспериментов и моделирования процесса там, где натурные измерения и визуализация затруднены.

Во введении обсуждается также развитие алгоритмов построения расчетных сеток. Сформулированы основные требования, предъявляемые к качеству расчетных сеток: гладкость или равномерность расчетной сетки, ортогональность или близость к ортогональности координатных сеточных линий, невырожденность и малая деформация ячеек (размеры ячеек в разных координатных направлениях должны быть близкими или соизмеримыми), адаптация расчетной сетки к виду расчетной области или особенностям решения основной задачи. Указывается, что приведенные критерии носят по существу противоречивый характер и удовлетворение этим критерием на практике является результатом компромисса, то есть искусства вычислителя.

Дается определение регулярных или структурированных и неструктурированных расчетных сеток.

Перечислены основные подходы к построению математических моделей, служащих для построения расчетных сеток:

- вариационный подход к построению расчетных сеток, заключающийся в прямой минимизации суммы нескольких функционалов, отвечающих за различные оптимальные свойства сеток;

- алгебраический подход, состоящий в использовании интерполяции граничных данных для расчета внутренних узлов сетки

- метод конформных и квазиконформных преобразований, переводящих криволинейную расчетную область в прямоугольную область в криволинейных координатах;

- дифференциальные (гиперболические, параболические и эллиптические) сетки, которые строятся на основе решения дифференциальных уравнений в частных производных;

Обсуждаются преимущества использования блочных сеток для проведения параллельных вычислений в областях сложной формы и различных геометрических размеров.

Обсуждаются проблемы и закономерности разработки комплексов и пакетов проблемно-ориентированных программ. Дается описание истории разработки комплекса программ, являющегося инструментом получения результатов, приведенных в диссертации.

В главе 1 работы приводится описание основных используемых в комплексе программ разностных алгоритмов. Изложены некоторые сведения из теории разностных схем, необходимые для понимания места указанных алгоритмов среди известных методов.

В § 1.1 излагаются основные положения теории TVD–схем и приводятся соображения, приведшие к разработке А. Хартемом его TVD схемы, являющейся обобщением схемы Годунова.

Исходная система уравнений идеального газа в интегральной форме может быть представлена в следующем виде:

$$d/dt \int_V \vec{U} dV + \oint_S \vec{n} \hat{F} dS = 0; \vec{U} = (\rho, \vec{m}, e); \hat{F} = (\vec{m}, (\vec{m}\vec{m})/\rho + H, \vec{m}(e+p)/\rho), \quad (1)$$

где V – величина контрольного объема; S – величина площади ограничивающей этот объем поверхности; \vec{U} – вектор консервативных переменных; $H = (0, \hat{E}P, 0)$; P – давление, ρ – плотность, $\vec{m} = (\rho u, \rho v)$ – вектор импульса, $e = \rho(\varepsilon + V^2/2)$, ε – полная и удельная энергия соответственно, \hat{E} – единичная матрица третьего порядка; \hat{F} – тензор потоков размерности 3×5 . Пусть $\vec{F} = \hat{F}\vec{n}$ – вектор потока в направлении нормали к грани контрольного объема в (1). Тогда $A = \partial \vec{F} / \partial \vec{U}$ – матрица Якобиана вектора $\vec{F} = \hat{F}\vec{n}$. Матрицы ее правых и левых собственных векторов и вектор собственных значений обозначим соответственно $\hat{R}, \hat{L}, \vec{\Lambda}$, $\vec{\Lambda} = (a_1, \dots, a_5)$.

Для реализации в рамках описываемого комплекса программ выбран α – вариант схемы Хартена, в рамках которой вектор потоков в направлении нормали к грани $\vec{F} = \hat{F}\vec{n}$ вычисляется по следующей схеме:

$$\vec{F}_{j+1/2} = 1/2(\vec{F}_j + \vec{F}_{j+1} + \sum_{l=1}^m \vec{R}_{j+1/2}^l [1/2\Psi(a_{j+1/2}^l)(g_j^l + g_{j+1}^l) - Q(a_{j+1/2}^l + \gamma_{j+1/2})\alpha_{j+1/2}^l]) \quad (2)$$

$$g_j^l = \text{limiter}(\alpha_{j+1/2}^l, \alpha_{j-1/2}^l), \quad \gamma_{j+1/2}^l = \begin{cases} \Psi(a_{j+1/2}^l)(g_{j+1}^l - g_j^l) / \alpha_{j+1/2}^l, & \alpha_{j+1/2}^l \neq 0; \\ 0, & \alpha_{j+1/2}^l = 0; \end{cases}$$

$$\Psi(z) = Q(z) - \lambda z^2; \quad Q(z) = \begin{cases} |z|, & |z| \geq \delta \\ (z^2 + \delta^2) / 2\delta, & |z| \leq \delta, \end{cases}$$

где $\alpha_{j+1/2}^l = \vec{L}_{j+1/2}^l (\vec{U}_{j+1} - \vec{U}_j)$, – вектор характеристических переменных в дельта-форме. В качестве операторов-ограничителей *limiter* использовались операторы *minmod* и *superbee*:

$$\text{minmod}(x, y) = \text{sgn}(x) \max[0, \min(|x|, y \text{sgn}(x))] \quad (3)$$

$$\text{superbee}(x, y) = \text{minmod}[\text{minmod}(2x, y), \text{minmod}(x, 2y)]. \quad (4)$$

Для определения газодинамических параметров на грани ячейки при вычислении потоков использовалось осреднение Ройе:

$$\tilde{\rho} = \sqrt{\rho_L \rho_R}; \quad \tilde{u} = \frac{\sqrt{\rho_L} u_L + \sqrt{\rho_R} u_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}; \quad \tilde{v} = \frac{\sqrt{\rho_L} v_L + \sqrt{\rho_R} v_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}; \quad \tilde{\varepsilon} = \frac{\sqrt{\rho_L} \varepsilon_L + \sqrt{\rho_R} \varepsilon_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}. \quad (5)$$

Автором предложены следующая модификация схемы Хартена (2).

1. Процедура осреднения Ройе (5) определяет значение скорости звука $c_{j+1/2}$ по осредненному значению энтальпии или внутренней энергии:

$$c_{j+1/2}^2 = (\gamma - 1) / 2 \cdot \alpha (1 - \alpha) (\vec{V}_{j+1} - \vec{V}_j)^2 + \alpha c_j^2 + (1 - \alpha) c_{j+1}^2, \quad (\alpha \in [0, 1]),$$

которое может лежать вне интервала $[c_j, c_{j+1}]$, что дает неверные значения собственных векторов, а вычисленные при этом собственные значения могут иметь другой знак в окрестности звуковых точек. В используемом в рамках комплекса варианте схемы Хартена эта возможность проверяется и в случае, когда $c_{j+1/2}$ оказывается вне интервала $[c_j, c_{j+1}]$, осреднение Ройе заменяется полусуммой газодинамических величин в центрах соседних ячеек.

2. При вычислении характеристических величин на грани $j+1/2$ по схеме Хартена используются геометрические и газодинамические величины из ячеек $j, j-1, j-2, j+1, j+2$ (пятиточечный шаблон). Для уменьшения влияния в схеме геометрических особенностей удаленных ячеек вместо характеристических величин $\alpha_{-1/2} = L_{-1/2} \Delta U_{-1/2}$, $\alpha_{1/2} = L_{1/2} \Delta U_{1/2}$, $\alpha_{3/2} = L_{3/2} \Delta U_{3/2}$ в описываемой реализации алгоритма используются псевдо – характеристические величины $\alpha_{-1/2} = L_{1/2} \Delta U_{-1/2}$, $\alpha_{1/2} = L_{1/2} \Delta U_{1/2}$, $\alpha_{3/2} = L_{1/2} \Delta U_{3/2}$.

В § 1.2 излагается второй используемый в комплексе программ TVD алгоритм Чакраварти–Ошера.

Семейство схем Чакраварти–Ошера, удовлетворяющих условию TVD имеет вид:

$$F_{m+1/2} = H_{m+1/2} + \sum_i \left(\frac{1+\delta}{4} \tilde{\alpha}_{1,m+1/2}^i + \frac{1-\delta}{4} \hat{\alpha}_{2,m+1/2}^i \right) \lambda_{m+1/2}^{i+} r_{m+1/2}^i - \sum_i \left(\frac{1+\delta}{4} \hat{\alpha}_{2,m+1/2}^i + \frac{1-\delta}{4} \tilde{\alpha}_{3,m+1/2}^i \right) \lambda_{m+1/2}^{i+} r_{m+1/2}^i, \quad (6)$$

$$\text{где} \quad \alpha_{1,m+1/2}^i = \vec{l}_{m+1/2}^i (\vec{Q}_m - \vec{Q}_{m-1}), \quad \alpha_{2,m+1/2}^i = \vec{l}_{m+1/2}^i (\vec{Q}_{m+1} - \vec{Q}_m),$$

$$\alpha_{3,m+1/2}^i = \vec{l}_{m+1/2}^i (\vec{Q}_{m+2} - \vec{Q}_{m+1}),$$

$$\hat{\alpha}_{1,m+1/2}^i = \text{minmod} \{ \alpha_{1,m+1/2}^i, b\alpha_{2,m+1/2}^i \}; \quad \tilde{\alpha}_{2,m+1/2}^i = \text{minmod} \{ \alpha_{2,m+1/2}^i, b\alpha_{1,m+1/2}^i \};$$

$$\hat{\alpha}_{2,m+1/2}^i = \text{minmod} \{ \alpha_{2,m+1/2}^i, b\alpha_{3,m+1/2}^i \}; \quad \tilde{\alpha}_{3,m+1/2}^i = \text{minmod} \{ \alpha_{3,m+1/2}^i, b\alpha_{2,m+1/2}^i \};$$

при этом $b = (3 - \delta) / (1 - \delta)$, а параметр δ определяет схемы различного порядка точности.

В § 1.3 излагается использовавшийся на начальном этапе разработки комплекса программ вариант метода коррекции потоков FCT (Flux Correction Transport). Автором была разработана модификация схемы FCT, предполагающая отдельную аппроксимацию неконвективной части тензора потоков, соответствующей шаровому (для невязкого газа) тензору напряжения, пропорциональному давлению.

Алгоритм для расчета оператора шага по времени $L_i(\Delta t)$, аппроксимирующего систему (1), имеет вид [10–13,17]:

1) этап предиктора

$$\tilde{U}_i = (U_i^n \text{Vol}^n - \Delta t (F_i^n \vec{S}_{i+1/2}^n - F_{i-1}^n \vec{S}_{i-1/2}^n)) / \text{Vol}^{n+1} - (B_i^n - B_{i-1}^n) \vec{T}_{i-1/2}^n; \quad (7)$$

2) этап корректора

$$U_i^{n+1} = ((\tilde{U}_i \text{Vol}^{n+1} + U_i^n \text{Vol}^n - \Delta t (\tilde{F}_{i+1}^n \vec{S}_{i+1/2}^{n+1} - \tilde{F}_i^n \vec{S}_{i-1/2}^n)) / \text{Vol}^{n+1} - (B_i^n - B_{i-1}^n) \vec{T}_{i-1/2}^n); \quad (8)$$

где $\vec{B} = P(0, \vec{i}_x, \vec{i}_y, \vec{i}_z, 0)$; $\vec{T}_{i+1/2}^n = \vec{\tau}_{i+1/2}^n \Delta t / \alpha_{i+1/2}^n$ – конечноразностная

аппроксимация неконвективной части вектора потоков,

$\alpha_{i+1/2}^n = 4 / ((S_{i+3/2}^n + S_{i-1/2}^n) / \text{Vol}_{i+1}^n + (S_{i+1/2}^n + S_{i-1/2}^n) / \text{Vol}_i^n)$, $\vec{\tau}_{i+1/2}^n$ – направление координатной линии в центре грани $S_{i+1/2}^n$;

3) на этапе сглаживания на криволинейной сетке вводятся весовые множители к значениям диффузионных потоков:

$$\phi_{i+1/2} = 2q\delta U_{i+1/2} S_{i+1/2}^n / (S_{i+1/2}^n + S_{i-1/2}^n) \quad (9)$$

Алгоритм применялся автором в 80-х, – начале 90-х годов прошлого столетия для численного моделирования двумерного секториального распада разрыва [10–13,17] и для расчета дифракции ударных волн на летящих

осесимметричных телах со стабилизаторами в широком диапазоне геометрий и параметров потока [10–17,24].

В § 1.4 излагаются применявшиеся при построении явных численных алгоритмов методы дискретизации по времени: метод переменных направлений и явный метод Рунге-Кутты. Областью применения рассматриваемых в работе алгоритмов и программ являлись нестационарные течения газовой динамики (в первую очередь для реагирующих смесей газов), поэтому был сделан выбор использования явных вариантов разностных алгоритмов. Преимущество неявных схем – большой шаг по времени – в данном случае не может быть реализовано, так как величина расчетного шага по времени определяется скоростью распространения возмущений в нестационарной задаче и не может быть выбрана большой без потери информации о нестационарной структуре течения.

Метод переменных направлений, сохраняющий второй порядок точности по времени, может быть представлен в виде оператора двойного шага по времени, который расщепляется на симметричную последовательность операторов шага в координатном направлении:

$$\overrightarrow{U_{ijk}^{n+2}} = L_i(\Delta t)L_j(\Delta t)L_k(\Delta t)L_k(\Delta t)L_j(\Delta t)L_i(\Delta t)\overrightarrow{U_{ijk}^n}; \quad (10)$$

где $L_j(\Delta t)$ – оператор шага в направлении, имеющий второй порядок точности по времени, $\overrightarrow{U_{ijk}^{n+2}}$ – значения газодинамических переменных на $n+2$ шаге по времени.

При разбиении расчетной области на отдельные блоки и проведении параллельных вычислений в подобластях существенным источником погрешности являются краевые условия сшивки на границе подобластей.

Расщепление оператора шага (10) в методе переменных направлений на симметричную последовательность операторов шага в координатном направлении предоставляет возможность полностью исключить этот источник погрешности на границе подобластей.

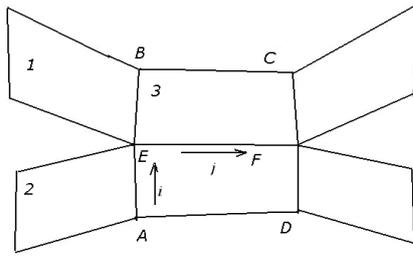


Рис.1 Организация оператора шага метода переменных направлений алгоритма при расчетах на блочных сетках.

Рассмотрим блочную расчетную область на рис.1. Оператор шага будет состоять из двух операторов шага в координатном направлении j для подобластей 1 (назовем ее S_1) и 2 (назовем ее S_2), соответственно, и пяти операторов шага в координатном направлении i : в подобласти 3 $-ABCD$ (назовем ее S_3) и в частях подобластей 1 и 2 вне подобласти 3:

$$L_i(\Delta t) = L_i(\Delta t)(S_1 - S_3) + L_i(\Delta t)(S_2 - S_3) + L_i(\Delta t)(S_3); \quad (11)$$

$$L_j(\Delta t) = L_j(\Delta t)(S_1) + L_j(\Delta t)(S_2); \quad \overline{U}_{ijk}^{n+2} = L_i(\Delta t)L_j(\Delta t)L_j(\Delta t)L_i(\Delta t)\overline{U}_{ijk}^n.$$

Из вида (1.5.4) следует, что никакие краевые условия на линии сшивки подобластей EF (рис. 1) не ставятся и источник погрешности отсутствует.

При реализации алгоритмов также использовался явный метод Рунге-Кутты 3-го порядка точности:

$$\begin{aligned} Q_i^{(1)} &= Q_i^{(0)} + \Delta t L(Q_i^{(0)}); \\ Q_i^{(2)} &= \frac{3}{4} Q_i^{(0)} + \frac{1}{4} [Q_i^{(1)} + \Delta t L(Q_i^{(1)})]; \\ Q_i^{(3)} &= \frac{1}{3} Q_i^{(0)} + \frac{2}{3} [Q_i^{(2)} + \Delta t L(Q_i^{(2)})], \end{aligned} \quad (12)$$

для коэффициентов которого имеет место соотношение $\sum_k \alpha_{jk} = 1$,

обеспечивающее положительность разностной схемы.

В § 1.5 излагаются некоторые особенности задания краевых условий в рассматриваемом комплексе программ. Последовательное использование автором метода конечного объема дает в этом вопросе определенные преимущества, так как разностный алгоритм на основе метода конечного объема требует задания только потоков на границе расчетной области и не

требует определения газодинамических параметров для фиктивных слоев ячеек. В параграфе приводятся краевые условия, реализованные в программных модулях рассматриваемого комплекса программ.

В главе 2 дается краткое описание актуальности исследования течений горения и детонации, перечислены основные области применения. Рассмотрены математические модели горения и детонации разного уровня сложности. Представлены численные алгоритмы расчета течений горения и детонации газовых смесей на основе двухстадийной модели с одной основной реакцией энерговыделения, а также с расщеплением системы уравнений газовой динамики и кинетики и организации временного цикла.

В § 2.1 обосновываются преимущества цикла с детонационным горением по сравнению с обычным изобарическим горением, используемым в ракетных и авиационных двигателях. Детонация является крайне эффективным видом горения. Ввиду преимущества почти изохорического горения детонация обладает более высокой термодинамической эффективностью по сравнению с изобарическим горением. При комнатном давлении и температуре изохорическое горение стехиометрической смеси кислорода и водорода на 18–37 % эффективнее по сравнению с изобарическим горением. Более того, детонация дает более интенсивное и стационарное сгорание, что означает возможность получения значительной тяги двигателя при небольших размерах. Все эти преимущества обуславливают общемировую распространенность исследований в области детонационного двигателя. В последние два десятилетия значительные усилия предприняты в исследованиях импульсного детонационного двигателя.

Разработка различных конструкций детонационных двигателей осложняется тем, что в реальности после поджига смеси переход дефлаграции в детонацию происходит на значительном расстоянии. В связи с этим актуальными являются исследования по инициации детонации, в частности, путем:

- инициирования детонации за слабыми ударными волнами;
- прямым инициированием детонации за сильными ударными волнами;
- применение специальных инжекторов;
- инициирование детонации в широком канале при переходе в него сформировавшейся детонации в узком канале.

В § 2.2 дается описание и сравнительный анализ математических моделей течений газовых смесей с горением и детонацией. Наиболее полная математическая модель включает в себя уравнения газовой динамики с учетом вязкости, теплопроводности и энерговыделения за счет химических реакций в интегральной форме, являющейся исходной для метода конечного объема, и уравнения химической кинетики для возможно более полного учета протекающих химических реакций. Так для смесей кислород–водород и кислород–воздух используются системы уравнений кинетики для 14, 21 или 36 реакций.

В рассматриваемом комплексе программ для численного моделирования горения и детонации в двухкомпонентных газовых смесях (кислород–водород и кислород–ацетилен) использовалась математическая модель с одной упрощенной модельной двухстадийной химической реакцией, включающей в себя индукционный период и последующую экзотермическую реакцию. Газ предполагался идеальным, невязким и не теплопроводным:

$$d / dt \int_V \bar{Q} dV + \oint_S \vec{n} F dS + \int_V \bar{\Phi} dV = 0, \quad (13)$$

где $F = (\vec{m}, (\vec{m}\vec{m}) / \rho + P I, \vec{m}(e + p) / \rho, \vec{m}\vec{B})$, $\vec{B} = (\beta, \alpha)$, $\bar{Q} = (\rho, \vec{m}, \rho e, \rho\beta, \rho\alpha)$,
 $\Phi = (0, 0, 0, 0, \rho w_\beta, \rho w_\alpha)$, $P = \rho RT$, $e = RT / (\gamma - 1) + \vec{V}^2 / 2 + \beta q$.

$$w_\alpha = \frac{d\alpha}{dt} = \frac{-1}{\tau_{ind}} = -k_1 \rho \exp(-E_1 / RT), \quad w_\beta = 0, \quad (14)$$

$$w_\beta = \frac{d\beta}{dt} = \begin{cases} -k_2 P^2 \left\{ \beta^2 \exp\left(\frac{-E_2}{RT}\right) - (1-\beta)^2 \exp\left(-\frac{E_2+q}{RT}\right) \right\}, & w_\alpha = 0 \\ 0, & w_\alpha \neq 0, \end{cases}$$

здесь $\rho, P, e, \vec{m}, T, R$ – плотность, давление, удельная энергия, вектор количества движения, температура и газовая постоянная соответственно.

Параметры α, β характеризуют продвижение экзотермической реакции: в периоде индукции $\beta=1, 0 \leq \alpha \leq 1$, на стадии экзотермической реакции $\alpha=0, 0 \leq \beta \leq 1$, γ – отношение удельных теплоемкостей – постоянная равная 1.4 для разбавленных смесей кислорода с водородом, q – удельный тепловой эффект химической реакции, k_1, k_2, E_1, E_2 – константы реакции.

Проводится сравнение различных математических моделей, описывающих горение и детонацию газовых смесей. Делается вывод о зависимости выбора математической модели от специфики решаемой задачи и достаточности математической модели (13), (14) для описания существенно нестационарных задач с большим количеством разрывов и для задач с большим пространственным масштабом.

В § 2.3 описываются варианты разностного алгоритма на основе схемы Хартена для численного моделирования течений смеси реагирующих невязких газов. Рассматриваются алгоритм без расщепления и с расщеплением на систему для газодинамических переменных и уравнения для кинетических переменных. В первом случае алгоритм аналогичен описанному в главе 1 за исключением другого набора собственных векторов и собственных чисел Якобиана $\partial \vec{F} / \partial \vec{Q}$.

В алгоритме с расщеплением на основе единой схемы Хартена или Чакраварти–Ошера отдельно решаются система уравнений газовой динамики и каждое уравнение для кинетических переменных. Этот вариант алгоритма пригоден для решения полной системы уравнений кинетики. Программная реализация позволяет задавать произвольное число компонент газовой смеси,

что упрощает переход к более сложным математическим моделям, описывающим течения горения и детонации.

При совместном решении уравнений газовой динамики и уравнений кинетики порядок суммарной точности алгоритма зависит от организации шага по времени и представляет определенную проблему при конструировании численного алгоритма. Для использованного варианта алгоритма без расщепления этот вопрос не возникает, для временной дискретизации использовался метод Рунге–Кутты третьего порядка точности по времени. Для варианта алгоритма с расщеплением автором предложен явный оператор шага по времени, основанный на методе переменных направлений, сохраняющий свойство консервативности, состоящий из следующей последовательности шагов:

1) вычисление потоков через грани ячейки в координатном направлении j : $\vec{F}_{j+1/2}^{n+1/2}, \vec{F}_{j-1/2}^{n+1/2}$;

2) вычисление новых значений концентраций реагирующих компонент при помощи интегрирования упрощенной системы обыкновенных дифференциальных уравнений кинетики.

3) вычисление новых значений газодинамических переменных с учетом конвективных потоков $\vec{F}_{j+1/2}^{n+1/2}, \vec{F}_{j-1/2}^{n+1/2}$ и новых значений концентраций реагирующих компонент и изменения полной энергии за счет энергии реакций.

В § 2.4 описывается процедура получения собственных векторов и собственных чисел для нерасщепленной системы уравнений газовой динамики и кинетики. Поскольку выбор наборов собственных векторов и собственных чисел является неединственным, проводится сравнение свойств таких систем векторов и предлагается оптимальный для устойчивости численного алгоритма выбор собственных векторов и собственных чисел.

В главе 3 описываются алгоритмы конструирования расчетных сеток.

В § 3.1 приводится вывод системы уравнений Пуассона, являющейся математической моделью для конструирования двумерных эллиптических расчетных сеток на плоскости и определяющей координаты точек сетки в декартовых координатах x, y через координаты узлов сетки в криволинейной системе координат ξ, η , определенной линиями сетки:

$$g_{22}(\vec{r}_{\xi\xi} + P \cdot \vec{r}_{\xi}) + g_{11}(\vec{r}_{\eta\eta} + Q \cdot \vec{r}_{\eta}) - 2g_{12}\vec{r}_{\xi\eta} = 0, \quad (15)$$

где $g_{12} = (x_{\xi}x_{\eta} + y_{\eta}y_{\xi})$, $g_{11} = (x_{\xi}^2 + y_{\xi}^2)$, $g_{22} = (x_{\eta}^2 + y_{\eta}^2)$.

Приводится также вывод системы уравнений Бельтрами, являющихся математической моделью для конструирования двумерных эллиптических расчетных сеток на поверхности. Отличием этих уравнений от уравнений Пуассона для двумерного случая является наличие в правой части оператора Бельтрами:

$$g_{22}(\vec{r}_{\xi\xi} + P \cdot \vec{r}_{\xi}) + g_{11}(\vec{r}_{\eta\eta} + Q \cdot \vec{r}_{\eta}) - 2g_{12}\vec{r}_{\xi\eta} = \bar{n}R. \quad (16)$$

$$\bar{n}R = \bar{n}G(k_1 + k_2) = \bar{n}G[(1 + q^2)r - 2pqs + (1 + p^2)t] / (1 + p^2 + q^2)^{3/2},$$

где $p = f_x$, $q = f_y$, $r = f_{xx}$, $s = f_{xy}$, $t = f_{yy}$, в случае, когда форма поверхности задается явно в виде функции $z = f(x, y)$.

Для обеих математических моделей определяется вид контрольных функций, управляющих распределением координатных линий и узлов в соответствии с геометрическими особенностями расчетной области, а именно, осуществляющих сгущение или разрежение сеточных линий и узлов в различных частях расчетной области:

$$P(\xi, \eta) = -\sum_{i=1}^N a_i \text{sign}(\xi - \xi_i) \exp(-c_i |\xi - \xi_i|) - \sum_{k=1}^M b_k \text{sign}(\xi - \xi_k) \exp(-d_k ((\xi - \xi_k)^2 + (\eta - \eta_k)^2)^{1/2}). \quad (17)$$

В § 3.2 описывается численный алгоритм для решения систем уравнений Пуассона и Бельтрами, являющийся вариантом итерационного метода верхней релаксации. Сходимость этого метода в определенной

степени зависит от выбора начального приближения. В качестве начального приближения строилась алгебраическая сетка, полученная методом трансфинитной интерполяции. В некоторых примерах при построении сетки на поверхности обтекаемого тела начальное приближение определялось квадратичной интерполяцией.

Описывается способ построения сеток размерности «2,5»: в этом случае одно из семейств координатных поверхностей задается фиксированным, и на этих поверхностях строятся двумерные сетки. В качестве примера можно рассматривать трехмерные сетки, полученные вращением двумерной сетки вокруг оси симметрии, или образованной набором конических поверхностей с вершинами на оси симметрии обтекаемого тела.

В § 3.3 описывается использовавшаяся в комплекса программ математическая модель в виде системы трех уравнений Пуассона для конструирования расчетных сеток в пространстве:

$$g_{11}(\partial^2 \vec{r} / \partial \xi^2 + P \partial \vec{r} / \partial \xi) + g_{22}(\partial^2 \vec{r} / \partial \eta^2 + Q \partial \vec{r} / \partial \eta) + g_{33}(\partial^2 \vec{r} / \partial \zeta^2 + R \partial \vec{r} / \partial \zeta) - \quad (18)$$

$$- 2g_{12} \partial^2 \vec{r} / \partial \xi \partial \eta - 2g_{23} \partial^2 \vec{r} / \partial \zeta \partial \eta - 2g_{13} \partial^2 \vec{r} / \partial \xi \partial \zeta = 0,$$

где $\vec{r}(\xi, \eta, \zeta)$ – радиус-вектор узла сетки в декартовых координатах, ξ, η, ζ – криволинейные координаты, соответствующие сеточным линиям (в разностной аппроксимации выбирается единичный шаг и эти переменные становятся целочисленными координатами, соответствующими номеру точки); $g_{11} = \partial \vec{r} / \partial \xi \cdot \partial \vec{r} / \partial \xi$, $g_{12} = \partial \vec{r} / \partial \xi \cdot \partial \vec{r} / \partial \eta$, $g_{22} = \partial \vec{r} / \partial \eta \cdot \partial \vec{r} / \partial \eta$, $g_{33} = \partial \vec{r} / \partial \zeta \cdot \partial \vec{r} / \partial \zeta$, $g_{23} = \partial \vec{r} / \partial \zeta \cdot \partial \vec{r} / \partial \eta$, $g_{13} = \partial \vec{r} / \partial \xi \cdot \partial \vec{r} / \partial \zeta$.

Для геометрической адаптации сетки к особенностям расчетной области по аналогии с двумерным случаем автором вводятся контрольные функции P, Q, R , которые служат для сжатия или растяжения (в зависимости от знаков коэффициентов) координатных линий семейств:

$$\begin{aligned}
P(\xi, \eta, \zeta) = & -\sum_i a_i \operatorname{sign}(\xi - \xi_i) \exp(-c_i |\xi - \xi_i|) - \sum_k b_k \times \\
& \times \operatorname{sign}(\xi - \xi_k) \exp(-d_k ((\xi - \xi_k)^2 + (\eta - \eta_k)^2)^{1/2}) - \\
& - \sum_n e_n \cdot \operatorname{sign}(\xi - \xi_n) \exp(-f_n ((\xi - \xi_n)^2 + (\zeta - \zeta_n)^2)^{1/2}) - \\
& - \sum_j g_j \cdot \operatorname{sign}(\xi - \xi_j) \exp(-h_j ((\xi - \xi_j)^2 + (\eta - \eta_j)^2 + (\zeta - \zeta_j)^2)^{1/2})
\end{aligned} \tag{19}$$

В качестве примера приведена расчетная сетка для расчета дифракции ударной волны на сфере в ударной трубе квадратного сечения. Задача имеет несколько плоскостей симметрии, поэтому расчетная область сводится к 1/8 физической области и изображена на Рис.2.

В § 3.4 описывается построение блочных структурированных сеток для расчета течений в областях сложной формы и разномасштабных течений. Обычным приемом построения криволинейных структурированных сеток является построение преобразования односвязной криволинейной расчетной области к прямоугольной области в некоторой криволинейной системе координат.

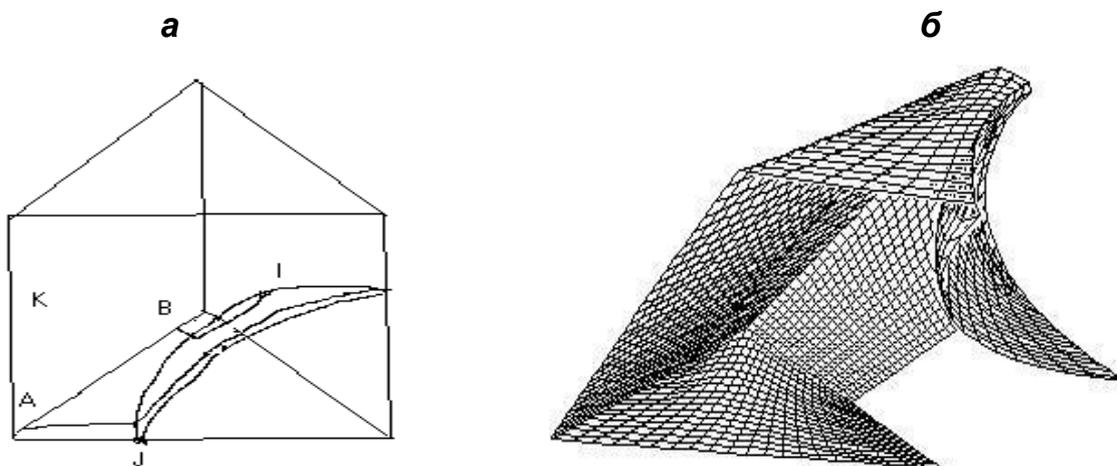


Рис.2. Пример расчетной сетки: а–схема расчетной области, б– нижний блок сетки для расчета дифракции ударной волны на шаре в ударной трубе квадратного сечения в аксонометрической проекции.

При этом расчетная сетка может содержать ячейки: с существенно тупыми и острыми углами, с большим различием в размерах по координатным направлениям, ячейки в разных частях расчетной области, значительно различающиеся по размерам (что особенно существенно для расчета нестационарных задач явными методами).

Последний случай характерен для расчета течений с комбинацией внутренних течений в каналах и внешних крупномасштабных течений. Начиная с некоторого уровня сложности расчетной области разбиение ее на несколько подобластей, существенно упрощает задачу построения расчетной сетки и дает блочную сетку на порядок лучшего качества, чем единая криволинейная структурированная сетка. В рамках рассматриваемого комплекса программ реализован простой алгоритм построения блочных структурированных сеток, состоящий из двух этапов:

- разбиение области сложной формы на элементарные подобласти и построение в каждой подобласти структурированной сетки;

- объединение пограничной части двух или более таких простых сеток в новую сетку и сглаживание координатных линий на границе между элементарными подобластями посредством нескольких итераций основного алгоритма.

При расчете на блочных сетках некоторых классов задач, в частности нестационарных течений с существенно различными по размеру частями (например, задачи взаимодействия внутреннего и внешнего обтекания), такая организация позволяет сохранить необходимую точность расчета и существенно повысить его экономичность.

В § 3.5 приведены формулы для вычисления геометрических величин структурированных сеток в рамках метода конечного объема. В методе конечного объема используются уравнения в интегральной форме в виде законов сохранения. При конструировании алгоритма в рамках этого метода приближенное вычисление геометрических величин: площадей граней, величины контрольного объема, векторов нормалей к граням проводится отдельно от аппроксимации искомых функций – газодинамических величин, поэтому формулы аппроксимации геометрических величин, для того, чтобы не увеличивать суммарную погрешность алгоритма, должны удовлетворять своим условиям консервативности.

Глава 4 работы посвящена сравнению математических моделей метода конечного объема и конечных разностей. В главе не содержится оригинальных результатов автора, тем не менее, она носит принципиальный характер, в ней аргументируется выбор автором математической модели метода конечного объема в качестве основы для конструирования всех используемых в комплексе алгоритмов и программ.

В § 4.1 проводится сравнение метода конечного объема, основанного на аппроксимации математической модели в интегральной форме законов сохранения и метода конечных разностей, основанного на аппроксимации системы уравнений в частных производных для газодинамических переменных в криволинейных координатах. Главной мотивацией использования уравнений сохранения или интегральной формы уравнений газовой динамики является улавливание разрывов в невязких течениях. Условия на таких разрывах соответствуют законам сохранения. Разрывы в значениях газодинамических переменных сопровождаются как ударными, так и детонационными волнами.

В § 4.2 рассмотрены способы задания краевых условий в рамках метода конечных разностей и метода конечного объема. Так краевые условия на стенке в рамках метода конечного объема сводятся к равенству нулю потоков через соответствующие граничные грани контрольного объема. Конечно-разностный подход, как правило, требует процедур экстраполяции искомых величин за границу расчетной области и определения этих величин для фиктивных слоев ячеек. Проведенное сравнение математических моделей метода конечного объема и конечных разностей показывает преимущество метода конечного объема в вопросах:

- сохранения консервативности численных алгоритмов для криволинейных систем координат;
- простоты и компактности аппроксимации градиента скорости при моделировании уравнений Навье–Стокса;
- сохранения консервативности при задании краевых условий на стенке.

В некоторых других отношениях оба метода равноценны. Существуют способы аппроксимации искомых величин и геометрических элементов, являющихся промежуточными между последовательно конечно-объемным и конечно-разностным подходами.

В главе 5 описываются результаты численных исследований течений горения и детонации. Цель исследования – дополнение натуральных экспериментов по переходу от горения к детонации и получению устойчивых циклов работы детонационных двигателей.

В § 5.1 описаны результаты численного моделирования течений в инжекторах. Использование инжекторов специальной формы служит для турбулизации течений газовых смесей и с помощью турбулизации – ускорения инициации детонации. Внутренние течения в инжекторах и ближайшей к ним окрестности не содержат областей горения или фронтов детонации, поэтому численное моделирование проводилось в рамках математической модели идеального нереагирующего газа. Результаты вычислений сравнивались с картинками натурального эксперимента, проводившегося в Институте высоких температур АН РАН. Исследовались три конфигурации инжекторов: сверхзвуковое сопло, насадок с резонаторной полостью и звуковой генератор Гартмана. Сопло с резонатором состоит из сверхзвукового сопла рассчитанного на число Маха 2 и соосного резонатора. Само сопло также использовалось как самостоятельный инжектор в экспериментах.

По результатам серии расчетов наблюдается качественно совпадающая с экспериментом картина течения.

Для одновременного расчета внутреннего течения в резонаторе Гартмана и сопле с резонатором и внешнего течения расчеты проводились с использованием блочных сеток и разбиения расчетной области на подобласти параллельного счета внутреннего и внешнего течения. Турбулизация течения звуковыми волнами есть один из факторов, способствующих возникновению детонационной волны. Визуализация

течения внутри резонатора по результатам расчетов дополняет в этом случае экспериментальные данные по визуализации внешнего течения и объясняет их природу.

В § 5.2 приводятся результаты численного моделирования инициации детонации в осесимметричных каналах с одним или двумя сужениями специальной формы. Прохождение реагирующей смеси через каналы с препятствиями или каналы с сужениями является еще одним способом подготовки реагирующей смеси к последующему воспламенению и переходу к детонации. Такие каналы представляют собой существенную составную часть конструкций импульсных и ротационных детонационных двигателей.

Поведенный цикл расчетов показал качественное совпадение с имеющимися экспериментальными и численными результатами. Визуализация результатов расчетов проводилась построением картин изолиний плотности и плотности горючей компоненты смеси. Картины изолиний показывают, что для канала с одним сужением фронт горения отстает от головной ударной волны, а для двух сужений переходит в детонационную волну, которая догоняет головную ударную волну. Детонация первоначально возникает в камере между двумя сужениями. Устойчивую детонационную волну удалось получить для канала с одним сужением при больших значениях давления и плотности в камере высокого давления.

В § 5.3 представлены результаты численного моделирования течений в резонаторе импульсного детонационного двигателя. На рис.3 приведена схема резонатора импульсного детонационного двигателя, представляющего собой полузамкнутую сферическую полость около среза которой (на экваторе) установлено кольцевое сопло. В газодинамическом резонаторе, периодически заполняющемся топливовоздушной смесью, пульсирующий процесс возникает за счет возбуждения резонансных автоколебаний. Амплитуда колебаний усиливается за счет выделения тепла при детонационном сгорании смеси в ударно-волновых структурах.

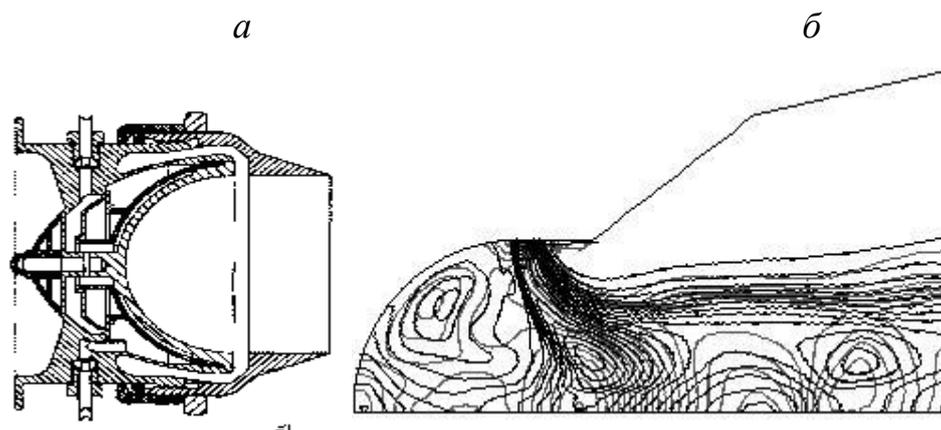


Рис. 3. а– схема резонатора импульсного детонационного двигателя; б–визуализация численного моделирования изолиниями плотности горючей компоненты и плотности смеси.

Был проведен цикл расчетов по численному моделированию течений в резонаторе. По результатам расчетов обнаружено два основных режима течения. При больших значениях отношения давления в выходном сечении кольцевого сопла к давлению в критическом сечении ($P_{exit} / P_{critical} = 0.8$) в расчетах наблюдается установление стационарного режима течения (рис.2,б), при малых значениях отношения давления в выходном сечении кольцевого сопла к давлению в критическом сечении (в расчетах $P_{exit} / P_{critical} = 0.08$) наблюдается пульсационный характер течения.

В § 5.4 обсуждаются результаты численного моделирования течений в спиновом детонационном двигателе. Спиновый или ротационный детонационный двигатель является еще одной перспективной технической идеей, которая, наряду с импульсным двигателем, в настоящее время отрабатывается и исследуется рядом авторов. В диссертации проведено численное исследование компоновка спинового двигателя с отдельной подачей подготовленного воздуха и горючей компоненты с образованием ротационной детонационной волны на конусе. Для численного исследования оптимизации геометрии области были выбраны сужения специальной формы, аналогичные описанным в § 5.2. Целями оптимизации были: улучшение перемешивания горючей компоненты с потоком воздуха; ускорение инициации горения и детонации смеси; повышение концентрации

горючей компоненты смеси на конической поверхности; обеспечение нераспространения горения и детонации вверх по потоку.

Расчет производился в несколько этапов. На первом этапе на установление рассчитывалось протекание не реагирующего газа высокого давления и плотности через исследуемую конструкцию слева направо. На втором этапе осуществлялся "вбрызг" под различными углами к основному потоку горючей компоненты через сверхзвуковое сопло, расположенное в "детонационном мешке" между сужениями специального вида. На третьем этапе запускалась в конической части спиновая детонационная волна. На рис.3 изображена расчетная сетка и картина изолиний плотности (в криволинейной системе координат на конической поверхности) при третьем этапе расчета (моделирование спиновой детонационной волны)

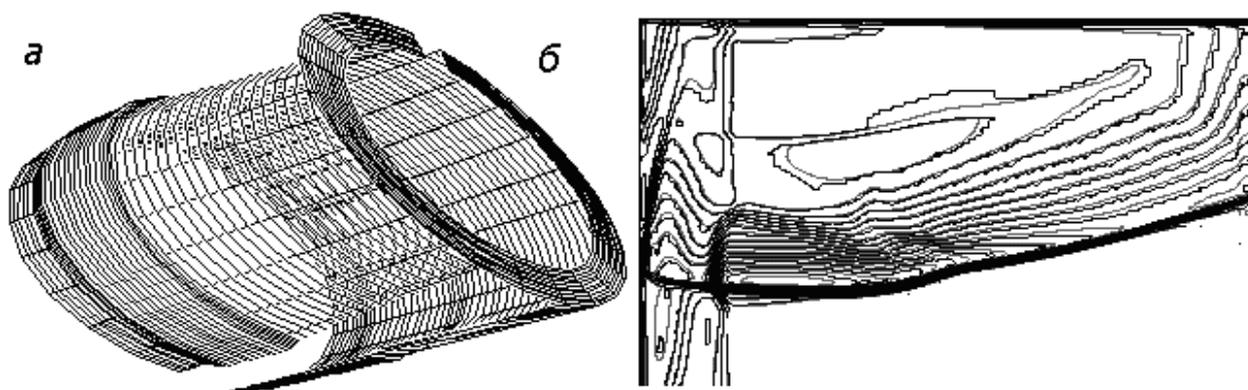


Рис.4. а – трехмерная расчетная сетка размером 60x120x150 узлов (изображена каждая десятая координатная линия), б – изолинии плотности водорода на конической поверхности (движение спиновой детонационной волны)

По результатам серии расчетов была определена компоновка, развивающая наибольшую тягу. Для отработки и оптимизации рассматриваемой конструкции потребуются дальнейшие численные эксперименты

В § 5.5 представлены результаты расчета течений горения и детонации водородсодержащей газовой смеси под оболочкой ядерного реактора. После аварии на Три-Майл Айленд, в которой имело место горение водорода, и аварии на Чернобыльской АЭС для обеспечения безопасности работы АЭС уделяется внимание даже маловероятным ситуациям, в том числе связанным с проблемой выделения водорода (хотя существуют достаточно надежные

методы борьбы с накоплением водорода под оболочкой реакторного зала). Хроника развития аварий на блоках АЭС «Фукусима» подтверждает, что взрывы водорода под оболочкой реакторов являются весьма вероятной, если не неотъемлемой частью развития тяжелой аварии.

Проведено численное моделирование различных режимов горения и детонации смеси воздух-водород под защитной оболочкой (контейнментом) реакторного зала АЭС для реакторов типа ВВР. Расчетная область представляет собой цилиндр (реакторная шахта), сопряженный с полусферой (купол контейнмента) первоначально заполненная водородо-воздушной смесью. Самопроизвольное возгорание и детонация смеси моделировались частью расчетной области, в которой в нулевой момент времени происходит моментальное выгорание водорода. Целью расчета являлась оценка пиковых значений давления на стенках защитной оболочки для прогноза ее разрушения. В соответствии с этим оценивались превышения значения давления и импульса вдоль купола контейнмента в различные моменты времени. Проектный запас прочности конструкции предполагает сохранение ее целостности до превышения значения давления в 30–40 раз. По результатам серии расчетов определены сценарии развития аварии (инициация горения в середине купола и на границе купола с шахтой реактора) при которых достигается 30–35-кратное превышение давления на куполе, что может привести к его разрушению.

В главе 6 описываются результаты численных исследований течений дифракции ударных волн на свободном и закрепленном теле.

В § 6.1 приводятся результаты численного исследования дифракции плоской ударной волны на сфере в ударной трубе. Взаимодействие ударной волны со сферой – один из известных тестов в ударной газовой динамике. Несмотря на многочисленные эксперименты, нестационарная смещающая сила на сфере, установленной в ударной трубе, в процессе прохождения ударной волны, в экспериментах количественно не определена.

Наиболее существенным параметром, определяющим течение в данном случае, является коэффициент сопротивления C_D .

Для вычислений течений газа с частицами (запыленный газ) или при анализе траектории частицы в сверхзвуковом потоке обычно используется величина коэффициента сопротивления частицы как некая средняя величина в предположении стационарности течения. В некоторых случаях, однако, предположение о стационарности течения вызывает сомнения. Современные исследования по ускорению микрочастиц посредством прохождения ударных волн требуют понимания природы сопротивления во время нестационарного взаимодействия. Смещающая сила частицы может существенно отличаться от той, которую испытывает частица при стационарном обтекании, благодаря отражению ударной волны, дифракции ее на частице и фокусировке за ней.

Были проведены расчеты дифракции ударной волны на закрепленной сфере в двумерной цилиндрической постановке (ударная труба полагалась имеющей круговое сечение).

Сравнение результатов натуральных экспериментов и расчетов проводилось для значений $M_{shock}=1.22$. На рис. 5 представлены графики безразмерных значений давления $C_p = (P - P_0) / (P_1 - P_0)$, (P_1 – давление в передней точке торможения, P_0 – давление в камере низкого давления перед ударной волной) вдоль поверхности сферы по результатам расчетов с нанесенными значениями давления (белые кружки), полученными из эксперимента в датчиках на поверхности сферы в моменты времени $t = 140, 208, 296, 380$ ms.

Проведено сравнение результатов расчетов с данными эксперимента по определению соответствующего смещающей силе безразмерного коэффициента $C_D = 2f / (\rho_2 U_2^2 \pi R^2)$ для того же значения $M_{shock}=1.22$.

На рис. 6 показан график C_D по результатам расчета, а результаты эксперимента обозначены белыми кружками. Отрицательные значения C_D (интервал времени (3 – 5 ms)) определенные в расчетах и эксперименте

объясняются схлопыванием ударной волны в окрестности задней точки торможения и появлением в этот промежуток времени отрицательной смещающей силы.

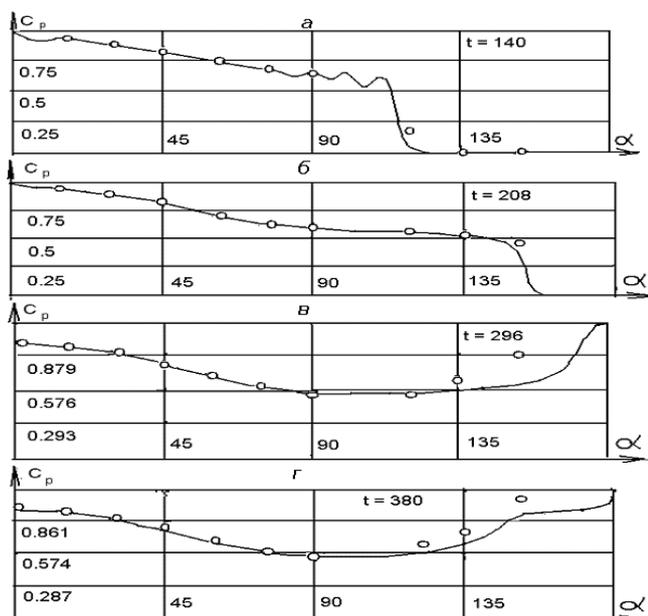


Рис. 5 Графики безразмерного давления в последовательные моменты времени, результаты расчета – сплошная линия, экспериментальные данные – белые кружки.

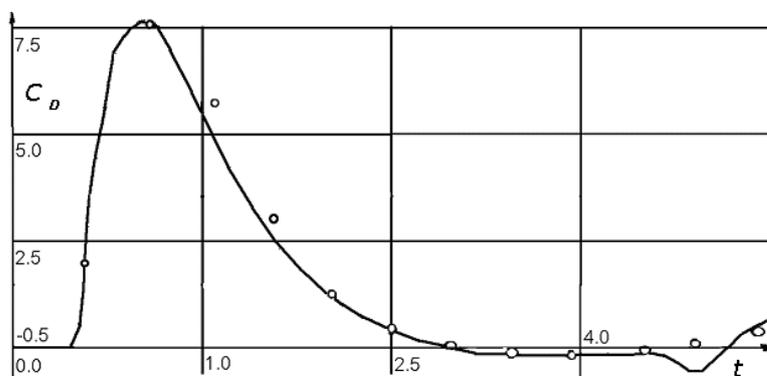


Рис. 6 График C_D от времени, сплошная линия – расчетные данные, белые кружки – результаты эксперимента

В § 6.2 приведены результаты трехмерных расчетов дифракции плоской ударной волны на сфере в ударной трубе. Трехмерные расчеты проводились для различных отношений размеров сферы к размерам поперечного сечения ударной трубы для свободной сферы, расположенной в центре поперечного сечения ударной трубы. По результатам вычисления смещающей силы получены графики зависимости пути, скорости и

ускорения сферы от времени. Результаты расчетов демонстрируют пригодность алгоритмов и программ для проведения расчетов по определению нестационарных аэродинамических нагрузок при воздействии на летательные аппараты ударных волн.

В § 6.3 приводятся результаты численных исследований перехода регулярное – маховское отражение при дифракции ударной волны на цилиндре и цилиндрическом сегменте. Взаимодействие ударной волны с цилиндром относительно интенсивно изучалось последние десятилетия. При прохождении ударной волны по поперечному выпуклому цилиндру отражение возникает вначале как регулярное отражение, которое затем переходит в маховское отражение при уменьшении угла между поверхностью цилиндра и падающей ударной волной. Были проведены многочисленные эксперименты по определению критических значений угла перехода от регулярного к маховскому отражению для цилиндра и от маховского к регулярному для вогнутой стенки для широкого диапазона чисел Маха. При переходе от регулярного отражения к маховскому возникновение ножки Маха и контактного разрыва точно определяло точку перехода. При переходе от маховского отражения к регулярному исчезновение линии контактного разрыва определяло точку перехода. Предложено несколько критериев определения точки перехода регулярное–маховское отражение. По результатам экспериментов рядом авторов было сделано заключение, что критический угол перехода для заданного числа Маха ударной волны на криволинейной стенке зависит от радиуса кривизны стенки (в частности, от величины радиуса цилиндра), не согласующееся с аналитическими результатами, сделанными на основе невязкой модели, в которой игнорируется существование на стенке пограничного слоя. Впоследствии была установлено определяющее влияние вязкости на величину угла перехода регулярное–маховское отражение. Задача первоначально была поставлена автору профессором W.H.Heilig'ом в 1994 году, позднее постановка задачи была сформулирована автору в 1995-1996

гг. профессором Л.Г.Гвоздевой. Исследование проводилось по предположениям о зависимости значения угла перехода от первоначального радиуса кривизны. Исследования проводились во второй половине 1990-х годов и в тот момент были актуальны.

В главе 7 диссертации приведено описание комплекса программ для расчета течений горения и детонации газовых смесей. Обсуждаются также некоторые вопросы разработки исследовательских проблемно-ориентированных комплексов программ.

В § 7.1 представлены структура и возможности описываемого комплекса, перечислены проведенные с его помощью ранее численные исследования газодинамических задач (не вошедшие в результаты диссертации), обсуждаются направления его дальнейшего развития.

Программы, разработанные по описанным в главах 1–3 диссертации алгоритмам численного моделирования газодинамических течений и построения расчетных сеток, объединены в комплекс программ для расчета двух- и трехмерных течений газа, а также течений горения и детонации газовых смесей. Указанный комплекс, содержащий также небольшую системную часть, состоящую из программ визуализации и подготовки данных, эксплуатировался и развивался более 15 лет [2,14–16,24].

Относительно долгая жизнь комплекса обусловлена прежде всего удачным перспективным выбором основных используемых численных алгоритмов – разностной схемой Хартена второго порядка точности по пространству и времени для уравнений Эйлера и относительно простым в реализации алгоритмом построения эллиптических расчетных сеток на основе решения системы уравнений Пуассона.

В § 7.2 обсуждаются некоторые вопросы разработки исследовательских комплексов программ. Целью обсуждения является определение места и назначения описываемого комплекса среди имеющихся программных продуктов, в частности универсальных коммерческих пакетов для расчета задач газовой динамики (например, Fluent, Ansys CFX, Star-CD и др.).

Дается определение исследовательского комплекса программ, который, подобно лабораторному оборудованию, при высоких требованиях на точность и надежность работы, мог бы быть быстро скомпонован из отдельных проверенных в работе блоков и при необходимости быстро переделан для решения новых, качественно отличных, задач.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

1. Разработана модификация схем Хартена [3,5,6,18,19] и Чакраварти–Ошера [20,21,30] с временной аппроксимацией по методу Рунге–Кутты третьего суммарного порядка точности, заключающаяся в поправке формул Ройе.

2. Разработана модификация метода коррекции потоков [10–13,17], заключающаяся в отдельной аппроксимации неконвективной части тензора потоков, соответствующей тензору напряжений.

3. Проведено сравнение различных математических моделей, используемых для моделирования течений горения и детонации газовых смесей. Дано обоснование выбора автором упрощенной модели двухстадийной химической реакции. Для выбранной модели предложена реализация TVD-схемы Хартена для моделирования течений газовых смесей с горением и детонацией в двух вариантах: без расщепления с общим решением уравнений газовой динамики и уравнения кинетики и с отдельным решением на основе схемы Хартена системы уравнений газовой динамики и уравнений кинетики [7,22,23,29].

4. Получена модификация математической модели Томпсона для конструирования многомерных криволинейных эллиптических сеток, заключающаяся в задании специального вида контрольных функций, управляющих геометрической адаптацией сетки. Разработан алгоритм построения двумерных и трехмерных эллиптических сеток на основе этой модификации математической модели. Предложен алгоритм построения двух и трехмерных блочных сеток, сохраняющих гладкость на границе сшивки блоков [3,17–19].

5. Указанные численные методы и алгоритмы были реализованы в виде комплекса проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента для течений горения и детонации и дифракции ударных волн. С помощью указанного комплекса программ были проведены циклы расчетов по:

- численному моделированию течений в инжекторах и каналах с сужениями;

- численному моделированию течений горения и детонации в пульсационном детонационном [6,7] и ротационном детонационном двигателе [29];

- численному моделированию взрыва водородно-воздушной смеси под оболочкой (контейнментом) атомного реактора [20];

- осесимметричной дифракции ударной волны на сфере в ударной трубе [17,20,21,30];

- определению точки перехода регулярного и маховского отражения ударной волны на цилиндрическом сегменте [3].

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Монография

1. **Численное** моделирование на основе метода конечного объема в задачах горения и дифракции ударных волн/ С.Н. Мартюшов. — Новосибирск: Наука, 2011 — 216 с.

Статьи в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК.

2. **Мартюшов С.Н.** Методика «МОДАМС» для расчета осесимметричных задач обтекания методом конечных объемов.- // Вопросы атомной науки и техники. Методики и программы численного решения задач математической физики.—1988.— вып. 2, М. С. 49–56.
3. **Мартюшов С.Н.** Расчет двух нестационарных задач дифракции на основе явной TVD схемы Хартена. Журнал "Вычислительные технологии" Новосибирск, 1996.—Т. 1, № 2.— С. 82–89.

4. **Мартюшов С.Н.** Построение двух- и трехмерных сеток для задач газодинамики на основе решения уравнений Пуассона // Изв. вузов. Механика. –1997–№ 4.–С. 108–114.
5. **Мартюшов С.Н.** Расчет двумерной дифракции по схеме Хартена второго порядка точности // Вычислительные технологии Новосибирск, 1997.–Т. 2, № 6.–С. 53–60.
6. **Мартюшов С.Н., Мартюшова Я.Г.** Численное моделирование струйных течений методом конечного объема на основе TVD схемы 2-го порядка точности // Вычислительные технологии. Новосибирск, 2004.–Т. 9, № 4.–С. 57–65.
7. **Мартюшов С.Н., Мартюшова Я.Г.** Численное моделирование течений детонации газовых смесей методом конечного объема // Вычислительные технологии. Новосибирск, 2008.–Т. 13, № 1. –С. 88–97.
8. **Мартюшов С.Н., Мартюшова Я.Г.** Численное моделирование течений в детонационном двигателе // Вычислительные технологии. Новосибирск, 2011.–Т. 16, № 4 –С.72-79.
9. **Мартюшов С.Н.** Использование водорода в качестве моторного топлива и конструирование детонационных двигателей // Автогазозаправочный комплекс и альтернативное топливо. Москва, 2011 № 5,–С.13-19.

Статьи в рецензируемых журналах и сборниках

10. **Мартюшов С.Н.** Области эллиптичности в задаче об угловом поршне // Численные методы механики сплошной среды. –1984. –Т. 15, № 5.–С. 118–131.
11. **Мартюшов С.Н.** Модификация метода конечного объема для расчета внешних задач обтекания // Моделирование в механике. –Новосибирск, 1989. –Т. 3(20), № 6.– С. 126–130.
12. **Мартюшов С.Н.** Расчет пространственных задач обтекания на основе TVD схемы Хартена // Вычислительные технологии. – Новосибирск, 1995. Т. 14, № 12. С. 219-228.
13. **Мартюшов С.Н.** Расчет нестационарных задач обтекания методом конечного объема на блочных регулярных сетках // Совместный выпуск по материалам Междунар. конф. «Вычислительные и информационные технологии в науке, технике и образовании», Журнал «Вычислительные технологии» Том 13, и Вестник КАЗНУ им. Фараби, № 3 (58), часть 2 Алматы; Новосибирск, 2008. –С. 398–405.
14. **Мартюшов С.Н., Мартюшова Я.Г.** Численное моделирование горения и детонации газовых смесей методом конечного объема // Вычислительные технологии. 2004. Алматы; Новосибирск. –Т. 9, ч. 3.–С. 136–139. (По материалам

- Международной конф. «Вычислительные и информационные технологии в науке, технике и образовании»).
15. **Мартюшов С.Н.** О равномерном движении углового поршня в политропном газе // Точные и приближенные методы исследования задач механики сплошной среды. Свердловск: УНЦ АН СССР, 1983. –С. 78–92.
 16. **Мартюшов С.Н.** Плоский секториальный распад разрыва идеального газа. –Свердловск, 1989.–(Препр. Ин-та математики и механики Уральского отделения АН СССР) –69 с.
 17. **Мартюшов С.Н.** О встречной и догонной осесимметричной дифракции на сфере // Приближенные методы исследования нелинейных задач механики сплошной среды. –Свердловск: Изд-во УНЦ, 1992. –С. 23–33.
Прочие публикации
 18. **Мартюшов С.Н.** Комплекс программ для расчета задач обтекания невязкого газа //Тез. Школы по комплексам программ. –Красноярск: Ин-т выч. техн. КНЦ СО АН СССР, 1990.
 19. **Мартюшов С.Н.** Алгоритм и комплекс программ «МОДАМС» для расчета пространственных задач обтекания в идеальном газе для трансзвукового диапазона Тез. конф. «Актуальные задачи прикладной математики», Саратов, 1991. – Т. 1.
 20. **Мартюшов С.Н.** Комплекс программ «МОДАМС» для расчета задач обтекания для невязкого газа // Тез. конф. «Вычислительные технологии», Ростов н/Д, 1992.– Т. 1, ч. 2
 21. **Мартюшов С.Н.** Расчет двух нестационарных задач дифракции на основе явной TVD схемы Хартена // Тез. конф. «Математические модели и численные методы механики сплошной среды» под ред. Ю.И. Шокина. Новосибирск, 1996.– С. 388–389.
 22. **Мартюшов С.Н.** Расчет нестационарной дифракции как тест на точность по времени явного алгоритма // Тр. Междунар. конф. МИТ-2009 «Математические и информационные технологии» – Копаоник, Сербия, 2009. –С. 216–220.
 23. **Мартюшов С.Н., Мартюшова Я.Г.** Моделирование течений горения и детонации на основе TVD схемы Хартена 2-го порядка точности // Материалы 5-го Всерос. семинара «Сеточные методы для краевых задач и приложения»,–Казань, 2004.–С. 154–158.
 24. **Martyushov S.N.** Complex of codes «Modams» for streamproblem calculations for spatial bodies in book of abstract, 2, // Third Russian–Japan Joint Symposium on Computational Fluid Dynamics.–Vladivostok. Russia.–1992.–P. 139.

25. **Martyushov S.N.** Construction of calculation grids on the basis of Poisson equation decision. // Proc. of 15–th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Appl.Maths.– Berlin.–1997.–Vol. 2.–P. 191–195.
26. **Martyushov S.N.** Numerical grid generation in computational field simulation // Proc. of the 6-th International Conf. Greenwich.– 1998. –P. 249-256.
27. **Martyushov S.N.** Numerical simulation of gas mixed detonation flows by finite volume method // Proc. of 3-rd International conference on finite difference methods: Theory and Applications. Rouse, Bulgaria.–2006. –P. 16.
28. **Martyushov S.N., Martyushova Y.G.** Numerical simulation of shock wave diffraction on the sphere in the shock tube // Proc. of 4-th International conference on numerical analys and its application., ed. S. Margelov, L. Vulkov, J. Wasniewski,–Lectures Notes in Computer Science. Rouse, Bulgaria. Springer, 2009.–P. 408-414.
29. **Мартюшов С.Н.** Численное моделирование детонации в импульсном детонационном двигателе // Тезисы докладов Международной конференции «Современные проблемы прикладной математики и механики: теория, эксперимент и практика». – Новосибирск, 2011, с. 76.
30. **Martyushov S.N.** Visualization in complex of codes for numerical simulation of deglagration and diffraction of shock waves // Proc. of the 8-th Pacific Symposium on Flow Visualization and Image Processing. Moscow.Lomonosov Moscow State University. 2011. n 46.
31. **Martyushov S.N.** Numerical simulation of flows in detonation engines devices // Abstracts of International Conference Mathematical and Informational Technologies. Vrnjachka Banya. Serbia.2011. P. 104.