

Numerical Experiments in a Shock Tube with an Intermediate and Detonation Chamber

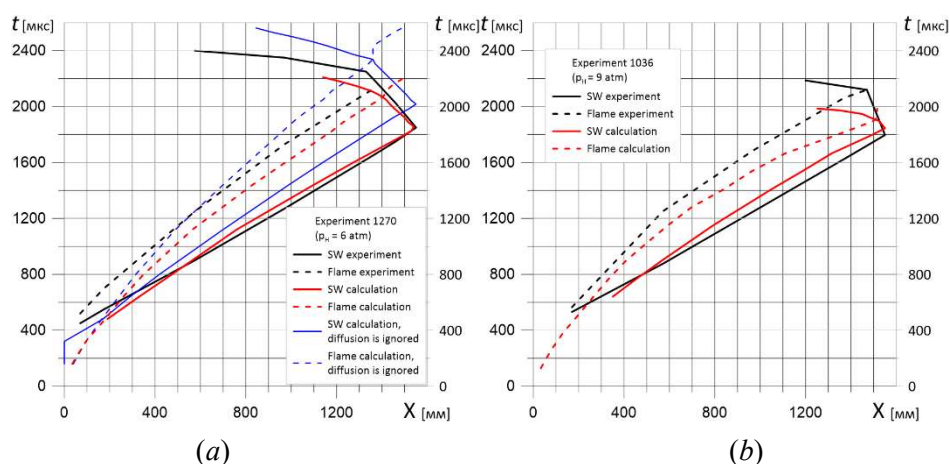
P. V. Kozlov, V. Yu. Levashov, Yu. V. Tunik

*Research Institute of Mechanics, Lomonosov Moscow State University,
Moscow, 119192, Russia
tunik@imec.msu.ru*

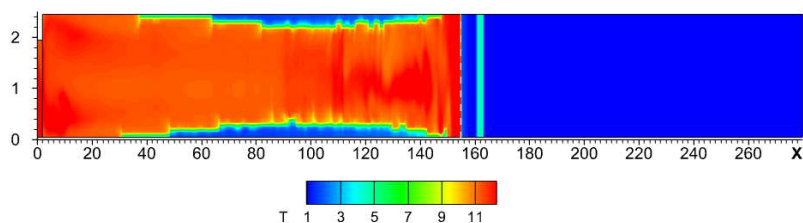
Abstract

The work is aimed at developing a digital analogue of a three-chamber shock tube. The shock tube of the Research Institute of Mechanics of Moscow State University, which is launched by burning an oxyhydrogen mixture in a high-pressure chamber, was chosen as a real prototype. The model is based on two-dimensional non-stationary Navier–Stokes equations for axisymmetric flows of a multicomponent reacting gas, taking into account diffusion. Test problems on initiating high-speed shock waves in air are formulated and numerically solved. Calculations are performed for burning of an oxyhydrogen mixture both in the mode of conventional and detonation combustion. It is shown that the proposed digital model of a three-chamber shock tube allows obtaining results close to the experiment when burning an oxyhydrogen mixture in the mode of conventional combustion. According to calculations, detonation combustion of an oxyhydrogen mixture increases the velocity of generated shock waves in all chambers of the setup.

Keywords: shock tube, numerical simulation, Navier–Stokes equations, combustion, detonation



Experimental and calculated trajectories of the shock wave at an initial pressure in the High Pressure Chamber of 6 (a) and 9 (b) atm



Opening of the diaphragm by the shock wave until detonation approaches (the dotted line shows the initial position of the diaphragm)

УДК 533.6.011.5

Численные эксперименты в ударной трубе с промежуточной и детонационной камерой

П. В. Козлов, В. Ю. Левашов, Ю. В. Туник

*НИИ механики МГУ им. М.В. Ломоносова,
Россия, Москва, 119192, Мичуринский проспект д. 1
tunik@imec.msu.ru*

Аннотация

Работа нацелена на разработку цифрового аналога трехкамерной ударной трубы. В качестве реального прототипа выбрана ударная труба НИИ механики МГУ, запуск которой осуществляется сжиганием гремучей смеси в камере высокого давления. Модель строится на основе двумерных нестационарных уравнений Навье – Стокса для осесимметричных течений многокомпонентного реагирующего газа с учетом диффузии. Сформулированы и численно решены тестовые задачи по инициированию высокоскоростных ударных волн в воздухе. Расчеты выполнены как при сжигании гремучей смеси в режиме обычного, так и детонационного горения. Показано, что предложенная цифровая модель трехкамерной ударной трубы позволяет получать близкие к эксперименту результаты при сжигании гремучей смеси в режиме обычного горения. По расчетам детонационное сжигание гремучей смеси повышает скорость генерируемых ударных волн во всех камерах установки.

Ключевые слова: ударная труба, численное моделирование, уравнения Навье – Стокса, горение, детонация

1. Введение

Классическая ударная труба (УТ) состоит из камеры высокого давления (КВД), заполненной в исходном состоянии толкающим газом, и камеры низкого давления с исследуемой газовой смесью. Простейшая модель функционирования УТ использует решение задачи о распаде произвольного разрыва между КВД и камерой низкого давления (КНД) (см., например, [1–2]). При проведении экспериментов одним из основных вопросов является вопрос о подготовке толкающего газа. В [3] высокое давление в КВД предложено создавать в результате адиабатического сжатия толкающий газ с помощью тяжелого свободного поршня. В [4] толкающий газ нагревается при постоянном объеме КВД за счет импульсного электродугового разряда. Наконец, существуют установки, у которых высокое давление в КВД создается в результате сжигания воспламеняющего газа, чаще всего разбавленной гелием водородно-кислородной смеси. Впервые этот способ был апробирован в [5].

Условно такие установки можно называть УТ с детонационной КВД, поскольку наибольший эффект в этом случае, может быть получен, если сгорание газа происходит в режиме детонации Чепмена – Жуге и детонация беспрепятственно проходит в КНД [6]. Однако взаимодействие детонации с разделительной диафрагмой между камерами УТ может понизить эффективность сжигания газа в режиме детонации Чепмена – Жуге. Кроме того, в смесях с большим содержанием химически инертных компонент возникают проблемы с инициированием детонации. Следующий по энергетической эффективности вариант использования горения в КВД – это полное сжигание газа до раскрытия диафрагмы. Эффективность сжигания газа в этом случае не зависит от режима горения, поскольку в КВД образуется смесь, параметры которой соответствуют равновесному состоянию продуктов горения при постоянном объеме. Однако горение воспламеняющегося газа в КВД, как правило, носит сложный неоднородный

характер, что служит причиной плохой повторяемости экспериментальных результатов из-за нерегулярного раскрытия диафрагмы

Кроме того, на структуру течения в камерах УТ и полноту сгорания оказывает влияние конечный во времени процесс раскрытия диафрагмы. Одномерная и тем более классическая теория могут привести к результатам, далеким от реального эксперимента.

Конечная цель работы, которую начинает данная статья, состоит в разработке цифрового аналога УТ с детонационной КВД. В качестве реального прототипа выбрана трех-камерная УТ НИИ механики МГУ, запуск которой осуществляется сжиганием гремучей смеси. Представлены результаты расчетов и сравнения с экспериментальными данными.

2. Описание установки

Схема установки представлена на рис. 1. Ударная труба состоит из трех секций: камеры высокого давления (КВД) длиной 1.55 м, камеры промежуточного давления (КПД) длиной 3.5 м и камеры низкого давления (КНД) длиной 3 м. КПД в данном случае играет роль буферной камеры по аналогии с [7, 8]. Все камеры имеют цилиндрическую форму с внутренним диаметром 50 мм. Секции трубы отделены друг от друга диафрагмами (на рисунке обозначены как D1 и D2). Диафрагмы выполнены из медной фольги толщиной 300 мкм с насечками. Одной из отличительных особенностей установки является наличие промежуточной камеры (КПД) между КВД и КНД. Промежуточная камера заполняется гелием, что препятствует попаданию продуктов сгорания из КВД в исследуемый газ, находящийся в КНД.

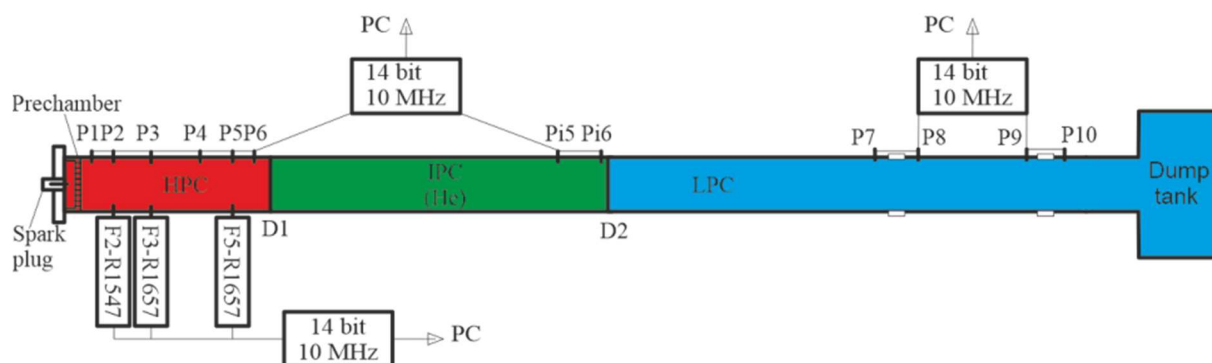


Рис. 1. Схема трех-камерной ударной трубы с фор-камерой для начального поджога гремучей смеси в КВД

Второй конструктивной особенностью рассматриваемой ударной трубы, является наличие форкамеры. Форкамера отделяет торцевую стенку трубы, на которой расположено поджигающее устройство (Spark plug на рис. 1), от основного объема КВД перфорированным диском. Перфорированный диск находится в 20 мм от торцевой стенки и имеет 19 микро-сопловых отверстий входным диаметром 1 мм и выходным 2 мм. Схема диска, ограничивающего форкамеру, представлена на рис. 2.

Первоначально искровой разряд автомобильной свечи (энергия разряда 0.1 Дж) воспламеняет газ в форкамере. Основная масса газа в КВД воспламеняется за счет инъекции продуктов горения через отверстия в диске, ограничивающем форкамеру. Смесь в КВД сгорает либо за головной ударной волной в режиме обычного горения, либо в волне детонации. Высокое давление в ударной или детонационной волне разрушает диафрагму между КВД и КПД. Сжатый гелий открывает вторую диафрагму и генерирует высокоскоростную ударную волну в КНД.

Для регистрации процессов, происходящих в камерах ударной трубы, экспериментальная установка оборудована датчиками давления (P1-P10 на рис. 1), сигнал с которых записывается на компьютер с помощью АЦП L-20-10. Также ударная труба оборудована системой

регистрации излучения, позволяющей измерять радиационные характеристики ударно нагретого газа, проходящего мимо двух измерительных сечений трубы. Более подробное описание схемы установки и измерительной аппаратуры можно найти в [9–10].

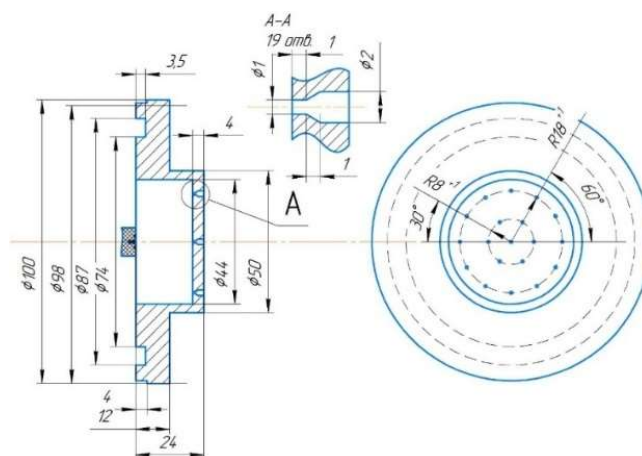


Рис. 2. Чертеж диска, ограничивающего форкамеру

3. Постановка задачи об иницировании ударных волн в КВД

Цифровой аналог УТ предполагает решение задачи, постановка которой позволяет адекватно описывать генерацию ударных волн, начиная с запуска установки. В начальный момент задаются давления $p_{\text{квд}}$ в КВД, $p_{\text{пк}}$ в КПД и $p_{\text{кнд}}$ в КНД. Во всех камерах газ находится в состоянии покоя при температуре $T_0 = 293 \text{ K}$. Считается, что искровой разряд мгновенно меняет давление, температуру и состав смеси в малой области вблизи свечи у левой торцевой стенки и оси симметрии. Температура T^* , давление p^* и состав газа приобретают в этой области значения, соответствующие равновесному состоянию продуктов горения гремучей смеси ($2\text{H}_2 + \text{O}_2$) с добавкой гелия при постоянном объеме. Далее решается задача об эволюции возникшей неоднородности.

Основу математической модели, описывающей динамику процессов в УТ, составляют двумерные нестационарные уравнения Навье-Стокса для осесимметричных течений многокомпонентного реагирующего газа (см. [11] и Приложение 1). При вычислениях диффузионных потоков $\vec{J}_k$ используется закон Фика с коррекцией Mason – Saxena [12], которая обеспечивает равенство нулю суммы диффузионных потоков. Эффективные коэффициенты диффузии, а также теплопроводности и вязкости для многокомпонентной смеси вычисляются по формулам Уилки (см., например, [13]). На стенках трубы и диафрагмах принимаются условия прилипания, непротекания и отсутствия теплоотдачи.

Для описания процессов воспламенения и горения гремучей смеси используется кинетическая модель В.В. Азатяна [14], которая учитывает 3 реакции диссоциации и 6 реакций обмена с участием 9 компонент: H_2 , O_2 , OH , H_2O , HO_2 , H_2O_2 , H , O , He (см. Приложение 2). Указанные газы возникают, в частности, и в области искрового разряда. Термодинамические свойства газовых компонент рассчитываются по данным из монографии [15]. Скорости реакций рассчитываются по данным из [16]. Приемлемость модели показана в [17], а также предварительно тестировалась по времени задержки воспламенения в сравнении с результатами, полученными по моделям [18–19]. Однако в условиях моделируемых экспериментов с высоким уровнем давления в КВД в расчетах наблюдается неоправданно высокая детонационная способность разбавленной гелием гремучей смеси. Согласующиеся с экспериментом результаты позволяет получить коррекция скорости реакций при давлении свыше одной атмосферы: скорость реакций делится на величину давления в атмосферах.

Диафрагмы и перфорированный диск, ограничивающий форкамеру, считаются бесконечно тонкими. Рассматривается как мгновенное раскрытие диафрагм, так и раскрытие за конечное время. В первом случае диафрагма исчезает мгновенно по истечению некоторого периода t_D воздействия на нее давления выше критического P_D . Во втором случае считается, что по истечению времени задержки t_D площадь раскрытия растет линейно в течение периода t_C .

Моделирование инъекции газа из форкамеры в основной объем КВД через отверстия в перфорированном диске, строго говоря, требует использования трехмерных расчетов. В двумерной постановке вертикальная граница расчетной ячейки, совпадающая с диском, делится на две части: одна соответствует непроницаемой стенке, другая представляет собой окно перетекания. В окне перетекания потоки массы, импульса и энергии определяются в результате решения задачи о распаде произвольного разрыва. Оставшаяся часть рассматривается как непроницаемая с обеих сторон стенка. Полученные потоки складываются с весовыми коэффициентами, которые пропорциональны площади соответствующих частей границы между ячейками по обе стороны от диска. Так, если шаг расчетной сетки по вертикали равен 1 мм, и диаметр отверстий на диске 1 мм, то площадь центрального отверстия составляет 25% (весовой коэффициент потоков перетекания) от площади вертикальной границы ближайшей к оси симметрии ячейки. Отверстия в реальном диске представляют собой расширяющееся сопло (рис. 2). В модели бесконечно тонкого диска лучшее совпадение с экспериментом дает выбор отверстия с диаметром выходного сечения. Ниже в расчетах рассматривается диск с полной перфорацией (рис. 2), диск без центрального отверстия и диск с одним центральным отверстием.

4. Метод решения и результаты численного моделирования ударных волн в трех-камерной ударной трубе

Задача решается численно. Расчеты выполняются между осью симметрии, цилиндрической и торцевыми стенками УТ, поэтапно: вначале от левой торцевой стенки до первой диафрагмы, затем с момента начала ее раскрытия расчетная область продлевается до второй диафрагмы, а далее аналогично до правой торцевой стенки. Моделирование осуществляется в ортогональной цилиндрической системе координат: ось абсцисс X совпадает с осью симметрии, ось ординат Y направлена перпендикулярно, по радиусу. Расчетная область разбита на ячейки горизонтальными и вертикальными прямыми.

В основе численного алгоритма – конечно-разностный метод С. К. Годунова – В.П. Колгана [20–23], который обеспечивает второй порядок решений уравнений Эйлера благодаря экстраполяции газодинамических параметров на границы ячеек с использованием минимальным по модулю центральных производных. Модификации этого метода для расчета течений вязкого многокомпонентного газа с химическими реакциями рассматриваются в [24–26].

Отличие данной работы заключается в том, что производные $\partial\Psi/\partial x$ и $\partial\Psi/\partial y$ на границе между ячейками для любого газодинамического параметра Ψ определяются в зависимости от ориентации граничного отрезка. Производная по нормали к отрезку рассчитывается по разности Ψ в центрах ячеек, производная вдоль отрезка определяется как полу сумма производных того же направления, вычисленных в соседних ячейках при экстраполяции параметров на их границы. Коэффициенты вязкости, теплопроводности и диффузии вычисляются, как и в [25], по значениям температуры и давления, которые получены в результате решения задачи Римана о распаде произвольного разрыва.

На стенке коэффициенты переноса вычисляются с учетом корректировки температуры и плотности газа. Значение температуры, полученное в результате решения задачи Римана на стенке, увеличивается за счет торможения скорости до нуля при сохранении полной энтальпии из пристеночной ячейки, а плотность падает при неизменном давлении. Производные обеих компонент скорости вдоль границы равны нулю, производные давления и плотности полагаются равными соответствующим значениям в пристеночной ячейке. В поперечном к стенке

направлении производные давления и плотности равны нулю, а производные компонент скорости рассчитываются по значениям в центрах пристеночных ячеек с учетом полного торможения на стенке.

В данной работе адекватность разрабатываемого цифрового аналога проверяется без претензии на качественный расчет пограничного слоя у стенок УТ. Эта способность используемого численного метода показана в [25], поэтому расчеты выполняются на неподвижной сетке с одинаковым шагом в 1 мм, как по продольной, так и поперечной координате.

4.1. Сжигание гремучей смеси в режиме “обычного” горения

Под “обычным” понимается горение, обусловленное теплопроводностью и диффузией. Такое горение возникает в смеси с высоким содержанием гелия. Видео 1 и 2 иллюстрируют воспламенение газа с 49 % содержанием гелия и инжекцию продуктов горения в основную часть КВД при давлении $p_{\text{квд}}$ равном 6 атм в случае диска с полной перфорацией и без центрального отверстия. В таблице 1 приводятся параметры смеси в области искрового разряда, рассчитанные по программе Gaseq [27]. Здесь и ниже радиус этой области 2 мм, протяженность по оси абсцисс 3 мм. Интересно отметить, что инжекция через диск с одним центральным отверстием обеспечивает практически такое же полное воспламенение, как и диск с полной перфорацией (Видео 3). Наименее эффективной оказывается перфорация без центрального отверстия.

В результате инжекции продуктов горения и воспламенения газа в КВД возникают волны сжатия, которые со временем трансформируются в ударную волну (Видео 4). Складывается характерная для обычного горения картина распространения волны горения (фронта пламени) с идущей впереди ударной волной. Истечение продуктов горения из фор-камеры создает поршневой эффект, толкающий волну горения. Построенная по расчетным данным траектория ударной волны близка к траектории, полученной в эксперименте № 1270 (рис. 3, а). Траектория, построенная в случае диска с одним центральным отверстием, практически совпадает с траекторией для диска с полной перфорацией (рис. 3, б). Диффузия оказывает заметное влияние на результат моделирования волны горения и, как следствие, ударной волны в КВД (рис. 3, а).

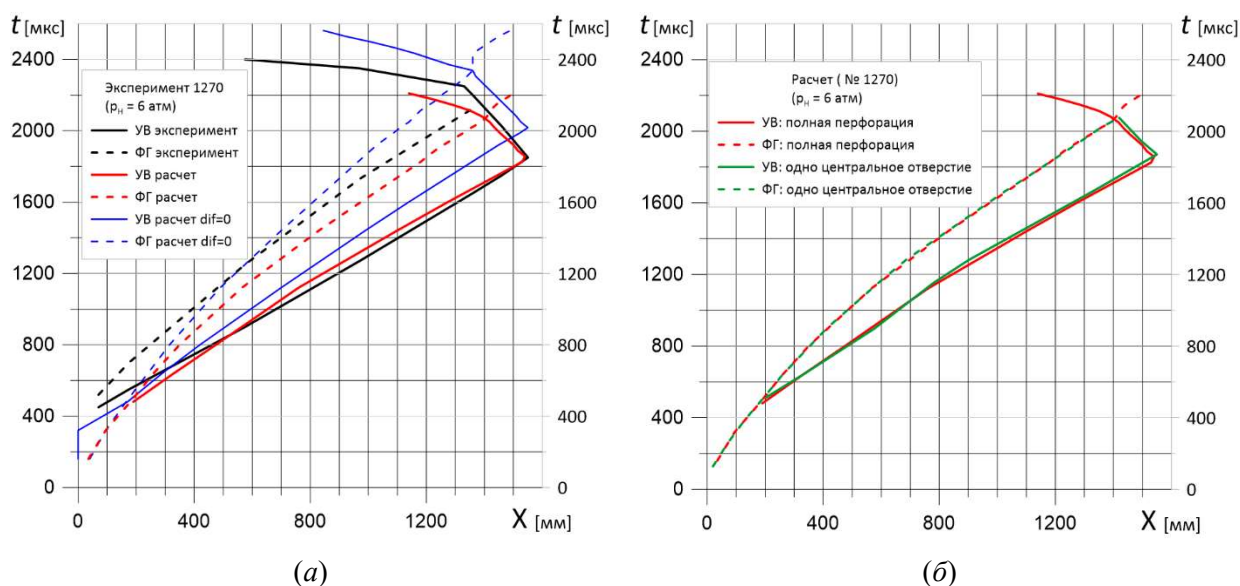


Рис. 3. Экспериментальные и расчетные траектории ударной волны

Более раннее формирование ударной волны, регистрируемое в эксперименте, связано с тем, что датчики на стенке УТ реагируют на поперечную ударную волну. Расхождение в траектории фронта горения может быть обусловлено двумя причинами. Во-первых, существует

различие в регистрации его положения. В расчете это абсцисса правой точки области с высокой температурой. В эксперименте положение фронта горения определяется по излучению радикала ОН. Вторая причина может быть связана с выбором кинетической модели горения гремучей смеси.

Примерно через 1850 мкс от искрового разряда ударная волна подходит к диафрагме. Однако ее раскрытие начинается с задержкой в $90 \div 100$ мкс (рис. 3, а). В течение этого времени в сторону левой торцевой стенки распространяется отраженная ударная волна, которая после взаимодействия с фронтом горения трансформируется в детонацию, сжигающую водород, оставшийся у стенки трубы (Видео 4).

В модели с мгновенным раскрытием диафрагмы значительная часть гремучей смеси, не сгоревшая за падающей и отраженной волной, перетекает в КПД (Видео 5). Воспламенение водорода на небольшом участке у стенки КПД не успевает обеспечить полное сгорание водорода. Значительная часть гремучей смеси сохраняется в течение всего времени сжатия гелия. Таким образом, на сжатие гелия в КПД расходуется только часть энергии, запасенной в КВД в начальный момент времени. Скорость ударной волны в КПД не превышает 3000 м/с, что составляет примерно 60% от скорости в эксперименте.

Процесс раскрытия диафрагмы в течение конечного времени представлен на Видео 6. Попавшая в КПД гремучая смесь воспламеняется сразу за раскрывшейся диафрагмой (Видео 7), что обеспечивает ее догорание и скорость ударной волны 6630 м/с, которая уже на расстоянии 2 метров от первой диафрагмы только на 7.5 % ниже экспериментальной. Почти полное выгорание гремучей смеси разгоняет ударную волну в КПД до 6630 м/с, а в КНД до 10340 м/с (Видео 8).

При начальном давлении в КВД равном 9 атм водород почти полностью сгорает уже в КВД (Видео 9), и скорость ударной волны в КНД достигает 10.925 км/с (Видео 10), что на 2.5 % ниже экспериментальной. Расчетная траектория ударной волны представлена на рис. 4. Параметры газа в области искрового разряда приводятся в таблице 1. В скобках, в первой строке, указана начальная мольная доля гелия в КВД.

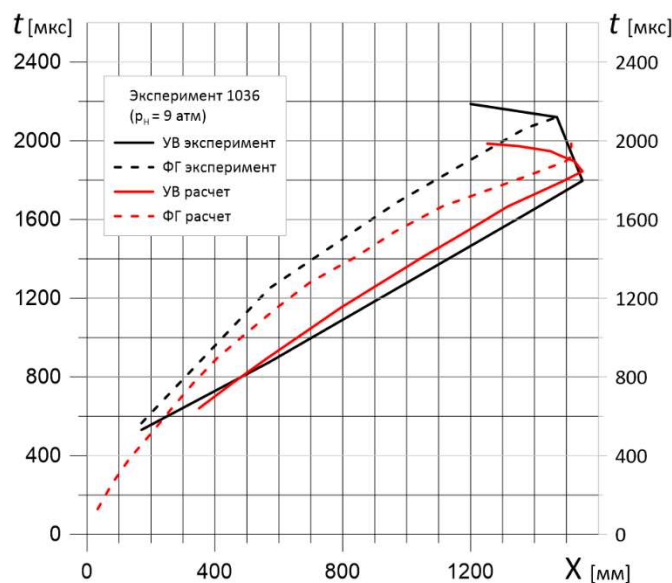


Рис. 4. Сравнение расчетных траекторий ударной волны при постепенном раскрытии диафрагмы с экспериментальными данными

Таким образом, можно считать, что разработанная численная модель формирования ударно-волновых структур в трех-камерной УТ позволяет получать близкие к эксперименту результаты при сжигании в КВД гремучей смеси в режиме обычного горения.

Таблица 1

Мольные доли газовых компонент (%), давление P^* и температура T^* в области искрового разряда при разных значениях давления $p_{\text{КВД}}$ и мольной концентрации гелия He_0 в КВД до подвода инициирующей энергии

$p_{\text{КВД}}$ (He_0)	6 (49)	9 (49)	6 (34)
$P^*/p_{\text{КВД}}$	10.129000	10.251000	10.370000
T^*/T_0	11.625000	11.797000	12.238000
H_2	4.93500	4.74300	7.79100
O_2	1.53200	1.45600	2.33900
ОН	3.85000	3.74500	6.35200
H_2O	31.48600	31.90400	39.69700
HO_2	6.13×10^{-3}	7.07×10^{-3}	1.21×10^{-2}
H_2O_2	9.80×10^{-4}	1.27×10^{-3}	1.90×10^{-3}
H	1.34500	1.20500	2.51100
O	0.60900	0.55000	1.17100
He	56.23700	56.38900	40.12500

4.2. Детонация в КВД

Гремучая смесь с меньшим разбавлением имеет более высокую детонационную способность. В смеси с 34 % гелия детонация формируется в КВД уже на расстоянии порядка 800 мм до подхода каких-либо возмущений к диафрагме, как в случае с полной перфорацией диска (Видео 11), так и в случае с одним центральным отверстием (Видео 12). Скорость детонации 3356 м/с соответствует детонации Чепмена – Жуге, вычисленной по программе Gaseq. Детонация легко преодолевает диафрагму, инициируя в КПД ударную волну, идущую со скоростью примерно 7800 м/с, что заметно выше, чем при сжигании смеси с 49 % гелия, как в сравнении с расчетом, так и с экспериментом. Однако неожиданно самый высокий результат получен в случае с диском без центрального отверстия. Формирование детонации задерживается, и к диафрагме первой подходит ударная волна (Видео 13). Детонация, сформировавшаяся на расстоянии примерно 1050 мм, не участвует в раскрытии диафрагмы. Диафрагму раскрывает ударная волна (рис. 5).

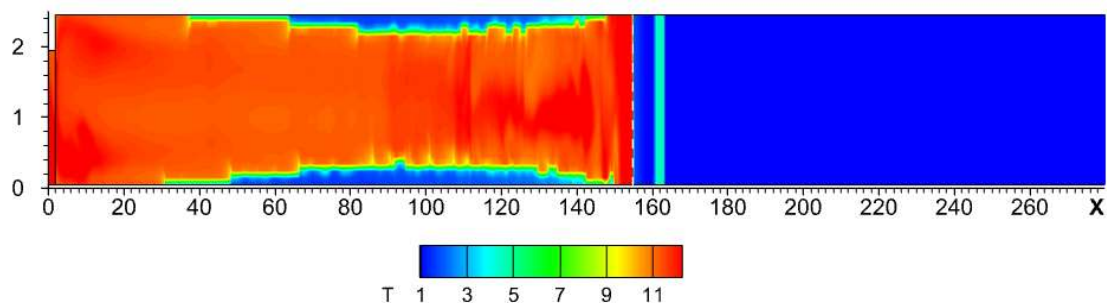


Рис. 5. Раскрытие диафрагмы ударной волной до подхода детонации (пунктирная линия – исходное расположение диафрагмы, более подробно на Видео 13)

Продукты детонации, проходящие в ПК, сохраняют минимальную энтропию, то есть имеют максимальную энергетическую эффективность. В результате детонационное сгорание смеси с 34% гелия в расчетах обеспечивает формирование в КНД УВ, распространяющейся со

скоростью более 13.2 км/с (Видео 14). В дополнении следует отметить важную роль фор-камеры в формировании детонационного режима сжигания гремучей смеси в КВД: в отсутствии фор-камеры детонация в смеси с 34% гелия возникает только после взаимодействия фронта горения с отраженной ударной волной (Видео 15).

5. Заключение

Разработана численная модель формирования ударно-волновых структур в трех-камерной УТ с форкамерой для поджига гремучей смеси в КВД.

Режим сгорания гремучей смеси в КВД зависит от добавки гелия. В расчетах сгорание бедных смесей с содержанием гелия более 50% происходит в режиме обычного горения, обусловленного теплопроводностью и диффузией. Сгорание смесей с низким содержанием гелия, например при 34 % гелия, может происходить в детонационном режиме. Наличие форкамеры способствует инициированию детонационного режима сжигания гремучей смеси в КВД.

Предложенная цифровая модель УТ позволяет получать близкие к эксперименту результаты при сжигании гремучей смеси в режиме обычного горения, что наглядно показано на схеме траектории УВ в КВД, а также при сравнении расчета и эксперимента по скорости ударных волн в ПК и КНД.

Эффективность обычного горения растет с повышением давления в КВД за счет более полного догорания гремучей смеси в КПД. При начальном давлении 9 атм скорость УВ в КНД достигает 11.2 км/с в эксперименте и 10.925 км/с в расчете, ошибка не превышает 2.5 %.

Расчеты показывают, что обычное горение в КВД с полной перфорацией форкамеры и с одним центральным отверстием приводит к распространению близких по интенсивности ударных волн. Отсутствие у форкамеры центрального отверстия снижает эффективность использования обычного горения гремучей смеси в КВД.

В случае легко детонирующей смеси наиболее эффективной оказывается фор-камера без центрального отверстия. В расчетах детонационное сгорание смеси с 34 % гелия обеспечивает формирование в КНД УВ со скоростью более 13.2 км/с.

Приложение 1

Двумерные нестационарные уравнения Навье – Стокса для осесимметричных течений, которые в цилиндрической системе координат (X, Y) можно представить в виде [1]

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho y}{\partial t} + \frac{\partial \rho u y}{\partial x} + \frac{\partial \rho v y}{\partial y} &= 0, \\ \frac{\partial \rho u y}{\partial t} + \frac{\partial y[\rho u^2 + p - \tau^{xx}]}{\partial x} + \frac{\partial y[\rho v u - \tau^{xy}]}{\partial y} &= 0, \\ \frac{\partial \rho v y}{\partial t} + \frac{\partial y[\rho v u - \tau^{yx}]}{\partial x} + \frac{\partial y[\rho v^2 + p - \tau^{yy}]}{\partial y} &= p - W, \\ \frac{\partial \rho E y}{\partial t} + \frac{\partial \rho u y H - u y \tau^{xx} - v y \tau^{yx} + q^x y}{\partial x} + \frac{\partial \rho v y H - v y \tau^{yy} - u y \tau^{xy} + q^y y}{\partial y} &= 0\end{aligned}$$

Здесь $H = h + 0.5(u^2 + v^2)$, $E = H - p/\rho$, $p = R_0 \rho T/\mu$; p , ρ , T , μ и h – давление, плотность, температура, молекулярный вес и удельная энтальпия газа, R_0 – универсальная газовая постоянная; u и q^x – скорость и тепловой поток по оси абсцисс X, а v и q^y – по оси ординат Y; $W/\rho = \eta \text{div} \vec{u} + 2\nu v/y$; τ^{xx} , τ^{yy} и $\tau^{xy} = \tau^{yx}$ – компоненты тензора напряжений, связанные с тензором скоростей деформации соотношениями $\tau^{ij}/\rho = \eta \text{div} \vec{u} + 2\nu e^{ij}$, то есть

$$\frac{\tau^{xx}}{\rho} = \eta \text{div} \vec{u} + 2\nu \frac{\partial u}{\partial x}, \quad \frac{\tau^{yy}}{\rho} = \eta \text{div} \vec{u} + 2\nu \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \frac{\tau^{xy}}{\rho} = \frac{\tau^{yx}}{\rho} = \nu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right),$$

где ν – кинематический коэффициент вязкости, а $\eta = -2\nu/3$ – второй коэффициент вязкости, $\text{div} \vec{u} = \partial u/\partial x + \partial v/\partial y + v/y$.

В многокомпонентной газовой смеси удельная энтальпия $h = \sum_k \beta_k h_k$, а тепловой поток $\vec{q} = -\lambda \text{grad} T + \vec{J}$. Здесь β_k – массовая доля k -й компоненты; $h_k = h_k(T)$ – энтальпия на единицу массы k -й компоненты; $\vec{J} = \sum_k h_k \vec{J}_k$, – суммарный тепловой за счет диффузии, $\vec{J}_k$ – диффузионный поток k -й компоненты. Диффузионные потоки $\vec{J}_k$ определяются законом Фика с эффективными коэффициентами диффузии Уилки

$$\bar{D}_k = (1 - \xi_k) / \sum_{n \neq k} (\xi_k / D_{kn})$$

и с учетом коррекции Mason-Saxena [2], которая обеспечивает равенство нулю суммы диффузионных потоков

$$\vec{J}_k = -\rho \bar{D}_k \nabla \beta_k + \rho_k \sum_n \bar{D}_n \nabla \beta_n$$

Коэффициенты бинарной диффузии D_{kn} рассчитываются по формуле, приводимой, например, в [3]

$$D_{kn} = D_{nk} = 0.268 \times 10^{-6} T^{3/2} \sqrt{0.5(\mu_k^{-1} + \mu_n^{-1})} / (p d_{kn}^2 \Omega_{kn})$$

Здесь $\Omega_{kn} = 1.074(T_{kn}^*)^{-0.1604}$ – интеграл столкновений; $T_{kn}^* = T/(\varepsilon_{kn}/k)$ приведенная температура столкновений, k – постоянная Больцмана, $\varepsilon_{kn} = \sqrt{\varepsilon_k \varepsilon_n}$ – глубина энергетической «ямы» потенциала межмолекулярного взаимодействия Леннарда – Джонса (см. таблицу 1). Коэффициент диффузии $\bar{D}_k$ имеет размерность м²/сек, если давление p в атм, молекулярная масса газовых компонент μ_k и μ_n в г/см³, а эффективный диаметр столкновений $d_{kn} = 0.5(d_k + d_n)$ в ангстремах (см. таблицу П1.1).

Таблица III.1

Диаметр столкновений, параметр потенциала Леннарда–Джонса, числа Прандтля и Шмидта для газовых компонент

компонента	d [Å]	ε/k [K]	Pr	Sc
H ₂	2.83	597	0.69	0.22
O ₂	3.47	1067	0.72	0.78
OH	3.15	798	0.72	0.44
H ₂ O	2.80	2600	1.00	0.98
HO ₂	3.47	1067	0.80	0.85
H ₂ O ₂	4.20	2893	1.00	0.96
H	3.50	370	0.67	0.10
O	3.05	1067	0.67	0.37
N ₂	3.80	714	0.72	0.95
He	2.20	102	0.67	0.88

Для коэффициентов кинематической вязкости и термо, или температуропроводности смеси также используются формулы Уилки (см. [3]):

$$\nu = \sum_k \nu_k \left(1 + \sum_{n \neq k} G_{kn}^{\nu} \frac{\xi_n}{\xi_k}\right)^{-1}, \quad \chi = \sum_k \chi_k \left(1 + \sum_{n \neq k} G_{kn}^{\chi} \frac{\xi_n}{\xi_k}\right)^{-1},$$

$$G_{kn}^{\nu} = G_{kn}^{\nu}(\nu_k, \nu_n) = 2^{-3/2} [1 + (\nu_k/\nu_n)^{1/2} (\mu_n/\mu_k)^{1/4}]^2 [1 + \mu_k/\mu_n]^{-1/2}, \quad G_{kn}^{\chi} = G_{kn}^{\chi}(\chi_k, \chi_n)$$

Здесь μ_k, ν_k, χ_k – молекулярный вес, а также кинематический коэффициент вязкости и термопроводности k -ой компоненты, которые рассчитываются по формулам молекулярно-кинетической теории

$$\nu_k = Sc_k \cdot D_k, \quad \chi_k = \nu_k / Pr_k, \quad D_k = \frac{1}{3} \bar{v}_k \cdot \bar{l}, \quad \bar{v}_k = \sqrt{\frac{8RT}{\pi \mu_k}}, \quad \bar{l} = \frac{1}{\sqrt{2} n \sigma}$$

Здесь Sc_k и Pr_k – числа Шмидта и Прандтля (табл. 1), $\bar{v}_k$ – средняя тепловая скорость молекул, $\bar{l}$ – средняя длина свободного пробега, n – число молекул в единице объема; ξ_k – мольная доля k -ой газовой компоненты, $\sigma = \sum \xi_k \sigma_k$ – средняя площадь сечения столкновений, $\sigma_k = \pi d_k^2 / 4$. Близкие результаты для коэффициентов переноса получаются и в том случае, если считать, что коэффициент самодиффузии $D_k = 0.5 D_{kk}$.

Изменение состава смеси с учетом диффузии описывается уравнениями

$$\rho \frac{d\beta_k}{dt} + \text{div} \vec{J}_k = \omega_k$$

Здесь ω_k – скорость изменения β_k за счет химических превращений: $\omega_k = \sum_r \omega_k^r$, где $\omega_k^r = \omega_k^r(T, \beta_n)$ – скорость образования k -й компоненты в реакции с номером r . Дивергентная форма этих уравнений в цилиндрической системе координат имеет вид

$$\frac{\partial \rho \beta_k y}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \beta_k + J_k^x) y}{\partial x} + \frac{\partial (\rho \beta_k + J_k^y) y}{\partial y} = y \omega_k$$

Приложение 2

В химической кинетике реакция записывается в виде $\sum_i \varsigma_i M^i \rightleftharpoons \sum_i \bar{\varsigma}_i M^i$. Здесь M^i – обозначение компонент, участвующих в реакции; ς_i и $\bar{\varsigma}_i$ – стехиометрические коэффициенты прямой и обратной реакции. Скорость химической реакции задается величиной $\Omega = \frac{\rho}{\mu_i} \frac{d\beta_i}{dt} (\bar{\varsigma}_i - \varsigma_i)^{-1}$, которая не учитывает диффузию и не зависит от того, по какой компоненте вычисляется изменение массовых долей в ходе реакции. Согласно закону действующих масс $\Omega = k_f \prod_i c_i^{\varsigma_i} - k_b \prod_i c_i^{\bar{\varsigma}_i}$. Здесь $c_i = \rho \beta_i / \mu_i$ – число молей i -й компоненты в единице объема, k_f и k_b – константы скорости прямой и обратной реакции, которые рассчитываются по формуле Аррениуса, в частности $k_f = AT^\kappa \exp(-\theta^*/T)$.

В таблицах П2-1 и П2-2 представлены реакции, входящие в принятую кинетическую модель [4], и параметры, необходимые для расчета скорости этих реакций [6], где m – порядок реакции, N_A – число Авогадро. В таблице П2-3 приводятся коэффициенты эффективности молекул и атомов W_M в качестве партнера M в реакциях диссоциации, часть из которых приводится в [6]. Скорость изменения массовой доли i -й компоненты в реакции с номером r вычисляется по формуле $\omega_i^r = \mu_i (\bar{\varsigma}_i^r - \varsigma_i^r) \Omega^r$.

Таблица П2-1

Прямые реакции и константы скорости этих реакций

Номер r	Прямые реакция	$AN_A^{1-m} [\text{см}^{3(m-1)} / \text{с}]$	κ	$\theta^* [\text{K}^\circ]$
1	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} = \text{HO}_2 + \text{M}$	5.80×10^{-30}	-0.80	0.0
2	$2\text{H} + \text{M} = \text{H}_2 + \text{M}$	5.14×10^{-30}	-1.00	0.0
3	$2\text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O}_2 + \text{M}$	6.10×10^{-29}	-0.76	0.0
4	$\text{O} + \text{OH} = \text{H} + \text{O}_2$	2.40×10^{-11}	0.00	353.0
5	$\text{H} + \text{HO}_2 = 2\text{OH}$	2.80×10^{-10}	0.00	440.0
6	$\text{H} + \text{OH} = \text{O} + \text{H}_2$	4.70×10^{-20}	2.643	2246.0
7	$\text{OH} + \text{H}_2 = \text{H} + \text{H}_2\text{O}$	1.70×10^{-16}	1.60	1660.0
8	$2\text{OH} = \text{H}_2 + \text{O}_2$	2.83×10^{-11}	0.00	24080.0
9	$\text{H} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{H}_2$	2.80×10^{-12}	0.00	1890.0

Таблица П2-2

Обратные реакции и константы скорости этих реакций

Номер r	Обратные реакция	$AN_A^{1-m} [\text{см}^{3(m-1)} / \text{с}]$	κ	$\theta^* [\text{K}^\circ]$
1	$\text{HO}_2 + \text{M} = \text{H} + \text{O}_2 + \text{M}$	6.10×10^{-06}	-0.85	24800.0
2	$\text{H}_2 + \text{M} = 2\text{H} + \text{M}$	1.65×10^{-05}	-0.86	52088.0
3	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} = 2\text{OH} + \text{M}$	2.00×10^{-07}	-0.00	22900.0
4	$\text{H} + \text{O}_2 = \text{O} + \text{OH}$	1.62×10^{-10}	0.00	7470.0
5	$2\text{OH} = \text{H} + \text{HO}_2$	1.10×10^{-13}	0.678	18240.0
6	$\text{O} + \text{H}_2 = \text{H} + \text{OH}$	8.50×10^{-20}	2.67	3160.0
7	$\text{H} + \text{H}_2\text{O} = \text{OH} + \text{H}_2$	7.50×10^{-16}	1.60	9270.0
8	$\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2\text{OH}$	1.00×10^{-09}	0.00	24180.0
9	$\text{HO}_2 + \text{H}_2 = \text{H} + \text{H}_2\text{O}_2$	$5.00 \cdot 10^{-15}$	0.694	10200.0

Таблица П2-3

Коэффициенты эффективности компонент в качестве партнера М

М	H ₂	O ₂	ОН	H ₂ O	HO ₂	H ₂ O ₂	H	O	He
W _М	1.0	0.4	0.2	6.5	0.4	0.5	0.2	0.1	1.0

Литература

1. Ударные трубы. Перевод с английского под редакцией Рахматуллина Х.А. и Семенова С.С. М.: Издательство Иностранной литературы. 1962. 700 с.
2. Баженова Т. В., Гвоздева Л. Г. Нестационарные взаимодействия ударных волн. Москва, Наука, 1977. 274 с.
3. Stalker R. J. An Investigation of Free Piston Compression of Shock Tube Driver Gas // National Research Council of Canada (NRC), Division of Mechanical Engineering, Mechanical Engineering. 1961.
4. Sharma S. P, Park C. Operating characteristics of a 60-and 10-cm arc-driven shock tube - part 1: the driver // J. Thermophysics and Heat Transfer. 1990. Vol. 4. Pp. 259–265.
5. Bird G. A. A Note on Combustion Driven Shock Tubes // AGARD Report No. 146. 1957.
6. Зельдович Я.Б. К вопросу об энергетическом использовании детонационного горения // Журнал технической физики. 1940. Т.10. №17. С. 1453–1461.
7. Hongru Y. Oxyhydrogen combustion and detonation driven shock tube // Acta Mech. Sinica. 1999. Vol. 15. Pp. 97–107. <https://doi.org/10.1007/BF02485874>
8. Li J., Chen H. & Yu H. A chemical shock tube driven by detonation // Shock Waves. 2012. Vol. 22. Pp. 351–362. <https://doi.org/10.1007/s00193-012-0374-y>
9. Забелинский И.Е., Козлов П.В., Акимов Ю.В., Быкова Н.Г., Герасимов Г.Я., Туник Ю.В., Левашов В.Ю. Детонационное инициирование сильных ударных волн для исследования радиационных характеристик высокотемпературных газов // Химическая физика. 2021. Т. 40. № 11. С. 22–28.
10. Kozlov P.V., Zabelinsky I.E., Bykova N.G., Gerasimov G.Ya, Levashov V.Yu, and Tunik Yu.V. Experimental study of air radiation behind a strong shock wave // Acta Astronautica. 2021. Vol. 194. Pp. 461–467.
11. Абакумов М. В. Методика моделирования течений вязкого газа в ортогональных криволинейных координатах. Докторская диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. МГУ имени М.В. Ломоносова, факультет вычислительной математики и кибернетики. Москва. 2020 г.
12. Mason E. A., Saxena S. C. Approximate formula for the thermal conductivity of gas mixtures // Physics of Fluids. 1958. Vol. 1. No. 5. Pp. 361–369.
13. Оран Э., Борис Дж. Численное моделирование реагирующих потоков. Пер. с англ. – М.: Мир, 1990, 660 с.
14. Азатян В. В., Андрианова З. С., Иванова А. Н. Моделирование ингибирования распространения пламени в водородо-воздушной среде // Кинетика и катализ. 2010. Т.51. №4. С. 483–491.
15. Гурвич Л. В., Вейц И. В., Медведев В. А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочник. Т.1. Кн.2. М.: Наука, 1978. 327с. под редакцией В.П. Глушко.
16. Попов Н. А. Влияние неравновесного возбуждения на воспламенение водород-кислородных смесей // Теплофизика высоких температур. 2007. Т. 45. № 2. С. 296–315.
17. Зубин М. А., Туник Ю. В. «О стабилизации детонационного горения водорода в сопле Лаваля» // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2015. Том 16, вып. 3. <http://chemphys.edu.ru/issues/2015-16-3/articles/579/>
18. Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ / Пер. с англ. Г.Л. Агафонова. Под ред. Власова П.А. — М.: Физматлит, 2003. 352 с.

19. Starik A. M., Titova N. S., Sharipov A. S. Kinetic mechanism of H_2 - O_2 ignition promoted by singlet oxygen $O_2(^1\Delta_g)$ // Deflagrative and detonative combustion / Ed. by G. D. Roy, S. M. Frolov. — Torus Press. Moscow. 2010. Pp. 12–19.
20. Колган В. П. Применение принципа минимальных значений производной к построению конечно-разностных схем для расчета разрывных решений газовой динамики // Ученые записки ЦАГИ. 1972. Т. III, № 6. С. 68–77.
21. Колган В. П. Конечно-разностная схема для расчета двумерных разрывных решений нестационарной газовой динамики // Ученые записки ЦАГИ. 1975. Т. VI, № 1. С. 9–14.
22. Тилляева Н. И. Обобщение модифицированной схемы С.К. Годунова на произвольные нерегулярные сетки // Ученые записки ЦАГИ. 1986. Т. XVII, № 2. С. 18–26.
23. Туник Ю. В. Численное решение тестовых задач на основе модифицированной схемы С.К. Годунова // ЖВМиМФ. 2018. Т. 58, № 10. С. 1629–1641. Doi: 10.31857/S004446690003583-2
24. Родионов А. В. Разработка методов и программ для численного моделирования неравновесных сверхзвуковых течений в приложении к аэрокосмическим и астрофизическим задачам. Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. Саров, Институт теоретической и математической физики. 2019. 299 с.
25. Туник Ю. В. Метод Годунова – Колгана для расчета течений вязкого газа // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2022. Т. 23, вып. 5.
<http://chemphys.edu.ru/issues/2022-23-5/articles/1010/>
26. Туник Ю. В. Расчет диффузии газов на контактном разрыве методом Годунова – Колгана // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2024. Т. 25, вып. 3.
<http://chemphys.edu.ru/issues/2024-25-3/articles/1116/>
27. Morley C. 2005. Gaseq: A Chemical Equilibrium Program for Windows. Version 0.79.
<http://www.gaseq.co.uk>.

References

1. *Shock Tubes*, Translation from English, Ed. by Rakhmatullin H.A. and Semenov S.S., Moscow: Foreign Literature Publishing House, 1962, 700 c. [in Russian].
2. Bazhenova T. V., Gvozdeva L. G., *Non-stationary interactions of shock waves*, M.: Nauka, 1977, 274 p. [in Russian].
3. Stalker R. J., *An Investigation of Free Piston Compression of Shock Tube Driver Gas* // National Research Council of Canada (NRC), Division of Mechanical Engineering, Mechanical Engineering. 1961.
4. Sharma S. P, Park C., Operating characteristics of a 60-and 10-cm arc-driven shock tube - part 1: the driver, *J. Thermophysics and Heat Transfer*, 1990, vol. 4, pp. 259–265. <https://doi.org/10.2514/3.175>
5. Bird G. A., *A Note on Combustion Driven Shock Tubes*, AGARD Report No. 146. 1957.
6. Zeldovich Ya. B., On the issue of energy use of detonation combustion, *Journal of Technical Physics*, 1940, vol.10, no.17, pp. 1453–1461 [in Russian].
7. Hongru Y., Oxyhydrogen combustion and detonation driven shock tube, *Acta Mech. Sinica*, 1999, vol. 15, pp. 97–107. <https://doi.org/10.1007/BF02485874>
8. Li J., Chen H. & Yu H., A chemical shock tube driven by detonation, *Shock Waves*, 2012, vol. 22, pp. 351–362. <https://doi.org/10.1007/s00193-012-0374-y>
9. Zabelinsky I. E., Kozlov P. V., Akimov Yu. V., Bykova N. G., Gerasimov G. Ya., Tunik Yu. V., Levashov V. Yu., Detonation initiation of strong shock waves to study the radiation characteristics of high-temperature gases, *Russian Journal of Physical Chemistry B*, 2021, vol. 15, no. 6, pp. 977–983. <https://doi.org/10.1134/S1990793121060117>
10. Kozlov P. V., Zabelinsky I. E., Bykova N. G., Gerasimov G. Ya, Levashov V. Yu, and Tunik Yu. V., Experimental study of air radiation behind a strong shock wave, *Acta Astronautica*, 2021, vol. 194, pp. 461–467. <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2021.10.032>

11. Abakumov M. V., *Methodology for modeling viscous gas flows in orthogonal curvilinear coordinates*, Doctoral dissertation for the degree of Doctor of Physical and Mathematical Sciences. Lomonosov Moscow State University, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics. Moscow. 2020 [in Russian].
12. Mason E. A., Saxena S. C., Approximate formula for the thermal conductivity of gas mixtures, *Physics of Fluids*, 1958, vol. 1, no. 5, pp. 361–369. <https://doi.org/10.1063/1.1724352>
13. Oran E. S., Boris J. P., *Numerical Simulation of Reactive Flow*, 2nd ed. Cambridge University Press; 2000. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511574474>
14. Azatyan V. V., Andrianova Z. S., Ivanova A. N., Modeling of flame propagation inhibition in a hydrogen-air environment, *Kinetics and Catalysis*, 2010, vol. 51, no. 4, pp. 483–491 [in Russian].
15. Gurvich L. V., Veits I. V., Medvedev V. A., et al., *Thermodynamic properties of individual substances. Handbook. V.1. Book 2*, M.: Nauka, 1978, 327 p. Ed. by V.P. Glushko [in Russian].
16. Popov N. A., The effect of nonequilibrium excitation on the ignition of hydrogen-oxygen mixtures, *High Temperature*, 2007, vol. 45, pp. 261–279. <https://doi.org/10.1134/S0018151X07020174>
17. Zubin M. A., Tunik Yu. V., On the stabilization of detonation combustion of hydrogen in a Laval nozzle, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2015, vol. 16, iss. 3 [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2015-16-3/articles/579/>
18. Warnatz J., Maas W., Dibble R., *Combustion. Physical and chemical aspects, modeling, experiments, formation of pollutants*, Springer Berlin, Heidelberg, 2006, 378 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-540-45363-5>
19. Starik A. M., Titova N. S., Sharipov A. S., *Kinetic mechanism of H_2-O_2 ignition promoted by singlet oxygen $O_2(a^1\Delta_g)$ // Deflagrative and detonative combustion* / Ed. by G. D. Roy, S. M. Frolov. — Torus Press. Moscow, 2010, pp. 12–19.
20. Kolgan V. P. Application of the principle of minimum values of the derivative to the construction of finite-difference schemes for calculating discontinuous solutions of gas dynamics, *Scientific notes of TsAGI*, 1972, vol. III, no. 6, pp. 68–77 [in Russian].
21. Kolgan V. P., Finite-difference scheme for calculating two-dimensional discontinuous solutions of non-stationary gas dynamics, *Scientific notes of TsAGI*, 1975, vol. VI, no. 1, pp. 9–14 [in Russian].
22. Tillyaeva N. I., Generalization of the modified scheme of S.K. Godunov to arbitrary irregular grids, *Scientific notes of TsAGI*, 1986, vol. XVII, no. 2, pp. 18–26 [in Russian].
23. Tunik Yu. V., Numerical solution of test problems based on the modified scheme of S.K. Godunov, *Journal of Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2018, vol. 58, no. 10, pp. 1629–1641 [in Russian]. <https://doi.org/10.31857/S004446690003583-2>
24. Rodionov A. V., *Development of methods and programs for numerical modeling of nonequilibrium supersonic flows in application to aerospace and astrophysical problems*. Dissertation for the degree of Doctor of Physical and Mathematical Sciences. Sarov, Institute of Theoretical and Mathematical Physics. 2019, 299 p. [in Russian].
25. Tunik Yu. V., Godunov – Kolgan method for calculating viscous gas flows, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2022, vol. 23, iss. 5 [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2022-23-5/articles/1010/>
26. Tunik Yu. V., Calculation of gas diffusion at a contact discontinuity by the Godunov – Kolgan method, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2024, vol. 25, iss. 3 [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2024-25-3/articles/1116/>
27. Morley C., Gaseq: A Chemical Equilibrium Program for Windows. Version 0.79. 2005. <http://www.gaseq.co.uk>

Статья поступила в редакцию 30 мая 2025 г.