

На правах рукописи

Максимов Дмитрий Юрьевич

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРОЦЕССОВ ГОРЕНИЯ В ПРЕДВАРИТЕЛЬНО
ПЕРЕМЕШАННОЙ ГАЗОВОЙ СМЕСИ**

05.13.18 — Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва 2008

Работа выполнена в Институте прикладной математики имени М. В. Келдыша РАН

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук,
доцент Пергамент Анна Халиловна

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Иванов Михаил Фёдорович

доктор физико-математических наук
Кулешов Андрей Александрович

Ведущая организация: Институт проблем безопасного развития
атомной энергетики РАН

Защита состоится 13 ноября 2008 г. в 13 час 00 мин на заседании диссертационного совета Д 002.058.01 при Институте математического моделирования РАН по адресу: 125047, Миусская пл., д. 4а.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИММ РАН.

Автореферат разослан 10 октября 2008 г.

Учёный секретарь
диссертационного совета Д 002.058.01,
д. ф.-м. н.

Н. В. Змитренко

Актуальность

В настоящее время значительный интерес вызывает исследование процессов горения в перемешанной смеси газов. Этот интерес предопределён тем, что позволяет выбрать оптимальные режимы горения, обеспечивающие эффективность работы двигателей внутреннего сгорания.

В настоящей диссертации рассмотрена постановка задачи горения, широко обсуждаемая в настоящее время в значительном количестве работ¹. При этом предполагается, что и топливо, и сгоревшее вещество находятся в газообразном состоянии. Кроме того, будем рассматривать пламя только в предварительно перемешанной газовой смеси (premixed flame). В отличие от диффузионного пламени (diffused flame), в этом случае все компоненты, необходимые для реакции, присутствуют в топливе с самого начала в виде однородной смеси; реакция может начаться при подводе тепла без дополнительных диффузионных процессов. Тем не менее, полностью пренебречь диффузией невозможно даже при исследовании горения в предварительно перемешанной смеси, так как скорость распространения фронта пламени зависит от коэффициентов переноса в зоне горения (в том числе — от диффузии).

Наиболее типичными экзотермическими режимами горения являются дефлаграция, или пламя, (медленный дозвуковой режим) и детонация (быстрый сверхзвуковой режим). В первом случае реакция распространяется благодаря теплопроводности, переносящей энергию от более нагретых продуктов горения к более холодному топливу. Во втором случае нагрев вызван ударными волнами, которые сжимают топливо, увеличивая при этом его температуру. Экспериментально неоднократно наблюдался спонтанный переход медленного горения в детонацию. Следует отметить, что предотвращение перехода от дефлаграции к детонации является важней-

¹ V. V. Bychkov, M. A. Liberman Dynamics and stability of premixed flames // Phys. Rep. 2000. V. 325. No 4–5. P. 115–237;

S. Kadowaki, T. Hasegawa Numerical simulation of dynamics of premixed flames: flame instability and vortex-flame interaction // Prog. En. Combust. Sci. 2005. V. 31. No 3. P. 193–241;

V. Akkerman, V. Bychkov Velocity of weakly turbulent flames of finite thickness // Combustion Theory and Modelling. 2005. V. 9. No 2. P. 323–351.

шей задачей безопасности жизнедеятельности. С другой стороны, контролируемый переход в детонацию важен для целого ряда инженерных задач. В частности, он лежит в основе работы новейших реактивных двигателей сверхзвуковых самолётов.

Высокая стоимость экспериментов в этой области с одной стороны, сложная теория в общей постановке с другой, приводят к необходимости проведения математического моделирования, т. е. к постановке задач, описывающих как устойчивые процессы, так и развитие неустойчивости и переход к детонации, разработке численных методов для решения жёстких задач, описывающих процессы горения, а также проведения циклов расчётов, позволяющих исследовать различные режимы.

Цель работы

Целью настоящей работы является изучение динамики и устойчивости процессов горения в предварительно перемешанной смеси воздуха и углеводородов, исследование развития неустойчивости Дарье–Ландау фронта пламени и формирования промежуточных асимптотик, а также переход от режимов медленного горения к детонации. Рассматриваются задачи с граничными условиями двух типов: проскальзывание и прилипание на стенках.

Особенностью двумерных и трёхмерных задач, моделирующих процессы горения, является жёсткость задачи, определяемая тем, что неустойчивы достаточно длинноволновые поперечные возмущения, характерные пространственные масштабы которых много больше ширины фронта L_f . L_f — математический параметр, определяемый из размерностного анализа по формуле $L_f = k/U_f$, где k — коэффициент температуропроводности, U_f — скорость распространения пламени; реальная ширина фронта на порядок меньше. Для реальных задач критическое значение длины волны, выше которой возмущения неустойчивы, составляет $\lambda_c \approx (20 \div 100)L_f$, так что для исследования неустойчивых режимов горения необходимо рассматривать поперечные размеры области существенно бóльшие, чем характерный размер в продольном направлении L_f . Кроме того, исследование асимптотики

рассматриваемых процессов требует рассмотрения значительных продольных масштабов, порядка сотни L_f и более. Таким образом, как поперечные, так и продольные актуальные размеры задачи существенно превышают характерный масштаб L_f . Это предъявляет жёсткие требования к выбору алгоритмов.

Для решения жёстких задач, описывающих процессы горения, необходимо иметь экономичные эффективные алгоритмы. В данной работе рассматриваются алгоритмы, основанные на методе расщепления по процессам, схеме высокого разрешения для гиперболической части уравнений и неявной схеме для той части, которая описывает диссипативные процессы вязкости и теплопроводности. Для разработки алгоритмов в гиперболической части в качестве основы взяты методы, развитые Ю. Б. Радвогиным² для системы уравнений газодинамики.

Научная новизна

В работе показана применимость метода расщепления по процессам для рассматриваемого типа задач, разработаны термодинамически обусловленные разностные схемы расщепления, которые корректно описывают процесс превращения механической энергии в тепловую, исследованы различные наиболее употребительные лимитеры в гиперболической части задачи на применимость для данного типа методов решения. Создан комплекс программ для машин с параллельной архитектурой, позволивший за приемлемое время произвести исследование численными методами явлений неустойчивости Дарье–Ландау, как первичной, так и вторичной. Показано наличие промежуточной асимптотики, предшествующей формированию устойчивого режима дефлаграции для гладких стенок трубы, и продемонстрирована возможность перехода к детонации в случае наличия прилипания на стенках.

²Yu. B. Radvugin, N. A. Zaitsev Multidimensional minimal stencil supported second order accurate upwind schemes for solving hyperbolic and Euler systems: Preprint, No 22. KIAM, RAS. 1996.

Практическая и научная ценность

В работе разработан новый класс термодинамически обусловленных разностных схем расщепления, что позволило рассмотреть сложные процессы развития первичной и вторичной неустойчивости Дарье–Ландау. Разработанные алгоритмы и созданные программы представляют интерес для исследования режимов горения в камерах двигателей внутреннего сгорания, как в режиме стационарного пламени, так и для моделирования перехода к детонации.

Ожидается, что результаты данной диссертации будут полезны при создании новых камер сгорания, в частности, при конструировании топков котлов, газовых турбин и карбюраторных двигателей.

Применяемые в диссертации подходы и методы могут быть использованы для численного решения задачи химической кинетики в более общей постановке с дополнительными компонентами, а также при рассмотрении течений в областях сложной формы.

Обоснованность и достоверность

Достоверность полученных в диссертационной работе результатов обеспечивается сравнением с рядом опубликованных апробированных работ, применением численных методов, как хорошо обоснованных теоретически, так и проверенных на тестовых задачах, которые сформулированы на основе опубликованных результатов ведущих исследователей в этой области, а также сопоставлением с данными эксперимента.

Апробация результатов

Основные положения и результаты работы докладывались и обсуждались на следующих научных конференциях и семинарах:

1. X, XI, XIII и XV школа–семинар «Современные проблемы аэрогидродинамики», Сочи, «Буревестник» МГУ, сентябрь 2002, 2003, 2005 и 2007.

2. Научная конференция «Ломоносовские чтения», апрель 2006 и 2007.
3. XVI Всероссийская конференция «Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов и решение задач математической физики с приложением к многопроцессорным системам», посвящённая памяти К. И. Бабенко, Абрау–Дюрсо, Новороссийск, сентябрь 2006.
4. Семинар отдела № 11 ИПМ им. М. В. Келдыша РАН «Вычислительные методы и математическое моделирование» под рук. член-корр. РАН Ю. П. Попова и проф. М. П. Галанина, июнь 2008.

Публикации и личный вклад автора

Результаты диссертации с достаточной полнотой отражены в 11 научных работах, среди которых две публикации в реферируемых журналах [7, 11], два препринта [3, 5], а также семь докладов в сборниках материалов и тезисов научных конференций [1, 2, 4, 6, 8–10].

В [1–3] автору принадлежит вариант схемы с расщеплением для двумерной постановки задачи горения, его численная реализация, исследование применимости разностных алгоритмов в гиперболической части, включая схему на границе, исследование применимости общеупотребительных лимитеров для рассматриваемого класса задач.

В [4–6] автору принадлежит метод учёта в разностной схеме положительности источника диссипации в уравнении теплопроводности, доказательство предложенной аппроксимации и показана необходимость учёта положительности диссипативного члена для ряда задач. Численно реализована диссипативная часть задачи.

В [7] автором выполнен тестовый расчёт с начальными условиями в виде окружности и эллипса и расчёт задачи Зельдовича–Франк–Каменецкого с условиями прилипания на стенках.

В [8] автором выполнен расчёт задачи об «осцилляционном фронте».

В [9–11] автором проведён расчёт задачи с условием прилипания на стенках в каналах различной ширины, проведено исследование поведения

фронта при различных типах начальных возмущений в задачах с условиями проскальзывания.

Структура и объём диссертации

Диссертация состоит из Введения, трёх Глав, Заключения и Списка литературы из 59 наименований. Работа изложена на 83 страницах, содержит 27 рисунков.

Содержание работы

Во **Введении** проведён обзор литературы и обоснована актуальность темы. Описаны основные режимы горения: пламя (медленное горение) и детонация (сверхзвуковое горение), кратко изложены их основные свойства, дан краткий исторический обзор научных результатов в теории устойчивости пламени. Изложены цель работы и общие методы исследования, научная новизна.

В **Первой главе** в разделе 1.1 сформулирована двумерная постановка задачи газодинамики с теплопроводностью, описывающая процессы горения как в режиме дефлаграции, т. е. при относительно малых изменениях давления, так и в режиме детонации. Рассмотрена полная двумерная система уравнений, учитывающая перенос, теплопроводность, вязкость и диффузию горючего вещества, дополненная определяющими соотношениями:

уравнение неразрывности

$$\partial_t \rho + \partial_i(\rho v_i) = 0, \quad (1a)$$

уравнения сохранения импульсов

$$\partial_t(\rho v_i) + \partial_j(\rho v_i v_j + \delta_{ij} p - \tau^{ij}) = \rho g^i, \quad (1б)$$

уравнение сохранения энергии

$$\partial_t(\rho[e + \frac{1}{2}v_j v_j]) + \partial_i(\rho v_i[e + \frac{1}{2}v_j v_j] + p v_i - v_j \tau^{ij} + q^i) = \rho v_i g^i, \quad (1в)$$

уравнение химической кинетики

$$\partial_t(\rho Y) + \partial_i(\rho v_i Y - (\eta/Sc) \partial_i Y) = -\frac{(\rho Y)^n}{\rho_R^{n-1} \tau_R} \exp(-E/RT), \quad (1г)$$

где Y — объемная концентрация топлива, ρ — плотность, p — давление, g^i — компоненты ускорения свободного падения, $e = QY + c_v T$ — внутренняя энергия на единицу массы, T — температура, Q — теплотворная способность топлива на единицу массы, c_p , c_v — теплоемкости на единицу массы при постоянном давлении и объеме соответственно, предполагаются независимыми от реакции. Рассматривается реакция первого порядка ($n = 1$), температурная зависимость реакции даётся законом Аррениуса с энергией активации E и временной константой τ_R . Тензор вязких напряжений \mathbb{T} и вектор теплового потока даются формулами

$$\tau^{ij} = \left(\xi - \frac{2}{3}\eta\right)\delta_{ij}\partial_k v_k + \eta(\partial_j v_i + \partial_i v_j),$$

$$q^i = -(c_p \eta / \text{Pr}) \partial_i T - (Q \eta / \text{Sc}) \partial_i Y,$$

где $\text{Pr} = \eta c_p / \kappa$ — число Прандтля (κ — коэффициент теплопроводности), $\text{Sc} = \eta / \rho D$ — число Шмидта (D — коэффициент диффузии горючей смеси), ξ , η — вязкости. Газовую смесь рассмотрим как идеальный газ с молярной массой m , так что уравнение состояния имеет вид

$$p = (R/m)\rho T,$$

R — универсальная газовая постоянная.

В дальнейшем будем обозначать скорости $v_1 = v_x$, $v_2 = v_y$.

Задача рассматривается в бесконечном канале с граничными условиями как прилипания, так и проскальзывания.

В разделе 1.2 приведены упрощённые уравнения для случая изобарического приближения.

В приближении слабо меняющегося давления скорость распространения фронта $U_f \ll c_f$, где c_f — скорость звука в исходной смеси, отсюда

$$M = U_f / c_f \ll 1,$$

где M — число Маха.

Изменение давления Δp может быть оценено как

$$\Delta p \propto \rho_f U_f^2,$$

$$\Delta p/p \propto \rho_f U_f^2/p_f \propto M^2 \ll 1.$$

В этих предположениях исходная система приводится к виду

$$\partial \rho / \partial t + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (2)$$

$$\rho \partial \mathbf{v} / \partial t + \rho (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \rho \mathbf{g}. \quad (3)$$

Приведён краткий вывод результатов Зельдовича–Франка–Каменецкого. Обозначим через ρ_f , T_f плотность и температуру перед фронтом пламени, $\Theta > 1$ — коэффициент теплового расширения. Уравнение теплопроводности при числе Льюиса $Le = Pr/Sc = 1$

$$-\rho_f U_f \frac{dT}{dx} = \frac{d}{dx} \left(\frac{\kappa}{c_p} \frac{dT}{dx} \right) + \frac{\rho_f T_f \Theta T_f - T}{\tau_R} \exp(-E/RT).$$

Профиль плоского стационарного фронта, записанный в безразмерном виде,

$$T(x) = \begin{cases} \Theta, & x \leq x_0, \\ 1 + (\Theta - 1)e^{-(x-x_0)}, & x > x_0, \end{cases} \quad (4)$$

$$\rho(x) = \frac{1}{T(x)}, \quad Y(x) = \frac{\Theta - T(x)}{\Theta - 1}, \quad v_x = -T \frac{U_f}{\sqrt{(R/m)T_f}}, \quad v_y = 0. \quad (5)$$

Скорость плоского фронта пламени

$$U_f = \sqrt{\frac{2k}{\tau_R} \frac{\sqrt{\Theta}}{\Theta - 1} \frac{\Theta T_f}{E/R}} \exp\left(-\frac{E/R}{2\Theta T_f}\right), \quad (6)$$

$k = \eta/Pr\rho_f$, x_0 — положение фронта.

Это решение весьма хорошо аппроксимирует реальный плоский фронт пламени. Но в данной работе исследуются режимы с искривлением фронта. Скорость распространения искривлённого фронта пламени существенно отличается от выражения (6) и превышает его. Как следствие, изменение давления на фронте пламени нельзя считать малым и изобарическое приближение неприменимо. Поэтому рассматривается полная задача.

Далее приводятся основные оценки, связывающие ширину L_f , скорость фронта U_f и характерное время процесса τ_b , которые сопоставляются с величиной характерного времени реакции в режиме дефлаграции.

Характерное время горения, τ_b , связанное очевидным образом с шириной зоны горения L_f , много больше τ_R , характерного времени реакции, определяемого составом смеси. Можно записать

$$\frac{1}{\tau_b} \propto \frac{1}{\tau_R} \exp\left(-\frac{E}{RT}\right).$$

Из (6) может быть вычислено время τ_R . Принимая во внимание соотношение $\tau_b = k/U_f^2$, получаем, что реакция горения начинается при температуре, много меньшей энергии активации. Действительно, для характерных параметров, используемых в работе, имеем $\tau_b = L_f/U_f = 2.5 \cdot 10^{-6}$ с, $\tau_R = 1.375 \cdot 10^{-11}$ с. Отсюда $E/RT \propto 12.2$.

Далее дан краткий обзор теории неустойчивости Дарье–Ландау. Приведён вывод критического значения длины волны, выше которой возмущения неустойчивы при $Le = 1$ и большой энергии активации в случае малой, но конечной ширины фронта. Кратко описан механизм нелинейной стабилизации фронта пламени. Отмечено, что применимость нелинейной теории и уравнение для стационарного искривлённого фронта пламени ограничена, поскольку для труб достаточно большой ширины развивается вторичная неустойчивость.

В разделе 1.3 проведено обезразмеривание задачи. Выбраны значения параметров обезразмеривания: температура и плотность непрореагировавшей смеси, ширина фронта в качестве единицы длины. Другие параметры, такие как обезразмеривающая скорость, будут являться следствиями основных.

Во **Второй главе** представлен алгоритм решения двумерной задачи горения, основанный на консервативной схеме расщепления по процессам, т. е. обобщённая задача «диффузии–конвекции», которая решается с помощью аддитивных схем, когда на первом этапе рассматривается задача диффузии с помощью неявных консервативных разностных схем, а на втором этапе система гиперболических уравнений.

В разделе 2.1 проведено расщепление по процессам. Исходная система уравнений представлена в векторном виде, включая диффузионную часть.

В [3,4] для одномерной задачи горения рассмотрена схема расщепления, которая, в сущности, представляет собой вариант аддитивной схемы, причём первый шаг — это решение диффузионных задач, а последующий — решение газодинамической задачи. Такой подход аналогичен известным схемам О. М. Белоцерковского³.

Переменные, относительно которых записывается система:

$$\rho, \quad I_x = \rho v_x, \quad I_y = \rho v_y, \quad w = \rho \left[e + \frac{1}{2}(v_x^2 + v_y^2) \right], \quad y = \rho Y.$$

Векторный вид:

$$\partial_t u + \partial_x f + \partial_y g = \partial_x A + \partial_y B + z.$$

Здесь f и g — «векторы», соответствующие гиперболической части, A и B — потоки в параболической части, z — источник. Такой вид позволяет расщепить на процессы, переноса и диффузии, при построении разностной схемы.

В разделе 2.2 подробно приведён вывод схемы в гиперболической части и исследованы её свойства. Гиперболическая часть системы (1) имеет вид

$$\partial_t \rho + \partial_x(\rho v_x) + \partial_y(\rho v_y) = 0, \quad (7a)$$

$$\partial_t(\rho v_x) + \partial_x(\rho v_x^2 + p) + \partial_y(\rho v_x v_y) = \rho g^x, \quad (7б)$$

$$\partial_t(\rho v_y) + \partial_x(\rho v_x v_y) + \partial_y(\rho v_y^2 + p) = \rho g^y, \quad (7в)$$

$$\begin{aligned} & \partial_t \left(\rho \left[e + \frac{1}{2}(v_x^2 + v_y^2) \right] \right) + \partial_x \left(v_x \rho \left[e + \frac{1}{2}(v_x^2 + v_y^2) \right] + v_x p \right) + \\ & + \partial_y \left(v_y \rho \left[e + \frac{1}{2}(v_x^2 + v_y^2) \right] + v_y p \right) = \rho v_x g^x + \rho v_y g^y, \end{aligned} \quad (7г)$$

$$\partial_t(\rho Y) + \partial_x(\rho v_x Y) + \partial_y(\rho v_y Y) = -Z(\rho, Y, T). \quad (7д)$$

В отличие от ряда работ⁴, в настоящей работе для системы газодинамических уравнений предложено использовать явные схемы с коррекцией

³ О. М. Белоцерковский, В. А. Гуцин, В. В. Щенников Метод расщепления в применении к решению задачи динамики вязкой несжимаемой жидкости // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1975. Т. 15. № 1. С. 197–207.

⁴ А. Ю. Демьянов Поведение ньютоновских характеристик в задаче перехода горения в детонацию // XLIV научная конференция МФТИ, 2001;

М. А. Liberman, V. V. Bychkov, S. M. Golberg, L. E. Eriksson Numerical study of curved flames under confinement // Combustion Sci. and Technol. 1998. V. 136. No 1. P. 221–251.

потоков типа TVD (Total Variation Diminishing — уменьшение полной вариации) для уменьшения числа нефизичных осцилляций. Такие схемы основаны на базовой схеме С. К. Годунова первого порядка. Одним из основных аспектов при использовании схем типа TVD является выбор лимитеров (называемых также ограничителями), при коррекции потоков, введение которых повышает порядок аппроксимации на гладких решениях.

Существенным для построения схемы является свойство однородности потока

$$\begin{aligned} f &= \frac{\partial f}{\partial u} u, & g &= \frac{\partial g}{\partial u} u, \\ a &= \frac{\partial f}{\partial u}, & b &= \frac{\partial g}{\partial u}. \end{aligned}$$

Схема имеет следующий вид. Консервативная форма:

$$\frac{\hat{u}_m - u_m}{\tau} + \frac{f_{m+1/2} - f_{m-1/2}}{h} = 0, \quad (8)$$

Разностная схема с ограничением потока в скалярном случае:

$$f_{m+1/2} = f_m + \frac{h - a\tau}{2} \psi \left(\frac{f_{m+1} - f_m}{h}, \frac{f_m - f_{m-1}}{h} \right), \quad (9)$$

где ψ — лимитер, функция, обеспечивающая свойство TVD, $a = \text{const} > 0$ — коэффициент переноса, m — номер узла сетки.

Обобщение на одномерную гиперболическую систему:

$$a = S_a^{-1} D_a S_a, \quad (10)$$

$$f_{m+1/2} = F_m^+ + F_{m+1}^-,$$

$$F_m^+ = f_m^+ + \frac{1}{2} \left(I - \frac{\tau}{h} a \right) S_a^{-1} D_a^+ \psi \left(S_a(u_{m+1} - u_m), S_a(u_m - u_{m-1}) \right), \quad (11)$$

$$F_{m+1}^- = f_{m+1}^- - \frac{1}{2} \left(I + \frac{\tau}{h} a \right) S_a^{-1} D_a^- \psi \left(S_a(u_{m+1} - u_m), S_a(u_{m+2} - u_{m+1}) \right). \quad (12)$$

Здесь D_a — диагональная матрица из собственных значений матрицы a , S_a — матрица, строки которой есть левые нуль-векторы a , $D_a^\pm = \frac{1}{2}(D_a \pm \pm |D_a|)$.

Для двумерного случая схема строится аналогичным образом.

Исследованы наиболее употребительные лимитеры, например `minmod`, `superbee` и т. п. Каждый из них можно сравнить, во-первых, по точности передачи характерных профилей в скалярном случае. Во-вторых, по степени выраженности фронтов в газодинамических задачах. Установлено, каковы порядки точности и аппроксимации в различных схемах с коррекцией потоков, а также каково влияние диффузионных процессов на эти явления.

В целом имеет место соответствие профиля получаемых величин точному решению задачи о распаде разрыва, что выражается в правильном определении уровней ρ , v , p в профилях и скоростей фронтов. Использование сглаженных начальных условий хотя бы на 2 расчётных интервала, а также учёт вязкости и теплопроводности позволяют эффективно применять схемы с лимитерами для расчёта физических задач. Чем точнее схема передаёт особенности решения (лимитер `superbee`), тем заметнее некоторые дефекты, например, немонотонность у фронта, энтропийный след и т. д., поэтому для проведения расчётов использован лимитер `minmod`, который в меньшей степени приводит к нефизическим немонотонностям, сохраняя свойство высокого разрешения фронтов.

Приведённый метод решения лишён ряда недостатков методов, развитых другими группами исследователей. Предложенная схема квазимонотонна, использует минимальный шаблон, имеет порядок аппроксимации $O(h^2 + \tau^2)$ на гладких решениях почти всюду, где меняется шаблон схемы, и шаг по времени определяется критерием Куранта, т. е. $\tau \sim O(h)$, а не $O(h^2)$, как при использовании явных схем в параболических задачах. Схемы с минимальным шаблоном не имеют ложных осцилляций, вызванных использованием расширенного шаблона, а также хорошо согласуются с граничными условиями. В результате появилась возможность использовать не избыточно подробные сетки и за разумное время провести цикл расчётов процессов горения в широких трубах, шириной $(5 \div 6)\lambda_c$.

В разделе 2.3 подробно рассмотрены аспекты, возникающие в двумерной гиперболической схеме. Отмечается, что учёт ряда членов, возникающих из общего класса явных схем для гиперболической системы, позволяет достичь

условия устойчивости $\max(q_x, q_y) \leq 1$, а не $q_x + q_y \leq 1$ в противном случае, где q_x, q_y — числа Куранта.

Рассмотрена схема при расчёте граничных условий. При её выводе используется метод характеристик и знание собственных значений на границе: 0, $-c$ и c , где c — скорость звука.

В разделе 2.4 рассмотрены особенности разностной схемы в параболической части задачи.

Диссипативная часть системы (1) имеет следующий вид.

$$\partial_t \rho = 0, \quad (13a)$$

$$\partial_t(\rho v_x) + \partial_x(-\tau^{xx}) + \partial_y(-\tau^{xy}) = 0, \quad (13б)$$

$$\partial_t(\rho v_y) + \partial_x(-\tau^{yx}) + \partial_y(-\tau^{yy}) = 0, \quad (13в)$$

$$\begin{aligned} & \partial_t(\rho[e + \frac{1}{2}(v_x^2 + v_y^2)]) + \\ & + \partial_x(-v_x \tau^{xx} - v_y \tau^{xy} + q^x) + \partial_y(-v_x \tau^{yx} - v_y \tau^{yy} + q^y) = 0, \end{aligned} \quad (13г)$$

$$\partial_t(\rho Y) + \partial_x(-(\eta/Sc) \partial_x Y) + \partial_y(-(\eta/Sc) \partial_y Y) = 0. \quad (13д)$$

Рассматривается соотношение, вытекающее из параболической части системы уравнений горения. При наличии диссипативных процессов часть кинетической энергии переходит в тепловую. Это приводит к появлению источника диссипации в уравнении теплопроводности:

$$\rho \partial_t([c_v T]) + \partial_x(-(c_p \eta/Pr) \partial_x T) + \partial_y(-(c_p \eta/Pr) \partial_y T) = A_v,$$

A_v — квадратичная диссипативная форма относительно производных скоростей, равная

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\mathbf{v} \cdot \mathbb{T}) - \mathbf{v} \cdot \operatorname{div} \mathbb{T} &= \tau^{xx} \partial_x v_x + \tau^{xy} \partial_x v_y + \tau^{yx} \partial_y v_x + \tau^{yy} \partial_y v_y = \\ &= [(\xi - \frac{2}{3}\eta)(\operatorname{div} \mathbf{v})^2] + [2\eta((\partial_x v_x)^2 + (\partial_y v_y)^2)] + [\eta(\partial_x v_y + \partial_y v_x)^2]. \end{aligned}$$

При условии $A_v \geq 0$ произвольный положительный начальный профиль температуры должен оставаться положительным в любой момент времени, что равносильно выполнению для уравнения теплопроводности условия достижения минимума решения либо в начальных данных, либо на границе при любых начальных условиях.

Описанные условия выполняются в дифференциальной постановке задачи, являясь следствиями уравнений системы. В разностном же случае это, вообще говоря, не так: в задачах размерности два и более возникает проблема аппроксимации положительного источника. Если условие положительности источника диссипации выполняется в разностной форме, то температура в системе остаётся положительной при переходе с одного временного слоя на другой. Такие схемы назовём положительными. В настоящей работе построена схема, которая не только является консервативной, т. е. правильно аппроксимирует баланс полной энергии, но и обеспечивает корректное описание термодинамических следствий из основной системы, в данном случае процесса превращения кинетической энергии в тепловую для правильного определения как внутренней, так и полной энергии. Такие схемы можно назвать по аналогии с работами С. К. Годунова термодинамически обусловленными.

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\vec{v} \cdot \mathbb{T})_{m,k} &= \frac{A_{m+1/2,k} - A_{m-1/2,k}}{h_x} + \frac{B_{m,k+1/2} - B_{m,k-1/2}}{h_y}. \\ A_{m+1/2,k} &= \left(\left(\xi + \frac{4}{3}\eta \right) u \frac{\partial u}{\partial x} + \left(\xi - \frac{2}{3}\eta \right) u \frac{\partial v}{\partial y} + \eta v \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right)_{m+1/2,k} = \\ &= \left(\xi + \frac{4}{3}\eta \right) \frac{u_{m+1,k} + u_{m,k}}{2} \frac{u_{m+1,k} - u_{m,k}}{h_x} + \\ &+ \left(\xi - \frac{2}{3}\eta \right) \frac{1}{2} \left(u_{m,k} \frac{v_{m+1,k+1} - v_{m+1,k-1}}{2h_y} + u_{m+1,k} \frac{v_{m,k+1} - v_{m,k-1}}{2h_y} \right) + \\ &+ \eta \frac{1}{2} \left(v_{m,k} \frac{u_{m+1,k+1} - u_{m+1,k-1}}{2h_y} + v_{m+1,k} \frac{u_{m,k+1} - u_{m,k-1}}{2h_y} \right) + \\ &+ \eta \frac{v_{m+1,k} + v_{m,k}}{2} \frac{v_{m+1,k} - v_{m,k}}{h_x}, \end{aligned} \quad (14)$$

для $B_{m,k+1/2}$ аналогично. Обозначено $u = v_x$, $v = v_y$.

В конце главы, разделе 2.5, обсуждаются различные особенности математического моделирования задач горения в каналах.

Показано, что шаг по пространству должен быть не более $L_f/2$ при расчёте одномерных задач и до $L_f/5$ для двумерных для правильной передачи скорости фронта.

Далеко от фронта пламени для ускорения счёта строится сетка с увеличивающимися ячейками.

Перед пламенем всегда распространяется звуковая волна, скорость которой существенно больше скорости пламени. Реализовать условия поглощения при наличии неоднородного поля скоростей становится затруднительным, вследствие чего возникает необходимость моделирования течения в достаточно длинном канале. С другой стороны, для правильного разрешения фронта необходимо брать до пяти ячеек на фронт. Всё это приводит к необходимости считать на многопроцессорной вычислительной системе.

Третья глава посвящена численным экспериментам. Рассмотрены задачи как с гладкими, так и с условиями прилипания на стенках.

В разделе 3.1 приводятся расчёты тестов из [7], отражающих некоторые качества схемы, в частности, схема сохраняет свойства симметрии, несмотря на то что сетка не адаптирована к структуре решения. Кроме того, можно видеть, что изначально некруговой разрыв на достаточно большом расстоянии от центра возмущения принимает форму круга. На рис. 1 представлено распределение плотности для начального разрыва в виде эллипса.

В разделе 3.2 описан численный способ получения плоского стационарного фронта пламени в виде решения Зельдовича–Франка–Каменецкого вблизи неподвижной границы.

Для исследования проблем устойчивости задавалось возмущение компоненты скорости v_x полученного стационарного решения. Вычтем из скорости величину ΘU_f , перейдя тем самым в систему отсчёта (СО), в которой плоский фронт покоится. В этой системе положим

$$v_x(x) \rightarrow v_x(x) + \tilde{v}_0(x, y), \quad (15)$$

где

$$\tilde{v}_0(x, y) = v_x(x) A_0 \sin(\pi y/D) \exp\left(-\frac{\pi^2(x-x_0)^2}{D^2}\right). \quad (16)$$

Здесь D — ширина области. Значение амплитуды возмущения A_0 выбрано равным 0.05.

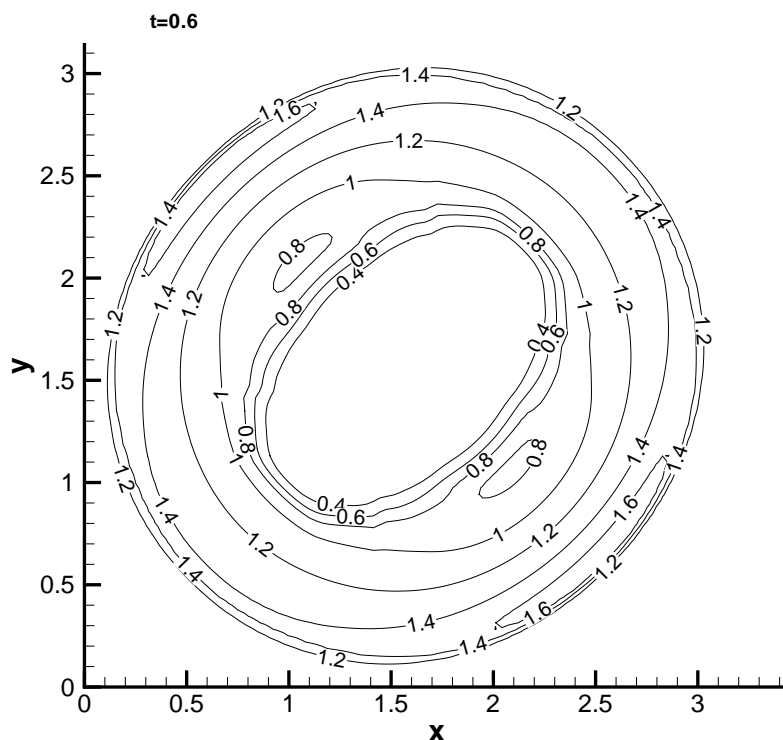


Рис. 1. Распределения плотности для начального разрыва в виде эллипса

Для определения скорости фронта пламени предложена формула на основе расчёта количества несгоревшего топлива.

В расчётах течений в трубах с гладкими стенками существует режим устойчивого пламени, дефлаграция. При этом, если ширина трубы $D < \lambda_c$, то любые возмущения затухают. Для труб шириной до $4\lambda_c$ устойчивое пламя представляет собой «одногорбое» (single-hump) распределение. Но такое распределение формируется не сразу. Первоначально образуется вогнутый фронт температуры. При этом линии тока практически стационарны и устанавливается квазистационарное поле скоростей. Затем при развитии вторичной неустойчивости Дарье–Ландау устанавливается «одногорбое» пламя.

Таким образом, помимо известного результата о существовании режима дефлаграции (медленного стационарного горения) в трубе с гладкими стенками, установлено, что формирование режима дефлаграции имеет три этапа: развитие неустойчивости Дарье–Ландау и формирование промежуточной квазистационарной асимптотики «многогорбого» (multi-hump) пла-

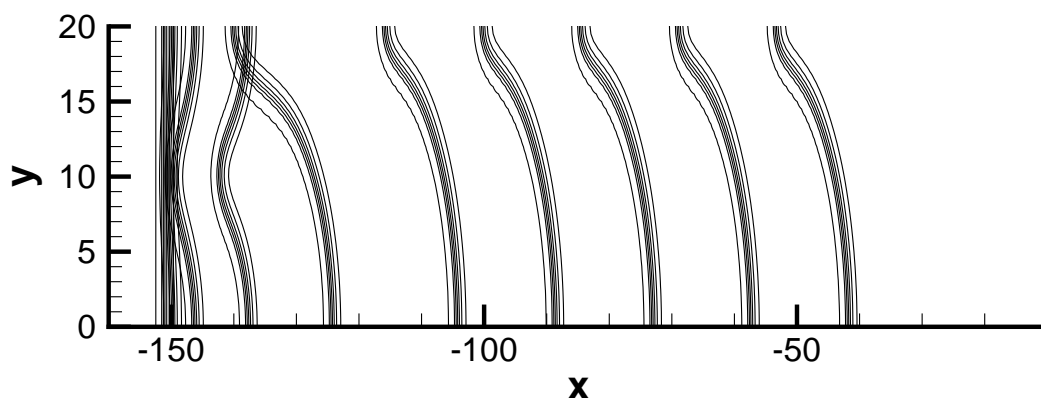


Рис. 2. Фронт в задаче с проскальзыванием

мени, затем распад этого решения и образование стационарного «одногогорбого» пламени (рис. 2). Моменты времени указываются в единицах t/τ , где $\tau = D/2U_f$.

Рассмотрим ещё один тип возмущений:

$$\tilde{v}_0(x, y) = v_x(x) A_0 \sin(-2\pi y/D) \exp\left(-\frac{\pi^2(x-x_0)^2}{D^2}\right). \quad (17)$$

Тем самым начальное течение как бы замедляется «снизу» трубы и ускоряется «сверху». Для трубы шириной 20 фронт после линейной стадии развития неустойчивости перешёл к стационарному виду, который получен путём иного возмущения.

Для трубы шириной 40 возникает почти та же картина, однако фронт, изначально антисимметричный относительно центра трубы, приобретая одnogорбую выпуклую конфигурацию, становится симметричным (рис. 3). Как общий вывод можно отметить существование двух устойчивых конфигураций фронта пламени: симметричный относительно оси канала и «скошенный» (slanted), обе из которых представляют собой выпуклое одnogорбое образование.

В разделе 3.3 для течений в трубе с условиями прилипания на стенках показано, что стационарный режим отсутствует (рис. 4, 5), но пламя начинает ускоряться, переходя в режим детонации даже для случая реакции

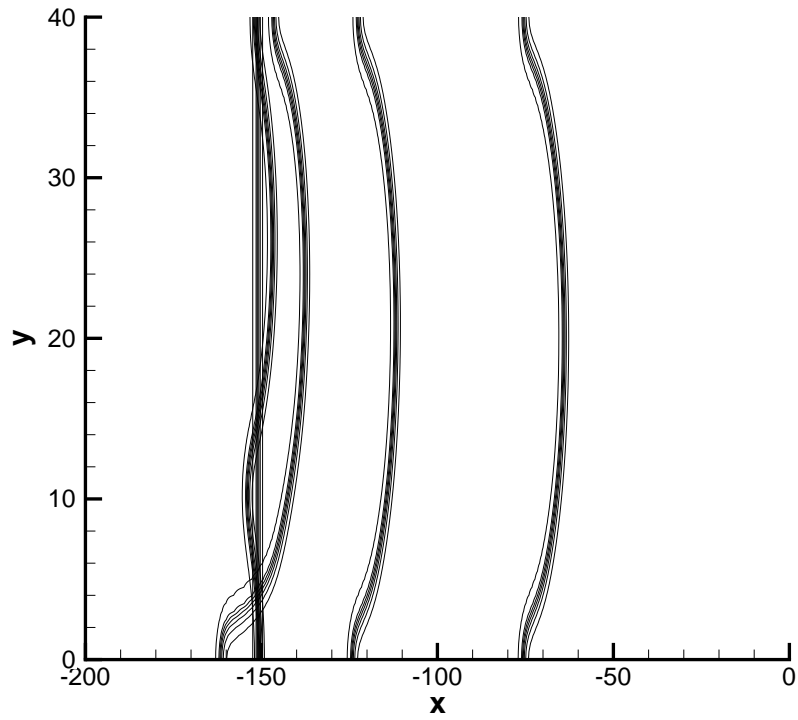


Рис. 3. Фронт и линии тока в задаче с проскальзыванием на момент $t/\tau = 7.34832$ при задании возмущения в обе стороны

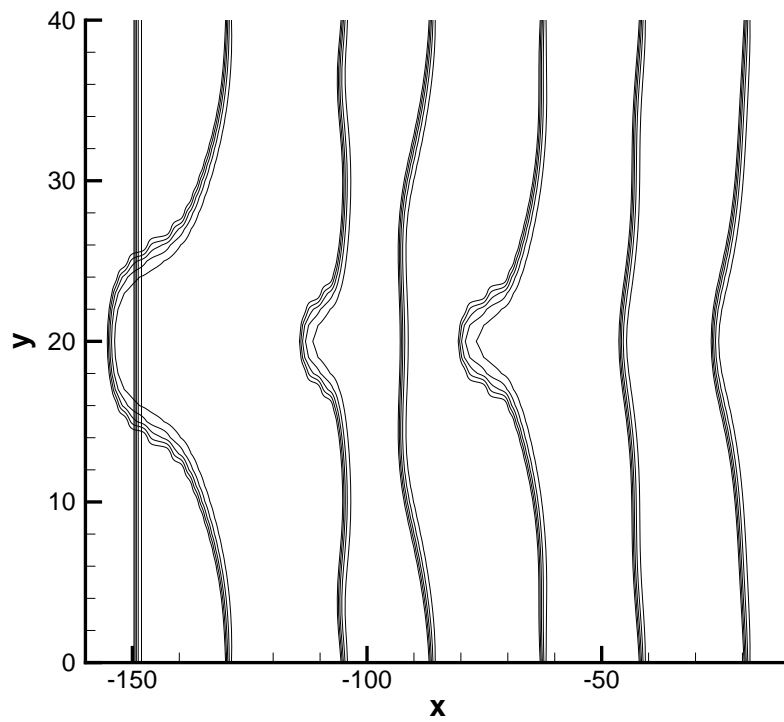


Рис. 4. «Осцилляционный фронт»

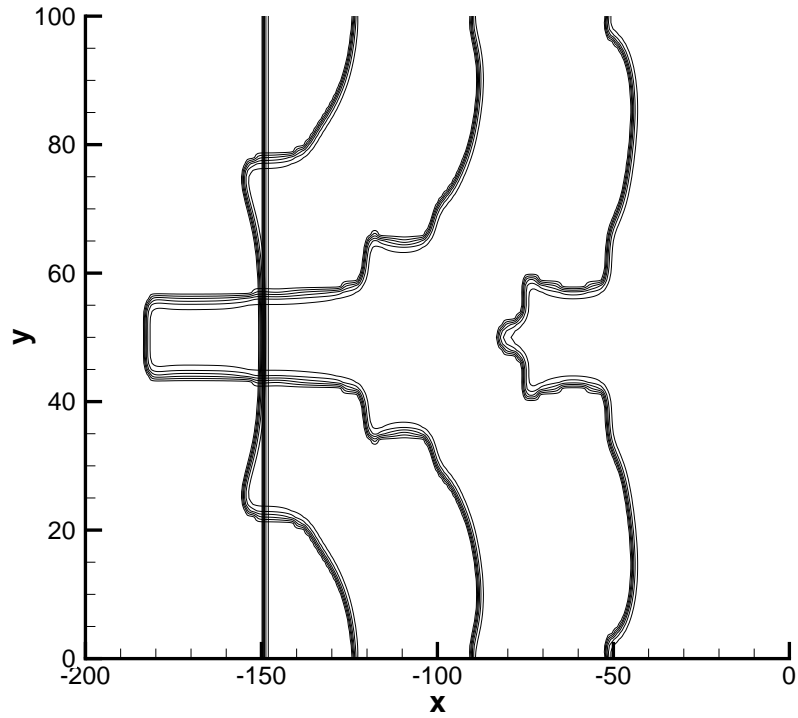


Рис. 5. Фронт в задаче с условиями прилипания на стенках в трубе шириной $100L_f$

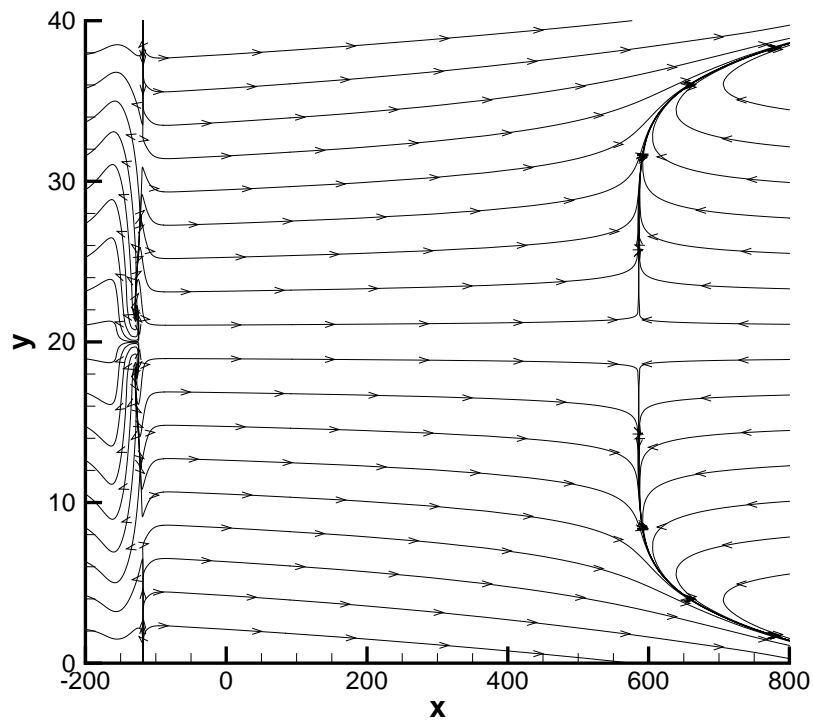


Рис. 6. Фронт и линии тока в задаче с условиями прилипания на стенках на момент $t/\tau = 0.5956$

первого порядка, когда выделение тепла при реакции относительно умеренное, что до настоящего времени в расчётах не наблюдалось (рис. 6).

В **Заключении** изложены основные результаты и выводы.

Результаты и выводы диссертации

1. Разработан метод расщепления по процессам для решения задач горения на основе TVD схем, позволяющих получить высокое разрешение фронтов горения. Проведена апробация алгоритма на известных результатах ряда авторов.
2. Сформулировано понятие термодинамической обусловленности разностной схемы как корректное описание процесса превращения кинетической энергии в тепловую. Построена схема, удовлетворяющая этому условию и обеспечивающая положительность температуры.
3. Для задач с гладкими стенками показано наличие промежуточной асимптотики в виде вогнутого «многогорбого» пламени и конечной асимптотики в виде выпуклого «одногогорбого» пламени.
4. Показано, что при наличии условий прилипания на стенках асимптотика не формируется, а наблюдаются пульсации. В дальнейшем амплитуда пульсаций затухает. Пламя начинает ускоряться, переходя в режим детонации даже для случая реакции первого порядка, когда выделение тепла при реакции относительно умеренное, что до настоящего времени в расчётах не наблюдалось.

Список работ автора по теме диссертации

1. *Д. Ю. Максимов, Б. Д. Плющенко* Экономичная разностная схема для уравнений горения на основе расщепления потока на конвективную и диффузионную части // X школа–семинар «Современные проблемы аэрогидродинамики», Сочи, «Буревестник» МГУ, сентябрь 2002.
2. *Д. Ю. Максимов, А. Х. Пергамент, Б. Д. Плющенко* TVD схемы с расщеплением для двумерных задач горения // XI школа–семинар

- «Современные проблемы аэрогидродинамики», Сочи, «Буревестник» МГУ, сентябрь 2003.
3. *Д. Ю. Максимов, А. Х. Пергамент, Б. Д. Плющенко* О некоторых схемах расщепления в задачах газодинамики с теплопроводностью: Препринт № 70. М.: ИПМатем. РАН. 2005.
 4. *М. Ю. Заславский, Д. Ю. Максимов, А. Х. Пергамент, Б. Д. Плющенко* О некоторых схемах расщепления в задачах газодинамики с теплопроводностью // XIII школа–семинар «Современные проблемы аэрогидродинамики», Сочи, «Буревестник» МГУ, сентябрь 2005.
 5. *М. Ю. Заславский, Д. Ю. Максимов* Положительная по температуре консервативная разностная схема для задач горения: Препринт № 4. М.: ИПМатем. РАН. 2006.
 6. *А. Х. Пергамент, М. Ю. Заславский, Д. Ю. Максимов* Положительная по температуре консервативная разностная схема для задач горения // Научная конференция «Ломоносовские чтения», апрель 2006.
 7. *М. Ю. Заславский, Д. Ю. Максимов, А. Х. Пергамент* О термодинамически обусловленных схемах расщепления в задачах горения // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2006. Т. 46. № 10. С. 1851–1865.
 8. *М. Ю. Заславский, Д. Ю. Максимов, А. Х. Пергамент* О термодинамически обусловленных схемах расщепления в задачах горения // XVI Всероссийская конференция «Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов и решение задач математической физики с приложением к многопроцессорным системам», посвящённая памяти К. И. Бабенко, Абрау-Дюрсо, Новороссийск, сентябрь 2006.
 9. *А. Х. Пергамент, Д. Ю. Максимов* Асимптотические режимы горения в широких трубах // Научная конференция «Ломоносовские чтения», апрель 2007.
 10. *Д. Ю. Максимов* Асимптотические режимы горения в широких трубах // XV школа–семинар «Современные проблемы аэрогидродинамики», Сочи, «Буревестник» МГУ, сентябрь 2007.
 11. *Д. Ю. Максимов* Асимптотические режимы горения в широких трубах // Мат. моделирование. 2007. Т. 19. № 10. С. 15–28.