

УДК 519.634

doi 10.26089/NumMet.v20r326

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ В РАМКАХ ДВУХСТАДИЙНОЙ КИНЕТИКИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В СИСТЕМЕ КООРДИНАТ, СВЯЗАННОЙ С ФРОНТОМ ЛИДИРУЮЩЕЙ ВОЛНЫ

Я. Э. Порошина<sup>1</sup>, П. С. Уткин<sup>2,3</sup>

Для численного исследования пульсирующей детонационной волны в рамках двухстадийной модели кинетики химических реакций в системе координат, связанной с фронтом лидирующей волны, разработан оригинальный вычислительный алгоритм. Для четырех известных режимов распространения детонации в рамках данной модели исследовано влияние порядка аппроксимации алгоритма, длины расчетной области, сеточного разрешения и типа граничного условия на дальнейшей границе на результаты моделирования. Проведено сравнение характера пульсаций с результатами расчетов других авторов.

**Ключевые слова:** математическое моделирование, детонационная волна, связанная с фронтом волны система координат, двухстадийная модель кинетики.

**1. Введение.** Теоретические и численные исследования устойчивости решения Зельдовича–Неймана–Деринга (ЗНД) [1–3], описывающего стационарную детонационную волну (ДВ), т.е. сверхзвуковую волну горения, в реагирующих газовых смесях восходят к работам Эрпенбека и Фикета [4, 5]. В большинстве последующих исследований динамики пульсирующей ДВ используется одностадийная модель кинетики химических реакций. К недостаткам данной модели следует отнести невозможность явного разделения зон индукции и тепловыделения, что послужило предпосылкой для разработки двухстадийной модели кинетики. Пионерская работа в данном направлении — модель В.П. Коробейникова, В.А. Левина, В.В. Маркова и Г.Г. Черного [6]. В [7] можно найти обзор результатов численных исследований течений с ДВ в рамках данной модели. Двухстадийная модель кинетики химических реакций предполагает существование зоны индукции без тепловыделения и следующей за ней экзотермической зоны химических реакций. В термически нейтральной зоне реакции термодинамическое состояние газовой смеси остается постоянным. Быстрое энерговыделение в зоне реакции приводит к увеличению температуры и уменьшению давления и плотности смеси, происходит превращение реагентов в продукты.

В [6] изучается нелинейная динамика одномерной пульсирующей детонации с использованием подобной модели. В расчетах показано, что по мере уменьшения длины зоны реакции детонация становится все более неустойчивой, что выражается в виде пульсаций с одним периодом колебаний, а также двумя и четырьмя периодами в одном решении. Пределом при уменьшении длины зоны реакции может служить модель Тунга (модель квадратной волны) [9], в которой присутствует зона индукции, но последующее тепловыделение происходит мгновенно. Известно, что такая модель является неустойчивой [10]. В [8] обнаружено, что порядок реакции может влиять на устойчивость детонации, так как его увеличение приводит к большему отношению длины зоны реакции  $\tilde{\Delta}_r$  к длине зоны индукции  $\tilde{\Delta}_i$  в решении ЗНД. Был также выполнен асимптотический анализ устойчивости, который показал, что устойчивая детонация может наблюдаться при условии, что

$$\frac{\tilde{\Delta}_r}{\tilde{\Delta}_i} \sim \frac{\tilde{E}_a}{\tilde{R}\tilde{T}_s},$$

где  $\tilde{E}_a$  — энергия активации,  $\tilde{T}_s$  — температура фон Неймана (ФН),  $\tilde{R}$  — универсальная газовая постоянная. Здесь и далее величины с тильдой являются размерными, без тильды — приведенными к безразмерному виду, см. раздел 2.2. В целом, работа [8] проясняет тот факт, что в более устойчивых режимах детонации зона индукции меньше, чем зона реакции, что типично, например, для водородно-кислородных смесей.

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт, факультет аэрофизики и космических исследований, Институтский пер., д. 9, 141701, Московская обл., г. Долгопрудный; студент, e-mail: poroshina@phystech.edu

<sup>2</sup> Институт автоматизации проектирования РАН, ул. 2-я Брестская, д. 19/18, 123056, г. Москва; ст. науч. сотр., e-mail: pavel\_utk@mail.ru

<sup>3</sup> Московский физико-технический институт, факультет аэрофизики и космических исследований, Институтский пер., д. 9, 141701, Московская обл., г. Долгопрудный; доцент, e-mail: pavel\_utk@mail.ru

Работа [11] является продолжением исследования [8]. Здесь была построена бифуркационная диаграмма развития неустойчивости и введен параметр устойчивости  $\chi$  по формуле

$$\chi = \frac{\tilde{E}_a}{\tilde{R}\tilde{T}_s} \frac{\tilde{\Delta}_i}{\tilde{\Delta}_r}.$$

Была также построена кривая нейтральной границы устойчивости в плоскости  $(M_{CJ}, \chi)$ , где  $M_{CJ}$  — число Маха самоподдерживающейся ДВ Чепмена–Жуге (ЧЖ), для модельных смесей с различными физико-химическими параметрами. Для ряда водородно-кислородных, ацетиленовых, пропановых и метановых смесей были получены параметры двухстадийной модели кинетики на основе детальной кинетики. Для данных конкретных смесей были также построены кривые устойчивости в плоскости  $(M_{CJ}, \chi)$ .

Целями настоящей работы являются:

- разработка вычислительного алгоритма для моделирования распространения ДВ в системе координат, связанной с фронтом лидирующей волны (СКФ), в рамках двухстадийной модели кинетики химических реакций;
- проведение численных исследований различных режимов распространения ДВ в рамках двухстадийной модели кинетики химических реакций;
- сравнительный анализ полученных результатов с данными из [12].

## 2. Математическая модель и постановка задачи.

**2.1. Определяющая система уравнений.** Математическая модель достаточно традиционна со времен работ [6, 7] и основана на уравнениях Эйлера с учетом химических реакций. Сначала запишем определяющую систему уравнений в лабораторной системе координат (ЛСК)  $(\xi, \tau)$ :

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial \tau} + \frac{\partial \tilde{\mathbf{f}}}{\partial \xi} = \tilde{\mathbf{s}}, \quad (1)$$

$$\tilde{\mathbf{u}} = \begin{bmatrix} \tilde{\rho} \\ \tilde{\rho}\tilde{v} \\ \tilde{e} \\ \tilde{\rho}\lambda_i \\ \tilde{\rho}\lambda_r \end{bmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{u}} = \begin{bmatrix} \tilde{\rho}\tilde{v} \\ \tilde{\rho}\tilde{v}^2 + \tilde{p} \\ (\tilde{e} + \tilde{p})\tilde{v} \\ \tilde{\rho}\tilde{v}\lambda_i \\ \tilde{\rho}\tilde{v}\lambda_r \end{bmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{s}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \tilde{\rho}\tilde{Q}[1 - H(1 - \lambda_r)]\tilde{K}_r(1 - \lambda_r)^k \\ -\tilde{\rho}\tilde{K}_i H(1 - \lambda_i) \exp(-\tilde{E}_a\tilde{\rho}/\tilde{p}) \\ \tilde{\rho}[1 - H(1 - \lambda_r)]\tilde{K}_r(1 - \lambda_r)^k \end{bmatrix}, \quad \tilde{e} = \tilde{\rho}\tilde{\epsilon} + \frac{1}{2}\tilde{\rho}\tilde{v}^2, \quad \tilde{\epsilon} = \frac{\tilde{p}}{\tilde{\rho}(\tilde{\gamma} - 1)}.$$

Пренебрежем эффектами вязкости, молекулярной диффузии и теплопроводности. Здесь  $\tilde{\mathbf{u}}$  — вектор консервативных переменных,  $\tilde{\mathbf{f}}$  — вектор потоков,  $\tilde{\mathbf{s}}$  — вектор источниковых членов. Используются следующие обозначения:  $\xi$  — пространственная координата,  $\tau$  — время,  $\tilde{\rho}$  — суммарная плотность газовой смеси,  $\tilde{v}$  — скорость газа,  $\tilde{p}$  — давление газа,  $\tilde{e}$  — плотность полной энергии смеси,  $\tilde{\epsilon}$  — удельная внутренняя энергия газа,  $\tilde{Q}$  — тепловой эффект химической реакции,  $\tilde{\gamma}$  — постоянный показатель адиабаты смеси.

Первые три уравнения описывают законы сохранения массы, импульса и энергии. Последние два уравнения появились вследствие того, что распространение ДВ моделируется с помощью двухстадийной кинетики химических реакций в формулировке [12]. Здесь  $\tilde{K}_i$  и  $\tilde{K}_r$  — константы скоростей процессов, определяющих эволюцию зоны индукции ( $\lambda_i$  — доля периода индукции) и зоны реакции ( $\lambda_r$  — доля периода реакции), соответственно. Переменные  $\lambda_i$  и  $\lambda_r$  могут меняться от 0 до 1. Зона индукции начинается при  $\lambda_i = 1$  и заканчивается при  $\lambda_i = 0$ . После этого начинается зона реакции при  $\lambda_r = 0$ , которая заканчивается при  $\lambda_r = 1$ . Функция Хевисайда  $H$  позволяет осуществлять переключение между уравнениями переноса долей периодов индукции и реакции. Через  $k$  обозначен порядок реакции. Сложно определить, каким должен быть порядок реакции  $k$  в случае двухстадийной кинетики химических реакций, так как множество элементарных реакций, имеющих место при использовании детальной кинетики, объединены в одну. Согласно [8, 12],  $0.5 \leq k \leq 1$ . При  $k < 1$  зона реакции имеет конечную длину. Далее будем следовать выбору [12]:  $k = 0.5$ . В качестве уравнения состояния берется уравнение состояния идеального газа.

При переходе в СКФ  $(\tilde{x}, \tilde{t})$  определяющая система уравнений (1) преобразуется следующим образом

(см., например, [13]):

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= \tilde{\xi} - \int_0^{\tilde{t}} \tilde{D}(\tau') d\tau', \quad \tilde{t} = \tilde{\tau}, \\ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{t}} + \frac{\partial(\tilde{f} - \tilde{D}\tilde{u})}{\partial \tilde{x}} &= \tilde{s}. \end{aligned} \tag{2}$$

Здесь через  $\tilde{D}$  обозначена текущая скорость фронта лидирующей ударной волны (ЛУВ). Отдельно обратим внимание, что далее при переходе в СКФ мы, тем не менее, будем использовать для удобства записи выражение для скорости газа в ЛСК  $\tilde{v} = \tilde{u} + \tilde{D}$ , где  $\tilde{u}$  — скорость газовой смеси в СКФ. Скорость лидирующего скачка  $\tilde{D}$  априори неизвестна, и требуется дополнить систему (2) уравнением, определяющим данную скорость, см. раздел 3.2.

**2.2. Приведение системы уравнений к безразмерному виду.** Так как исследовались различные модельные смеси, в данной работе была проведена процедура приведения определяющей системы уравнений к безразмерному виду [12]. Нижним индексом “s” обозначим параметры непосредственно за фронтом ЛУВ (параметры ФН). Параметры ФН и начальные параметры невозмущенной среды, которые обозначены нижним индексом “0”, связывают между собой соотношения Ренкина–Гюгонио (РГ) на скачке (см., например, [10]):

$$\frac{\tilde{p}_s}{\tilde{p}_0} = 1 + \frac{2\gamma(M_{CJ}^2 - 1)}{\gamma + 1}, \quad \frac{\tilde{\rho}_s}{\tilde{\rho}_0} = \frac{(\gamma + 1)(M_{CJ}^2 - 1)}{(\gamma - 1)M_{CJ}^2 + 2}, \quad \frac{\tilde{v}_s}{\tilde{c}_0} = \frac{2(M_{CJ}^2 - 1)}{(\gamma + 1)M_{CJ}}. \tag{3}$$

Здесь  $\tilde{c}_0$  — скорость звука. Опишем последовательность действий в процедуре приведения определяющей системы уравнений к безразмерному виду.

1. В качестве характерных масштабов выбираются давление  $\tilde{p}_s$  и плотность  $\tilde{\rho}_s$ :

$$p = \frac{\tilde{p}}{\tilde{p}_s}, \quad \rho = \frac{\tilde{\rho}}{\tilde{\rho}_s}.$$

2. Характерные масштабы для скорости и энергии —  $\sqrt{\tilde{p}_s/\tilde{\rho}_s}$  и  $\tilde{p}_s/\tilde{\rho}_s$ :

$$v = \frac{\tilde{v}}{\sqrt{\tilde{p}_s/\tilde{\rho}_s}}, \quad \varepsilon = \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{p}_s/\tilde{\rho}_s}, \quad E_a = \frac{\tilde{E}_a}{\tilde{p}_s/\tilde{\rho}_s}, \quad Q = \frac{\tilde{Q}}{\tilde{p}_s/\tilde{\rho}_s}.$$

3. Число Маха  $M_{CJ}$  ДВ ЧЖ определяется формулой [10]:

$$M_{CJ} = \sqrt{1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} \frac{\tilde{Q}}{\tilde{p}_0/\tilde{\rho}_0} + \sqrt{\left[ \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} \frac{\tilde{Q}}{\tilde{p}_0/\tilde{\rho}_0} + 1 \right]^2} - 1}. \tag{4}$$

Выразим  $M_{CJ}$  через безразмерные параметры, подставив в (4) соотношения (3):

$$\begin{aligned} M_{CJ} &= \sqrt{1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \frac{\tilde{p}_s/\tilde{p}_0}{\tilde{\rho}_s/\tilde{\rho}_0} + \sqrt{\left[ \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \frac{\tilde{p}_s/\tilde{p}_0}{\tilde{\rho}_s/\tilde{\rho}_0} + 1 \right]^2} - 1}, \\ M_{CJ} &= \sqrt{1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \frac{1 + \frac{2\gamma(M_{CJ}^2 - 1)}{\gamma + 1}}{(\gamma + 1)(M_{CJ}^2 - 1)} + \sqrt{\left[ 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \frac{1 + \frac{2\gamma(M_{CJ}^2 - 1)}{\gamma + 1}}{(\gamma + 1)(M_{CJ}^2 - 1)} \right]^2} - 1}. \end{aligned}$$

Выполнив необходимые преобразования, получим следующее выражение для  $M_{CJ}$  через безразмерные параметры:

$$M_{CJ}^2 = \frac{\sqrt{A} + 2C + 2}{2(1 - 2B)}, \tag{5}$$

$$A = (2C + 2)^2 - 4(1 - 2B)(1 - 2D), \quad B = \frac{2\gamma Q(\gamma - 1)^2}{\gamma(\gamma + 1)},$$

$$C = \frac{Q(\gamma - 1)}{\gamma(\gamma + 1)}(-\gamma^2 + 6\gamma - 1), \quad D = -\frac{2Q(\gamma - 1)^2}{\gamma(\gamma + 1)}.$$

Следует отметить, что в [12] есть опечатка в аналогичных соотношениях для  $M_{CJ}$ .

4. Вычисляем давление и плотность в невозмущенной среде с помощью (3):

$$p_0 = \frac{\tilde{p}_0}{\tilde{\rho}_s} = \frac{\gamma + 1}{2\gamma M_{CJ}^2 - \gamma + 1}, \quad \rho_0 = \frac{\tilde{\rho}_0}{\tilde{\rho}_s} = \frac{(\gamma - 1)M_{CJ}^2 + 2}{(\gamma + 1)(M_{CJ}^2 - 1)}.$$

5. В качестве характерного масштаба длины берется длина зоны индукции в решении ЗНД:

$$x = \frac{\tilde{x}}{\tilde{\Delta}_i}.$$

6. Безразмерное время тогда будет иметь следующий вид:

$$t = \frac{\tilde{t}\sqrt{\tilde{p}_s/\tilde{\rho}_s}}{\tilde{\Delta}_i}. \quad (6)$$

7. Выпишем безразмерное время индукции  $t_i$  для последующего определения  $K_i$ . Величина  $K_i$  определяется из решения уравнения переноса доли периода индукции:

$$\frac{D\lambda_i}{Dt} = -\tilde{K}_i H(1 - \lambda_i) \exp\left(-\frac{\tilde{E}_a}{\tilde{p}/\tilde{\rho}}\right), \quad \frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \tilde{v} \frac{\partial}{\partial x}.$$

В зоне индукции в решении ЗНД термодинамические параметры постоянны, а давление и плотность определяются параметрами ФН, поэтому данное уравнение переписывается следующим образом:

$$\frac{D\lambda_i}{Dt} = -\tilde{K}_i \exp\left(-\frac{\tilde{E}_a}{\tilde{p}_s/\tilde{\rho}_s}\right).$$

Тогда время индукции принимает вид

$$\tilde{t}_i = \tilde{K}_i^{-1} e^{\tilde{E}_a/(\tilde{p}_s/\tilde{\rho}_s)}. \quad (7)$$

С другой стороны, время индукции, выраженное через безразмерные величины, с использованием (3) и (6) может быть представлено следующим образом:

$$t_i = \frac{\tilde{t}_i\sqrt{\tilde{p}_s/\tilde{\rho}_s}}{\tilde{\Delta}_i} = \frac{\tilde{t}_i\sqrt{\tilde{p}_s/\tilde{\rho}_s}}{(\tilde{D}_{CJ} - \tilde{v}_s)\tilde{t}_i} = \frac{\sqrt{\tilde{p}_s/\tilde{\rho}_s}}{\tilde{D}_{CJ}(1 - \tilde{v}_s/\tilde{D}_{CJ})} = \sqrt{\frac{2\gamma M_{CJ}^2 - \gamma + 1}{((\gamma - 1)M_{CJ}^2 + 2)\gamma}}. \quad (8)$$

Соответственно, получаем выражение для константы скорости процессов в зоне индукции из (7) и (8):

$$K_i = \frac{e^{E_a}}{t_i} = \sqrt{\frac{((\gamma - 1)M_{CJ}^2 + 2)\gamma}{2\gamma M_{CJ}^2 - \gamma + 1}} e^{E_a}.$$

8. Константа скорости зоны реакции определяется выражением

$$K_r = \left(\frac{\tilde{K}_r}{\tilde{K}_i}\right) K_i.$$

Выбранные характерные масштабы не меняют вид определяющей системы уравнений (2). Далее будем оперировать только безразмерными параметрами.

**2.3. Постановка задачи.** Для численного моделирования динамики распространения ДВ в СКФ выбрана следующая постановка задачи. Расчетная область представляет собой отрезок  $[-L; 0]$ . Длина расчетной области  $L$  и условия на левой границе брались такими, чтобы возмущения, отражающиеся от левой границы, не влияли на решение и, в частности, на динамику ЛУВ. Правая граница соответствует ЛУВ, поэтому на ней выставляются условия РГ, отвечающие текущей скорости  $D$  (см. раздел 3.2). На левой границе могут выставляться условия экстраполяции нулевого порядка или параметры ЧЖ (см. раздел 3.3). В качестве начального решения берется решение ЗНД.

**3. Вычислительный алгоритм.**

**3.1. Метод расщепления по физическим процессам и конечно-объемная схема.** Вычислительный алгоритм основывается на методе расщепления по физическим процессам. На первом этапе определяющая система (2) решается без учета химических процессов ( $s = 0$ ). Используется равномерная расчетная сетка с числом ячеек  $N$ . Размер расчетной ячейки  $\Delta x = L/N$ . Пространственная часть (2) дискретизируется методом конечных объемов:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = - \frac{F_{m+1/2} - F_{m-1/2}}{\Delta x}.$$

Здесь  $m$  — пространственный индекс расчетной ячейки,  $m + 1/2$  и  $m - 1/2$  обозначают правую и левую грани этой ячейки соответственно,  $U$  — искомая сеточная функция,  $F$  — вектор численного потока. Численный поток рассчитывается с помощью сеточно-характеристического варианта монотонной схемы Куранта–Изаксона–Рис [14]:

$$F_{m+1/2} = \frac{1}{2} \left[ F(\{U_m^n\}^+) + F(\{U_{m+1}^n\}^-) \right] + \frac{1}{2} |B|_{m+1/2}^m \left[ \{U_m^n\}^+ - \{U_{m+1}^n\}^- \right],$$

$$F(U) = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p \\ (p + e)v \\ \rho v \lambda_i \\ \rho v \lambda_r \end{bmatrix} - D^{n+1} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho v \\ e \\ \rho \lambda_i \\ \rho \lambda_r \end{bmatrix}, \quad |B|_{m+1/2}^n = \frac{1}{2} \left( \left[ \Omega_m^n |\Lambda_m| (\Omega_m^n)^{-1} \right]^+ + \left[ \Omega_{m+1}^n |\Lambda_{m+1}| (\Omega_{m+1}^n)^{-1} \right]^- \right),$$

$$\Lambda_m = \begin{bmatrix} v_m^n - c_m^n - D^{n+1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v_m^n + c_m^n - D^{n+1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v_m^n - D^{n+1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v_m^n - D^{n+1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & v_m^n - D^{n+1} \end{bmatrix}, \quad (9)$$

$$\Omega_m^n = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ v_m^n - c_m^n & v_m^n + c_m^n & 0 & 0 & v_m^n \\ \frac{(v_m^n)^2 - 2v_m^n c_m^n}{2} + \frac{(c_m^n)^2}{\gamma - 1} & \frac{(v_i^n)^2 + 2v_m^n c_m^n}{2} + \frac{(c_m^n)^2}{\gamma - 1} & 0 & 0 & \frac{(v_m^n)^2}{2} \\ \lambda_{im}^n & \lambda_{im}^n & 0 & 1 & 0 \\ \lambda_{rm}^n & \lambda_{rm}^n & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$(\Omega_m^n)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} \frac{v_m^n (2c_m^n - v_m^n + v_m^n \gamma)}{(c_m^n)^2} & -\frac{1}{2} \frac{(c_m^n - v_m^n + v_m^n \gamma)}{(c_m^n)^2} & \frac{1}{2} \frac{(\gamma - 1)}{(c_m^n)^2} & 0 & 1 \\ \frac{1}{4} \frac{v_m^n (-2c_m^n - v_m^n + v_m^n \gamma)}{(c_m^n)^2} & -\frac{1}{2} \frac{(-c_m^n - v_m^n + v_m^n \gamma)}{(c_m^n)^2} & \frac{1}{2} \frac{(\gamma - 1)}{(c_m^n)^2} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} \frac{(v_m^n)^2 (\gamma - 1) \lambda_{r_m}^n}{(c_m^n)^2} & \frac{v_m^n (\gamma - 1) \lambda_{r_m}^n}{(c_m^n)^2} & -\frac{(\gamma - 1) \lambda_{r_m}^n}{(c_m^n)^2} & 0 & 1 \\ -\frac{1}{2} \frac{(v_m^n)^2 (\gamma - 1) \lambda_{i_m}^n}{(c_m^n)^2} & \frac{v_m^n (\gamma - 1) \lambda_{i_m}^n}{(c_m^n)^2} & -\frac{(\gamma - 1) \lambda_{i_m}^n}{(c_m^n)^2} & 1 & 0 \\ -\frac{1}{2} \frac{(-2(c_m^n)^2 - (v_m^n)^2 + (v_m^n)^2 \gamma)}{(c_m^n)^2} & \frac{v_m^n (\gamma - 1)}{(c_m^n)^2} & -\frac{(\gamma - 1)}{(c_m^n)^2} & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Здесь  $n$  — индекс текущего слоя по времени, верхний индекс “+” соответствует параметрам на правой грани  $m$ -й ячейки, верхний индекс “-” соответствует параметрам на левой грани  $(m+1)$ -й ячейки. Эти величины определяются в результате покомпонентного восполнения вектора консервативных переменных с использованием ограничителя `minmod`, что позволяет повысить порядок аппроксимации (ПА) по пространственной переменной на гладких решениях до второго:

$$\begin{aligned} \{U_m^n\}^+ &= U_m^n + \frac{\Delta x}{2} \left[ \frac{\partial U}{\partial x} \right]_m^n, & \{U_{m+1}^n\}^- &= U_{m+1}^n - \frac{\Delta x}{2} \left[ \frac{\partial U}{\partial x} \right]_{m+1}^n, \\ \left[ \frac{\partial U}{\partial x} \right]_m^n &= \text{minmod} \left( \frac{U_{m+1}^n - U_m^n}{\Delta x}, \frac{U_m^n - U_{m-1}^n}{\Delta x} \right), \\ \text{minmod}(a, b) &= \frac{1}{2} (\text{sign}(a) + \text{sign}(b)) \min(|a|, |b|). \end{aligned} \quad (10)$$

Решение в центре  $m$ -й ячейки после первого этапа метода расщепления по физическим процессам на следующем  $(n+1)$ -м слое по времени определяется с использованием явной схемы Эйлера интегрирования по времени:

$$U_m^{n+1} = U_m^n - \frac{\Delta t^n}{\Delta x} (F_{m+1/2}^n - F_{m-1/2}^n).$$

Шаг интегрирования  $\Delta t^n$  выбирается динамически для обеспечения устойчивости на используемой сетке:

$$\Delta t^n = \text{CFL} \cdot \min_m (\Delta t_m^n), \quad \Delta t_m^n = \frac{\Delta x}{\max(|v_m^n + c_m^n|, |v_m^n - c_m^n|)},$$

где CFL — число Куранта–Фридрихса–Леви. В рамках данной работы число CFL во всех расчетах выбиралось равным 0.1.

На втором этапе метода расщепления по физическим процессам происходит учет источниковых членов, отвечающих за химические реакции. Решение с предыдущего этапа берется в качестве начального. Система становится системой обыкновенных дифференциальных уравнений и решается в каждой расчетной ячейке от момента времени  $t^n$  до момента времени  $t^n + \Delta t^n$ :

$$\begin{cases} d\rho/dt = 0, \\ d(\rho v)/dt = 0, \\ de/dt = \rho Q [1 - H(1 - \lambda_r)] K_r (1 - \lambda_r)^k, \\ d(\rho \lambda_i)/dt = -\rho K_i H(1 - \lambda_i) \cdot \exp(-E_a \rho/p), \\ d(\rho \lambda_r)/dt = \rho [1 - H(1 - \lambda_i)] K_r (1 - \lambda_r)^k. \end{cases}$$

Из первого и второго уравнений следует, что плотность и скорость газа остаются постоянными на данном этапе. Отметим, что нет необходимости решать все пять дифференциальных уравнений одновременно. Из-за особенностей постановки задачи и наличия термически нейтральной зоны индукции четвертое уравнение данной системы, описывающее эволюцию этой зоны, может решаться независимо от остальных:

$$\frac{d\lambda_i}{dt} = -K_i \cdot \exp(-E_a \rho/p), \quad t \in [t^n; t^{n+1}].$$

Это уравнение решается в каждой расчетной ячейке по явной схеме Эйлера первого порядка с внутренним шагом  $0.2\Delta t^n$ , пока  $\lambda_i < \epsilon$ . Малый параметр  $\epsilon$  во всех расчетах брался равным  $10^{-6}$ . Когда же параметр  $\lambda_i$  становится меньше либо равным  $\epsilon$ , считаем, что зона индукции окончена, и больше к данному уравнению не возвращаемся в данной ячейке на данном этапе. В этом случае решаются оставшиеся уравнения, описывающие развитие зоны тепловыделения:

$$\begin{cases} \frac{dp}{dt} = \rho(\gamma - 1)QK_r(1 - \lambda_r)^k, \\ \frac{d\lambda_r}{dt} = K_r(1 - \lambda_r)^k. \end{cases}$$

Заметим, что эти два уравнения также можно совместно не интегрировать. Оба уравнения решались с помощью явной схемы Эйлера.

Таким образом, вектор решения обновляется, и алгоритм выполняется снова на следующем слое по времени.

**3.2. Определение скорости детонационной волны.** В матрице собственных значений  $\Lambda_m$  (9), а также в векторе потоков  $\mathbf{F}$  присутствует неизвестная скорость ДВ  $D^{n+1}$ . Ее нахождение требует отдельного алгоритма, который будет описан в данном разделе. Описанный здесь алгоритм, в целом, следует работе [13]. Определяющая система уравнений записывается в характеристической форме вдоль характеристики  $C_+$ :

$$\begin{cases} \frac{D_+x}{Dt} = v + c - D, \\ \frac{D_+p}{Dt} + \rho c \frac{D_+v}{Dt} = (\gamma - 1)\rho Q[1 - H(1 - \lambda_r)]K_r(1 - \lambda_r)^k, \end{cases} \quad (11)$$

$$\frac{D_+}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (v + c) \frac{\partial}{\partial x}. \quad (12)$$

Формула (12) описывает материальную производную вдоль  $C_+$ -характеристики. Непосредственно на правой границе расчетной области  $\lambda_r = 0$ . В связи с этим система (11) переписывается в виде

$$\begin{cases} \frac{D_+x}{Dt} = v + c - D, \\ \frac{D_+p}{Dt} + \rho c \frac{D_+v}{Dt} = 0. \end{cases} \quad (13)$$

Используя локальное кусочно-линейное приближение характеристики (см. рис. 1), получим следующую конечно-разностную аппроксимацию (13):

$$\begin{cases} -x_*^n = (c_*^n + v_*^n - D^n)\Delta t^n, \\ p_s^{n+1} - p_*^n + \frac{1}{2}((\rho c)_*^n + (\rho c)_s^{n+1})(v_s^{n+1} - v_*^n) = 0. \end{cases} \quad (14)$$

Здесь  $x_*$  обозначает точку пересечения характеристики  $C_+$  с осью  $x$ . Соответственно, нижний индекс “\*” обозначает параметры в данной точке. Они вычисляются с помощью линейной интерполяции (или экстраполяции в зависимости от локального наклона характеристики) по известным параметрам в ячейках с координатам центров  $x_{N-1}$  и  $x_N$  (см. рис. 1):

$$\begin{aligned} p_*^n &= p_N^n - \frac{x_* - x_N}{x_N - x_{N-1}} (p_{N-1}^n - p_N^n), & \rho_*^n &= \rho_N^n - \frac{x_* - x_N}{x_N - x_{N-1}} (\rho_{N-1}^n - \rho_N^n), \\ c_*^n &= c_N^n - \frac{x_* - x_N}{x_N - x_{N-1}} (c_{N-1}^n - c_N^n), & v_*^n &= v_N^n - \frac{x_* - x_N}{x_N - x_{N-1}} (v_{N-1}^n - v_N^n). \end{aligned}$$

Работы [15–17], в которых был построен алгоритм второго ПА для моделирования детонации в СКФ в рамках одностадийной кинетики химических реакций, показывают, что еще лучшего результата можно

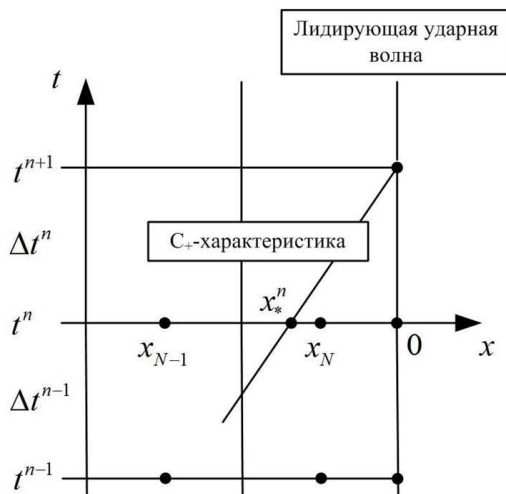


Рис. 1. К алгоритму определения скорости ЛУВ

добиться, используя для разностной аппроксимации (13) локально квадратичное представление характеристики на сеточном шаблоне, включающем большее количество точек. Для случая двухстадийной модели кинетики это является предметом дальнейших исследований. Учтем теперь, что  $x_N = -0.5\Delta x$ , а  $x_N - x_{N-1} = \Delta x$ . Тогда

$$\begin{aligned} p_*^n &= p_N^n - \frac{x_* + 0.5\Delta x}{\Delta x} (p_{N-1}^n - p_N^n), & \rho_*^n &= \rho_N^n - \frac{x_* + 0.5\Delta x}{\Delta x} (\rho_{N-1}^n - \rho_N^n), \\ c_*^n &= c_N^n - \frac{x_* + 0.5\Delta x}{\Delta x} (c_{N-1}^n - c_N^n), & v_*^n &= v_N^n - \frac{x_* + 0.5\Delta x}{\Delta x} (v_{N-1}^n - v_N^n). \end{aligned} \quad (15)$$

Теперь рассмотрим отдельно первое уравнение системы (14), подставив в него формулы (15):

$$\begin{aligned} -x_*^n - \left( c_N^n - \frac{x_* + 0.5\Delta x}{\Delta x} (c_{N-1}^n - c_N^n) + v_N^n - \frac{x_* + 0.5\Delta x}{\Delta x} (v_{N-1}^n - v_N^n) - D^n \right) \Delta t^n &= 0, \\ x_*^n &= \frac{\Delta t^n \left( c_N^n - \frac{c_{N-1}^n - c_N^n}{2} + v_N^n - \frac{v_{N-1}^n - v_N^n}{2} - D^n \right)}{-1 + \frac{\Delta t^n}{\Delta x} (c_{N-1}^n - c_N^n + v_{N-1}^n - v_N^n)}. \end{aligned} \quad (16)$$

Для определения параметров в точке  $x = 0$  в  $(n+1)$ -й момент времени воспользуемся соотношениями РГ (3) и определением скорости звука в идеальном газе:

$$\begin{aligned} p_s^{n+1} &= p_0 \left( 1 + \frac{2\gamma((M^{n+1})^2 - 1)}{\gamma + 1} \right), & \rho_s^{n+1} &= \rho_0 \frac{(\gamma + 1)((M^{n+1})^2 - 1)}{(\gamma - 1)(M^{n+1})^2 + 2}, \\ v_s^{n+1} &= c_0 \frac{2((M^{n+1})^2 - 1)}{(\gamma + 1)(M^{n+1})^2}, & c_s^{n+1} &= \sqrt{\gamma \frac{p_s^{n+1}}{\rho_s^{n+1}}}, \end{aligned} \quad (17)$$

где, напомним,  $p_0$ ,  $\rho_0$  и  $c_0$  — давление, плотность и скорость звука перед фронтом ЛУВ в невозмущенной среде. После подстановки (17) и (15) во второе уравнение (14) с учетом (16) получим нелинейное алгебраическое уравнение относительно  $M^{n+1}$ , которое решается методом Ньютона:

$$M_{j+1}^{n+1} = M_j^{n+1} - \frac{f(M_j^{n+1})}{f'(M_j^{n+1})}, \quad f = p_s^{n+1} - p_*^n + \frac{1}{2} ((\rho c)_*^n + (\rho c)_s^{n+1}) (v_s^{n+1} - v_*^n).$$

Здесь индекс  $j$  обозначает итерации метода Ньютона. В качестве начального приближения берется значение числа Маха с предыдущего шага по времени. При  $n = 0$  значение числа Маха можно вычислить по формуле (5). Получив число Маха, можно определить и скорость детонации на  $(n+1)$ -м шаге по времени:

$$D^{n+1} = c_0 M^{n+1}.$$

**3.3. Граничные условия.** Были применены различные граничные условия на удаленной левой границе расчетного отрезка для исследования их влияния на распространение ДВ. Для учета граничных условий при расчете потока вводилась дополнительная фиктивная ячейка с индексом  $m = 0$  слева. Возможные варианты граничных условий перечислены ниже:

— экстраполяция нулевого порядка:

$$\rho_{m=0}^n = \rho_{m=1}^n, \quad v_{m=0}^n = v_{m=1}^n, \quad p_{m=0}^n = p_{m=1}^n, \quad \lambda_{i_{m=0}}^n = \lambda_{r_{m=1}}^n, \quad \lambda_{m=0}^n = \lambda_{m=1}^n;$$

— стационарное втекание с параметрами ЧЖ:

$$\rho_{m=0}^n = \rho_{CJ}, \quad v_{m=0}^n = v_{CJ}, \quad p_{m=0}^n = p_{CJ}, \quad \lambda_{i_{m=0}}^n = 0, \quad \lambda_{r_{m=0}}^n = 1.$$

На правой границе также вводилась фиктивная ячейка с индексом  $m = N + 1$ , и параметры в ней являются параметрами ФН (17):

$$\rho_{m=N+1}^n = \rho_s^{n+1}, \quad v_{m=N+1}^n = v_s^{n+1}, \quad p_{m=N+1}^n = p_s^{n+1}, \quad \lambda_{i_{m=N+1}}^n = 1, \quad \lambda_{r_{m=N+1}}^n = 0.$$

**4. Тестирование вычислительного алгоритма.** Для тестирования вычислительного алгоритма рассмотрим тестовую задачу из [13, 17]. Данная задача моделирует взаимодействие двух ударных волн (УВ), когда одна из них догоняет другую.



Длина расчетной области составляет  $L = 20$ . Отрезок  $[-L; -L/3]$  является областью за УВ, движущейся со скоростью  $D_2 = 12$  и догоняющей УВ, движущуюся со скоростью  $D_1 = 6$ . Область за более медленной УВ соответствует отрезку  $[-L/3; 0]$ . Невозмущенные параметры перед первой УВ, а также все остальные параметры в области приведены в [17]. Показатель адиабаты  $\gamma$  брался равным 1.2. Расчет проводился на сетке с числом ячеек  $N = 900$ .

Результат тестирования вычислительного алгоритма представлен на рис. 2. Красная линия обозначает точное решение, зеленая линия обозначает решение, полученное с помощью приведенного в нашей работе вычислительного алгоритма. Из этого рисунка следует, что скорость ЛУВ, установившаяся после того, как более быстрая УВ догнала более медленную, выходит на теоретический уровень 13.727.

Отметим, что рассмотренная задача качественно соответствует ситуации, возникающей при распространении ДВ, когда вторичная внутренняя волна догоняет ЛУВ, усиливая и ускоряя ее. Опишем один период колебаний на примере высокочастотного режима из [12], подробнее классификация режимов будет описана в следующем разделе. На рис. 3 представлены профили давления и плотности, смещенные на 0.1 вверх относительно друг друга для наглядности. В момент времени  $t = 431.975$  контактный разрыв (КР) движется налево по зоне индукции к зоне реакции. В момент, когда КР приходит к началу зоны реакции, генерируется сильная волна сжатия, которая движется направо, пока не догонит ЛУВ. Это усиливает фронт ЛУВ, создает новый КР, начинается новый цикл.

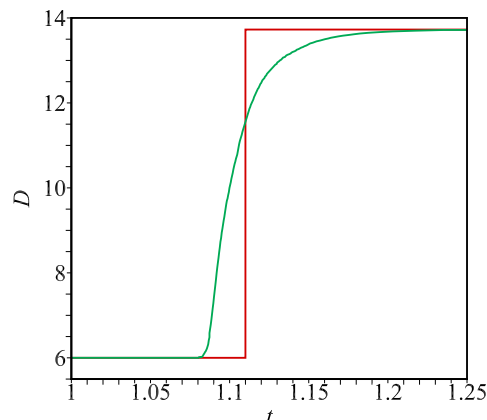


Рис. 2. Зависимость скорости ЛУВ от времени

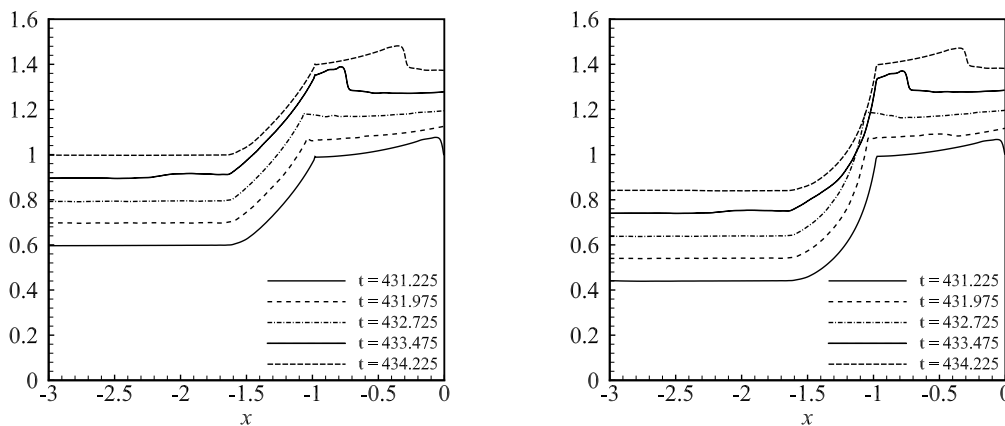


Рис. 3. Пространственные профили давления  $p$  (слева) и плотности  $\rho$  (справа) при распространении ДВ в высокочастотном режиме, см. таблицу

## 5. Численное исследование структуры детонационной волны в рамках двухстадийной модели кинетики химических реакций.

**5.1. Описание основных режимов детонации.** Согласно [12], можно выделить четыре основных режима распространения ДВ в рамках рассматриваемой двухстадийной модели кинетики реакций. Они различаются между собой периодами колебаний. Очень высокочастотный режим характеризуется тем, что период колебаний меньше времени индукции  $t_i$  в решении ЗНД. В высокочастотном режиме период колебаний больше, чем время индукции, но сравним с ним по величине. Кроме того, выделяются низкочастотный режим колебаний с периодом колебаний гораздо больше времени индукции и переходный режим, который сочетает в себе колебания и высокой, и низкой частоты одновременно. Физико-химические параметры смесей, отвечающих данным режимам, представлены в таблице.

**5.2. Подтверждение используемых параметров расчетов.** Было проведено численное исследование влияния на решение сеточного разрешения, длины расчетной области и ПА вычислительного алгоритма.

**5.2.1. Влияние сеточного разрешения.** Валидация необходимого разрешения проводилась при

Параметры рассмотренных режимов колебаний

Режим	$E_a$	$Q$	$K_r$	$k$	$\gamma$
Очень высокочастотный	1.0	10.3875	2.1	0.5	1.2
Высокочастотный	5.0	2.789	3.2	0.5	1.2
Низкочастотный	10.0	10.3875	0.15	0.5	1.2
Переходный	5.0	10.3875	0.37	0.5	1.2

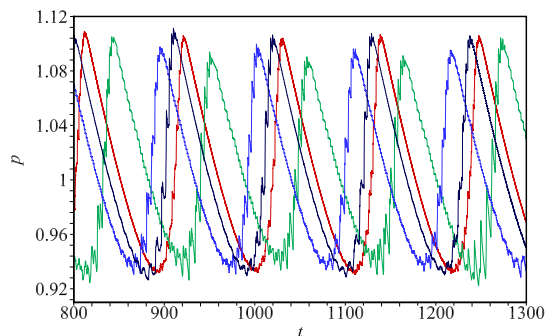


Рис. 4. Профили давления за фронтом ЛУВ при различном разрешении зоны индукции, низкочастотный режим. Зеленая линия соответствует расчету с  $N_i = 32$ , синяя — 64, фиолетовая — 128, красная — 256

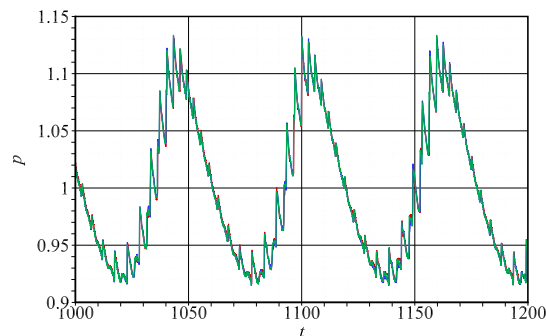


Рис. 5. Профили давления за фронтом ЛУВ при различной длине расчетной области, переходный режим. Красная линия соответствует  $L = 100$ , синяя — 500, зеленая — 750

наибольших используемых в расчетах значениях параметров энергии активации  $E_a$  и тепловыделения  $Q$ , т.е. при  $E_a = 10.0$  и при  $Q = 10.3875$ . Данные параметры вместе с константой скорости реакции  $K_r = 0.15$  соответствуют низкочастотному режиму распространения ДВ. Расчеты проводились при следующих значениях количества ячеек  $N_i$  на зону индукции: 8, 16, 32, 64, 128 и 256. Отметим, что при  $N_i = 8$  и при  $N_i = 16$  не удалось инициировать самоподдерживающуюся детонацию с помощью использования ЗНД-профилей параметров в качестве начальных условий. При остальных значениях  $N_i$  детонация инициировалась успешно, и на рис. 4 видно, что при разрешении  $N_i = 32$  и больше появляется уже установившийся режим детонации. В то время как период колебаний не зависит от разрешения, амплитуда колебаний является более чувствительной.

При разрешении 128 ячеек на зону индукции амплитуда колебаний не отличается от расчетов с 256 ячейками на зону индукции. Это позволяет заключить, что разрешение  $N_i = 128$  является достаточным для текущего исследования, и в дальнейшем такое количество ячеек на зону индукции будет использоваться в расчетах. Расчеты проводились с граничным условием путем экстраполяции нулевого порядка на удаленной левой границе.

**5.2.2. Влияние длины расчетной области.** Были исследованы различные длины  $L$  расчетной области: 100, 500 и 750. Расчеты проводились для низкочастотного режима колебаний, как и в предыдущем случае, а также для переходного режима. Отметим, что согласно процедуре безразмеривания (см. раздел 2.2) длина зоны индукции в решении ЗНД является характерным масштабом, и, следовательно, размер расчетной области  $L = 100$  отвечает расчетной области, содержащей в себе 100 длин зоны индукции. На рис. 5 для переходного режима видно, что рассматриваемые варианты длины расчетной области слабо влияют на колебательный режим. Значит, достаточная длина расчетной области  $L = 100$ .

**5.2.3. Влияние порядка аппроксимации вычислительного алгоритма.** Везде в основных расчетах далее (см. раздел 5.3) использовался второй ПА. Было проведено исследование влияния ПА на решение при  $L = 100$ ,  $N_i = 128$ . При расчете с первым ПА аппроксимация производной  $[\partial U / \partial x]_m^n$  в (10) бралась равной 0. Приведем результаты для всех четырех режимов колебаний. Можно видеть, что в высокочастотном режиме колебаний (см. рис. 6а) более высокий ПА по пространству привел к тому, что значительно увеличилась амплитуда колебаний. В очень высокочастотном режиме (см. рис. 6б) можно наблюдать качественно иную картину пульсаций при использовании второго ПА. В низкочастотном режиме (см. рис. 6в) отсутствуют промежуточные пульсации при расчете с помощью первого ПА. Это более

выражено в переходном режиме (см. рис. 6г), где первый ПА сгладил колебания высокой частоты.

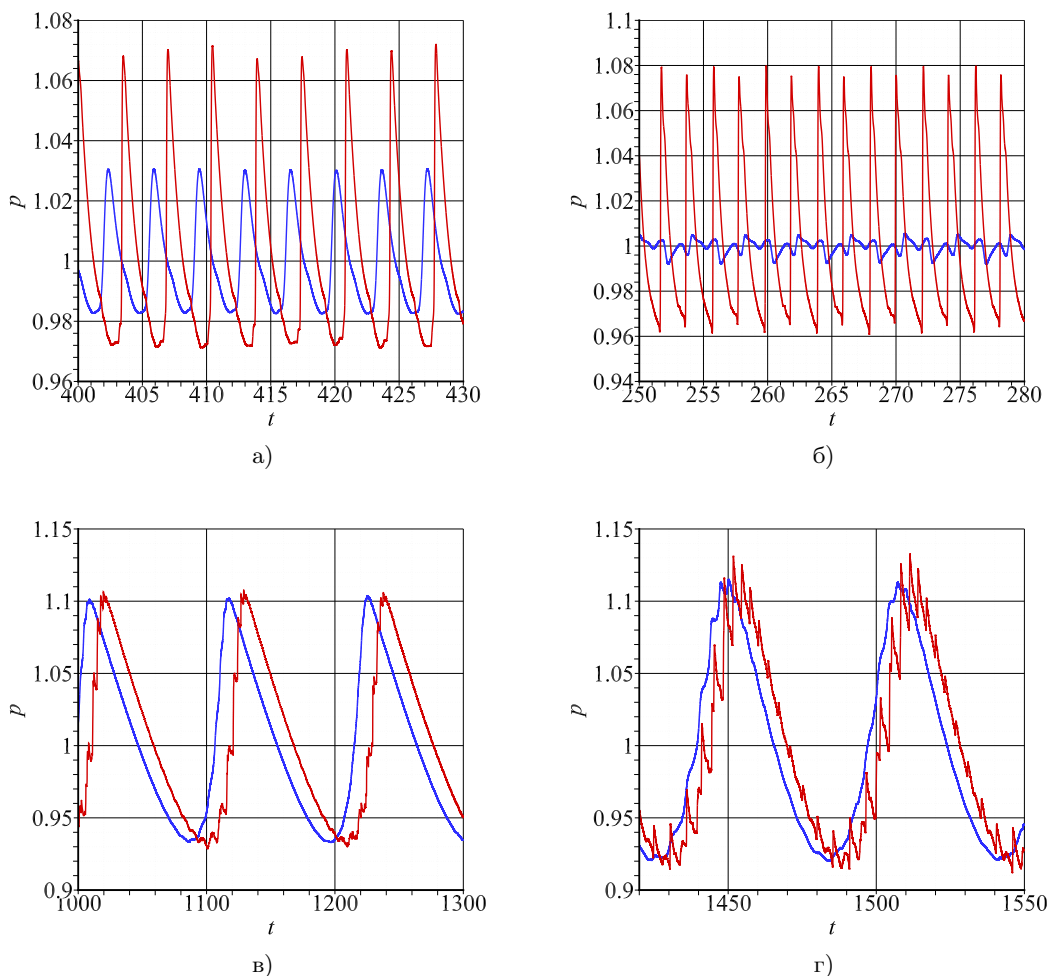


Рис. 6. Профили давления за фронтом ЛУВ в расчетах по схемам первого (синий цвет) и второго (красный цвет) ПА: высокочастотный режим (а), очень высокочастотный режим (б), низкочастотный режим (в), переходный режим (г)

**5.3. Численное исследование различных режимов распространения детонационной волны.** Результаты моделирования различных режимов распространения ДВ сравнивались с расчетными данными из [12]. В [12] расчеты проводились в ЛСК, в качестве начального условия берется ЗНД-решение, длина расчетной области — 100 длин зоны индукции. Справа от фронта ЛУВ находится невозмущенная среда. В качестве граничных условий слева берутся параметры ЧЖ, а справа — набегающий со скоростью ЧЖ поток. Таким образом, в [12] исследуется квазистационарная ДВ в набегающем потоке в ЛСК.

Как уже упоминалось, высокочастотный период колебаний характеризуется тем, что период колебаний данного режима сравним по величине с периодом индукции, однако больше него. Данному режиму колебаний соответствует скорость ДВ ЧЖ  $D_{CJ} = 1.988$  и число Маха ЧЖ  $M_{CJ} = 2.173$ . Параметры невозмущенной среды перед ЛУВ равны  $p_0 = 0.1976$ ,  $\rho_0 = 0.2834$ . Рассчитанный через безразмерные параметры период индукции  $t_i$  в решении ЗНД равен 1.775. Рисунок 7а иллюстрирует пульсации давления за фронтом ЛУВ, полученные в расчете в СКФ. Рисунок 7б представляет собой укрупненную картину профиля давления за фронтом ЛУВ в сравнении с данными, полученными авторами [12]. Видно, что период колебаний практически совпадает с данными из [12] и равен примерно 3.5 (около двух периодов индукции). Минимальное значение давления совпадает с данными расчета [12], максимальное немного больше в расчете авторов. Следует также отметить, что колебаниям термодинамических параметров отвечают соответствующие колебания скорости распространения ДВ  $D$ . В разделе 4 описан механизм возникновения пульсаций в высокочастотном режиме.

Были протестированы параметры ЧЖ в качестве граничных условий на левой, удаленной границе

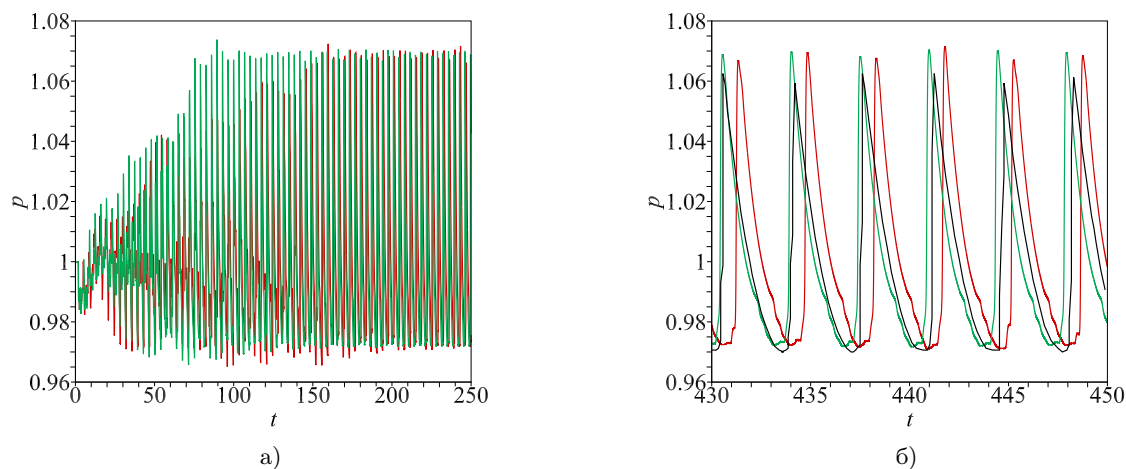


Рис. 7. Профили давления за фронтом ЛУВ, высокочастотный режим. Зеленая линия соответствует расчету авторов с параметрам ЧЖ на левой границе, красная — расчету авторов с экстраполяцией нулевого порядка на левой границе, черная — данным из [12]. Рисунок (б) является укрупненным планом при  $t \in [400; 430]$

наравне с экстраполяцией нулевого порядка, однако существенных различий в решениях замечено не было (см. рис. 7). Единственное отличие состоит в том, что при использовании параметров ЧЖ в качестве граничных условий колебания постоянной амплитуды и периода установились примерно на 100 единиц времени раньше, чем при использовании условия экстраполяции нулевого порядка (см. рис. 7а).

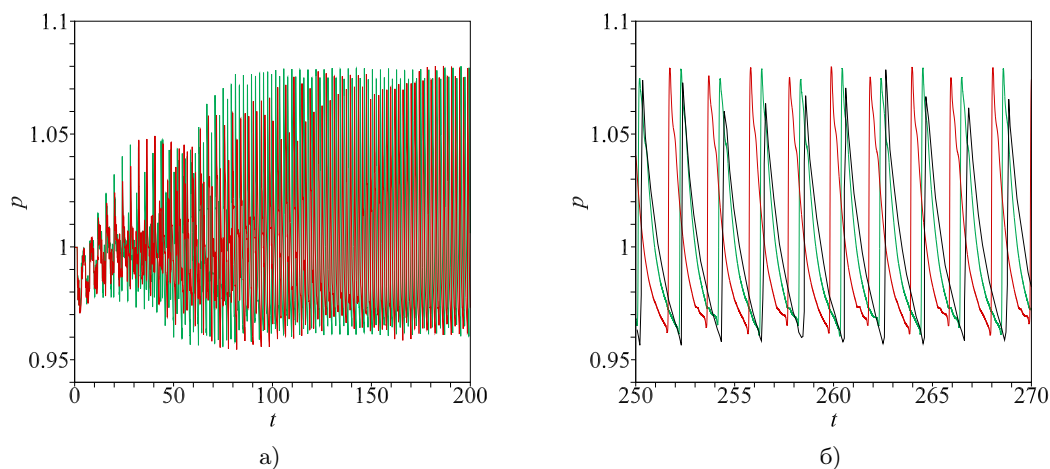


Рис. 8. Профили давления за фронтом ЛУВ, очень высокочастотный режим. Цвета аналогичны рис. 7. Рисунок (б) является укрупненным планом при  $t \in [250; 270]$

В [12] отмечается, что при увеличении константы скорости реакции  $K_r$  уменьшается длина зоны реакции, что приводит к большей скорости тепловыделения в конце зоны индукции. Это ускоряет процесс усиления волн сжатия. Если значение константы скорости  $K_r$  будет малым, то длина зоны реакции может стать слишком большой по сравнению с длиной зоны индукции, а волны сжатия не будут усиливаться достаточно быстро. Следовательно, продольная неустойчивость может вовсе не возникнуть. Если значение параметра  $E_a$  становится слишком малым, то неустойчивость тоже подавляется.

Очень высокочастотный режим колебаний характеризуется тем, что период колебаний для данного режима меньше величины периода индукции. Такому режиму колебаний соответствует скорость ДВ ЧЖ  $D_{CJ} = 3.104$  и число Маха ЧЖ  $M_{CJ} = 6.216$ . Параметры невозмущенной среды перед ЛУВ равны  $p_0 = 0.02377$ ,  $\rho_0 = 0.1144$ . Рассчитанный через безразмерные параметры период индукции  $t_i$  равен 2.815. Отметим, что данные значения числа Маха  $M_{CJ}$ , скорости детонации  $D_{CJ}$  и периода индукции  $t_i$  будут оставаться такими же и для низкочастотного, и для переходного режимов распространения ДВ. Это связано с тем, что они рассчитываются через тепловой эффект  $Q$ , который остается постоянным для всех

этих режимов. Рисунок 8 представляет картину распространения ДВ в очень высокочастотном режиме в СКФ в сравнении с результатами, полученными в [12], а также при сравнении используемых граничных условий. Период и амплитуда колебаний из [12] практически совпадают с периодом и амплитудой, которые были получены в данной работе. При использовании параметров ЧЖ решение выходит на постоянную амплитуду колебаний раньше, чем в случае использования экстраполяции нулевого порядка, как и в высокочастотном режиме (см. рис. 8а).

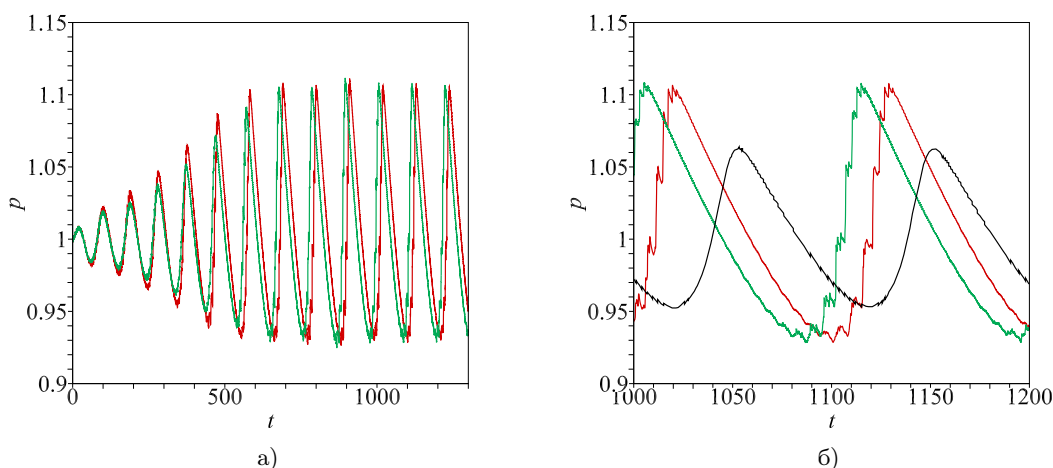


Рис. 9. Профили давления за фронтом ЛУВ, низкочастотный режим. Цвета аналогичны рис. 7. Рисунок (б) является укрупненным планом при  $t \in [1000; 1200]$

Низкочастотный режим характеризуется периодом колебаний, превышающим период индукции. В данном расчете период индукции равен 2.815, в то время как на рис. 9б видно, что период колебаний составляет примерно 110 единиц (39 периодов индукции). В работе [12] указывается, что период колебаний составил 33 периода индукции. Рисунок 9а иллюстрирует профили давления за фронтом ЛУВ при использовании различных граничных условий. Результат расчета авторов сравнивается с данными из [12] на рис. 9б. В то время как периоды колебаний отличаются незначительно, амплитуды разнятся существенно. Так как, проведя исследование на достаточное разрешение и длину расчетной области, мы исключили возможность влияния этих факторов на результаты моделирования, можно предположить, что причина отличий по сравнению с [12] заключается в различных постановках и вычислительных алгоритмах. Весомым также может быть то, что постановка задачи в [12] (сквозной счет) не предполагает точного определения значений параметров за фронтом ЛУВ, в отличие от настоящей работы.

В [12] предполагается, что механизм возникновения пульсаций в низкочастотном режиме аналогичен высокочастотному режиму за исключением того, что волны сжатия генерируются не в одной точке, а в относительно широком диапазоне и не являются дискретными. В данном режиме энергия активации высока, а соотношение между длиной зоны реакции и зоны индукции очень велико на границе устойчивости, что обуславливает низкую частоту пульсаций.

Переходный режим характеризуется тем, что сочетает в себе одновременно колебания и высокой, и низкой частоты. В [12] указывается, что подобные колебания наблюдались в работе [18], где использовалась детальная кинетика для моделирования пульсирующей детонации в водородно-воздушной смеси. Более того, в работе [19] были предприняты попытки моделирования данного режима с помощью одностадийной кинетики химических реакций, однако эта идея не увенчалась успехом. Это говорит о том, что двухстадийная кинетика лучше способна улавливать тонкости, возникающие при моделировании детонации в реальных смесях. На рис. 10 представлена картина пульсаций давления за фронтом ЛУВ в сравнении с данными из [12]. Кроме того, на рис. 10 присутствует сравнение результатов при моделировании с использованием параметров ЧЖ и экстраполяции нулевого порядка в качестве граничных условий. Видно, что, как и во всех предыдущих случаях, граничное условие слабо влияет на результат. Сравнение же с данными из [12] указывает на незначительные различия в амплитуде колебаний и ощутимые расхождения в их периоде. Период колебаний низкой частоты равняется  $12t_i$  в [12] и  $21t_i$  в данной работе.

**6. Заключение.** Итак, численно исследовано несколько режимов распространения одномерной пульсирующей волны газовой детонации в рамках двухстадийной модели кинетики химических реакций в формулировке [12]. Одной из основных особенностей данного исследования является рассмотрение задачи в

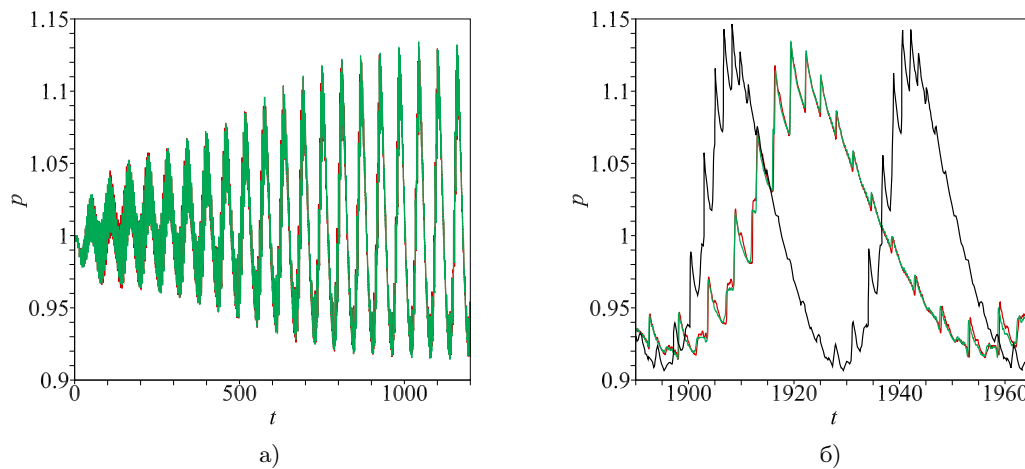


Рис. 10. Профили давления за фронтом ЛУВ, переходный режим. Цвета аналогичны рис. 7. Рисунок (б) является укрупненным планом при  $t \in [1890; 1965]$

системе координат, связанной с лидирующим скачком. С одной стороны, осуществляется переход в неинерциальную систему координат, поскольку скорость лидирующего скачка зависит от времени. Это приводит к преобразованию привычных уравнений Эйлера, в них начинает фигурировать априори неизвестная скорость лидирующего скачка. Для ее нахождения используются соотношения вдоль  $C_+$ -характеристики [13]. Разработан и детально описан вычислительный алгоритм для решения задачи в подобной постановке. Перечисленные факторы (неинерциальность системы координат, необходимость рассмотрения дополнительных уравнений для скорости волны) определяют сложность подобного подхода для исследователя с точки зрения вычислительной математики. С другой стороны, рассмотрение задачи в системе координат фронта имеет два основных достоинства. Во-первых, данный подход является существенно менее вычислительно затратным по сравнению с традиционным рассмотрением задачи инициирования и распространения детонации в лабораторной системе координат. Здесь расчетная область физически соответствует не части или полному по длине каналу, в котором рассматривается распространение детонационной волны, а всегда некоторой области непосредственно за фронтом лидирующей волны. Во-вторых, такой подход позволяет точно фиксировать параметры непосредственно за фронтом лидирующей волны. Лидирующая волна является фиксированной границей расчетной области и не испытывает численного “размазывания”, что неизбежно происходит в методах сквозного счета.

В результате численного исследования четырех известных режимов распространения волны детонации в рамках рассматриваемой модели кинетики (очень высокочастотный, высокочастотный, низкочастотный и переходный) и сравнения полученных результатов с расчетными данными [12] были установлены следующие закономерности:

- для очень высокочастотного и высокочастотного режимов период пульсаций давления за фронтом самоподдерживающейся детонационной волны в расчетах авторов практически совпадает с данными [12]. Амплитуды пульсаций в [12] при этом оказываются несколько заниженными, что соответствует наблюдениям [16, 17], в которых исследования проводились для одностадийной модели кинетики,
- для низкочастотного режима периоды колебаний отличаются незначительно, различие в максимальном значении давления при пульсациях при этом гораздо больше (до 5%) по сравнению с высокочастотными случаями,
- для переходного режима, наоборот, наблюдается незначительное отличие в амплитудах колебаний (хотя данный вопрос требует более детального изучения, поскольку в переходном режиме наблюдаются пульсации как минимум двух различных масштабов) и очень большое, практически в два раза отличие в периоде низкочастотных пульсаций.

Отметим важный момент — основные исследования предварялись предварительными, в которых были исследованы влияние сеточного разрешения, длины расчетной области и порядка аппроксимации вычислительного алгоритма на результаты моделирования и выбраны оптимальные значения перечислен-

ных параметров. В основных расчетах проверялось также влияние типа граничного условия на дальней, удаленной границе.

Работа выполнена в рамках Программы 6 фундаментальных научных исследований Президиума РАН.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зельдович Я.Б. К теории распространения детонации в газообразных системах // Журнал экспериментальной и технической физики. 1940. **10**, № 5. 542–568.
2. Von Neumann J. Theory of detonation waves // Collected Works. Vol. 6. London: Pergamon, 1963. 203–218.
3. Döring W. Über den Detonationsvorgang in Gasen [On detonation processes in gases] // Annalen der Physik. 1943. **43**. 421–436.
4. Erpenbeck J.J. Stability of steady-state equilibrium detonations // Physics of Fluids. 1962. **5**, N 5. 604–614.
5. Fickett W., Wood W. Flow calculations for pulsating one-dimensional detonations // Physics of Fluids. 1966. **9**, N 5. 903–916.
6. Korobeinikov V.P., Levin V.A., Markov V.V., Chernyi G.G. Propagation of blast waves in a combustible gas // Acta Astronautica. 1972. **17**, N 5–6. 529–537.
7. Седов Л.И., Коробейников В.П., Марков В.В. Теория распространения взрывных волн // Труды Математического института АН СССР. 1986. **175**. 178–216.
8. Short M., Sharpe G.J. Pulsating instability of detonations with a two-step chain-branching reaction model: theory and numerics // Combustion Theory and Modelling. 2003. **7**, N 2. 401–416.
9. McVey J.B., Toong T.Y. Mechanism of instabilities of exothermic hypersonic blunt-body flows // Combustion Science and Technology. 1971. **3**, N 2. 63–76.
10. Fickett W., Davis W.C. Detonation: theory and experiment. Berkeley: University of California Press, 1979.
11. Ng H.D., Radulescu M.I., Higgins A.J., Nikiforakis N., Lee J.H.S. Numerical investigation of the instability for one-dimensional Chapman–Jouguet detonations with chain-branching kinetics // Combustion Theory and Modelling. 2005. **9**, N 3. 385–401.
12. Leung C., Radulescu M.I., Sharpe G.J. Characteristics analysis of the one-dimensional pulsating dynamics of chain-branching detonations // Physics of Fluids. 2010. **22**. doi: 10.1063/1.3520188.
13. Kasimov A.R., Stewart D.S. On the dynamics of self-sustained one-dimensional detonations: A numerical study in the shock-attached frame // Physics of Fluids. 2004. **16**, N 10. 3566–3578.
14. Холодов А.С. О построении разностных схем с положительной аппроксимацией для уравнений гиперболического типа // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1978. **18**, № 6. 1476–1492.
15. Lopato A.I., Utkin P.S. Детальное математическое моделирование пульсирующей детонационной волны в системе координат, связанной с лидирующим скачком // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2016. **56**, № 5. 856–868.
16. Lopato A.I., Utkin P.S. Toward second-order algorithm for the pulsating detonation wave modeling in the shock-attached frame // Combustion Science and Technology. 2016. **188**, N 11–12. 1844–1856.
17. Lopato A.I., Utkin P.S. О двух подходах к математическому моделированию детонационной волны // Математическое моделирование. 2016. **28**, № 2. 133–145.
18. Daimon Y., Matsuo A. Unsteady features on one-dimensional hydrogen-air detonations // Physics of Fluids. 2007. **19**. doi: 10.1063/1.2801478.
19. Short M., Wang D. On the dynamics of pulsating detonations // Combustion Theory and Modelling. 2001. **5**, N 3. 343–352.

Поступила в редакцию  
18.06.2019

---

### Numerical Simulation of Detonation Wave Propagation Using a Two-Stage Kinetics Model of Chemical Reactions in the Shock-Attached Frame

Ya. E. Poroshyna<sup>1</sup> and P. S. Utkin<sup>2, 3</sup>

<sup>1</sup> Moscow Institute of Physics and Technology, Faculty of Aerophysics and Space Research; Institutskii pereulok 9, Dolgoprudny, 141701, Russia; Student, e-mail: poroshina@phystech.edu

<sup>2</sup> Institute for Computer Aided Design, Russian Academy of Sciences; ulitsa 2nd Brestskaya 19/18, Moscow, 123056, Russia; Ph.D., Senior Scientist, e-mail: pavel\_utk@mail.ru

<sup>3</sup> Moscow Institute of Physics and Technology, Faculty of Aerophysics and Space Research; Institutskii pereulok 9, Dolgoprudny, 141701, Russia; Ph.D., Associate Professor, e-mail: pavel\_utk@mail.ru

Received June 18, 2019

**Abstract:** For the numerical study of a pulsating detonation wave using a two-stage kinetics model of chemical reactions in the shock-attached frame, a new numerical algorithm is proposed. For the four known modes of detonation wave propagation, the effect of the approximation order of the proposed numerical algorithm, the length of the computational domain, the grid resolution, and the type of the far-field boundary condition on the simulation results is analyzed in the framework of this model. The character of pulsations is compared with the numerical results obtained by a number of other authors.

**Keywords:** mathematical modeling, detonation wave, shock-attached frame, two-stage kinetics model.

### References

1. Ya. B. Zel'dovich, "On the Theory of Detonation Propagation in Gaseous Systems," *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **10** (5), 542–568 (1940).
2. J. von Neumann, "Theory of Detonation Waves," in *Collected Works* (Pergamon, London, 1963), Vol. 6, pp. 203–218.
3. W. Döring, "Über den Detonationsvorgang in Gasen [On Detonation Processes in Gases]," *Ann. Phys.* **43**, 421–436 (1943).
4. J. J. Erpenbeck, "Stability of Steady-State Equilibrium Detonations," *Phys. Fluids* **5** (5), 604–614 (1962).
5. W. Fickett and W. W. Wood, "Flow Calculations for Pulsating One-Dimensional Detonations," *Phys. Fluids* **9** (5), 903–916 (1966).
6. V. P. Korobeinikov, V. A. Levin, V. V. Markov, and G. G. Chernyi, "Propagation of Blast Waves in a Combustible Gas," *Acta Astronaut.* **17** (5–6), 529–537 (1972).
7. L. I. Sedov, V. P. Korobeinikov, and V. V. Markov, "The Theory of Blast Wave Propagation," *Tr. Mat. Inst. im. V.A. Steklova, Akad. Nauk SSSR* **175**, 178–216 (1986) [*Proc. Steklov Inst. Math.* **175**, 187–228 (1988)].
8. M. Short and G. J. Sharpe, "Pulsating Instability of Detonations with a Two-Step Chain-Branching Reaction Model: Theory and Numerics," *Combust. Theory Modelling* **7** (2), 401–416 (2003).
9. J. B. McVey and T. Y. Toong, "Mechanism of Instabilities of Exothermic Hypersonic Blunt-Body Flows," *Combust. Sci. Technol.* **3** (2), 63–76 (1971).
10. W. Fickett and W. C. Davis, *Detonation: Theory and Experiment* (University of California Press, Berkeley, 1979).
11. H. D. Ng, M. I. Radulescu, A. J. Higgins, et al., "Numerical Investigation of the Instability for One-Dimensional Chapman–Jouguet Detonations with Chain-Branching Kinetics," *Combust. Theory Modelling* **9** (3), 385–401 (2005).
12. C. Leung, M. I. Radulescu, and G. J. Sharpe, "Characteristics Analysis of the One-Dimensional Pulsating Dynamics of Chain-Branching Detonations," *Phys. Fluids* **22** (2010). doi: 10.1063/1.3520188.
13. A. R. Kasimov and D. S. Stewart, "On the Dynamics of Self-Sustained One-Dimensional Detonations: A Numerical Study in the Shock-Attached Frame," *Phys. Fluids* **16** (10), 3566–3578 (2004).
14. A. S. Kholodov, "Construction of Difference Schemes with Positive Approximation for Hyperbolic Equations," *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **18** (6), 1476–1492 (1978) [*USSR Comput. Math. Math. Phys.* **18** (6), 116–132 (1978)].
15. A. I. Lopato and P. S. Utkin, "Detailed Simulation of the Pulsating Detonation Wave in the Shock-Attached Frame," *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **56** (5), 856–868 (2016) [*Comput. Math. Math. Phys.* **56** (5), 841–853 (2016)].
16. A. I. Lopato and P. S. Utkin, "Toward Second-Order Algorithm for the Pulsating Detonation Wave Modeling in the Shock-Attached Frame," *Combust. Sci. Technol.* **188** (11–12), 1844–1856 (2016).
17. A. I. Lopato and P. S. Utkin, "Two Approaches to the Mathematical Modeling of Detonation Waves," *Mat. Model.* **28** (2), 133–145 (2016) [*Math. Models Comput. Simul.* **8** (5), 585–594 (2016)].
18. Y. Daimon and A. Matsuo, "Unsteady Features on One-Dimensional Hydrogen–Air Detonations," *Phys. Fluids* **19** (2007). doi: 10.1063/1.2801478.
19. M. Short and D. Wang, "On the Dynamics of Pulsating Detonations," *Combust. Theory Modelling* **5** (3), 343–352 (2001).