

Лекция № 1

Введение в предмет. Краткое содержание курса.

к.ф.-м.н. Уткин Павел Сергеевич
e-mail: utkin@icad.org.ru, pavel_utk@mail.ru
(926) 2766560

Задачи горения в газовых и многофазных смесях



Газовая плита на кухне



Внутренняя баллистика



Объемно-детонирующие заряды взрывчатых веществ



Горение топлива в дизельном двигателе



Ракетные двигатели на твердом топливе



Взрывы на шахтах

Основные типы пламен

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

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

Классификация режимов горения по скорости распространения



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

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

Предпосылки открытия газовой детонации

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

Катастрофические явления в угольных шахтах

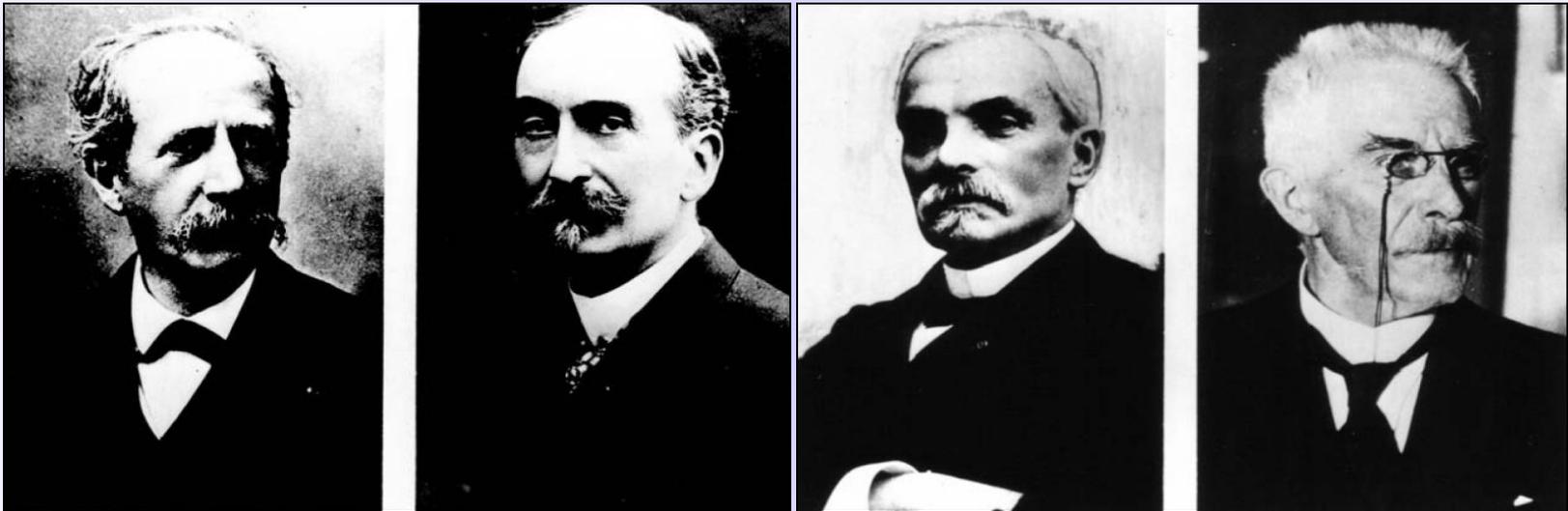


«Второй или Великий Взрыв на склоне». Опубликовано в *Canadian Illustrated News* 31 мая 1873 г., стр. 345. Взрывом на руднике Westville в Pictou Country 13 мая 1873 г. убило 60 человек. Обломки были разбросаны очень далеко, а взрывы и пожар продолжались несколько дней. (<http://www.gov.ns.ca/>)

Этап 1. Открытие газовой детонации.

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

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

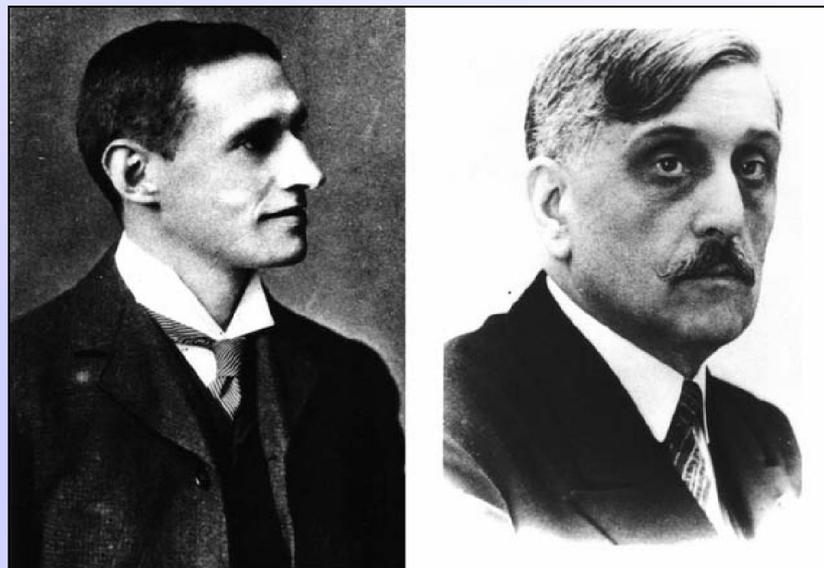
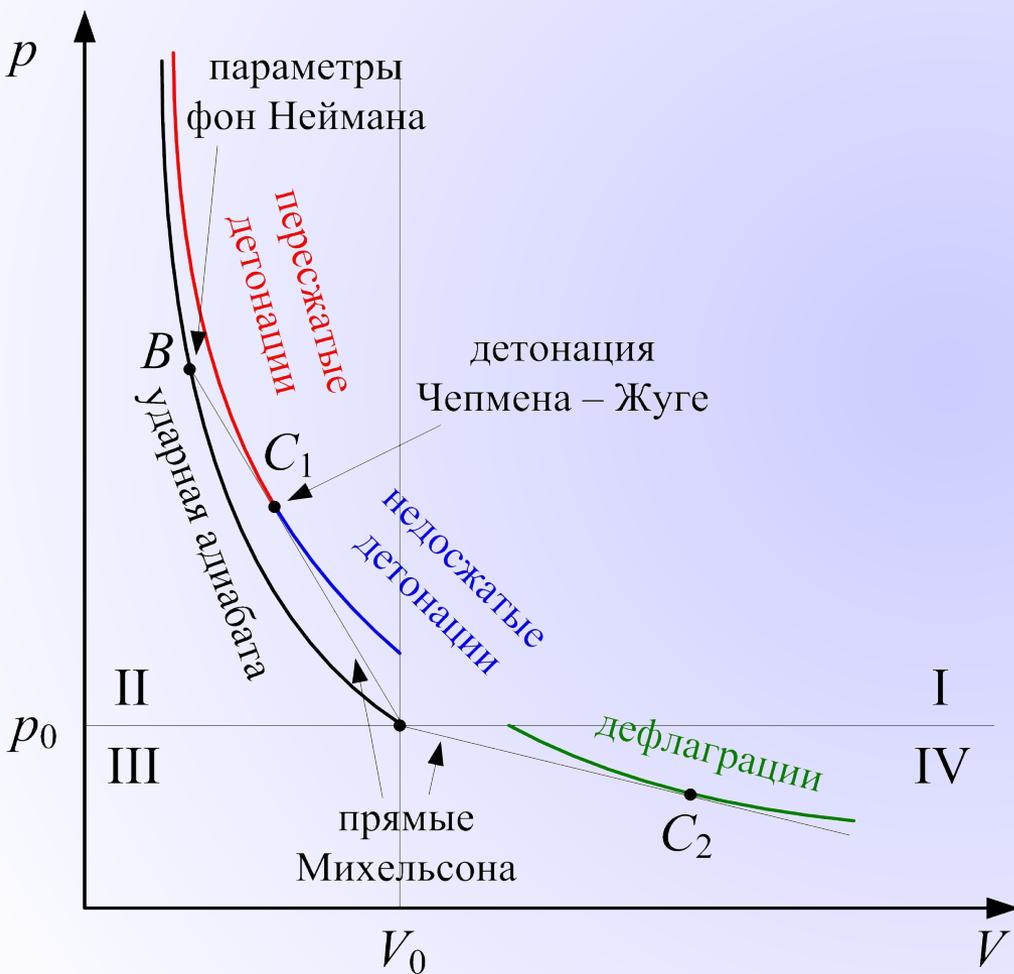


М. Бертло (1827 – 1907), П. Вьель (1854 – 1934), Э. Маляр (1833 – 1899), Г. Ле-Шателье (1850 – 1936)

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

Этап 2. Термодинамическая модель.

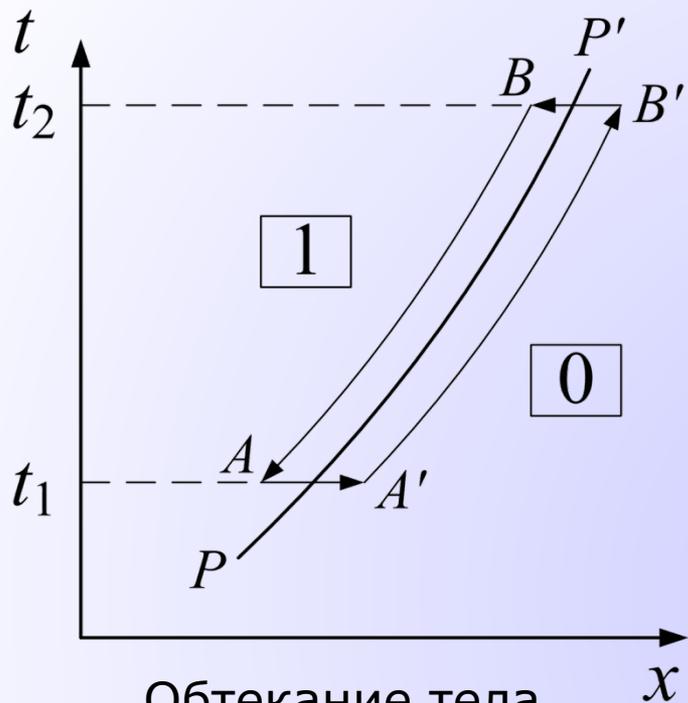
Конец XIX в. – начало XX в. – Михельсон, Чепмен, Жуге разрабатывают термодинамическую модель детонации, исходя из законов сохранения на сильном разрыве.



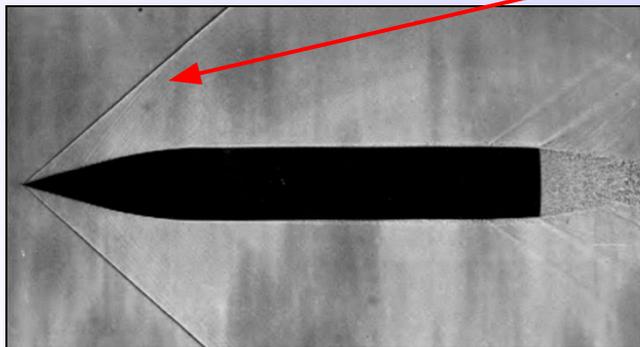
Д.Л. Чепмен (1869 – 1958) и Е. Жуге (1871 – 1943)

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

Лекция № 2 (15.09). Соотношения на разрыве.



Обтекание тела сверхзвуковым потоком



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

Соотношения Ренкина – Гюгонио:

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

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

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

Разрывы

Ударные волны

$$U_1 \neq U_0$$

$$p_1 \neq p_0$$

$$\rho_1 \neq \rho_0$$

Контактные – нет потока массы вещества через разрыв

$$U_1 = U_0 = D$$

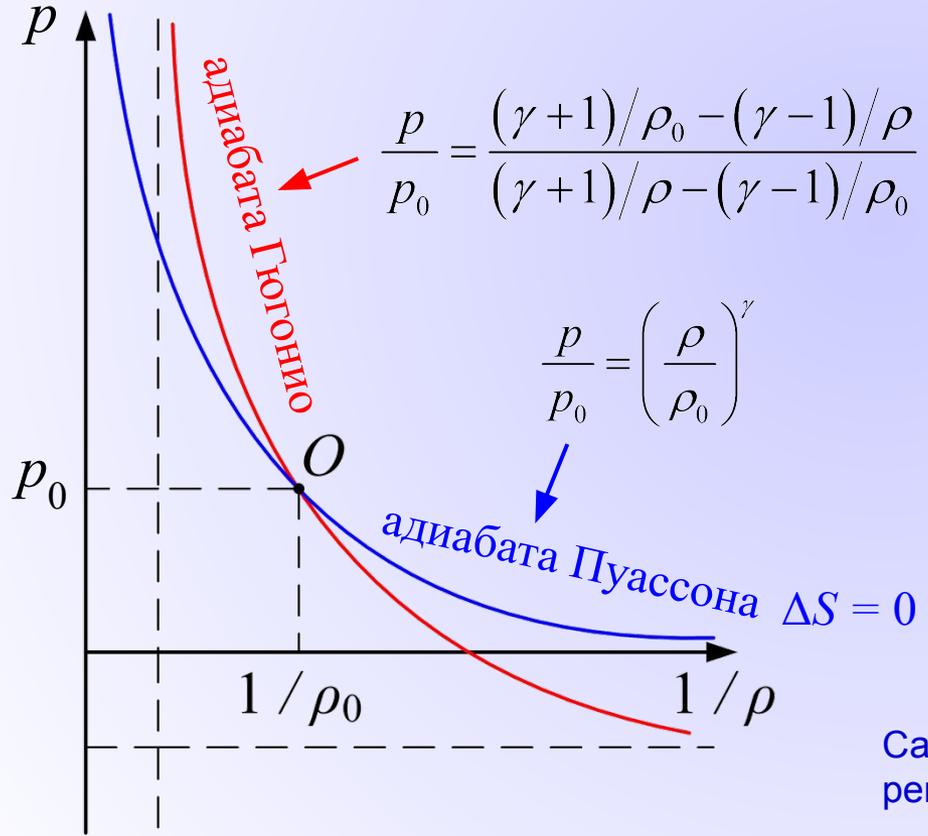
$$p_1 = p_0, \rho_1 \neq \rho_0$$

Лекция № 2 (15.09). Элементарная теория ударных волн.

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

Адиабата Гюгонио

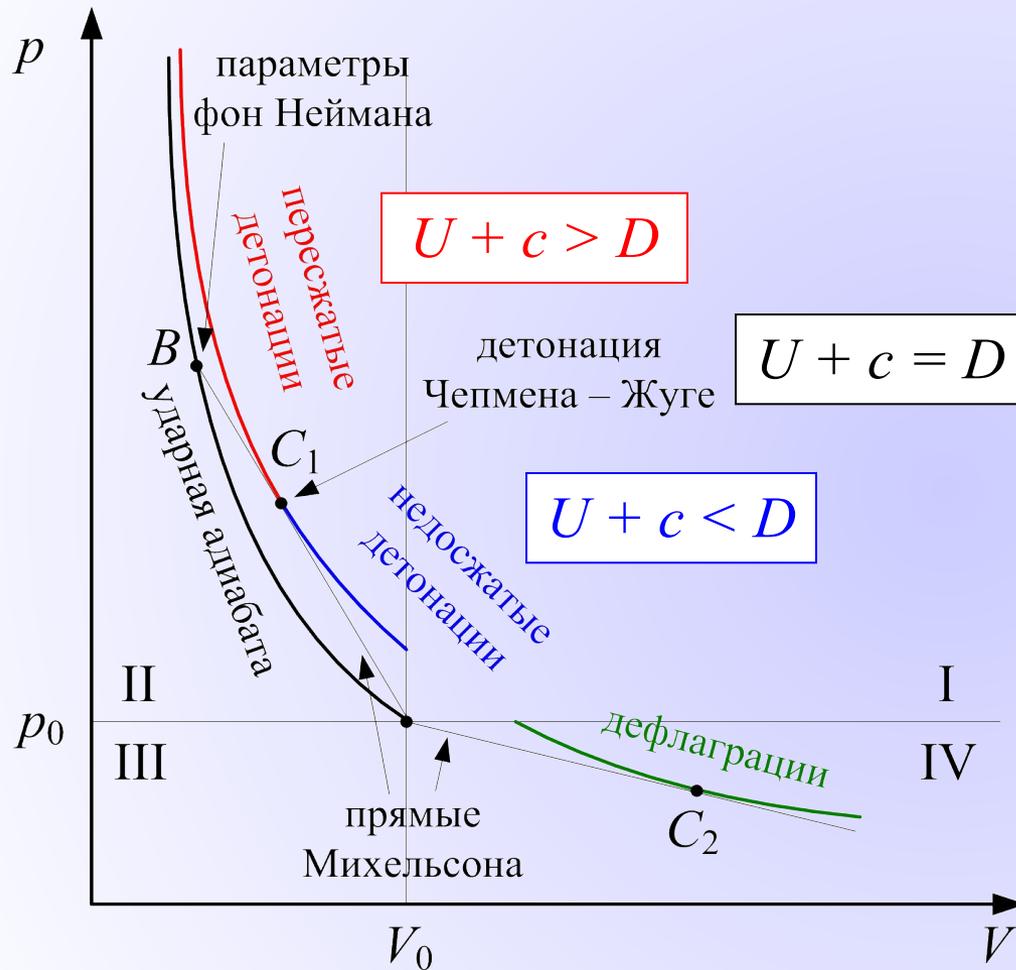
$$\rightarrow e_1(p_1, \rho_1) - e_0(p_0, \rho_0) = \frac{1}{2}(p_1 + p_0) \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho_1} \right) + e = \frac{p}{\rho(\gamma - 1)}$$



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

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

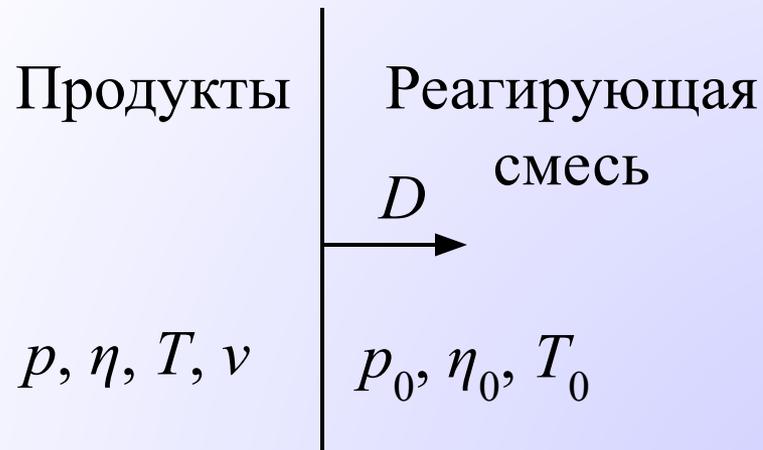
Лекция № 3 (22.09). Теория экзотермического скачка.



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

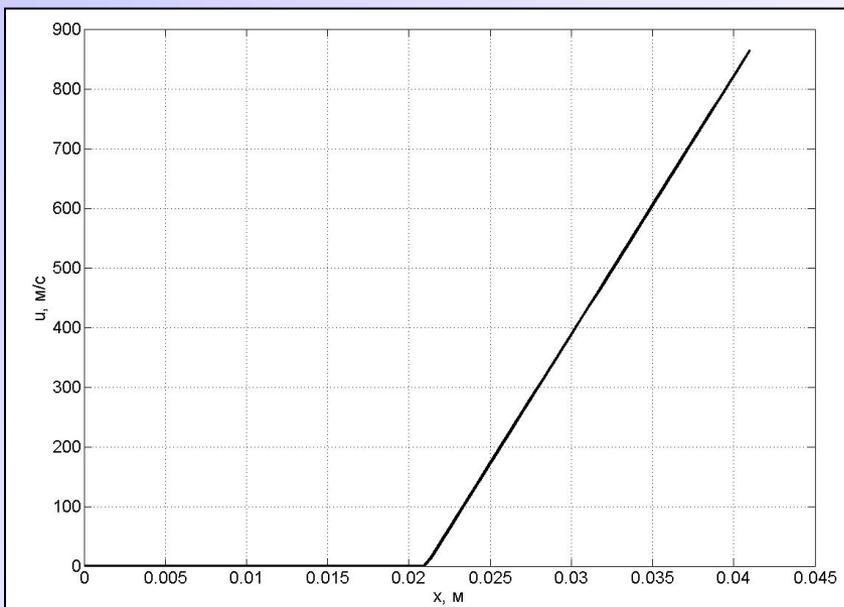
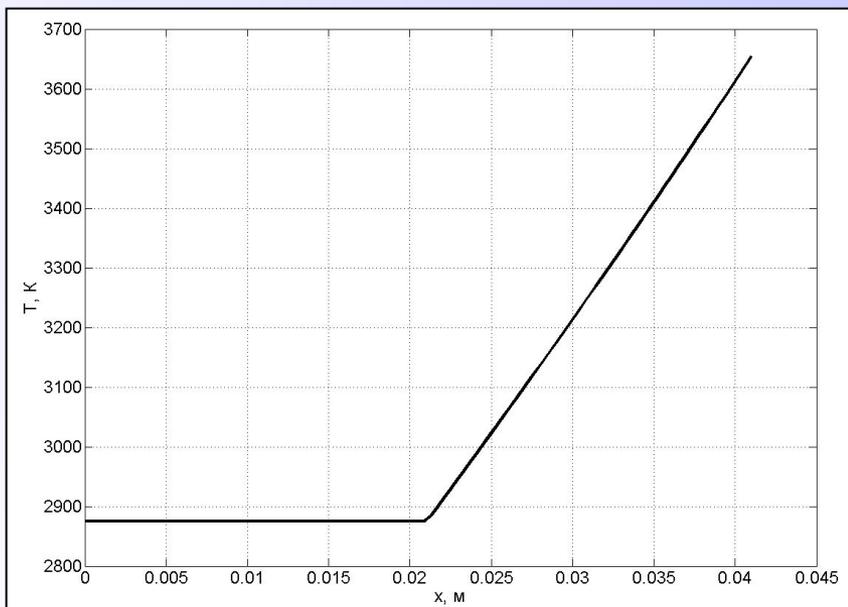
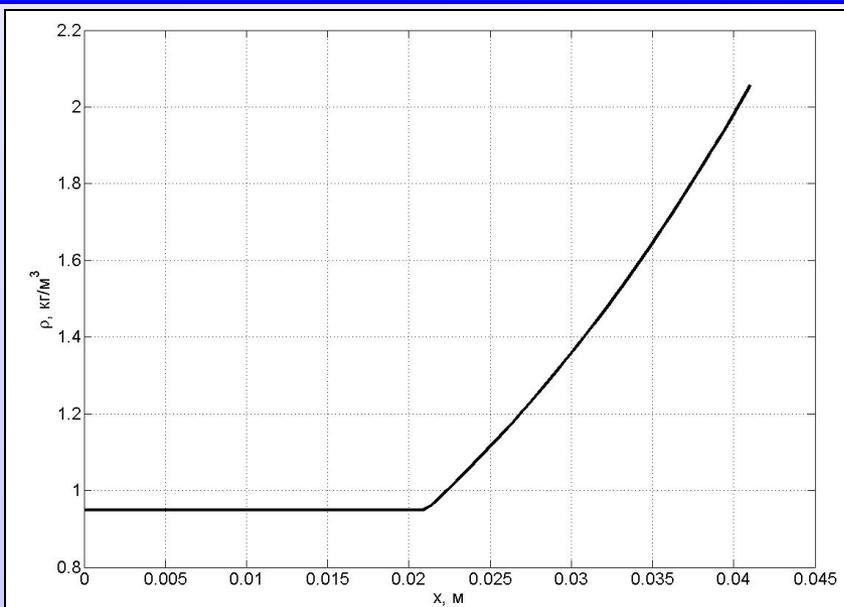
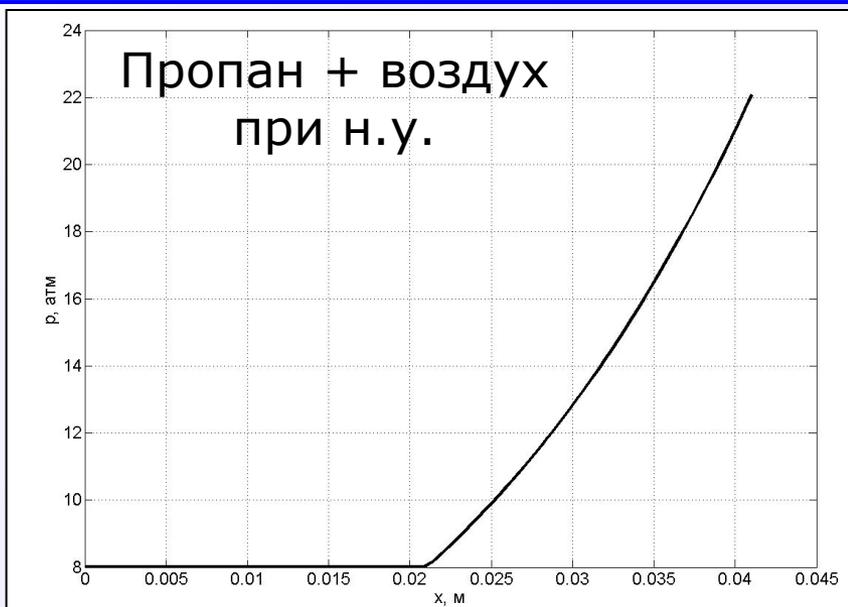
- Верхней точке касания прямой Михельсона в кривой Гюгонио C_1 соответствует минимальная скорость скачка для верхней ветви, а нижней точке касания C_2 – максимальная скорость скачка для нижней.
- Скорость скачка для всех точек верхней ветви кривой Гюгонио сверхзвуковая, а для нижней ветви – дозвуковая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

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

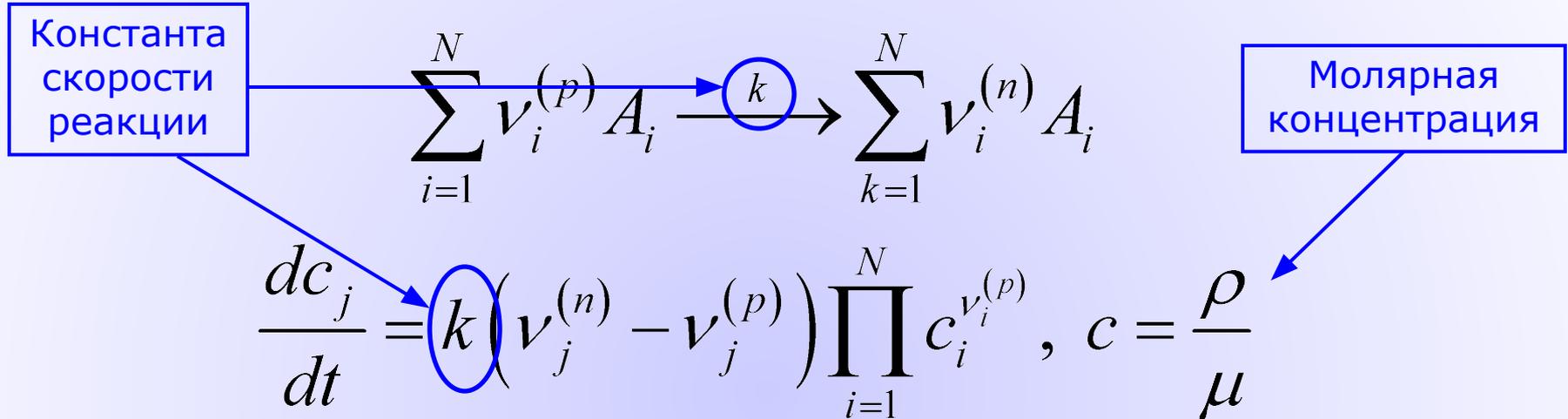


$$D|_{p_0=0, \gamma=\gamma_0} = \sqrt{2Q(\gamma^2 - 1)}$$

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



Для элементарной реакции:

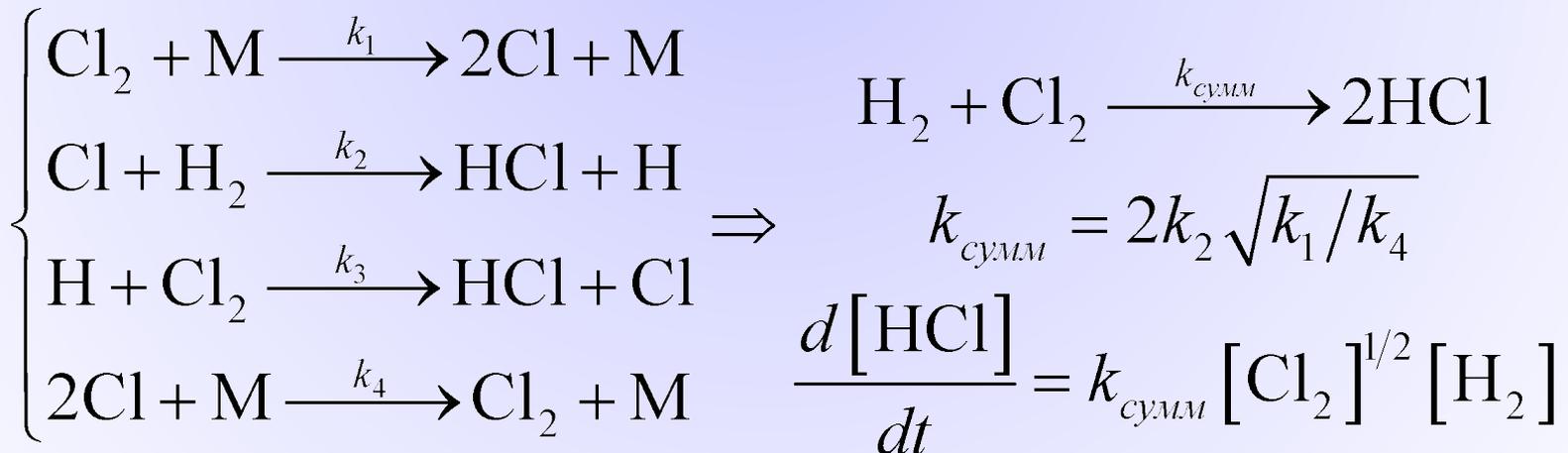
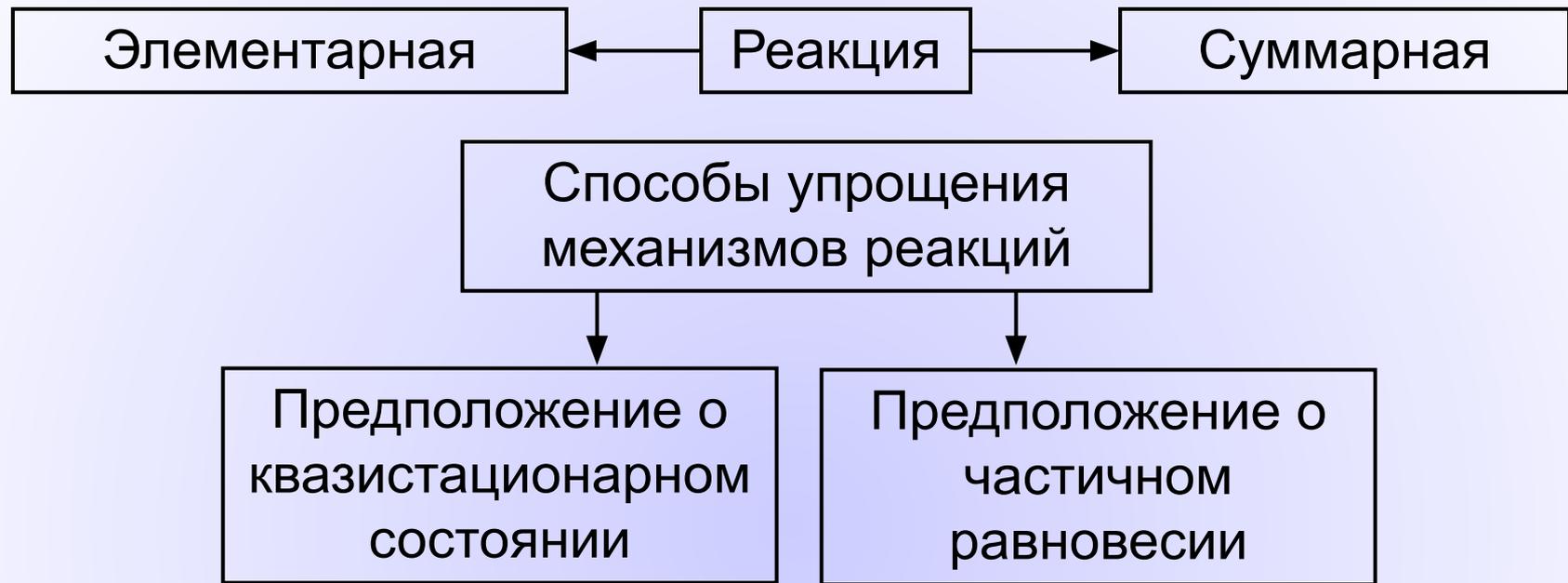


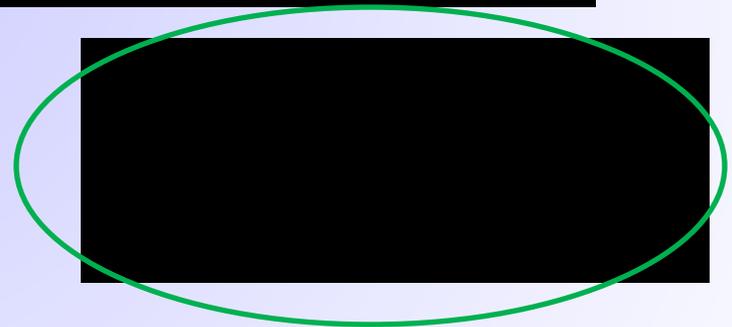
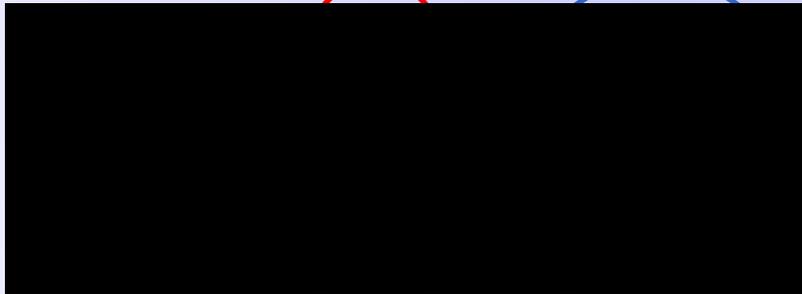
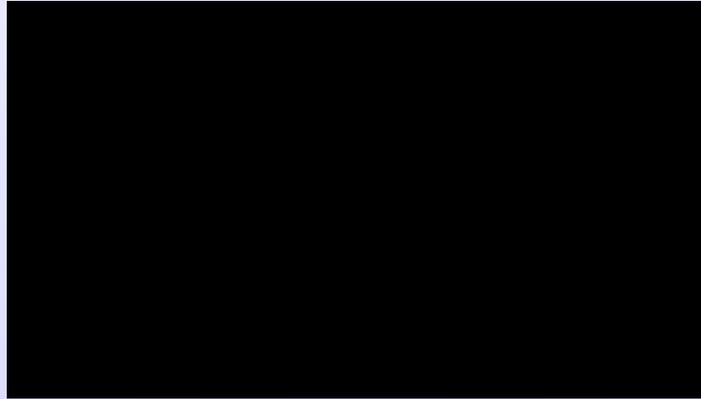
Для химических реакций характерна сильная и нелинейная зависимость констант скорости от температуры (закон Аррениуса, 1889 г.):

Константы

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

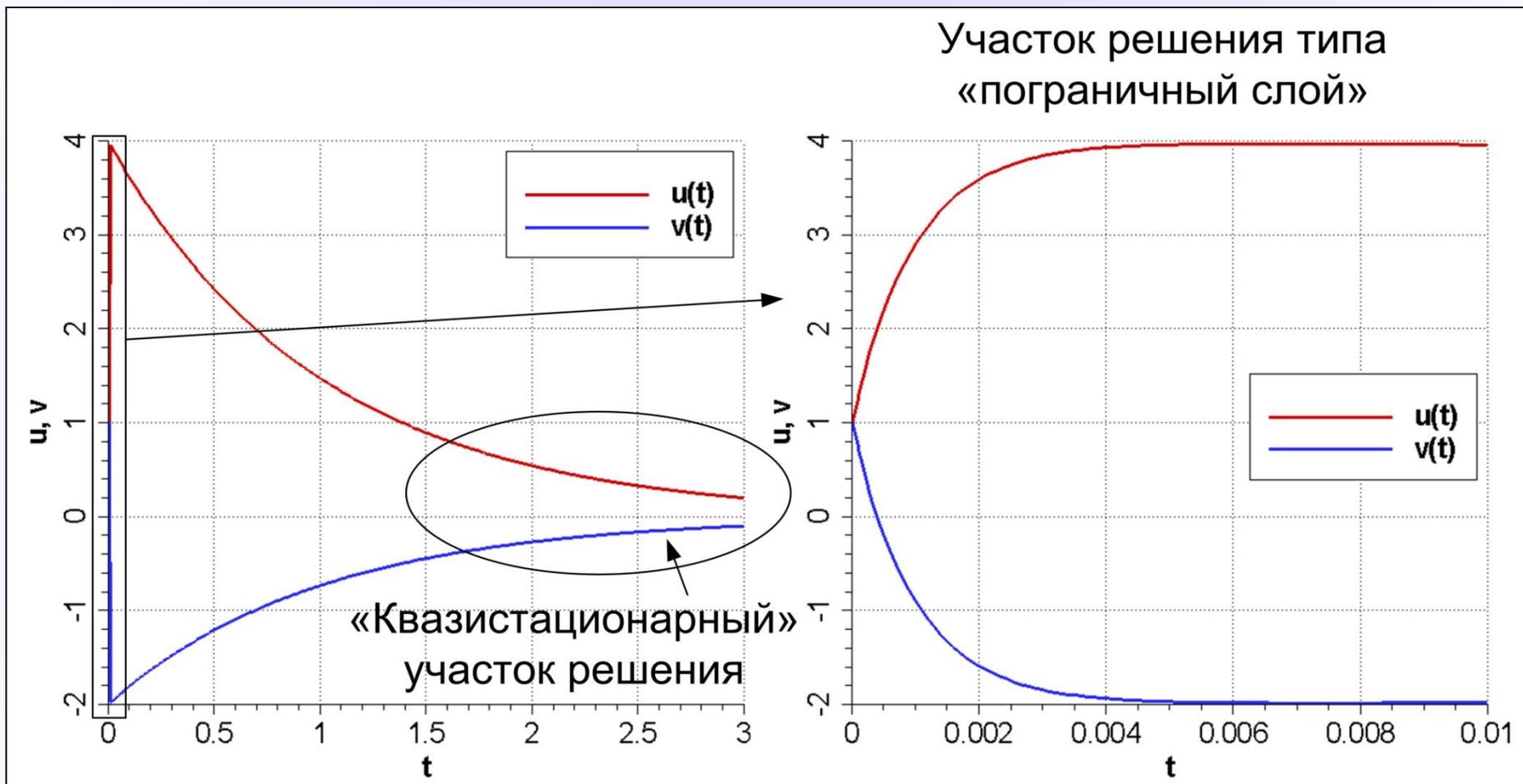
Энергия активации





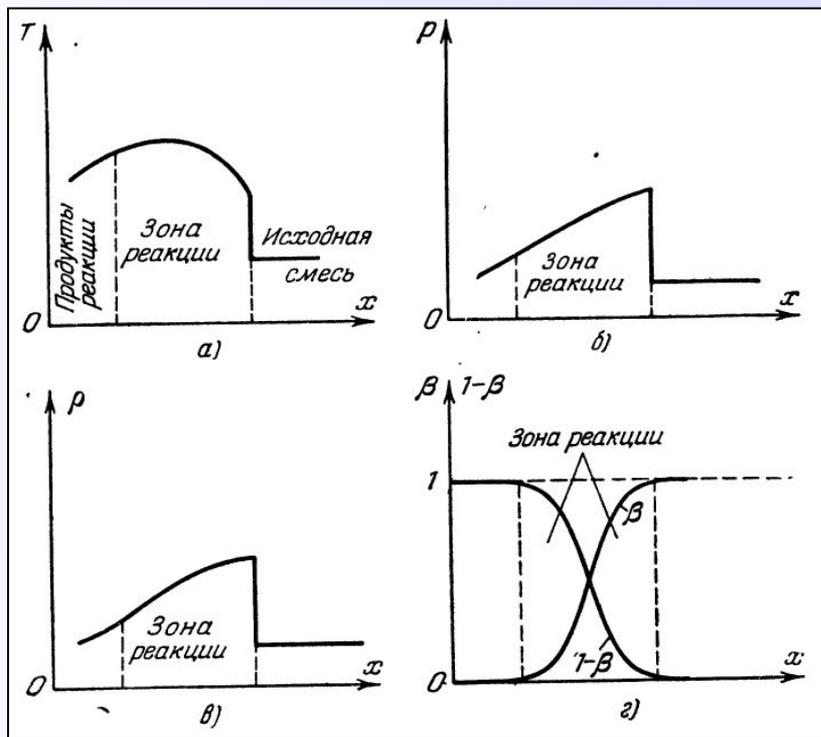
медленно убывает **быстро убывает** **определение жесткости**

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



Этап 3. Модель Зельдовича – Неймана – Деринга.

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

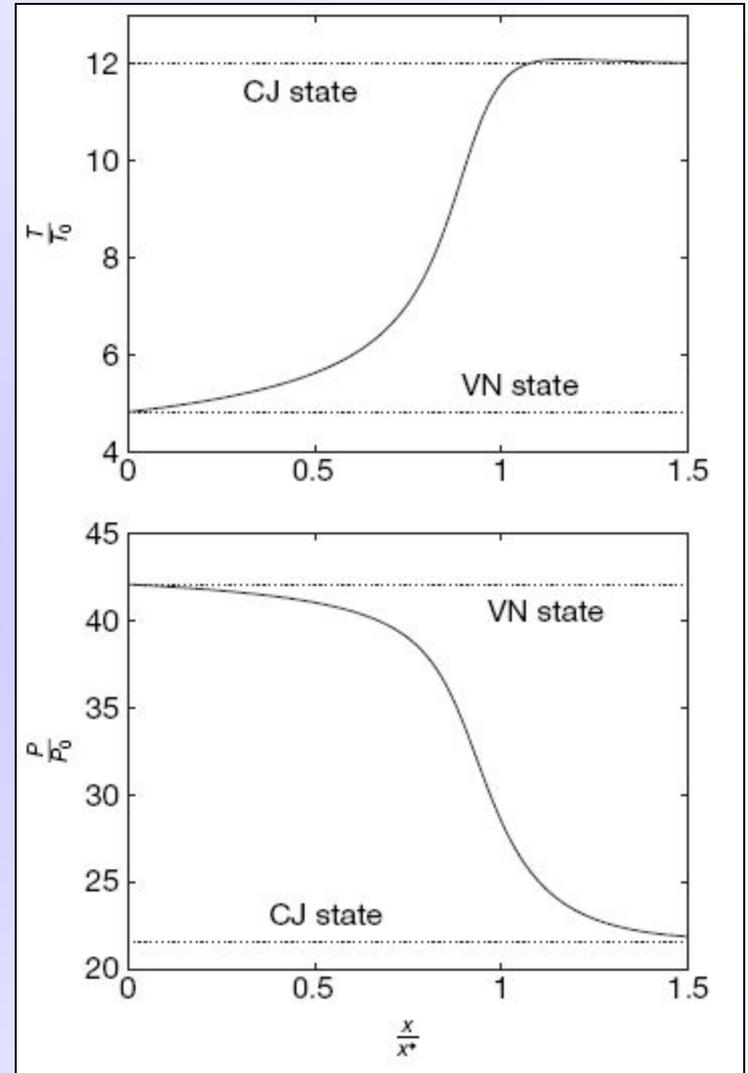


Я.Б. Зельдович, А.С. Компанец Теория детонации. – М.: Госуд. изд-во технико-технич. лит-ры, 1955. – С. 87.



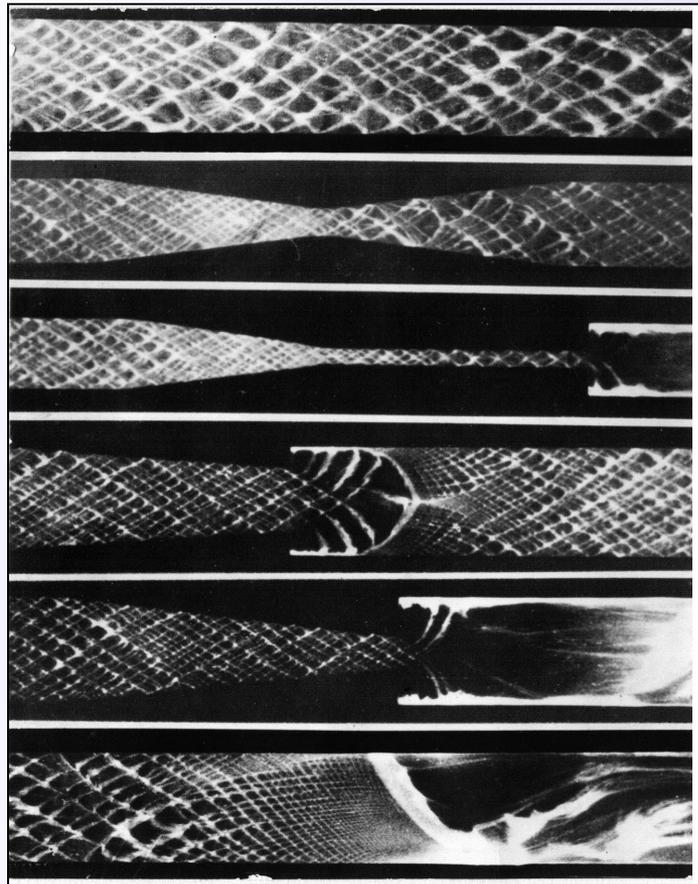
Я.Б. Зельдович (1914 – 1987), Дж. фон Нейман (1903 – 1957) и В. Деринг (1911 – 2006)

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

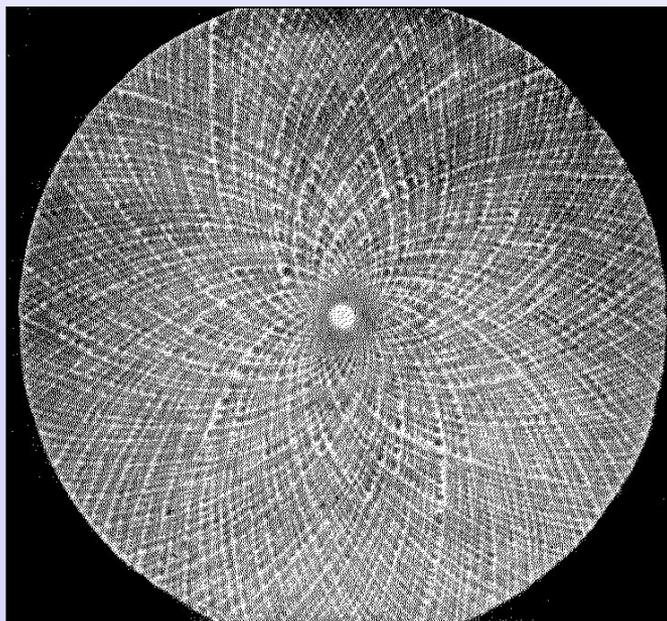


Lee J.H.S. The Detonation Phenomenon. – New York: Cambridge University Press, 2008. – P. 402.

Этап 4. Экспериментальные исследования.

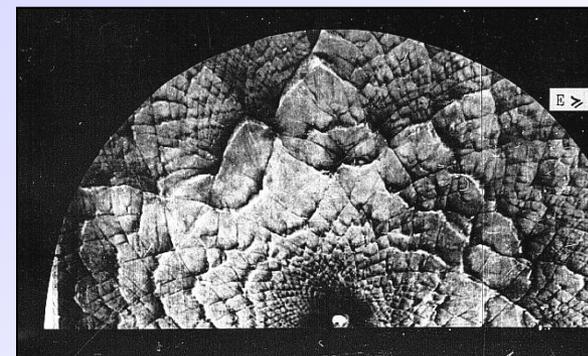
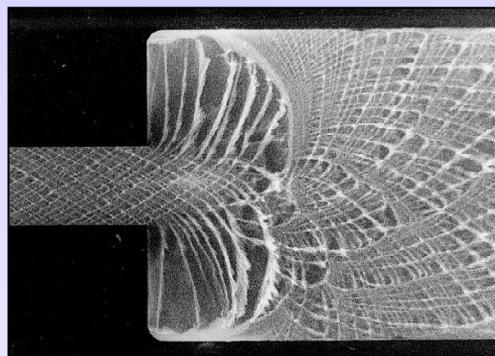


Следовые отпечатки
детонационной волны в плоских
каналах различной
конфигурации
Б.В. Войцеховский (1958 г.)



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

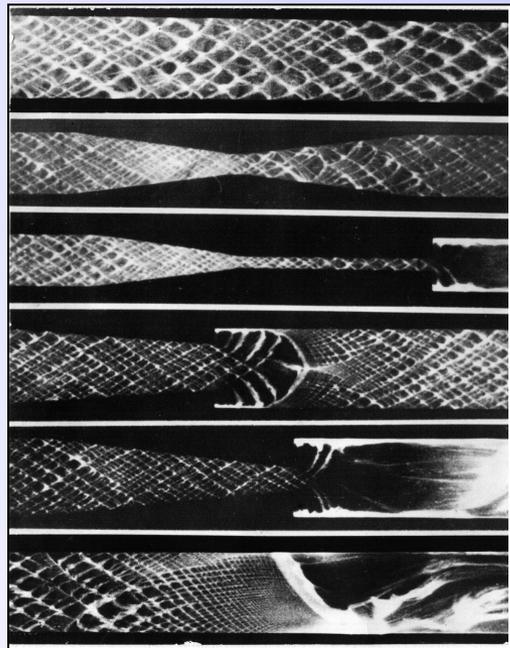
Опыты *А.А. Васильева* (ИГиЛ СО РАН) по дифракции волны
детонации из узкого канала в широкий и по прямому инициированию



Явление газовой детонации

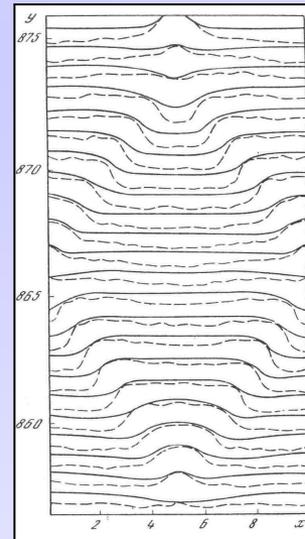
- **Детонация** – это гидродинамический волновой процесс распространения по веществу экзотермической реакции со сверхзвуковой скоростью.
- **Детонационная волна** – самоподдерживающийся ударный разрыв, за фронтом которого непрерывно инициируется химическая реакция вследствие нагрева при адиабатическом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

Натурные эксперименты

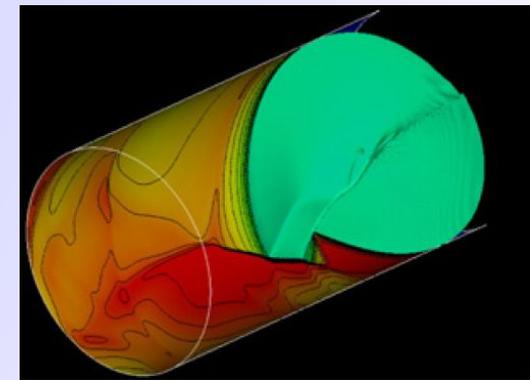


Фотографии детонационной волны в плоских каналах различной конфигурации
Войцеховский (1958 г.)

Вычислительные эксперименты



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



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

Актуальность моделирования в задачах горения

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

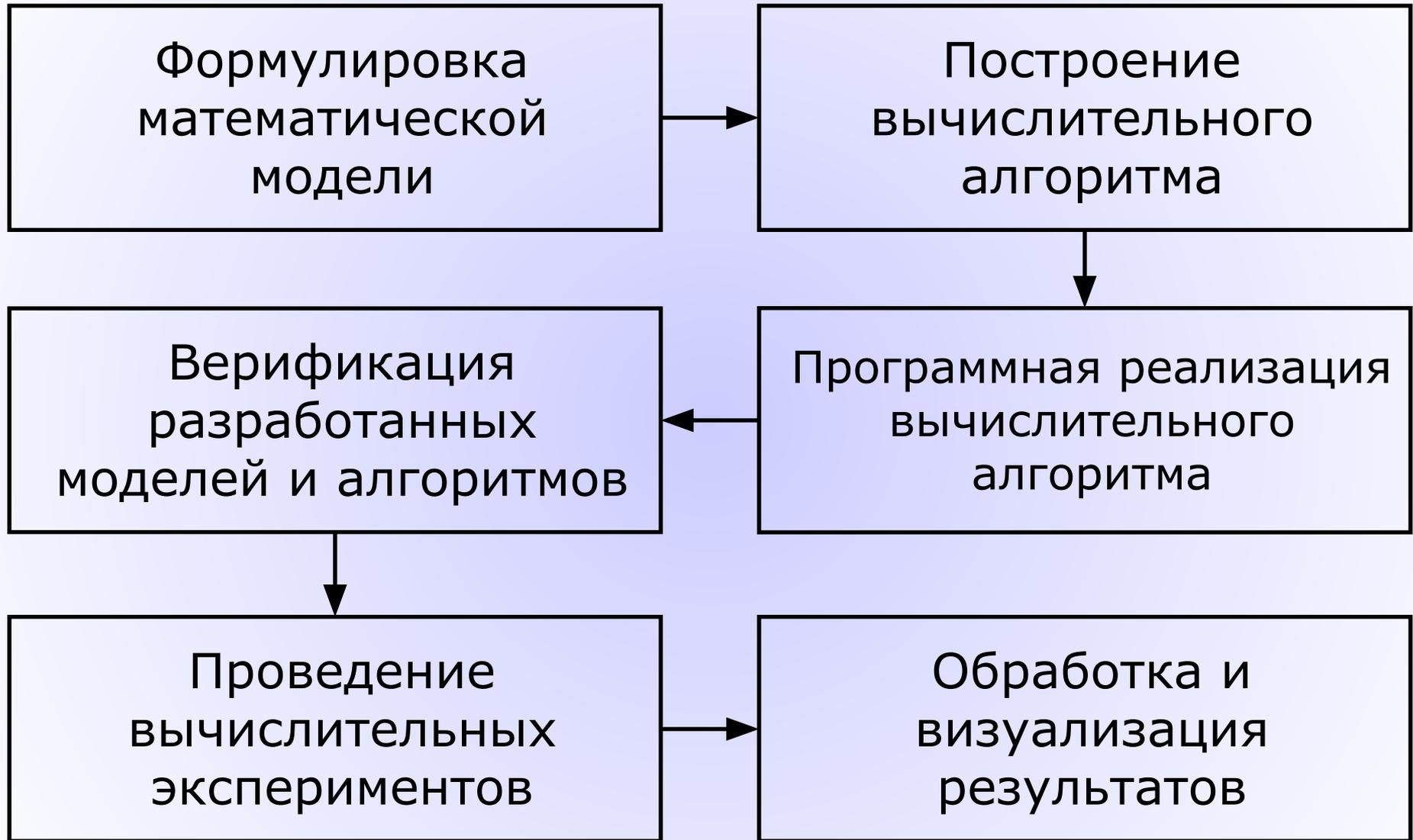


Сложности в проведении натурального эксперимента и принципиальная невозможность получения в натурном эксперименте многих характеристик процесса.



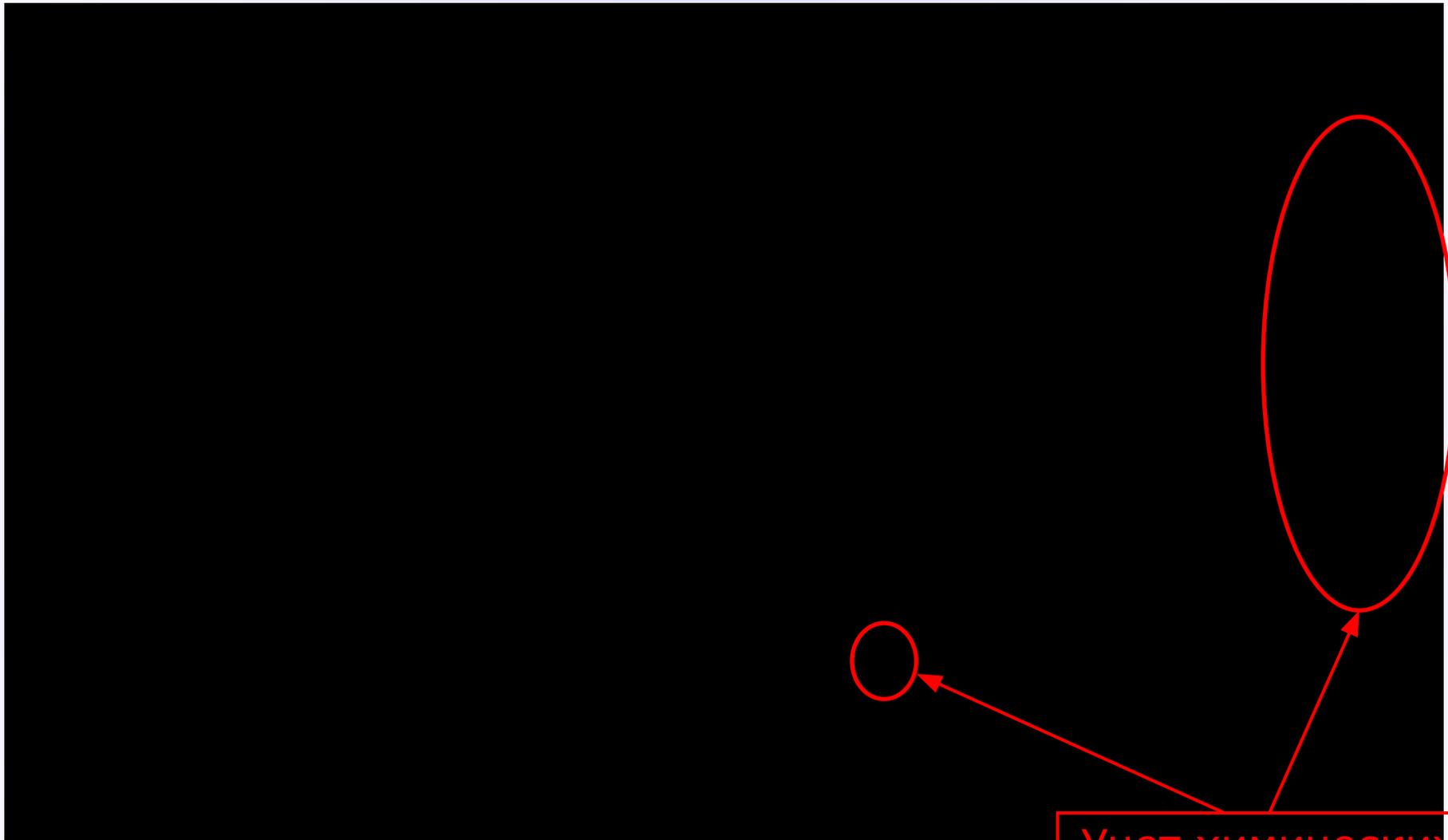
Необходимость построения математической модели явления, ее эффективной численной реализации и проведения **вычислительных экспериментов**.

Основные этапы проведения вычислительного эксперимента



Математические модели детонационных волн

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



Учет химических
реакций

Метод конечных объемов

Для произвольной компоненты вектора консервативных переменных:

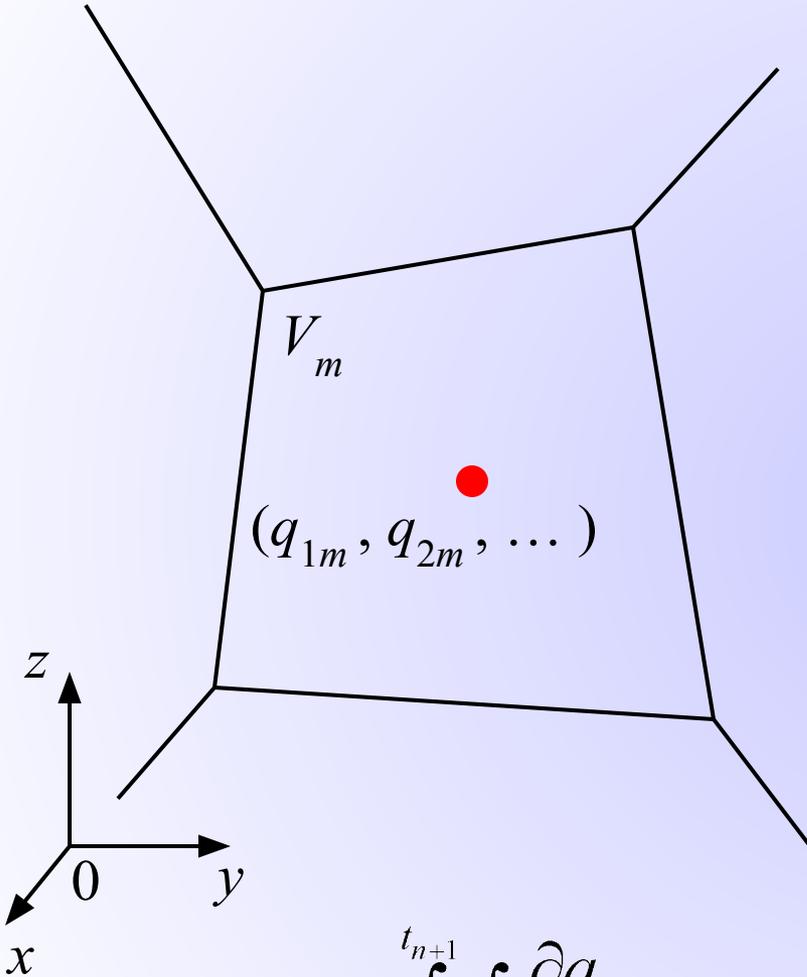
$$\frac{\partial q_m}{\partial t} + \frac{\partial f_{m1}}{\partial x} + \frac{\partial f_{m2}}{\partial y} + \frac{\partial f_{m3}}{\partial z} = 0$$

или

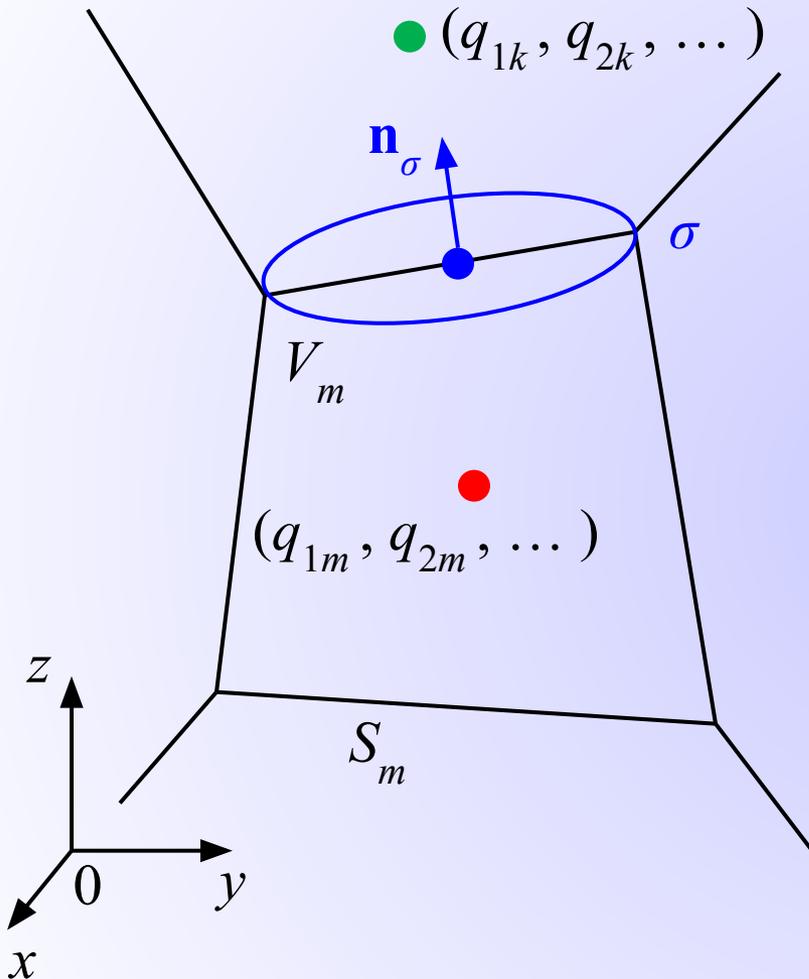
$$\frac{\partial q_m}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{f}_m) = 0$$

Проинтегрируем по объему ячейки расчетной сетки и по времени:

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



Метод конечных объемов



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

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

Аппроксимируем поверхностный интеграл через сумму интегралов по граням ячейки:

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

Основной вопрос – как определять численный поток?

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

Дивергентная форма записи (в форме законов сохранения)

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

Вектор консервативных переменных

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

Вектор потоков

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

Полная энергия

Внутренняя энергия (уравнение состояния)

Матрица
Якоби

Характеристическая
форма

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

Скорость звука

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

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

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

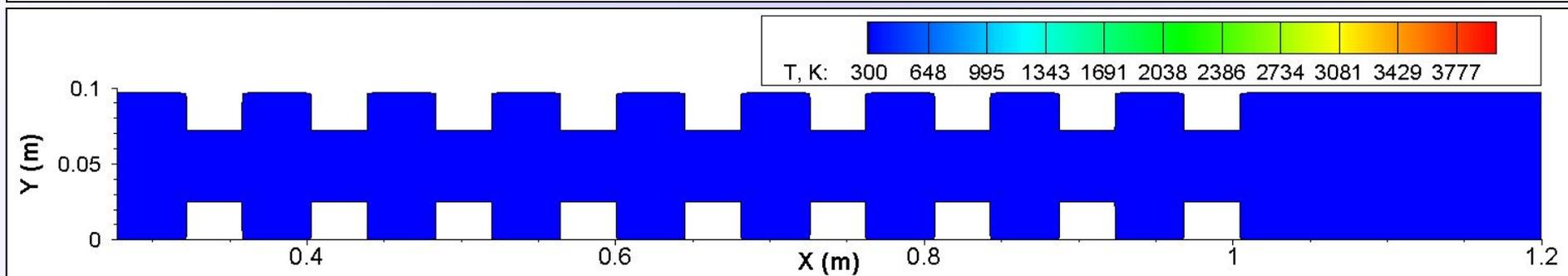
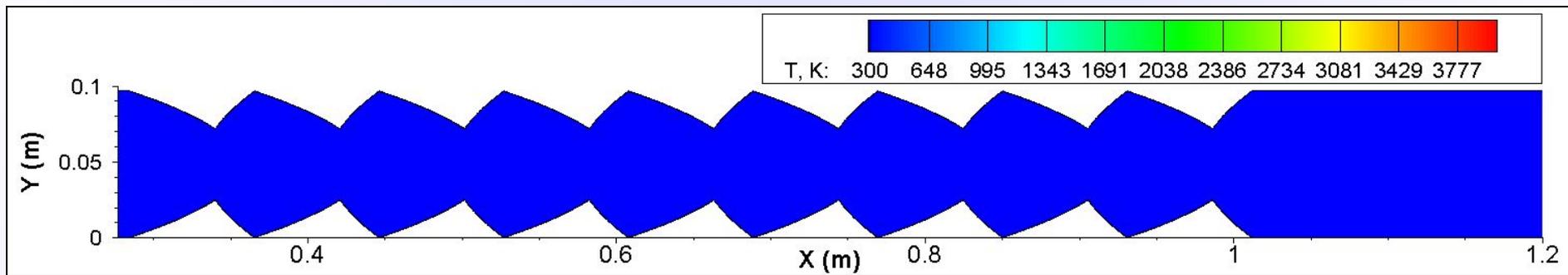
$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x} = \mathbf{0}$$

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

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

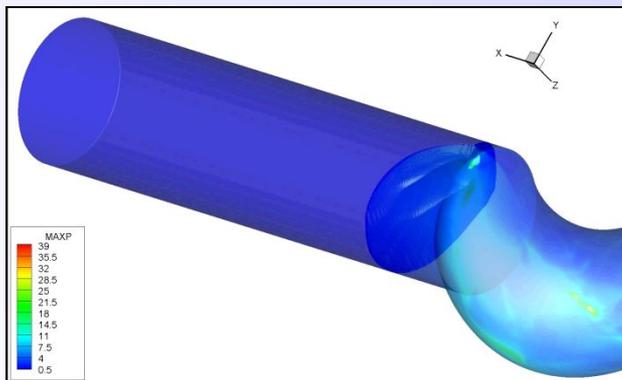
$$\mathbf{q}(x, 0) = \begin{cases} \mathbf{q}_R & \text{при } x > 0 \\ \mathbf{q}_L & \text{при } x < 0 \end{cases}$$

Численное исследование реагирующих потоков



Иницирование детонации в плоском канале с параболическим профилем стенок

Иницирование детонации в винтовой трубе



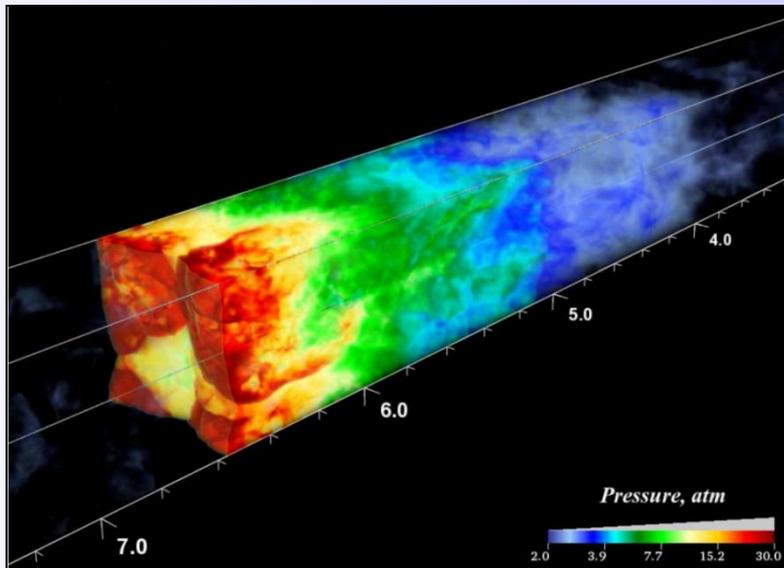
Semenov, I., Akhmedyanov, I., Lebedeva, A., Utkin, P. Three-dimensional numerical simulation of shock and detonation waves propagation in tubes with curved walls // Science and Technology of Energetic Materials. – 2011. – Vol. 72, No. 4. – P. 116– 122.

Трёхмерные исследования детонационных процессов

Трудности при трёхмерном исследовании нестационарных переходных режимов и эффектов, связанных с геометрией трубы:

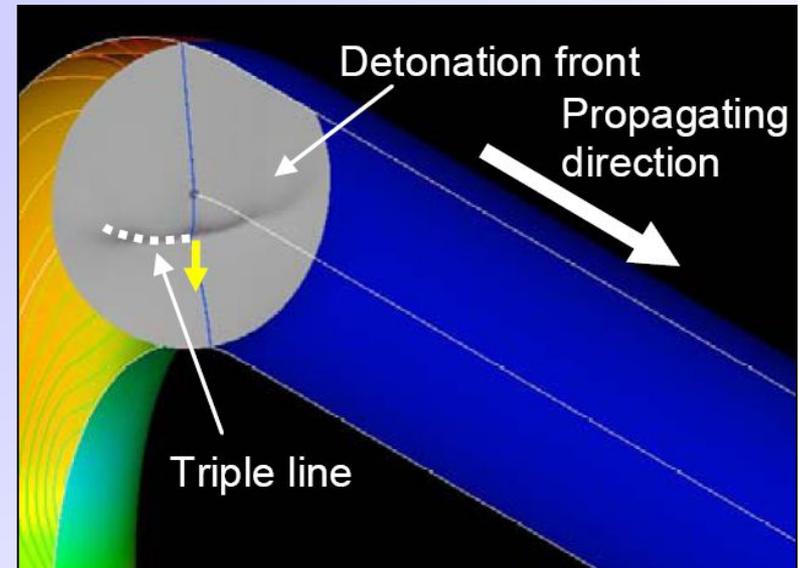
- вычислительная сложность и затраты по памяти;
- генерация неструктурированных сеток для областей со сложной геометрией;
- сложности построения схем высокого порядка на неструктурированных сетках;
- эффективная параллелизация вычислительного алгоритма.

Трёхмерный расчет перехода горения в детонацию на сетке с числом ячеек \sim **270 млн.**



Poludenko A.Y., Gardiner T.A., Oran E.S. Deflagration-to-Detonation Transition in Unconfined Media // Proc. 23rd ICDERS. July 24 – 29, 2011. Irvine, USA.

Трёхмерный расчет распространения детонационной волны в трубе с изгибом



Tsuboi N. et al. Three-dimensional Simulations of H_2/O_2 Detonation in a Round Bent Tube // Proc. 8th ISHPMIE. September 5 – 11, 2010. Yokohama, Japan.

Очень краткая история параллельных вычислений

1950-ые

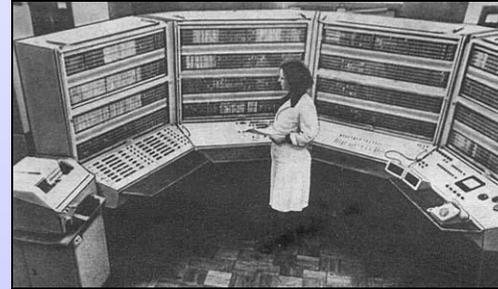


Женщины с арифмометрами,
работали пока не уставали...

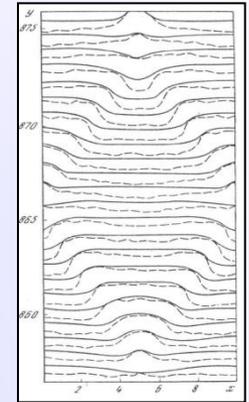


Первая Советская
атомная бомба

1970-ые



БЭСМ-6, **1 MFlops**

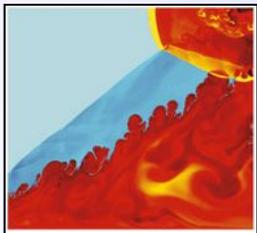


Моделирование
детонационной ячейки
(В.В. Марков, 1981)

1990-ые



Кластеры типа Beowolf, **~ 10 GFlops**

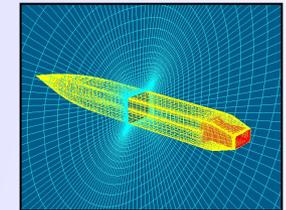


Двумерное
моделирование
горения и детонации
(E.S. Oran et al.)

2012 год



Tianhe-2 (Китай),
более 3 000 000 вычислительных
ядер, **~ 55 PFlops**



Сложные трехмерные
расчетные сетки



Трехмерное
вычислительное
горение

Фундаментальные проблемы теории детонации

- Распространение волны детонации в зарядах взрывчатых веществ критического диаметра
- Определение критических условий инициирования детонации в сверхзвуковом потоке
- Дифракция детонационной волны – переход установившейся детонации из трубы в неограниченное пространство, определение критического диаметра трубы
- Дифракция пламени – спонтанное инициирование детонации в волне разрежения
- Определение критических условий прямого инициирования газовой детонации, оптимизация инициирования за счет пространственных и временных факторов
- Оптимизация перехода горения в детонацию и ударно-волнового инициирования за счет геометрических факторов
- Эффект добавок

Vasil'ev A.A. Outstanding Problems in Gaseous Detonations // Appl. of Deton. to Propul. / Eds. G. Roy et al. – M.: Torus Press, 2004. – P. 3 – 10.

Практическая значимость

Детонационное горение

Фундаментальная составляющая

Исследование механизмов и критических условий инициирования и распространения волн газовой детонации



Первый полет самолета с импульсным детонационным двигателем длился около 10 секунд (январь 2008)

Прикладная составляющая

Пожаро- и взрывобезопасность

Импульсное детонационное горение

Детонация природного газа с воздухом:

- замена жаровых труб в газотурбинных установках;
- импульсные горелки;
- дробление и газификация тяжелых фракций нефти и угля, бытовых и промышленных отходов.

Вместо заключения. Совсем немного философии.

«Взрыв ядерной бомбы – это одновременное протекание многих взаимосвязанных процессов – деления ядерного горючего нейтронами, распространения образующихся при этом нейтронов, выделения энергии и ее переноса по веществу, газодинамического разлета чудовищно разросшегося вещества. Все эти процессы описываются системой нелинейных уравнений в частных производных. Такие задачи ни физики, ни математики в 1947 – 48 г.г. не умели решать. В 1947 году заканчивались конструкторские работы по созданию советской атомной бомбы. Возник вопрос о теоретическом прогнозе мощности взрыва...

Присутствовавший на семинаре А.Н.Тихонов предложил провести методом конечных разностей прямой расчет взрыва на основе полных моделей физических процессов (распространения нейтронов и тепла, ядерного горения и газодинамики)... В то время ни теории, ни опыта практического применения разностных схем для сложных задач математической физики фактически не было. Поэтому это заявление было неожиданным для физиков и вызвало реплику Л.Д. Ландау, что такой расчет был бы подвигом...

Работы, связанные с созданием атомного и водородного оружия, привели к колоссальному ускорению развития не только многих разделов техники, физики, химии, но и перестройке математических наук в связи с появлением компьютеров и вычислительных методов. *Ведущую роль в познании теперь играет математическое моделирование с технологией математического эксперимента.»*

Самарский А.А. Прямой расчет мощности взрыва // Сборник трудов Международного Симпозиума Наука и общество – история совместного атомного проекта (40-е – 50-е годы), Дубна, 14 – 15 мая 1996. – Т. I. – С. 1 – 9.

Требования к выставлению оценки по курсу

Максимальный балл за семестр – 100. Из них:

- Первое задание – максимум 30 баллов (в срок предоставлена работающая программа – 15 баллов, в срок предоставлен отчет с описанием метода, анализом сходимости и верным результатом – 15 баллов). Каждая следующая неделя задержки – уменьшение максимума на 10%.
- Второе задание – максимум 30 баллов (в срок предоставлена работающая программа – 15 баллов, в срок предоставлен отчет с описанием метода, анализом порядка аппроксимации метода и верным результатом – 15 баллов). Каждая следующая неделя задержки – уменьшение максимума на 10%.
- Ответ на теоретический вопрос на зачете – максимум 30 баллов
- Посещение лекций – максимум 10 баллов (1 балл за лекцию)

Соответствие баллов и оценки:

80 – 100 – отлично, 50 – 79 – хорошо, 30 – 49 – удовлетворительно

1. Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. – М.: Физматлит, 2006. – 352 С.
2. Физика взрыва / Под ред. Л.П. Орленко. – Изд. 3-е испр. – Т. 1. – М.: Физматлит, 2004. – 832 С.
3. Lee J.H.S. The detonation phenomenon. – Cambridge University Press, 2008. – 402 P.
4. Зельдович Я.Б., Компанеец А.С. Теория детонации. – М.: Госуд. изд-во технико-технич. лит-ры, 1955. – 268 С.