

НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА АКУСТИЧЕСКОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ В НЕРАВНОВЕСНОМ ХИМИЧЕСКИ АКТИВНОМ ГАЗЕ: ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И СТРУКТУРА УДАРНЫХ ВОЛН*

С. С. Храпов¹, В. П. Радченко², И. С. Маковеев³, Г. С. Иванченко⁴

Аннотация: Рассмотрена динамика неустойчивых звуковых волн в химически активном колебательно-возбужденном газе. На основе газодинамического метода MUSCL (Monotone Upwind Scheme for Conservation Laws) построена одномерная численная модель и разработан вычислительный инструмент для исследования различных стадий эволюции акустической неустойчивости в неравновесных течениях колебательно-возбужденного газа с учетом необратимых химических реакций первого порядка, вязкости, теплопроводности, нагрева и охлаждения. Численная модель обладает высоким пространственным разрешением, имеет второй порядок точности и позволяет рассматривать различные модели химических реакций и времени колебательной релаксации. Для повышения производительности вычислений проведено распараллеливание численного алгоритма с использованием технологии OpenMP. Определены условия, накладываемые на параметры химически активной неравновесной среды, для построения начального квазистационарного состояния с медленным и монотонным изменением газодинамических величин. Такое начальное состояние может быть технически реализуемо в реальной экспериментальной установке, что позволит изучать и сравнивать нелинейную динамику акустической неустойчивости при проведении численного и физического моделирования. Показано, что учет химического энерговыделения приводит к увеличению интенсивности и пространственного масштаба ударно-волновых импульсов (УВИ), формирующихся на конечной нелинейной стадии развития акустической неустойчивости. Обнаружено, что УВИ могут при определенных условиях возбуждать детонационные волны (ДВ) высокой интенсивности даже в случае незначительного (~ 10%) вклада химического энерговыделения в общую равновесную мощность нагрева газа. В области детонационного возбуждения образуются две сильные ударные волны (УВ), на фронте которых давление увеличивается в 40–70 раз. Эти ДВ распространяются в противоположных направлениях от области возбуждения со скоростями порядка 6–8 М, полностью выжигая на своем пути химически активный реагент. Показано, что численная модель с хорошей точностью описывает структуру течения в области детонационного горения за фронтом УВ. При оптимальном выборе пространственного разрешения на ширину ДВ приходится более 100 расчетных ячеек, а ее структура хорошо согласуется с теоретическими моделями — ударной адиабатой Рэнкина–Гюгоньо и условием Чепмена–Жуге.

Ключевые слова: неравновесный газ; колебательная релаксация; химические реакции; акустическая неустойчивость; ударно-волновые импульсы; детонационные волны; численное моделирование; метод MUSCL; параллельные вычисления; OpenMP

DOI: 10.30826/CE26190102

EDN: AMUKIX

Литература

1. Коган Е. Я., Молевич Н. Е. Звуковые волны в неравновесном молекулярном газе // Известия высших учебных заведений. Физика, 1986. Т. 29. № 7. С. 53–59.
2. Осипов А. И., Уваров А. В. Неравновесный газ: проблемы устойчивости // Успехи физических наук, 1996. Т. 166. № 6. С. 639–650. doi: 10.3367/UFN.0166.199606c.0639.
3. Молевич Н. Е. Дисперсия скорости звука и вторая вязкость в средах с неравновесными химическими реакциями // Акустический ж., 2003. Т. 49. № 2. С. 229–232.

* Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-71-00016, <https://rscf.ru/project/23-71-00016/>). Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М. В. Ломоносова.

¹ Волгоградский государственный университет, khrapov@volsu.ru

² Волгоградский государственный университет, viktor.radchenko@volsu.ru

³ Волгоградский государственный университет, i.s.makoveev@volsu.ru

⁴ Волгоградский государственный университет, genaivanchenko@volsu.ru

4. Макарян В. Г., Молевич Н. Е. Структура слабых ударных волн в стационарно неравновесной среде // Физико-химическая кинетика в газовой динамике, 2005. Т. 3. Ст. 84. <http://chemphys.edu.ru/issues/2005-3/articles/84/>.
5. Makaryan V. G., Molevich N. E. Stationary shock waves in nonequilibrium media // Plasma Sources Sci. T., 2007. Vol. 16. No. 1. P. 124–131. doi: 10.1088/0963-0252/16/1/017.
6. Храпов С. С., Иванченко Г. С., Радченко В. П., Маковеев И. С. Динамика малых возмущений в неравновесном колебательно-возбужденном газе // Математическая физика и компьютерное моделирование, 2023. Т. 26. № 4. С. 83–105. doi: 10.15688/mpcm.jvolsu.2023.4.7.
7. Храпов С. С. Газодинамические неустойчивости в неравновесной химически активной среде // Математическая физика и компьютерное моделирование, 2024. Т. 27. № 1. С. 26–44. doi: 10.15688/mpcm.jvolsu.2024.1.3.
8. Храпов С. С., Иванченко Г. С., Радченко В. П., Титов А. В. Численное моделирование акустической неустойчивости в неравновесном колебательно-возбужденном газе // Ж. технической физики, 2023. Т. 93. № 12. С. 1727–1731. doi: 10.61011/JTF.2023.12.56805.f213-23.
9. Храпов С. С. Нелинейная динамика акустической неустойчивости в колебательно-возбужденном газе: влияние нагрева и охлаждения // Физико-химическая кинетика в газовой динамике, 2023. Т. 24. № 6. С. 94–117. <http://chemphys.edu.ru/issues/2023-24-6/articles/1059/>.
10. Храпов С. С. Нелинейная динамика акустической неустойчивости в колебательно-возбужденном газе: влияние времени релаксации и структура ударных волн // Физико-химическая кинетика в газовой динамике, 2024. Т. 25. № 7. С. 185–217. <http://chemphys.edu.ru/issues/2024-25-7/articles/1151>.
11. Шамишин И. О., Аксёнов В. С., Казаченко М. В., Гусев П. А., Фролов С. М. Быстрый переход горения в детонацию в спиралевидных трубах // Горение и взрыв, 2023. Т. 16. № 3. С. 29–50. doi: 10.30826/CE23160304.
12. Шамишин И. О., Иванов В. С., Аксёнов В. С., Гусев П. А., Авдеев К. А., Фролов С. М. Распространение пламени и переход горения в детонацию в полуограниченной плоской щелевой камере сгорания с отдельной подачей этилена и кислорода // Горение и взрыв, 2023. Т. 16. № 4. С. 38–65. doi: 10.30826/CE23160405.
13. Khoperskov S. A., Vasiliev E. O., Sobolev A. M., Khoperskov A. V. The simulation of molecular clouds formation in the Milky Way // Mon. Not. R. Astron. Soc., 2013. Vol. 428. No. 3. P. 2311–2320. doi: 10.1093/mnras/sts195.
14. Бутенко М. А., Беликова И. В., Кузьмин Н. М., Хохлова С. С., Иванченко Г. С., Тен А. В., Кудина И. В. Численное моделирование внешней спиральной структуры галактик: влияние неосесимметрии темного гало на форму газового диска // Математическая физика и компьютерное моделирование, 2022. Т. 25. № 3. С. 73–83. doi: 10.15688/mpcm.jvolsu.2022.3.5.
15. Van Leer B. Towards the ultimate conservation difference scheme V. A second order sequel to Godunov's method // J. Comput. Phys., 1979. Vol. 32. No. 1. P. 101–136. doi: 10.1016/0021-9991(79)90145-1.
16. Шоев Г. В., Бондарь Е. А., Облапенко Г. П., Кустова Е. В. Разработка и апробация методики численного моделирования термически неравновесных диссоциирующих течений в ANSYSFluent // Теплофизика и аэромеханика, 2016. Т. 23. № 2. С. 159–171.
17. Косарева А. А., Нагнибеда Е. А. Диссоциация и колебательная релаксация в пространственно однородной смеси CO₂/CO/O // Вестник СПбГУ. Сер. 1, 2016. Т. 3. № 61. С. 468–480. doi: 10.21638/11701/spbu01.2016.315.
18. Ковач Э. А., С. А. Лосев, А. Л. Сергиевская, Н. Храпак. Каталог моделей физико-химических процессов 2. Процессы колебательного энергообмена // Физико-химическая кинетика в газовой динамике, 2010. Т. 10. № 2. С. 189–229.
19. Алемасов В. Е., Дрегалин А. Ф., Тишин А. П., Худяков В. А., Костин В. Н. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. — М.: ВИНТИ, АН СССР, 1980. Т. 10. № 1. 379 с.
20. Храпов С. С. Численное моделирование двумерных газодинамических течений в многокомпонентных неравновесных средах // Математическая физика и компьютерное моделирование, 2025. Т. 28. № 1. С. 60–87. doi: 10.15688/mpcm.jvolsu.2025.1.5.
21. Скребков О. В., Костенко С. С., Смирнов А. Л. Колебательная неравновесность в реакции водорода с кислородом (обзор) // Ж. технической физики, 2023. Т. 93. № 8. С. 1073–1093. doi: 10.21883/JTF.2023.08.55969.39-23.
22. Toro E. F., Spruce M., Speares W. Restoration of the contact surface in the HLL Riemann solver // Shock Waves, 1994. Vol. 4. No. 1. P. 25–34. doi: 10.1007/BF01414629.
23. Harten A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws // J. Comput. Phys., 1983. Vol. 49. No. 3. P. 357–393. doi: 10.1016/0021-9991(83)90136-5.
24. Щелкин К. И. Теория горения и детонации // Механика в СССР за 50 лет. — М.: Наука, 1970. Т. 2. С. 343–422.
25. Radchenko V., S. Khrapov, A. Khoperskov. CAD model of an experimental setup for studying acoustic instability in a nonequilibrium chemically active medium: Optimization of the cooling system // 6th Conference (International) on Control Systems, Mathematical Modeling, Automation and Energy Efficiency Proceedings. — Lipetsk, 2024. P. 533–538. doi: 10.1109/SUMMA64428.2024.10803831.
26. Surzhikov S. T. Non-equilibrium supersonic flow past a blunt plate at high angle of attack // Fluid

Дуп., 2023. Vol. 58. No. 1. P. 113–127. doi: 10.1134/S0015462822700033.

27. *Иванов В. С., Фролов С. М., Семенов И. В.* Детонация в стратифицированных двухфазных системах «га-

зообразный окислитель – жидкая пленка горячего»: трехмерный расчет // *Горение и взрыв*, 2024. Т. 17. № 4. С. 65–81. doi: 10.30826/CE24170407.

Поступила в редакцию 30.07.2024

После доработки 26.01.2026

Принята к публикации 02.02.2026