

8. Mechanisms of direct detonation initiation via thermal explosion of radiatively heated gas-particles layer / V. P. Efremov, M. F. Ivanov, A. D. Kiverin, I. S. Yakovenko // Results in Physics. — 2015. — Vol. 5. — Pp. 290–296.
9. Application of dissipation-free numerical method CABARET for solving gas-dynamics of combustion and detonation / M. Ivanov, A. D. Kiverin, S. G. Pinevich, I. S. Yakovenko // J. Phys.: Conf. Ser. — 2016. — Vol. 754. — P. 102003.
10. Role of numerical scheme choice on the results of mathematical modeling of combustion and detonation / I. Yakovenko, A. D. Kiverin, S. G. Pinevich, M. F. Ivanov // J. Phys.: Conf. Ser. — 2016. — Vol. 774. — P. 012093.

На правах рукописи



Яковенко Иван Сергеевич

РЕЖИМЫ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПЛАМЕНИ В ХИМИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ГАЗАХ И ГАЗОВЗВЕСЯХ

Специальность 01.04.14 —
«Теплофизика и теоретическая теплотехника»

Яковенко Иван Сергеевич

Автореферат

РЕЖИМЫ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПЛАМЕНИ В ХИМИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ГАЗАХ
И ГАЗОВЗВЕСЯХ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Автореферат

Подписано в печать 21.03.2017	Уч.-изд.л. 1,16	Формат 60×84/16
Печать офсетная	Заказ №191	Усл.-печ.л. 1,25
Тираж 100 экз.		Бесплатно

ОИВТ РАН. 125412, Москва, Ижорская ул., 13, стр. 2

Москва — 2017

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном Учреждении науки Объединенном институте высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН) и в Федеральном государственном бюджетном образовательном Учреждении высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» (МГТУ им. Н.Э. Баумана)

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, профессор,
Объединенный институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН), заведующий отделом,

Иванов Михаил Фёдорович

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор,
Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук (ИБРАЭ РАН), заведующий отделом,

Головизнин Василий Михайлович

доктор физико-математических наук,

Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук (ИХФ РАН), заведующий лабораторией,

Мелвцев Сергей Павлович

Ведущая организация:

Государственный научный центр Федеральное государственное унитарное предприятие «Центральный институт аналитического мониторинга имени П.И. Варанова»

Защита состоится "___" _____ 2017 г. в ___ ч. ___ на заседании диссертационного совета Д 002.110.02 Федерального государственного бюджетного Учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук по адресу: 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, экзп.-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИВТ РАН.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью Учреждения, просьба направлять по адресу: 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2.

Автореферат разослан "___" _____ 2017 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета Д 002.110.02

к.ф.-м.н.



М. М. Васильев

©ФГБУН Объединённый институт высоких температур Российской академии наук, 2017.

женном наборе тестовых задач из области газодинамики многокомпонентных реагирующих смесей показаны принципиальные преимущества данной методики в сравнении с методами, обладающими более высокой схемной вязкостью.

7. Разработан параллельный объектно-ориентированный программный комплекс для решения многомерных задач газодинамики реагирующих потоков на суперкомпьютерных вычислительных системах с возможностью использования различных физико-математических моделей и вычислительных алгоритмов, а также широкими возможностями обработки данных получаемых в ходе расчета результатов.

Публикации в журналах из перечня ВАК

1. Hydrogen-oxigen flame acceleration and deflagration-to-detonation transition in three-dimensional rectangular channels with no-slip walls / M. F. Ivanov, A. D. Kiverin, I. S. Yakovenko, M. A. Liberman // *Int. J. Hydrogen Energy*. — 2013. — Vol. 38, no. 36. — Pp. 16427–16440.
2. О детонационно-индуцированной имплантации микрочастиц в подложку / В. В. Голуб, М. Ф. Иванов, А. Д. Киверин, И. С. Яковенко // *Письма ЖТФ*. — 2014. — Т. 40, № 20. — С. 88–95.
3. *Ivanov M. F., Kiverin A. D., Yakovenko I. S.* The role of compression waves in flame acceleration and transition to detonation inside confined volumes // *J. Phys.: Conf. Ser.* — 2015. — Vol. 653. — P. 012062.
4. Direct initiation of gaseous detonation via radiative heating of microparticles volumetrically suspended in the gas / V. P. Efremov, M. F. Ivanov, A. D. Kiverin, I. Yakovenko // *J. Phys.: Conf. Ser.* — 2015. — Vol. 653. — P. 012063.
5. *Kiverin A. D., Yakovenko I. S.* Modes of shocked flame instability defined by the scalinities of combustion kinetics at rising pressure // *J. Phys.: Conf. Ser.* — 2015. — Vol. 653. — P. 012061.
6. *Ivanov M. F., Kiverin A. D., Yakovenko I. S.* Влияние газодинамических процессов на развитие горения вблизи концентрарционных пределов воспламенения // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана*. — 2015. — Т. 6. — С. 85–98.
7. Объемное инициирование газовой детонации путем лучистого нагрева взвешенных в газе микрочастиц / В. П. Ефремов, М. Ф. Иванов, А. Д. Киверин, И. С. Яковенко // *Письма ЖТФ*. — 2016. — Т. 42, № 4. — С. 52–59.

ле при расширении очага горения, позволяет наблюдать развитие ячеистой структуры фронта пламени за счет интенсивного нарастания неустойчивости фронта пламени.

В заключении приведены основные результаты работы, которые заключаются в следующем:

1. Проведено трехмерное численное моделирование процессов ускорения пламени и перехода к детонации в канале с использованием детальных моделей химической кинетики, табличных уравнений состояния и с учетом зависимости коэффициентов переноса от состояния смеси. Полученные результаты трехмерных расчетов полностью воспроизвели предложенный ранее на основе результатов двухмерных расчетов механизм перехода к детонации и выявили особенности процесса перехода к детонации, наблюдаемые при 3-х мерном моделировании, включающие скорость перехода к детонации, структуру течений и их отображение на двумерных проекциях.
2. На основе результатов трехмерного моделирования, а также данных вспомогательных двухмерных расчетов определена роль волн сжатия, излучаемых при распространении пламени в канале в формировании процессов ускорения пламени и перехода к детонации.
3. При помощи детального численного моделирования выявлены основные стадии формирования и структура зоны горения в ограниченных объемах, заполненных бедными смесями водорода с воздухом, близкими по составу к концентрационному пределу воспламенения, и определен ведущий физический механизм распространения пламени в таких смесях, обусловленный конвективным переносом очагов горения и диффузией горючей компоненты в зону реакции.
4. На основе численного моделирования описана динамика развития волн горения, инициированных лучистым нагревом от внешнего источника излучения инертных микрочастиц, взвешенных в горючей газовой смеси. Предложен новый подход к инициированию детонации в газовых смесях на малых пространственных масштабах, основанный на лучистом нагреве локального облака химически нейтральных микрочастиц в горючей газовой среде, и получены критерии реализации такого детонационного режима.
5. На вычислительном эксперименте проанализирован процесс напыления микрочастиц, движущихся в потоке за детонационной волной, на твердотельную подложку и определены оптимальные характеристики потока частиц и пространственного положения подложки.
6. Бездиссипативный метод КАБАРЕ адаптирован для решения многомерных задач газовой динамики горения и детонации. На предло-

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Процессы развития волн горения в газовых смесях и газовзвесьях, содержащихся внутри замкнутых объемов, остаются предметом многочисленных научных исследований. В первую очередь интерес к этим процессам обусловлен вопросами энергоэффективности тепловых установок, а также необходимостью обеспечения пожаро- и взрывобезопасности на производстве при хранении и использовании высокоактивных топлив. Богатый опыт, накопленный в результате теоретических и экспериментальных исследований, позволил сформулировать надежные модели стационарных режимов дозвукового (дефлаграционного) и сверхзвукового (детонационного) распространения волн горения в газовых смесях. Однако процессы, протекающие внутри реальных технических систем, таких как камеры сгорания двигателей и тепловых машин, помещений химической и горнодобывающей промышленности, контейнеров АЭС при возникновении аварий, являются принципиально нестационарными и развиваются путем последовательной эволюции переходных режимов распространения пламени. Разномасштабность протекающих процессов, принципиальная многомерность, а также большое число определяющих факторов, в значительной степени осложняют всестороннее исследование реальных технических систем путем их теоретического анализа и экспериментальных наблюдений. Значительные успехи в этой области были достигнуты благодаря развитию вычислительных методов. Методами детального численного моделирования были определены механизмы ответственные за формирование и эволюцию режимов распространения волн горения в газовых смесях для некоторого класса модельных задач. Однако, только с появлением мощных кластерных суперкомпьютеров терафлопсной и петафлопсной производимости стало возможным моделирование процессов горения с учетом детального описания полного спектра физико-химических процессов, сопровождающих распространение волн горения в смесях различного состава и на масштабах присущих реальным экспериментальным установкам и техническим системам.

Данная диссертация посвящена исследованию с применением современных компьютерных средств и методов различных режимов распространения волн горения и детонации в газовых смесях и газовзвесьях и оценке возможности использования рассматриваемых режимов в прикладных задачах разработки перспективных технических систем и обеспечения пожаро- и взрывобезопасности, что определяет её актуальность. Для выделения фундаментальных процессов, определяющих горение горючих газовых смесей и газовзвесей, рассмотрены предельные случаи горения наиболее химически активных стехиометрических смесей и слабоактивных бедных смесей, газозвез-

сей с микрочастицами, переложившими энергию горючей газовой компоненте, и с микрочастицами, отбирающими энергию от горючей компоненты. В качестве основных были рассмотрены водородосодержащие смеси, что позволяет использовать результаты диссертации в задачах водородной энергетики и безопасности. Анализ режимов инициирования и распространения волн горения и детонации в газозвесах может быть использован как для создания двигателей нового поколения, работающих на основе детонационных циклов, так и для обеспечения безопасности в запаленных пространствах, таких как горные выработки шахтенных сооружений, помещения мукомольных заводов, зерновых хранилищ и др. Оценка эффективности процесса имплантации микрочастиц в подложку может быть использована для создания технических устройств обработки поверхностей материалов и создания композитных материалов. Результаты настоящей диссертационной работы получены путем численного решения детализированных математических моделей описывающих процессы горения горючих смесей, состоящих из химически активных газов с примесями нейтральных микрочастиц. Модель газовой фазы учитывает вязкость, сжимаемость, теплопроводность, многокомпонентную диффузию, конвективный перенос и энерговыделение за счет химического превращения. Для описания динамики инертных взвешенных микрочастиц использовалась двухтемпературная двухскоростная континуальная модель сплошной среды или приближение Стокса переноса не взаимодействующих частиц в газе в потоке.

Цель диссертационной работы. Целью работы является выполнение методов численного моделирования исследования физических механизмов формирования нестационарных и переходных режимов распространения волн горения и детонации в газовых смесях различного состава, в том числе и с содержанием мелкодисперсных инертных частиц (гавозвесах). Для достижения целей исследований был разработан эффективный вычислительный программный комплекс компьютерного моделирования процессов горения с использованием многопроцессорных кластерных вычислительных систем, выполнена программная реализация и адаптация современного бездиссипативного вычислительного метода КАБАРЕ для решения задач газодинамики горения и детонации и проведен ряд вычислительных экспериментов по распространению волн горения внутри ограниченных объемов содержащих горючую газовую смесь или газозвесь при различных начальных условиях в одномерной, двухмерной и трехмерной геометриях расчетной области. Были выполнены постановки и проанализированы результаты следующих компьютерных экспериментов:

1. Трехмерное и двухмерное детальное моделирование распространения волн горения стехиометрической водород-кислородной смеси

В **главе ПЯТЬ** предложена процедура адаптации современного бездиссипативного метода КАБАРЕ для решения задач газодинамики реагирующих потоков. Приведены локально-одномерные характеристические формы записи исходной трехмерной системы уравнений физико-математической модели динамики химически активной многокомпонентной газовой смеси. Описана процедура получения решений данной системы в рамках багально-характеристического представления схемы КАБАРЕ (*Головин В.М. // ДАН, 2005*). Сравнительный анализ возможностей метода КАБАРЕ проведен по отношению к зарекомендовавшему себя для решения задач горения и детонации эйлеров-лагранжеву методу (ЭЛМ). Предложен ряд тестовых задач, акцентирующих внимание на различных аспектах моделирования широкого круга задач физики горения. В частности приведены результаты тестов вычислительных методов на задаче о распространении ламинарного пламени, которые показали более быструю сходимость решения по ширине фронта пламени и нормальной скорости горения при использовании метода КАБАРЕ. Решение задачи об инициировании детонации нестационарным источником энерговыделения методом КАБАРЕ позволило воспроизвести эйлеров-лагранжева метода за счет более высокой схемной диссипации и искусственного размазывания поверхностей газодинамических разрывов на несколько расчетных ячеек. Преимущество физически обособленной процедуры мини-

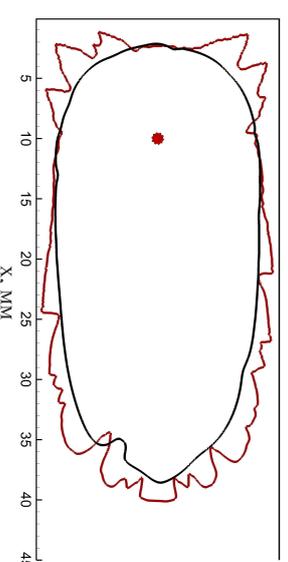


Рис. 8 — Топология фронта пламени в плоском канале шириной 20 мм, распространяющемся от локализованного на оси канала источника воспламенения (источник воспламенения обозначен закрашенной красным областью). Приведено сравнение двух изолиний температуры $T = 3000$ К на момент времени $t = 145$ мкс, полученных по двум различным вычислительным методикам: черная линия — ЭЛМ, красная метод КАБАРЕ.

мизации схемной вязкости, положенной в основу схемы КАБАРЕ, также наглядно проявляется при моделировании распространения волн горения от точечного источника воспламенения в двухмерном канале (см. рис. 8). Более детальное воспроизведение акустических возмущений, формируемых в кана-

от закрытого торца полуоткрытого канала с переходом от дефлаграционного горения к детонации.

2. Моделирование распространения и эволюции очага горения под действием гравитационного поля в бедной водород-воздушной смеси близкой к нижнему концентрационному пределу воспламенения.
3. Моделирование процесса возбуждения детонации в газозвезях с неоднородным распределением инертных микрочастиц путем их чистого нагрева от внешнего источника.
4. Моделирование переноса инертных микрочастиц в потоке за детонационной волной для задач имплантации.

Научная новизна работы.

1. Впервые анализ процесса ускорения пламени и перехода к детонации методами численного моделирования был выполнен в трехмерной постановке с учетом детальных механизмов химической кинетики, что позволило уточнить детали механизма перехода к детонации, ранее исследованного только в двухмерной геометрии.
2. Получена более полная, по сравнению с приводимой ранее в литературе, детализация процесса эволюции очага пламени вблизи нижнего концентрационного предела горения, выполненная на основе детального моделирования горения в замкнутых объемах, заполненных низкоактивными горючими смесями.
3. Показана принципиальная возможность инициирования направленной детонационной волны в газовой смеси путем лучистого нагрева взвешенных химически нейтральных микрочастиц.
4. Впервые методами математического моделирования воспроизведен процесс имплантации частиц на подложку в импульсе детонационной волны и получены оптимальные соотношения между характеристиками потока частиц и расположением подложки.
5. Бездиссипативный баланс-характеристический метод КАБАРЕ был впервые адаптирован для решения задач распространения волн горения в химически активных газовых смесях.

Научная и практическая ценность работы. Компьютерное моделирование трёхмерных процессов горения и детонации позволяет обрабатывать и уточнять методы и трактовку результатов диагностики этих процессов в лабораторных экспериментах. Проведённый анализ особенностей горения бедных водородно-воздушных смесей позволил выделить и детализировать конвективный механизм переноса очагов возгорания, что даёт дополнительный материал, необходимый для оценки возникновения и развития пожара в реакторном зале при тяжёлых авариях на АЭС. Полученные результаты и модели горения газозвезей позволяют оценить качественное и количественное влия-

ром 1 мкм движутся в потоке в непосредственной близости к фронту детонационной волны (метка 1 на рис. 6а). При достижении фронтом детонации поверхности подложки, формируемые встречные потоки препятствуют оседанию частиц на подложке (метка 2 на рис. 6а). С увеличением размеров частиц усиливаются их инерционные свойства. Более массивные частицы ускоряются газодинамическим потоком продуктов детонации и располагаются в потоке на расстоянии от фронта детонации. При этом встречный поток за отраженной от подложки ударной волной оказывает меньшее воздействие на более массивные частицы, и частицы частично достигают поверхности подложки, а частично вовлекаются в основное течение в зазоре (метка 3 на рис. 6б), благодаря чему увеличивается полезный расход частиц осаждаемых на подложке. Наиболее крупные частицы из рассмотренных, с диаметром 100 мкм, достигают подложку практически в полном объеме (метка 4 на рис. 6в).

Далее рассмотрено влияние геометрических свойств подложки на эффективность процесса имплантации. Так, анализ возникающих газодинамических течений в случаях плоских, вогнутых и выпуклых подложек показали, что при использовании профилированных подложек с выпуклой подстилающей поверхностью, формирующей тупой угол близкий к 120° с направлением падающей ударной волны, на ранних стадиях процесса наблюдается полное обтекание подложки ударной волной, что обеспечивает наименьшую интенсивность встречных потоков и наибольшую вероятность оседания частиц и их локализацию (см. рис. 7).

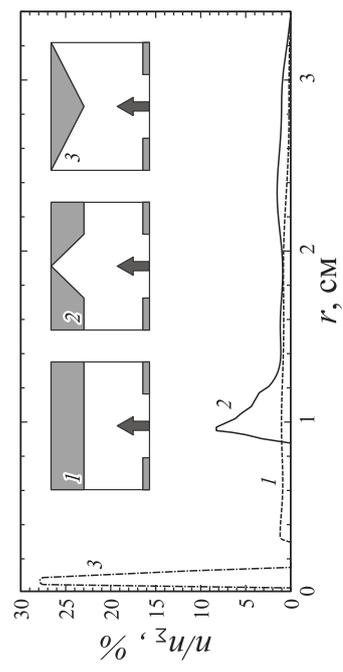


Рис. 7 — Распределение осевших частиц вдоль поверхности подложки, отнесенных к полному числу осевших частиц. Расстояние r отсчитывается от оси сопла. Штриховая линия 1 – плоская подложка, сплошная линия 2 – угол между осью сопла и поверхностью подложки 45°, наклонная часть подложки переходит в горизонтальную, образуя выпуклый угол (135°), при $r = 1$; штрихпунктирная линия 3 – угол между осью сопла и выпуклой поверхностью подложки 60.5°. На врезках схематично показана геометрия подложки в 3 приведенных случаях.

ние микрочастиц на развитие процессов горения горючей смеси и определить вклад теплового излучения в физические механизмы возгорания и инициирования детонации в газозвезях, что может быть использовано в научных и прикладных исследованиях физики горения и взрыва дисперсных горючих газовых сред и топлив. Конкретные результаты могут быть использованы при создании ряда перспективных технических систем таких как двигатели внутреннего сгорания нового поколения, эффективные системы имплантации и напыления микрочастиц, системы пожаро- и взрывобезопасности водородных энергетических установок и АЭС.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Полученное на основе детального трехмерного моделирования подтверждение ламинарной природы газодинамического течения в процессе ускорения пламени и перехода в детонацию в высоко химически активных газовых смесях.
2. Подтверждение справедливости теории ускорения пламени и перехода к детонации, основанной ранее на результатах двухмерных расчётов горения высоко химически активных газовых смесей, путём компьютерного моделирования развития данных процессов в трехмерных полуготкрытых каналах реального масштаба заполненных стехиометрической водород-кислородной смесью.
3. Детальное описание сценария развития горения в бедных водород-воздушных смесях близких по составу к концентрированному предельно воспламенения, содержащихся в замкнутом объеме.
4. Обнаруженный методами численного моделирования механизм локализованного инициирования детонации газообразной горючей смеси путем лучистого нагрева слоя взвешенных в газе химически нейтральных микрочастиц.
5. Результаты анализа моделирования динамики микрочастиц в потоке за фронтом детонационной волны и концепция повышения эффективности детонационно-индуцированной имплантации микрочастиц путем профилирования подложки или изменения ее ориентации по отношению к потоку.
6. Оценка эффективности бездиссипативного метода КАБАРЕ для повышения точности решения задач горения и детонации газовых смесей

Достоверность результатов. В основу физических моделей и математических алгоритмов использованных для проведения исследований положены общепринятые на данный момент методики описания фундаментальных законов горения газообразных и дисперсных сред. Для проверки корректности получаемых результатов было проведено всестороннее тестирование ком-

Приведены результаты вычислительного эксперимента по детонационному напылению микрочастиц в твердотельную подложку. Исследование газодинамических процессов сопутствующих напылению микрочастиц в импульсе детонационной волны было проведено в рамках постановки задачи о моделировании выхода детонационной волны из сопла детонационной пушки с радиальной подачей микрочастиц. Облако частиц, расположенное в начальный момент времени вблизи микрочастиц, подхватывается потоком продуктов горения за фронтом устойчивой детонационной волны с параметрами Чепмена-Жуге. Ввиду малой концентрации частиц динамика примесной фазы описывалась в приближении Стокса. На рисунке 6 представлены временные зависимости средней скорости и координаты центра масс облака при использовании частиц различного размера. Наиболее мелкие частицы диамет-

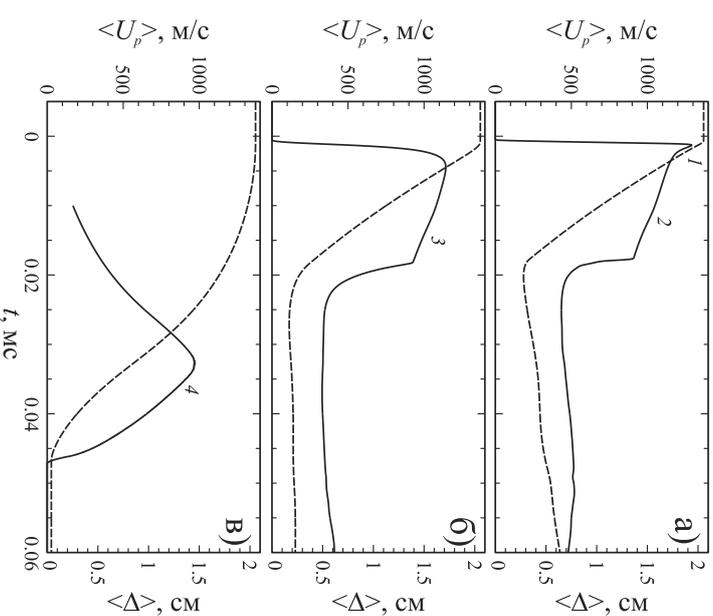


Рис. 6 — Хронограммы средней величины модуля скорости частиц (сплошные линии) и расстояния центра масс облака частиц от подложки (штриховые линии). Плотность материала частиц $\rho = 1.0 \text{ г/см}^3$. Размеры частиц: а) — 1.0 мкм, б) — 10.0 мкм, в) — 100.0 мкм. $t = 0.0 \text{ мс}$ — момент выхода детонационной волны из сопла канала. Цифрами отмечены характерные стадии, выделенные в приведенном анализе процессов.

ет скорость звука в газе. За сверхзвуковым фронтом реакции следует волна сжатия. По мере движения скорость фронта реакции падает и его наступление приводит к формированию устойчивой детонации, которая проходит через границу слоя и далее движется в холодной газовой смеси. Однако в случае малых размеров облака частиц, масштабов нагретой области может быть недостаточно для взаимодействия между волной сжатия и спонтанной волной реакции. В этом случае волна реакции выйдет в холодную газовую смесь в форме недосжатой детонации, что не повлечет за собой инициирование устойчивой детонации в газе. Таким образом, обнаружено, что существует минимальное значение ширины слоя газа с частицами L_{min} , при котором возможно формирование устойчивой детонации в рассматриваемой постановке. При увеличении толщины слоя в среде формируется более крутой градиент температуры. Скорость распространения спонтанной волны меньше скорости звука и она вырождается в волну дефлаграции, а волна сжатия обгоняет фронт реакции переходит в ударную волну. Формирование детонации при этом происходит в результате нестационарного ускорения пламени за фронтом ведущей ударной волны. Возникающая при этом детонационная волна распространяется в пересжатом режиме и имеет достаточную интенсивность, чтобы сформировать устойчивую детонацию в холодной газовой смеси. При дальнейшем увеличении ширины слоя газа с частицами газодинамические факторы все слабее влияют на структуру облака частиц при его нагреве от внешнего источника, и распределение температуры соответствует профилю потока излучения, который экспоненциально затухает при прохождении в толщину слоя ($T(x) \sim \exp(-x/\Lambda)$). Интенсивность ускорения волны горения на еще более крутом градиенте температуры не достаточна для перехода к детонации на масштабах нагретого слоя. Однако формирование детонации возможно и в этом случае, в результате многократного взаимодействия между переотраженной от границ облака частиц ударной волной и фронтом пламени (см. рис. 5в). Данный сценарий не может быть реализован, если ширина слоя больше некоторой критической ширины L_{max} , при которой ударная волна затухает при прохождении от одной границы слоя до другой.

Далее приведены полученные критерии на начальные размеры облака частиц L_{min} и L_{max} и начальную длину свободного пробега в нем для реализации описанных механизмов инициирования детонации. Также представлен анализ влияния мощности источника теплового излучения на процесс воспламенения смеси и последующую эволюцию горения. На основе сравнения характерного времени установления теплового равновесия между соседними частицами и длительностью нагрева получена оценка максимального теплового потока внешнего источника, при котором могут быть получены описанные режимы.

пьютерных кодов реализующих выбранную физико-математическую модель процессов горения. Полученные результаты хорошо согласуются с теоретическими представлениями и экспериментальными данными о параметрах ламинарного пламени, детонационных волн и динамике переходных режимов. Используемые численные методы для решения уравнений газовой динамики показали хорошее совпадение в области сходимости на тестовых задачах распространения волн горения и детонации с результатами, полученными с использованием более современного бездиссипативного метода КАБАРЕ.

Апробация работы. Основные положения и результаты работы докладывались и обсуждались на следующих научных конференциях: Всероссийская научная школа молодых ученых Волны и вихри в сложных средах (Москва, 2012), VII Всероссийская конференция Необратимые процессы в природе и технике (Москва 2013), XXV Конференция “Современная химическая физика” (Туапсе 2013), XI Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики (Казань, 2015), Всероссийская научно-техническая конференция Авиадвигатели XXI века (Москва 2015), Третья Международная конференция по горению и детонации “Мемориал Я.Б. Зельдовича” (Москва 2014), VI European Combustion Meeting (Лунд, Швеция 2013), 24th International colloquium on the dynamics of explosions and reactive systems (Тайбей, Тайвань 2013), XXVIII, XXX International conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Эльбрус, 2013, 2015), XXIX International conference on Equations of State for Matter (Эльбрус, 2014, 2016), 8th International Seminar on Flame Structure (Берлин, 2014), 6th International symposium on non-equilibrium processes, plasma, combustion and atmospheric phenomena (Сочи 2014), 25th International colloquium on the dynamics of explosions and reactive systems (Лидс, Великобритания, 2015).

Личный вклад. Автором разработаны подходы к программной реализации многомерного численного моделирования процессов распространения волн горения и детонации в газовых смесях и газовзвезях на кластерных многопроцессорных и многоядерных системах, проведена большая часть вычислительных экспериментов. Он принимал непосредственное участие в тестировании использованных компьютерных кодов, проводил модернизацию и усовершенствование вычислительного комплекса в соответствии с современными подходами разработки программного обеспечения, внедрял новые физические модели и математические алгоритмы. Принимал активное участие в анализе и интерпретации полученных результатов расчетов, а также в формулировке и обосновании моделей и выводов, вошедших в диссертацию.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 32 печатных изданиях 10 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 22 — в тезисах докладов.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения. Полный объем диссертации **135** страниц текста с **34** рисунками и **3** таблицами. Список литературы содержит **151** наименование.

Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, формулируется цель, ставятся задачи работы, сформулированы научная новизна и практическая значимость представляемой работы.

В **первой главе** приведен очерк из истории развития науки о горении и взрыве, отмечены фундаментальные исследования, оказавшие наибольшее влияние на становление физики горения и детонации газовых смесей и газовезеси. Дан краткий литературный обзор современных работ посвященных теоретическим и экспериментальным исследованиям, а также математическому моделированию процессов горения и детонации газовых смесей и газовезеси. Описана терминология, используемая в специальной научно-технической литературе посвященной тематике данной диссертационной работы. С учетом результатов проведенного аналитического обзора рассмотрена физико-математическая модель газовой фазы, основанная на полной системе уравнений газовой динамики Навье-Стокса с учетом сжимаемости, вязкости, теплопроводности, многокомпонентной диффузии и химических превращений, используемая в исследованиях, представленных в диссертации. Приведены используемые уравнения состояния газовой смеси, заданные таблично, с учетом температурных зависимостей теплоемкостей и энthalпии образования каждой из компонент смеси. Описана применяемая методика учета протекания химических реакций при помощи детальных кинетических механизмов окисления водород-кислородных и водород-воздушных смесей. Приведены континуальная двухскоростная, двухтемпературная модель для описания динамики взвешенных в газовой смеси инертных микрочастиц в случае высоких массовых концентраций частиц, и приближение Стокса использованное в случае более низких массовых концентраций. Представлены методики расчетов коэффициентов переноса и учета переноса теплового излучения в рамках диффузионного приближения.

Во **второй главе** представлены использованные алгоритмы вычислительной физики. Приведены основные этапы решения уравнений физико-математической модели газовой смеси или газовезеси в рамках модифицированного эйлерово-лагранжева метода, обладающего вторым порядком точности по пространству и первым по времени, который был использован для получения большинства из полученных в диссертации результатов. Обсуждан-

и перенос тепла от частиц к несущей газовой фазе ведет к формированию градиентов температуры в газе. Возникновение градиента температуры определяет соответствующий градиент времени задержки воспламенения смеси T_{ind} . Распространение волны горения на образцованном градиенте температуры в газе было проанализировано в рамках классификации режимов горения на градиентах времени задержки воспламенения, предложенной Д.Б. Зельдовичем (*Zeldovich Ya.B // Combust. Flame, 1980*). В зависимости от начальных размеров облака частиц выявлены сценарии и проанализированы физические механизмы формирования детонационного горения в газовезеси. В частности показано, что инициирование детонации в условиях рассмотренной задачи возможно в следующих основных режимах (см. рис. 5). В случае малой

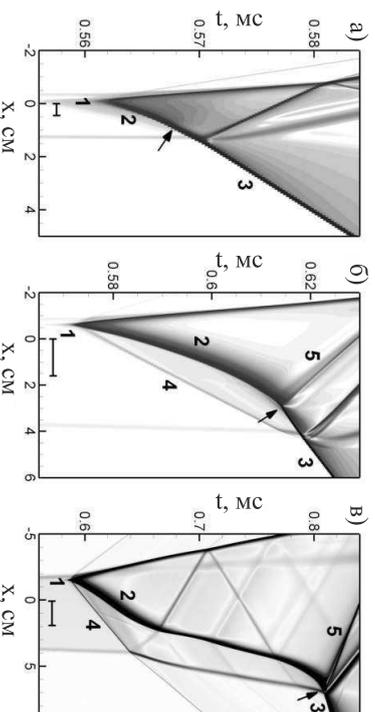


Рис. 5 – $x - t$ диаграммы развития процесса инициирования детонации внутри нагретого двухфазного слоя с длиной пробега излучения $\Delta = 3,33$ см. а – формирование детонации в результате взаимодействия недосжатой детонации с волной сжатия в слое начальной ширины 0,5 см, б – формирование детонации в результате нестационарного ускорения пламени за ведущей ударной волной в слое начальной ширины 1,7 см, в – формирование детонации в результате взаимодействия волны горения и отраженных ударных волн в слое начальной ширины 2,0 см. 1 – первичный очаг, 2 – волна реакции, 3 – волна детонации в чистой газовой смеси, 4 – ударная волна, 5 – волна детонации. Стрелкой показана точка возникновения детонации, горизонтальный отрезок показывает начальную ширину слоя.

протяженности облака частиц, в газе формируется практически однородное распределение температуры, что определяется взаимным влиянием эффектов газодинамического расширения нагретого газа и поглощения излучения частицами. Детонация при этом возникает в результате развития нестационарного теплового взрыва на пологом градиенте температуры. Эволюция теплового взрыва на градиенте температуры носит характер распространения так называемой спонтанной волны реакции, видимая скорость которой определяется как $U_{sp} = |\text{grad}(T_{ind})|^{-1}$, и в случае пологого градиента превышает

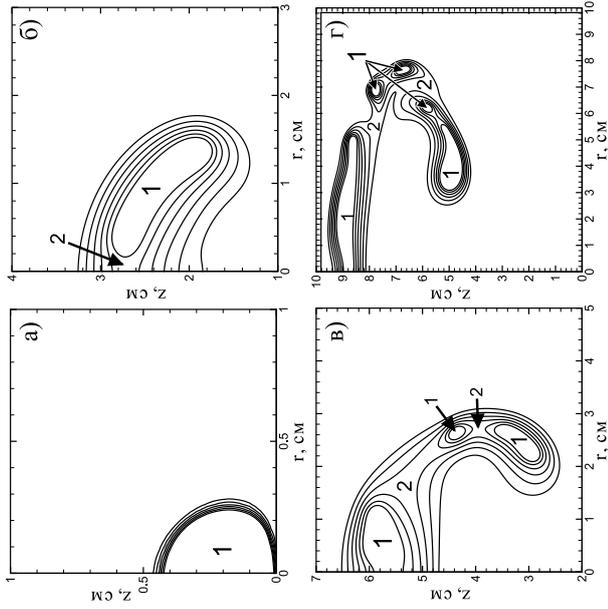


Рис. 4 – Структура всплывающего в гравитационном поле очага горения водородно-воздушной смеси с концентрацией водорода 6 % на различных стадиях развития процесса горения в ограниченном объеме: а) воспламенение вблизи нижнего торца, левая граница – ось симметрии, 1 – область очага химической реакции; б) всплывание очага горения в поле гравитационных сил; в) разрушение структуры очага горения и формирование ансамбля очагов меньшего масштаба, 2 – область затухания горения; г) многоочаговый режим распространения пламени.

В четвертой главе приведены результаты исследования формирования и распространения волн дозвукового горения и детонационных волн в дисперсных средах, представляющих собой горючую газовую смесь с примесью взвешенных инертных микрочастиц. В частности методами численного моделирования проведен анализ инициирования горения в газозвеси на основе стехиометрической водород-кислородной смеси с добавлением мелкодисперсных инертных микрочастиц путем воздействия на среду оптического излучения от внешнего источника. Представлена постановка задачи, в рамках которой, в горючей газовой смеси изначально задано однородное облако взвешенных инертных микрочастиц с резкими границами. Внешний источник излучения был расположен на левой границе расчетной области, интенсивность источника задавалась равной интенсивности излучения абсолютно черного тела при температуре 5800 К, что соответствует данным работы *Berkowitz A.M.* et. al. // Proc. Comb. Inst., 2011, где аналогичная постановка была рассмотрена экспериментально. При наличии неоднородности распределения взвешенных в газозвеси микрочастиц, поглощение излучения частицами, их нагрев

ность выбора данной вычислительной методики подтверждается приведенными данными по её всестороннему тестированию при решении широкого круга задач физики горения и детонации. Кратко описана разработанная на языке **Fortran 2008** с использованием технологии **MPI** параллельная объектно-ориентированная программная платформа, предназначенная для создания пакетов вычислительной газодинамики. Представлена реализация на базе данной платформы алгоритмов решения уравнений физико-математической модели и химической кинетики, с возможностью проведения ресурсоемких численных экспериментов на высокопроизводительных вычислительных системах с разделенной памятью.

Третья глава посвящена исследованию физико-химических механизмов развития горения газообразных смесей в ограниченных объемах. В частности, рассмотрены процессы ускорения пламени и перехода от медленного горения к детонации в высокоактивных стехиометрических смесях водорода с кислородом в гладких каналах в трехмерной геометрии. Полученные результаты находятся в соответствии с теорией ускорения пламени и перехода к детонации, разработанной ранее на основе детальных двухмерных расчетов развития горения в полукрытых каналах, в рамках которой формирование детонационной волны нестационарно ускоряющимся пламенем происходит в результате роста давления на масштабах зоны реакции. На рисунке 1 представлена полученная из проведенных вычислительных экспериментов временная зависимость скорости ведущей точки фронта пламени и давления в ней для двухмерных и трехмерных каналов. В обоих случаях качественно вос-

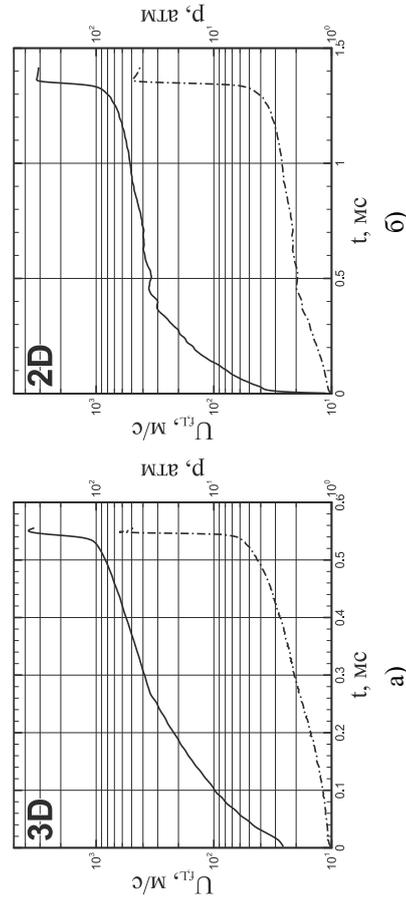


Рис. 1 – Динамика скорости ведущей точки поверхности фронта пламени (сплошные линии) и давления в этой точке (штрихпунктирные линии) в зависимости от времени для а) трехмерных и б) двухмерных каналов шириной 10 мм.

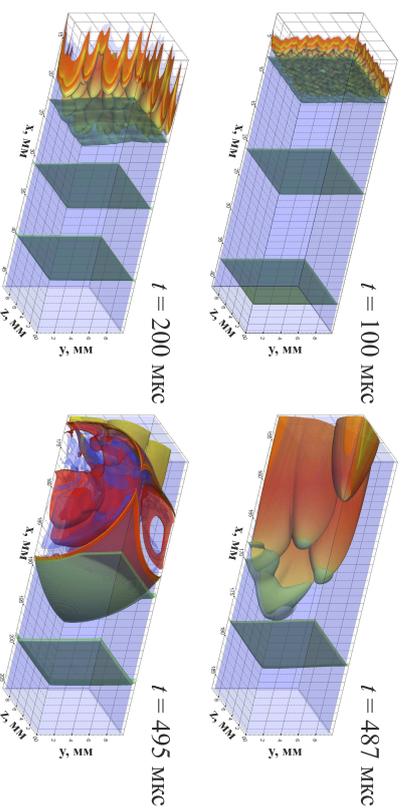


Рис. 2 — Особенности газодинамических течений формируемых на различных стадиях ускорения пламени и перехода к детонации в трехмерном канале. Рисунки показывают структуру фронта пламени и волны сжатия в потоке перед фронтом на моменты времени 100, 200, 487 и 495 мкс.

производятся основные стадии процесса, наблюдаемые в лабораторных экспериментах (см. рис. 2). Основным различием является более интенсивное развитие процесса в трехмерном случае, что объясняется наличием дополнительной стенки свободной. По результатам трехмерного численного моделирования были построены теневые снимки, которые позволили интерпретировать результаты реального эксперимента по ускорению пламени в каналах и подтвердить ламинарную структуру формируемого в канале газодинамического потока, на протяжении всего процесса вплоть до формирования детонации. Сравнение реальных и численных теневых фотографий представлено на рисунке 3.

В обоих случаях проекция реального трехмерного потока на двухмерную плоскость экрана приводит к получению изображения сложной, казалось бы турбулентной структуры потока, что, как показали проведенные трехмерные расчеты (см. рис. 2), в действительности не так.

Приведены результаты анализа динамики волны горения в канале с использованием модели, описывающей фронт пламени как совокупность движущихся источников энерговыделения. В рамках данной модели была выявлена роль волн сжатия, излучаемых с поверхности фронта пламени при нестационарном распространении пламени в канале, на всех стадиях процесса ускорения пламени и перехода к детонации.

Проанализировано влияние характера зависимости времени задержки воспламенения смеси от давления, что позволило, на основе проведенных двухмерных экспериментов, получить и обосновать механизм перехода к

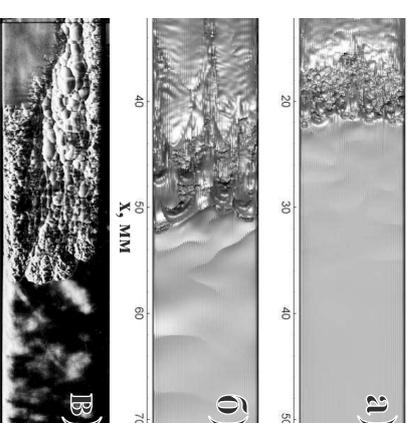


Рис. 3 — Теневые изображения структуры фронта пламени на первой стадии ускорения пламени в канале: а) и б) получены из результатов трехмерных расчетов в моменты времени соответственно 200 мкс и 300 мкс, в) экспериментальный снимок (Kizilevov M. et. al. // Comb. Sci. Tech., 2010)

детонации в свежей смеси на расстоянии от фронта пламени в водород-кислородных смесях при низких начальных давлениях, где время задержки воспламенения возрастает с увеличением давления.

Также в данной главе, путем детального двухмерного моделирования, выявлены особенности развития волн горения в замкнутых объемах, заполненных низкоактивными газовыми смесями водорода с воздухом близкими по составу к концентрированному пределу воспламенения. В отличие от процессов горения в химически активных смесях близких к стехиометрии, горение бедных смесей характеризуется гораздо более длительными временами развития. В связи с этим важную роль начинает играть воздействие на очаг гравитационных сил. Анализ динамики распространения очага горения позволил выявить механизмы конвективного переноса очага горения в гравитационном поле и детализировать основные стадии развития процесса. Следуя аналогии между конвективным подъемом горячего пузыря и распространением очага горения в бедной смеси, были выделены следующие стадии развития горения. Непосредственно после воспламенения реакция горения в низкоактивной смеси поддерживается за счет диффузионного переноса свежей смеси в зону реакции, в отличие от механизма распространения горения за счет переноса тепла, доминирующего в смесях близких к стехиометрии. При конвективном подъеме горячих продуктов горения происходит разрушение изначальной структуры очага за счет нарастания собственных пульсаций и формирование режима развитого многоочагового горения смеси (см. рис. 4).