

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО
Директор физтех-школы
аэрокосмических технологий
С.С. Негодяев

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Численное моделирование реагирующих потоков
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Компьютерное моделирование физических процессов Физтех-школа Аэрокосмических Технологий кафедра физической механики
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Количество контрольных работ, заданий: 2

Программу составил: П.С. Уткин, канд. физ.-мат. наук, доцент

Программа обсуждена на заседании кафедры физической механики 31.01.2022

Аннотация

В рамках данного курса обсуждаются такие темы, как введение в численное моделирование реагирующих потоков, термодинамическая модель детонационной волны, распределение параметров в продуктах детонации, химическая кинетика, модель детонационной волны Зельдовича-Неймана-Деринга. Целью дисциплины является формирование у студентов знаний и получение практических навыков математического моделирования с использованием современных численных методов такой области механики сплошных сред, как быстрые течения с химическими реакциями. К задачам дисциплины относятся освоение студентами базовых знаний (понятий, концепций, методов) в области численного моделирования реагирующих потоков, приобретение теоретических знаний и практических умений и навыков в области математического моделирования, оказание консультаций и помощи студентам в проведении собственных теоретических исследований в области математического моделирования.

После успешного освоения курса студент будет знать основные модели для математического описания детонационных волн в газе : термодинамическая модель, модель Зельдовича-Неймана-Деринга, модель, основанную на систему уравнений Эйлера и уравнениях кинетики химических реакций, основные понятия и принципы численных методов для решения задач динамики потоков реагирующих газовых сред. Он также будет уметь понять поставленную задачу, использовать свои знания для решения фундаментальных и прикладных задач теории течений с волнами детонации, оценивать корректность постановок задач. А также овладеет навыками освоения большого объема информации, самостоятельной работы и освоения новых дисциплин, культурой постановки, анализа и решения математических и прикладных задач, требующих для своего решения использования математических подходов и методов решения задач механики реагирующих потоков.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

формирование у студентов знаний и получение практических навыков математического моделирования с использованием современных численных методов такой области механики сплошных сред, как быстрые течения с химическими реакциями.

Задачи дисциплины

- освоение студентами базовых знаний (понятий, концепций, методов) в области численного моделирования реагирующих потоков;
- приобретение теоретических знаний и практических умений и навыков в области математического моделирования;
- оказание консультаций и помощи студентам в проведении собственных теоретических исследований в области математического моделирования.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- основные модели для математического описания детонационных волн в газе – термодинамическую модель, модель Зельдовича-Неймана-Деринга, модель, основанную на систему уравнений Эйлера и уравнениях кинетики химических реакций;
- основные понятия и принципы численных методов для решения задач динамики потоков реагирующих газовых сред.

уметь:

- понять поставленную задачу;
- использовать свои знания для решения фундаментальных и прикладных задач теории течений с волнами детонации;
- оценивать корректность постановок задач.

владеть:

- навыками освоения большого объема информации;
- навыками самостоятельной работы и освоения новых дисциплин;
- культурой постановки, анализа и решения математических и прикладных задач, требующих для своего решения использования математических подходов и методов решения задач механики реагирующих потоков.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Введение в численное моделирование реагирующих потоков	1			9
2	Термодинамическая модель детонационной волны	7			9
3	Распределение параметров в продуктах детонации	6			9
4	Химическая кинетика	7			9
5	Модель детонационной волны Зельдовича-Неймана-Деринга	3			9
6	Модель детонационной волны на основе системы уравнений Эйлера и уравнений химической кинетики	6			15
Итого часов		30			60
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.			

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 1 (Осенний)

1. Введение в численное моделирование реагирующих потоков

Задачи теории горения. Понятия дефлаграции и детонации. История исследования детонации. Основные результаты экспериментальных исследований детонации. Эволюция математических моделей волны детонации. Трудности современного математического описания волны детонации.

2. Термодинамическая модель детонационной волны

Разрывные решения уравнений газовой динамики. Соотношения Ренкина-Гюгонио. Ударные волны и контактные разрывы. Адиабата Гюгонио. Теорема Цемплена. Понятие экзотермического скачка. Кривая Гюгонио с учетом тепловыделения. Свойства кривой Гюгонио. Недосжатая, пересжатая и самоподдерживающаяся детонация. Условие отбора Чепмена-Жуге. Расчет параметров Чепмена-Жуге за самоподдерживающейся волной детонации.

3. Распределение параметров в продуктах детонации

Характеристическая форма системы уравнений Эйлера в терминах энтропии. Гиперболичность системы уравнений газовой динамики. Инварианты Римана. Волна Римана как особое решение системы уравнений газовой динамики. Автомодельное решение задачи о распределении параметров в продуктах взрыва.

4. Химическая кинетика

Основные понятия химической реакции. Концепции элементарной и глобальной реакции. Полный кинетический механизм. Порядок элементарной реакции. Система обыкновенных дифференциальных уравнений химической кинетики. Закон скорости реакции. Закон Аррениуса. Анализ механизма реакций на модельном примере из двух реакций первого порядка. Концепции квазистационарных состояний и частичного равновесия для упрощения кинетического механизма. Система обыкновенных дифференциальных уравнений химической кинетики как пример жесткой системы. Формулы дифференцирования назад для численного интегрирования жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений.

5. Модель детонационной волны Зельдовича-Неймана-Деринга

Модель Зельдовича-Неймана-Деринга стационарной одномерной волны детонации. Сингулярность определяющей системы уравнений в звуковой точке. Параметры фон Неймана.

6. Модель детонационной волны на основе системы уравнений Эйлера и уравнений химической кинетики

Трехмерная система уравнений Эйлера, дополненная химической кинетикой. Метод расщепления по физическим процессам. Метод конечных объемов дискретизации определяющей системы уравнений. Проблема аппроксимации численного потока. Задача Римана. Метод Годунова. Понятие «Римановского солвера» для интегрирования уравнений Эйлера. Набор тестов для проверки «Римановских солверов».

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Учебная аудитория, оснащенная мультимедиапроектором и экраном.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Лекции по вычислительной математике [Текст] : учеб. пособие для вузов / И. Б. Петров, А. И. Лобанов. — М. : Интернет-Ун-т Информ. Технологий : БИНОМ. Лаб. знаний, 2006, 2010, 2013. — 523 с.

Дополнительная литература

1. Сеточно - характеристические численные методы [Текст] / К.М.Магомедов, А. С. Холодов ; отв. ред. О. М. Белоцерковский ; Акад. наук СССР, Вычислительный центр АН СССР .— М. : Наука, 1988 .— 288 с.
2. Физика взрыва [Текст] : [учеб. пособие для вузов] / Ф. А. Баум, К. П. Станюкович, Б. И. Шехтер .— М. : Физматгиз, 1959 .— 800 с.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

База данных экспериментальных данных по детонации в различных топливно-воздушных сме-сях – http://shepherd.caltech.edu/detn_db/html/db.html

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Microsoft Office

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий курс Численное моделирование реагирующих потоков, должен, с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения, понятия и методы математического моделирования течений с химическими реакциями. Успешное освоение курса требует напряженной самостоятельной работы студента. В программе курса приведено минимально необходимое время для работы студента над темой.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение и конспектирование рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала (по конспектам лекций, учебной и научной литературе), подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения, доказательство отдельных утверждений, свойств;
- выполнение двух заданий по курсу;
- подготовку к дифференцированному зачету.

Руководство и контроль за самостоятельной работой студента осуществляется в форме индивидуальных консультаций.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Компьютерное моделирование физических процессов Физтех-школа Аэрокосмических Технологий кафедра физической механики
курс:	1
квалификация:	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Дифференцированный зачет	
Разработчик:	П.С. Уткин, канд. физ.-мат. наук, доцент

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Численное моделирование реагирующих потоков» обучающийся должен:

знать:

- основные модели для математического описания детонационных волн в газе – термодинамическую модель, модель Зельдовича-Неймана-Деринга, модель, основанную на систему уравнений Эйлера и уравнениях кинетики химических реакций;
- основные понятия и принципы численных методов для решения задач динамики потоков реагирующих газовых сред.

уметь:

- понять поставленную задачу;
- использовать свои знания для решения фундаментальных и прикладных задач теории течений с волнами детонации;
- оценивать корректность постановок задач.

владеть:

- навыками освоения большого объема информации;
- навыками самостоятельной работы и освоения новых дисциплин;
- культурой постановки, анализа и решения математических и прикладных задач, требующих для своего решения использования математических подходов и методов решения задач механики реагирующих потоков.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

3. Перечень типовых контрольных заданий, используемых для оценки знаний, умений, навыков

Промежуточная аттестация по дисциплине «Численное моделирование реагирующих потоков» осуществляется в форме дифференцированного зачета (зачета с оценкой) на основе устного опроса по билетам.

Перечень контрольных вопросов

1. Доказать, что в ударной волне газ нельзя сжать больше, чем в $(\gamma+1)/(\gamma-1)$ раз, где γ – показатель адиабаты газа.
2. Теорема Цемплена с доказательством.
3. Доказать, что скорость скачка для всех точек верхней ветки кривой Гюгонио – сверхзвуковая, а для нижней ветви – дозвуковая относительно исходного вещества.
4. Доказать, что при условиях:
 - 1) равенства показателей адиабаты реагирующей смеси и продуктов горения;
 - 2) пренебрежимо малого давления перед фронтом детонационной волны;
 - 3) равенства нулю скорости газа перед фронтом волны;

скорость самоподдерживающейся детонационной волны равна:

$$D = \sqrt{2(\gamma^2 - 1)Q},$$

где γ – показатель адиабаты, Q – тепловой эффект.

5. Доказать, что система уравнений Эйлера газовой динамики (обозначения стандартные)

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0, \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p) = 0, \\ \frac{\partial S}{\partial t} + u \frac{\partial S}{\partial x} = 0, \end{cases}$$

имеет гиперболический тип.

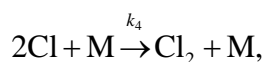
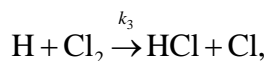
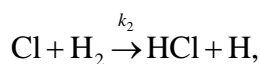
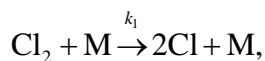
6. Пусть волна детонации распространяется в самоподдерживающемся режиме Чепмена-Жуге от закрытого конца трубы. Перед ее фронтом заданы давление p_0 и плотность ρ_0 покоящегося ($u_0 = 0$) реагирующего газа, характеризующегося константой тепловыделения Q . Будем считать, что:

- 1) показатели адиабаты реагирующей смеси и продуктов горения одинаковы и равны γ ;

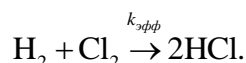
- 2) давление перед фронтом волны детонации пренебрежимо мало по сравнению с давлением за фронтом.

Получить зависимости $\rho(x, t)$, $p(x, t)$ и $u(x, t)$ в продуктах волны детонации.

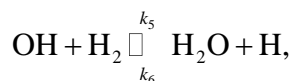
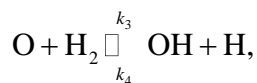
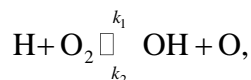
7. Используя предположение о квазистационарности по компонентам $[H]$ и $[Cl]$ на основании полного механизма



получить закон $k_{эфф}$ скорости образования HCl в глобальной реакции



8. Используя предположение о частичном равновесии приведенных ниже реакций



выразить концентрации промежуточных компонентов $[O]$, $[H]$ и $[OH]$ через концентрации стабильных компонентов $[H_2]$, $[O_2]$ и $[H_2O]$.

9. Рассчитать параметры фон Неймана детонационной волны (плотность, давление и скорость газа) при условиях:

- 1) равенства показателей адиабаты реагирующей смеси и продуктов горения;
- 2) пренебрежимо малого давления перед фронтом детонационной волны;
- 3) равенства нулю скорости газа перед фронтом волны.

Давление и плотность газа перед фронтом детонационной волны — p_0 и ρ_0 , показатель адиабаты — γ , тепловой эффект — Q .

10. Выписать метод Гира (чисто неявный линейный многошаговый метод) 3-го порядка аппроксимации для решения обыкновенного дифференциального уравнения:

$$\frac{du}{dt} = f(t, u).$$

11. Рассматривается модельная задача Коши для неоднородного уравнения переноса:

$$u_t + \lambda u_x = u, \quad \lambda = \text{const} > 0, \quad u(x, 0) = u_0(x).$$

Описать алгоритм численного решения данной задачи с использованием:

- 1) метода расщепления по физическим процессам;
- 2) метода конечных объемов;
- 3) явной схемы Эйлера интегрирования по времени;
- 4) метода Годунова расчета численного потока.

12. Рассматривается задача Римана для одномерной системы уравнений Эйлера газовой динамики. Параметры слева от первоначального разрыва: $p_L = 1.0$, $\rho_L = 1.0$, $u_L = 1.0$.

Используя анализ на фазовой плоскости состояний (u, p) , привести какой-либо набор параметров p_R , ρ_R , u_R справа от разрыва, чтобы в результате распада разрыва образовалась конфигурация из:

- а) ударной волны, движущейся вправо, контактного разрыва и волны разрежения, движущейся влево;
- б) ударной волны, движущейся влево, контактного разрыва и волны разрежения, движущейся вправо.

4. Критерии оценивания

Максимальный балл за семестр – 100. Из них:

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

Соответствие баллов и оценки: 80 – 100 – отлично, 50 – 79 – хорошо, 30 – 49 – удовлетворительно.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Во время проведения зачета обучающиеся могут пользоваться программой дисциплины, а также литературными источниками и ноутбуками.