

УДК 519.633.6

doi 10.26089/NumMet.v18r101

МОДИФИКАЦИЯ СХЕМЫ “КАБАРЕ” ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ОДНОМЕРНЫХ ДЕТОНАЦИОННЫХ ТЕЧЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОДНОСТАДИЙНОЙ НЕОБРАТИМОЙ МОДЕЛИ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

А. В. Данилин¹, А. В. Соловьев², А. М. Зайцев³

Представлен алгоритм для численного моделирования задач одномерной детонации с использованием одностадийной необратимой модели химической кинетики. Дискретизация уравнений движения произведена согласно балансно-характеристической методике “кабаре”. Аппроксимация источниковых членов выполнена без расщепления по физическим процессам с использованием неявного подхода с регулируемым порядком аппроксимации. Показано точное согласование параметров моделируемой детонации Чепмена–Жуге с аналитическим решением. Для неустойчивой детонации продемонстрирована зависимость результатов расчета от порядка аппроксимации правых частей.

Ключевые слова: односкоростная многокомпонентная среда, системы гиперболических уравнений, схема “кабаре”, вычислительная гидродинамика, консервативный метод, детонация, реакция Аррениуса.

1. Введение. На данный момент теоретические и экспериментальные исследования феномена детонации проводятся уже больше века. Эти исследования начаты в работах Чепмена и Жуге [1–3], в которых рассмотрены свойства разрывных течений с тепловыделением на поверхности разрыва. Из полученных в этих работах соотношений следует аналитическая форма для одномерных детонационных волн, описанная в [4]. В работах Зельдовича, фон Неймана и Деринга [5–7] была аналитически рассмотрена структура фронта детонации, результаты данных исследований объединены общим названием — ZND (Zel’dovich–Neumann–Döring detonation). В работах [8, 9] была показана неустойчивая природа одномерной детонации Чепмена–Жуге. В дальнейшем в работах [10–13] была аналитически и численно исследована неустойчивость пересжатых детонационных волн, в работе [14] затрагиваются явления удвоения периода осцилляций и их хаотизации при варьировании энергии активации.

В задачах о моделировании одномерной детонации применяются различные типы численных алгоритмов. В работе [15] рассмотрены преимущества и недостатки схем типа Годунова при моделировании гидродинамики с одностадийной необратимой химической кинетикой. В работе [16] предложен численный алгоритм типа MUSCL (Monotone Upstream-Centered Schemes for Conservation Laws), в котором используется численное интегрирование характеристической формы уравнений движения. В работах [17–20] проводится конструирование численных алгоритмов типа ENO (Essentially Non-Oscillatory algorithm) с порядком аппроксимации с первого по пятый включительно с одностадийной необратимой химической кинетикой, при помощи которых моделируются различные режимы детонации.

В настоящей статье проводится адаптация алгоритма “кабаре” для моделирования детонационных задач с использованием одностадийной необратимой модели химической кинетики. Некоторые свойства полученного алгоритма исследуются на решении двух задач, посвященных детонации Чепмена–Жуге и неустойчивой детонации. В первой проводится сравнение скорости детонационной волны и формы детонационной волны с аналитическим решением. Во второй задаче проводится моделирование неустойчивой детонации. Для обеих задач сравниваются решения, полученные с использованием первого и второго порядка аппроксимации правой части. К свойствам алгоритма “кабаре” относятся консервативность, второй порядок аппроксимации на гладких решениях и сравнительно небольшая численная вязкость. Данная схема предложена и развита в работах [21–26] и успешно зарекомендовала себя для разнообразных задач, связанных с решением систем гиперболических уравнений [27–29].

¹ Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, Большая Тульская ул., д. 52, 115191, Москва; мл. науч. сотр., e-mail: adanilin@ibrae.ac.ru

² Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, Большая Тульская ул., д. 52, 115191, Москва; вед. науч. сотр., e-mail: solovjev@ibrae.ac.ru

³ Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, Большая Тульская ул., д. 52, 115191, Москва; мл. науч. сотр., e-mail: azai@ibrae.ac.ru

2. Уравнения движения.

2.1. Консервативная форма уравнений движения. Движение горючей смеси описывается уравнениями движения идеального газа, движение концентрации топлива в смеси описывается уравнением переноса примеси с правой частью, отвечающей за химическую кинетику [19]. Внешние силы отсутствуют. Вязкость и диффузия отсутствуют. Уравнения неразрывности для концентрации топлива, плотности горючей смеси, законы сохранения импульса и энергии имеют следующий вид:

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho Z u}{\partial x} = -Z \rho^2 A \exp(-T_a/T), \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + p}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial u(\rho E + p)}{\partial x} = 0. \quad (2)$$

Здесь Z — массовая доля горючей смеси; u — скорость; ρ — плотность среды; p — давление смеси; A — константа скорости реакции, $\exp(-T_a/T)$ — множитель Аррениуса; T_a — температура активации; T — температура смеси; $E = C_v T + u^2/2 + ZQ$ — сумма удельных внутренней, кинетической и скрытой тепловой энергий горючей смеси; C_v — теплоемкость смеси при постоянном объеме, Q — удельный тепловой эффект реакции. Уравнение состояния среды зададим в форме $p = (\gamma - 1)C_v T \rho$, где γ — эффективный показатель адиабаты смеси.

2.2. Простая форма уравнений движения. Система уравнений (1), (2) после ряда эквивалентных преобразований может быть записана в так называемой простой форме [16]:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathcal{A} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \mathbf{g}, \quad \varphi^T = (Z, \rho, u, p), \quad (3)$$

$$\text{где } \mathcal{A} = \begin{pmatrix} u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u & \rho & 0 \\ 0 & 0 & u & 1/\rho \\ 0 & 0 & \gamma p & u \end{pmatrix}, \quad \mathbf{g} = \begin{pmatrix} -Z \rho \exp(-T_a/T) \\ 0 \\ 0 \\ (\gamma - 1)QZ\rho^2 A \exp(-T_a/T) \end{pmatrix}.$$

Эта форма уравнений движения в данном случае является вспомогательной и служит для получения характеристической системы уравнений.

2.3. Характеристическая форма уравнений движения. Можно показать, что собственные значения матрицы \mathcal{A} имеют следующий вид:

$$\lambda_1 = u + c, \quad \lambda_2 = u - c, \quad \lambda_{3,4} = u,$$

где $c = \sqrt{\gamma p / \rho}$ — скорость звука. Из собственных векторов матрицы \mathcal{A} составим матрицу

$$\Omega = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1/\rho c \\ 0 & 0 & 1 & -1/\rho c \\ 0 & -c^2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

умножим ее на выражение (3) и получим характеристическую форму уравнений движения [16]:

$$\Omega \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \Lambda \Omega \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \Omega \mathbf{g}, \quad (4)$$

где $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4)$.

3. Численный алгоритм.

3.1. Расчетная область и сетка. Расчетная область — отрезок $[0, L]$. В расчетной области введена равномерная расчетная сетка из $N_x + 1$ узлов, заданная узловыми точками:

$$x_i : 0 = x_1 < x_2 < \dots < x_{N_x} < x_{N_x+1} = L.$$

Данный набор узлов порождает N_x расчетных ячеек. Центрам ячеек соответствуют консервативные переменные, обозначаемые двумя полуцелыми индексами $i + 1/2$, узлы сетки обозначаются целыми индексами i . Численный алгоритм оперирует двумя типами переменных: консервативными и потоковыми.

Консервативные переменные относятся к центрам расчетных ячеек и имеют смысл средних значений физических величин в рамках одной вычислительной ячейки, потоковые величины относятся к узлам расчетной сетки и отвечают за обмен величинами между ячейками. Схема оперирует тремя временными слоями: начальным n , полуполым $n + 1/2$ и новым $n + 1$.

3.2. Задание начальных данных. В качестве глобальных физических констант задаются показатель адиабаты γ и удельная теплоемкость C_v при постоянном объеме горючей смеси, а также параметры химической кинетики — константа реакции A , температура активации T_a и удельный тепловой эффект Q . В начальный момент времени в центрах и узлах расчетных ячеек задаются плотность горючей смеси ρ , скорость u и давление p , откуда определяется полная энергия E и температура T . Во всей расчетной области находится свежая горючая смесь: $Z = 1$.

3.3. Временной шаг. Для устойчивости представленного явного алгоритма шаг по времени определяется условием Куранта–Фридрихса–Леви:

$$\frac{(\lambda_{\max}^x)_{i+1/2}^n \tau_n}{\Delta x_{i+1/2}} \leq \text{CFL} \leq 1,$$

где $(\lambda_{\max}^x)_{i+1/2}^n = |u_{i+1/2}^n| + c_{i+1/2}^n$, $c_{i+1/2}^n = \sqrt{(\gamma p / \rho)_{i+1/2}^n}$ — локальная скорость звука на n -м временном слое и CFL — число Куранта.

3.4. Схема “кабаре”. Для аппроксимации левых частей уравнений движения (1), (2) используется схема “кабаре” для многокомпонентной газовой среды, предложенная и исследованная в работах [27, 28]:

$$\frac{U_{i+1/2}^{n+1} - U_{i+1/2}^n}{\tau_n} + \frac{\bar{F}_{i+1} - \bar{F}_i}{\Delta x_{i+1/2}} = \tilde{f}. \tag{5}$$

Здесь $U^T = (\rho Z, \rho, \rho u, \rho E)$ — вектор консервативных величин, $F^T = (\rho Z u, \rho u, \rho u^2 + p, u(\rho E + p))$ — вектор потоков, $\bar{\eta} = (\eta^n + \eta^{n+1})/2$ — черта над потоковыми переменными обозначает усреднение по начальному и новому временным слоям.

Таблица 1

Правые части уравнений движения аппроксимируются следующим образом:

Зависимость свойств алгоритма от параметра σ

σ	Схема	Порядок аппроксимации
0	Явная	Первый
1/2	Неявная	Второй
$(0, 1/2) \cup (1/2, 1]$	Неявная	Первый

$$\tilde{f} = \frac{1}{2} \left((1 - \sigma) F_{i+1/2}^n + F_{i+1/2}^{n+1/2} + \sigma F_{i+1/2}^{n+1} \right).$$

Здесь $F^T = (-AZ\rho^2 \exp(-T_a/T), 0, 0, 0)$ — вектор правых частей и σ — параметр, позволяющий управлять порядком аппроксимации численной схемы, а также задавать режим работы алгоритма в его явной или неявной модификациях. Подробнее зависимости свойств алгоритма от σ приведены в табл. 1.

3.5. Первая фаза алгоритма. Один временной шаг схемы “кабаре” состоит из трех фаз. В первой фазе алгоритма вычисляются промежуточные консервативные значения на полуполым $n + 1/2$ временном слое. Во второй фазе вычисляются потоковые переменные на новом $n + 1$ временном слое. На третьей фазе рассчитываются консервативные переменные на новом $n + 1$ временном слое.

Дискретизация уравнений движения на первой фазе алгоритма:

$$\frac{U_{i+1/2}^{n+1/2} - U_{i+1/2}^n}{\tau_n/2} + \frac{F_{i+1}^n - F_i^n}{\Delta x_{i+1/2}} = (1 - \sigma) f_{i+1/2}^n + \sigma f_{i+1/2}^{n+1/2}. \tag{6}$$

Из выражения (6) получаются значения консервативных величин Z, ρ, u, E на полуполым временном слое. Величины $\rho_{i+1/2}^{n+1/2}$ и $u_{i+1/2}^{n+1/2}$ вычисляются по явной схеме:

$$\frac{\rho_{i+1/2}^{n+1/2} - \rho_{i+1/2}^n}{\tau_n/2} + \frac{\{\rho u\}_{i+1}^n - \{\rho u\}_i^n}{\Delta x_{i+1/2}} = 0,$$

$$\frac{\{\rho u\}_{i+1}^{n+1/2} - \{\rho u\}_{i+1/2}^n}{\tau_n/2} + \frac{\{\rho u^2\}_{i+1}^n - \{\rho u^2\}_i^n}{\Delta x_{i+1/2}} + \frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta x_{i+1/2}} = 0.$$

Величины $Z_{i+1/2}^{n+1/2}$ и $T_{i+1/2}^{n+1/2}$ вычисляются по неявной схеме:

$$\frac{\{\rho Z\}_{i+1/2}^{n+1/2} - \{\rho Z\}_{i+1/2}^n}{\tau_n/2} + F_Z^n = -A \left((1 - \sigma) \{Z \rho^2 \exp(-T_a/T)\}_{i+1/2}^n + \sigma \{Z \rho^2 \exp(-T_a/T)\}_{i+1/2}^{n+1/2} \right), \quad (7)$$

$$\frac{\{\rho(C_v T + u^2/2 + ZQ)\}_{i+1/2}^{n+1/2} - \{\rho(C_v T + u^2/2 + ZQ)\}_{i+1/2}^n}{\tau_n/2} + F_E^n = 0, \quad (8)$$

где $F_Z^n = \frac{\{\rho Z u\}_{i+1}^n - \{\rho Z u\}_i^n}{\Delta x_{i+1/2}}$ и $F_E^n = \frac{\{u(\rho E + p)\}_{i+1}^n - \{u(\rho E + p)\}_i^n}{\Delta x_{i+1/2}}$.

При $\sigma > 0$ система из уравнений (7), (8) преобразуется в трансцендентное уравнение на температуру

$$\varphi(T_{i+1/2}^{n+1/2}) = T_{i+1/2}^{n+1/2}, \quad (9)$$

разрешаемое методом простых итераций. Вид функции $\varphi(T)$ и выбор начального приближения обеспечивают сходимость итерационного процесса. Подстановка полученного значения $T_{i+1/2}^{n+1/2}$ в уравнение (7) дает значение концентрации горючей смеси на полущелом временном слое $Z_{i+1/2}^{n+1/2}$.

3.6. Вторая фаза алгоритма. На второй фазе при помощи характеристического подхода вычисляются потоковые переменные на новом временном слое. Для вычисления некоторых величин в рамках одной пространственно-временной ячейки $[x_i, x_{i+1}] \times [t_n, t_{n+1}]$ считаются постоянными некоторые зависимости от локальных параметров течения газа элементы матрицы Ω . Обозначим матрицу с локально постоянными элементами через $\Omega_{i+1/2}^{n+1/2}$:

$$\Omega_{i+1/2}^{n+1/2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & G_{i+1/2}^{n+1/2} \\ 0 & 0 & 1 & -G_{i+1/2}^{n+1/2} \\ 0 & -c^2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Собственные значения матрицы (10) будем считать постоянными в рамках рассматриваемой пространственно-временной ячейки:

$$(\lambda_1)_{i+1/2}^{n+1/2} = u_{i+1/2}^{n+1/2} + c_{i+1/2}^{n+1/2}; \quad (\lambda_2)_{i+1/2}^{n+1/2} = u_{i+1/2}^{n+1/2} - c_{i+1/2}^{n+1/2}; \quad (\lambda_{3,4})_{i+1/2}^{n+1/2} = u_{i+1/2}^{n+1/2};$$

где $c_{i+1/2}^{n+1/2} = \left\{ \sqrt{\gamma p / \rho} \right\}_{i+1/2}^{n+1/2}$ — локальная скорость звука.

В случае постоянства элементов $G_{i+1/2}^{n+1/2}$ матрицы $\Omega_{i+1/2}^{n+1/2}$ характеристическая форма уравнений движения (4) сводится к набору уравнений переноса локальных инвариантов Римана:

$$\frac{\partial I_f}{\partial t} + (\lambda_f)_{i+1/2}^{n+1/2} \frac{\partial I_f}{\partial x} = (g_f)_{i+1/2}^{n+1/2}, \quad f = \overline{1, 4},$$

где $I_1 = u + G_{i+1/2}^{n+1/2} p$, $I_2 = u - G_{i+1/2}^{n+1/2} p$, $I_3 = \ln \frac{p}{\rho^\gamma}$, $I_4 = Z$, $G_{i+1/2}^{n+1/2} = 1/(\rho c)_{i+1/2}^{n+1/2}$ — вспомогательная величина.

Таким образом, для каждой расчетной ячейки получена система уравнений переноса инвариантов Римана I_f с соответствующими характеристическими скоростями λ_f . Данная система приближает исходную дифференциальную систему (4). Далее для каждого узла расчетной сетки производится вычисление и коррекция потоковых значений инвариантов на $n + 1$ временном слое. При этом в каждом узле рассчитываются два возможных вида инвариантов: один, приходящий из левой, и другой, приходящий из правой по отношению к данному узлу расчетной ячейки. Первый инвариант обозначается индексом L , второй — R . Затем из этих инвариантов выбирается один в соответствии со знаком соответствующей характеристической скорости, отнесенной к этой грани. Алгоритм такого выбора приведен ниже. Рассмотрим экстраполяцию на новый временной слой и коррекцию некоторого инварианта I , переносимого по характеристике λ .

Экстраполяция инварианта, приходящего из левой ячейки: $(I_i^{n+1})_L^* = 2I_{i-1/2}^{n+1/2} - I_{i-1}^n$.

Коррекция инварианта, приходящего из левой ячейки:

$$(I_i^{n+1})_L = \begin{cases} m, & (I_i^{n+1})_L^* \leq m; \\ M, & (I_i^{n+1})_L^* \geq M; \\ (I_i^{n+1})_L^*, & (I_i^{n+1})_L^* \in (m, M); \end{cases} \quad \text{где} \quad \begin{cases} m = \min(I_{i-1}^n, I_{i-1/2}^n, I_i^n) + \tau_n g; \\ M = \max(I_{i-1}^n, I_{i-1/2}^n, I_i^n) + \tau_n g; \\ g = \frac{(I_{i-1/2}^{n+1/2} - I_{i-1/2}^n)}{\tau_n/2} + \lambda_{i-1/2}^{n+1/2} \frac{(I_i^n - I_{i-1}^n)}{\Delta x_{i-1/2}}. \end{cases}$$

Экстраполяция инварианта, приходящего из правой ячейки: $(I_i^{n+1})_R^* = 2I_{i+1/2}^{n+1/2} - I_{i+1}^n$.

Коррекция инварианта, приходящего из правой ячейки:

$$(I_i^{n+1})_R = \begin{cases} m, & (I_i^{n+1})_R^* \leq m; \\ M, & (I_i^{n+1})_R^* \geq M; \\ (I_i^{n+1})_R^*, & (I_i^{n+1})_R^* \in (m, M). \end{cases} \quad \text{где} \quad \begin{cases} m = \min(I_i^n, I_{i+1/2}^n, I_{i+1}^n) + \tau_n g; \\ M = \max(I_i^n, I_{i+1/2}^n, I_{i+1}^n) + \tau_n g; \\ g = \frac{(I_{i+1/2}^{n+1/2} - I_{i+1/2}^n)}{\tau_n/2} + \lambda_{i+1/2}^{n+1/2} \frac{(I_{i+1}^n - I_i^n)}{\Delta x_{i+1/2}}. \end{cases}$$

Окончательный выбор значения потокового инварианта I на новом временном слое происходит следующим образом:

$$I_i^{n+1} = \begin{cases} I_i^{n+1}{}_L, & \lambda_{i-1/2}^{n+1/2} + \lambda_{i+1/2}^{n+1/2} \geq 0; \\ I_i^{n+1}{}_R, & \lambda_{i-1/2}^{n+1/2} + \lambda_{i+1/2}^{n+1/2} < 0. \end{cases}$$

После вычисления потоковых значений инвариантов на $n + 1$ временном слое из них производится восстановление потоковых физических величин.

Вычислим вспомогательные величины G_Q и G_R , необходимые для расчета потоковых значений давления и скорости:

$$G_R = \begin{cases} G_{i-1/2}^{n+1/2}, & \lambda_{i-1/2}^{n+1/2} + \lambda_{i+1/2}^{n+1/2} \geq 0; \\ G_{i+1/2}^{n+1/2}, & \lambda_{i-1/2}^{n+1/2} + \lambda_{i+1/2}^{n+1/2} < 0; \end{cases} \quad G_Q = \begin{cases} G_{i-1/2}^{n+1/2}, & \lambda_{2i-1/2}^{n+1/2} + \lambda_{2i+1/2}^{n+1/2} \geq 0; \\ G_{i+1/2}^{n+1/2}, & \lambda_{2i-1/2}^{n+1/2} + \lambda_{2i+1/2}^{n+1/2} < 0. \end{cases}$$

Перейдем теперь к непосредственному вычислению потоковых величин на $n + 1$ временном слое.

$$\text{Давление и скорость: } p_i^{n+1} = \frac{(I_1)_i^{n+1} - (I_2)_i^{n+1}}{G_R + G_Q}, \quad u_i^{n+1} = \frac{G_R(I_2)_i^{n+1} + G_Q(I_1)_i^{n+1}}{G_R + G_Q}.$$

$$\text{Плотность и массовая доля горючей смеси } Z: \rho_i^{n+1} = \left(\frac{p_i^{n+1}}{\exp I_{3i}^{n+1}} \right)^{1/\gamma}, \quad Z_i^{n+1} = (I_4)_i^{n+1}.$$

$$\text{Сумма полной и скрытой тепловой энергии: } E_i^{n+1} = \frac{p_i^{n+1}}{(\gamma - 1)\rho_i^{n+1}} + \frac{(u_i^{n+1})^2}{2} + Z_i^{n+1}Q.$$

3.7. Третья фаза. Дискретизация уравнений движения на третьей фазе алгоритма:

$$\frac{U_{i+1/2}^{n+1} - U_{i+1/2}^{n+1/2}}{\tau_n/2} + \frac{F_{i+1}^{n+1} - F_i^{n+1}}{\Delta x_{i+1/2}} = (1 - \sigma)f_{i+1/2}^{n+1/2} + \sigma f_{i+1/2}^{n+1}. \quad (11)$$

Из выражения (11) получаются значения консервативных величин Z , ρ , u , E на новом временном слое.

Величины $\rho_{i+1/2}^{n+1}$ и $u_{i+1/2}^{n+1}$ вычисляются по явной схеме:

$$\frac{\rho_{i+1/2}^{n+1} - \rho_{i+1/2}^{n+1/2}}{\tau_n/2} + \frac{\{\rho u\}_{i+1}^{n+1} - \{\rho u\}_i^{n+1}}{\Delta x_{i+1/2}} = 0,$$

$$\frac{\{\rho u\}_{i+1/2}^{n+1} - \{\rho u\}_{i+1/2}^{n+1/2}}{\tau_n/2} + \frac{\{\rho u^2\}_{i+1}^{n+1} - \{\rho u^2\}_i^{n+1}}{\Delta x_{i+1/2}} + \frac{p_{i+1}^{n+1} - p_i^{n+1}}{\Delta x_{i+1/2}} = 0.$$

Величины $Z_{i+1/2}^{n+1}$ и $T_{i+1/2}^{n+1}$ вычисляются по неявной схеме:

$$\frac{\{\rho Z\}_{i+1/2}^{n+1} - \{\rho Z\}_{i+1/2}^{n+1/2}}{\tau_n/2} + F_Z^{n+1} = -A \left((1 - \sigma) \{Z \rho^2 \exp(-T_a/T)\}_{i+1/2}^{n+1/2} + \sigma \{Z \rho^2 \exp(-T_a/T)\}_{i+1/2}^{n+1} \right), \quad (12)$$

$$\frac{\{\rho(C_v T + u^2/2 + ZQ)\}_{i+1/2}^{n+1} - \{\rho(C_v T + u^2/2 + ZQ)\}_{i+1/2}^{n+1/2}}{\tau_n/2} + F_E^{n+1} = 0, \quad (13)$$

$$\text{где } F_Z^{n+1} = \frac{\{\rho Z u\}_{i+1}^{n+1} - \{\rho Z u\}_i^{n+1}}{\Delta x_{i+1/2}}, \quad F_E^{n+1} = \frac{\{u(\rho E + p)\}_{i+1}^{n+1} - \{u(\rho E + p)\}_i^{n+1}}{\Delta x_{i+1/2}}.$$

Система уравнений (12), (13) разрешается полностью аналогично первой фазе (9). Следует отметить, что суммирование дискретизаций уравнений движения (6) и (11) на первом и третьем шагах алгоритма даст в итоге исходную схему “кабаре” (5).

4. Численные эксперименты. В качестве тестовых решены три задачи: о детонации Чепмена–Жуге и две об импульсной детонации с различными энергиями инициализации. Для всех тестовых задач используется одна и та же расчетная область — отрезок $[0, L_x] = [0, 0.8]$. В качестве граничных условий на концах отрезка заданы непроницаемые стенки. Во всех экспериментах используется число Куранта $CFL = 0.3$. В рамках всех экспериментов производятся расчеты по алгоритму как с первым, так и со вторым порядком аппроксимации правых частей уравнений движений, для чего соответственно используются значения параметра аппроксимации $\sigma = 1$ и $\sigma = 1/2$. Начальные данные и параметры химической кинетики для задач взяты из работы [19].

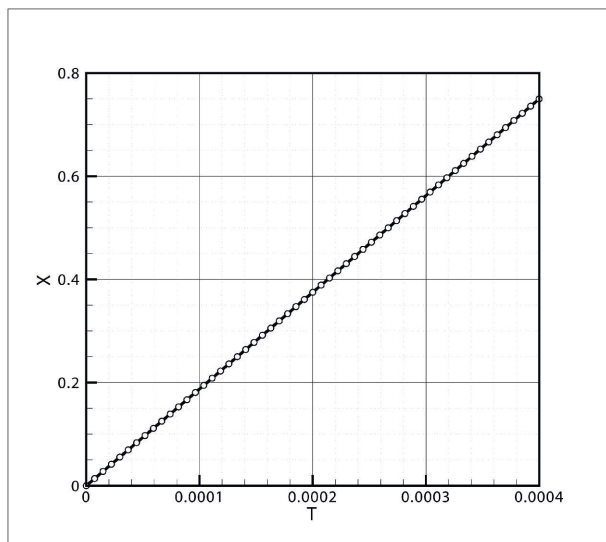
Начальные данные в задаче 1, 2

Задача	Подобласть	p , Па	T , К	ρ , кг/м ³	u , м/с
1	Инициализация	10×10^5	1500	2.325	0
	Фон	1×10^5	293	1.191	0
2	Инициализация	150×10^5	15000	0.323	0
	Фон	1×10^5	293	0.862	0

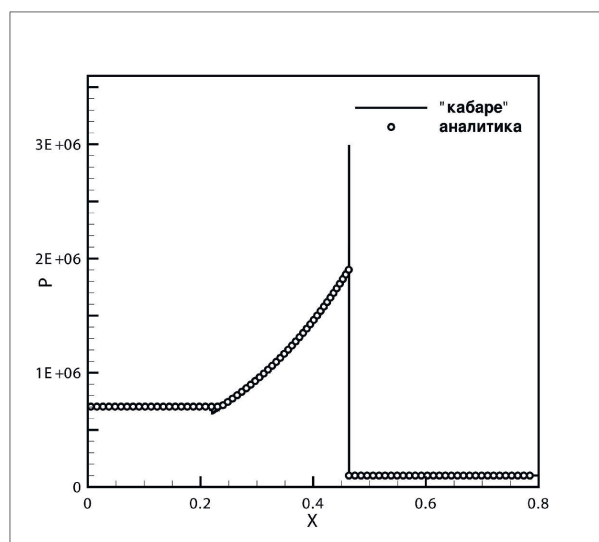
Таблица 2

Таблица 3
Свойства горючей смеси

Задача	1	2
γ	1.25	1.17
μ , кг/моль	0.029	0.021
A , м ³ /(кг с)	10^9	6.85×10^9
Q , Дж/кг	2.94×10^6	5.02×10^6
T_a , К	8543.9	13598.0
C_v , Дж/кг	1146.8	2327.7



а)



б)

Рис. 1. Зависимость положения фронта детонационной волны от времени (а). Поле давления в детонации Чепмена–Жуге на момент времени 200 мкс для расчета со вторым порядком аппроксимации правой части уравнений движения и аналитическое решение [4] (б).

Сплошная линия — эксперимент, кружки — аналитика

4.1. Детонация Чепмена–Жуге в условной ацетилено-воздушной смеси. Численный эксперимент ставится следующим образом. В начальный момент времени для инициации детонации в подобласти $[0, 0.0005]$ задаются повышенное давление и температура, в остальной части расчетной области задаются фоновые параметры горючей смеси. Начальные данные и свойства газовой смеси и химической кинетики приведены в табл. 2 и 3 соответственно.

В ходе эксперимента начальный скачок давления и температуры приводит к возникновению пересжа-

той волны детонации, которая через короткое время переходит в устойчивый режим детонации Чепмена–Жуге. Скорость развившейся детонационной волны выходит на аналитическое значение $D = 1874.66$ м/с, что показано на рис. 1а, где сопоставлены экспериментальная и аналитическая зависимость положения фронта детонационной волны от времени. Полученное решение имеет все характерные элементы детонационной волны: разрыв на фронте, химический пик и волну разрежения. На рис. 1б решение по схеме “кабаре” сопоставлено с аналитическим видом детонационной волны [4].

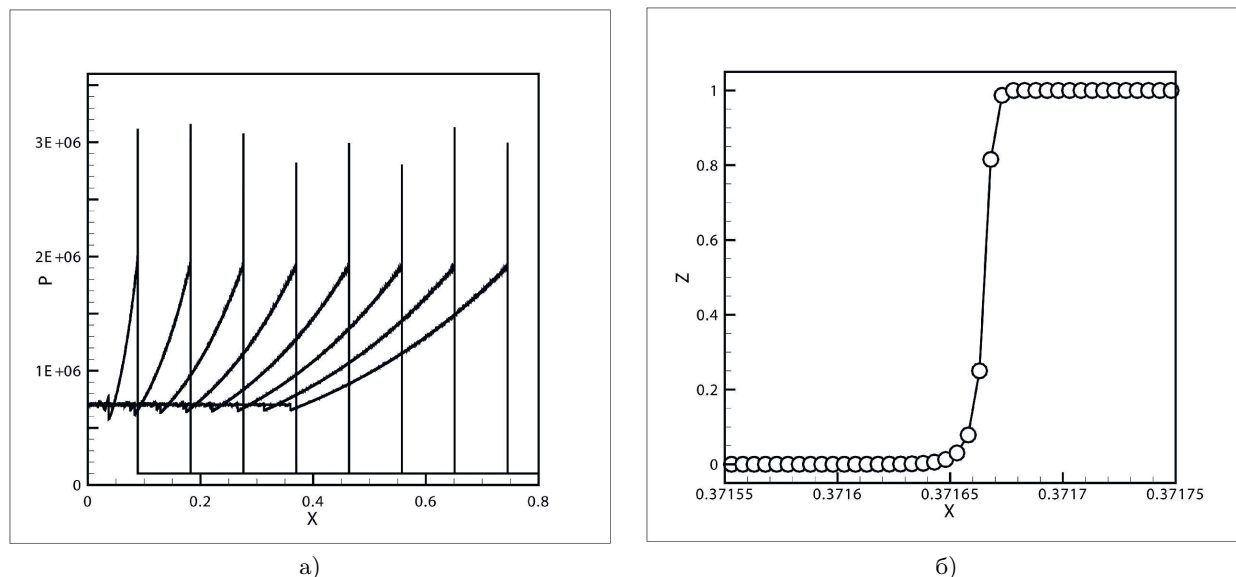


Рис. 2. Поле давления в детонации Чепмена–Жуге на моменты времени 50, 100, 150, 200, 250, 300 мкс (а). Поле концентрации горючей смеси на момент времени 200 мкс (б)

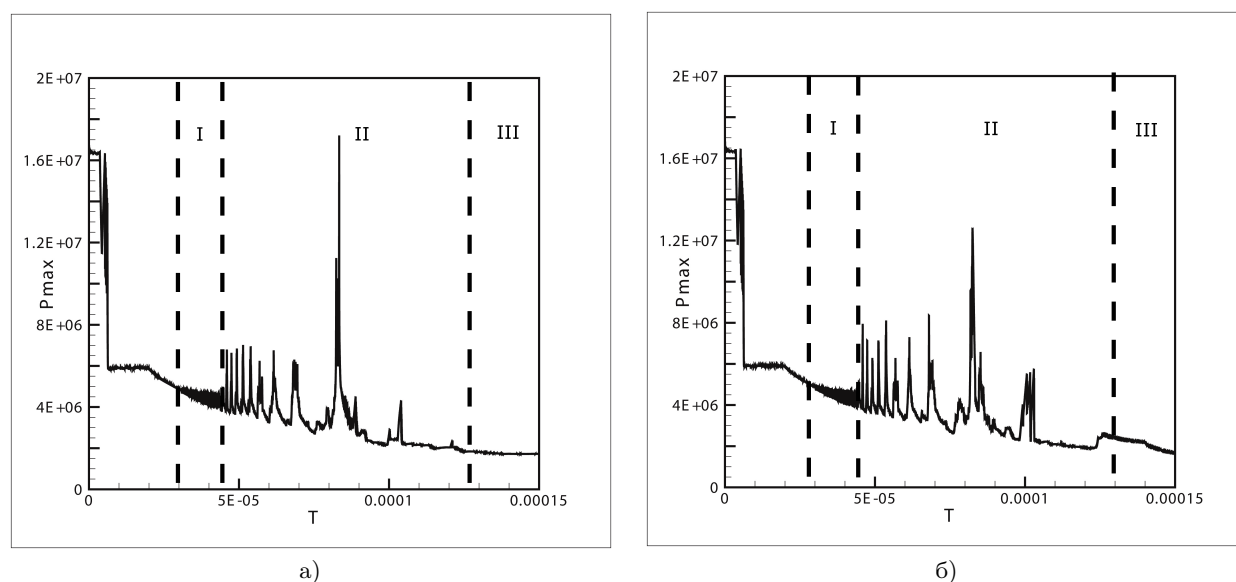


Рис. 3. Зависимость пикового давления от времени для расчетов пульсирующей детонации с: а) первым, б) вторым порядком аппроксимации правых частей

На рис. 2а представлены картины давления на моменты времени 50, 100, 150, 200, 250, 300 мкс, из которых видно, что детонационная волна сохраняет устойчивость, ее форма автомодельна. На используемой расчетной сетке область химической реакции разрешается семью расчетными ячейками, что продемонстрировано полем концентрации горючей смеси на момент времени 300 мкс на рис. 2б. Рисунки в данном разделе приведены для расчетов по схеме со вторым порядком аппроксимации правых частей уравнений движения. Результаты расчетов, проведенных с использованием первого порядка аппроксимации, не имеют существенных отличий от приведенных здесь.

4.2. Неустойчивая детонация в условной водородно-воздушной смеси. В начальный момент времени для инициации детонации в подобласти $[0, 0.01]$ задаются повышенные давление и температура, в остальной части расчетной области задаются фоновые параметры горючей смеси. На левой и правой гранях расчетной области задаются условия непроницаемой стенки. Точные физические параметры в начальный момент времени и свойства горючей смеси приведены в табл. 2 и 3 соответственно. В ходе проведенного эксперимента возникает эффект пульсирующей детонации (рис. 3), проходящей следующие фазы: регулярный высокочастотный режим (область I), нерегулярный режим, состоящий из серии пиков (область II), затухание (область III). Варьирование порядка аппроксимации правых частей уравнений движения качественно не влияет на картину течения: без существенного изменения остались начало и окончание фазы высокочастотных пульсаций давления, в нерегулярной фазе сохраняется количество пиков давления. Последний всплеск давления происходит для двух расчетов практически одновременно.

5. Заключение. В настоящей статье предложен неявный численный алгоритм для расчета задач одномерной газовой динамики с необратимой одностадийной реакцией, описывающей горение. Приведено численное решение задач об устойчивой и неустойчивой одномерной детонации. Моделирование осуществлялось при помощи модификаций алгоритма первого и второго порядка точности. Для задачи об устойчивой детонации получен режим детонации Чепмена–Жуге с характерным автомодельным профилем течения, скорость детонационной волны с высокой точностью совпадает с аналитической оценкой. В задаче о неустойчивом детонационном течении получен режим пульсирующей детонации. Варьирование порядка аппроксимации правых частей уравнений движения не оказывает качественного и существенного количественного влияния на решение исследуемых задач.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 16–31–00401).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Chapman D.L.* On the rate of explosion in gases // *Philos. Mag.* 1899. **47**. 90–104.
2. *Jouguet E.* On the propagation of chemical reactions in gases // *J. de Mathematiques Pures et Appliquees.* 1905. **1**. 347–425.
3. *Jouguet E.* *Mécanique des explosifs.* Paris: Octave Doin et Fils, 1917.
4. *Райзер Ю.П.* Введение в гидрогазодинамику и теорию ударных волн для физиков. Долгопрудный: Интеллект, 2011.
5. *Зельдович Я.Б.* К теории распространения детонации в газообразных системах // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* 1940. **10**, № 5. 542–568.
6. *von Neumann J.* *Collected works.* Vol. 6. New York: Pergamon Press, 1963.
7. *Döring W.* On detonation processes in gases // *Ann. Phys.* 1943. **43**. 421–436.
8. *Erpenbeck J.J.* Stability of steady-state equilibrium detonations // *Physics of Fluids.* 1962. **5**, N 5. 604–614.
9. *Щелкин К.И.* Неустойчивость горения и детонации газов // *Успехи физических наук.* 1965. **87**, № 2. 273–302.
10. *Fickett W., Wood W.W.* Flow calculations for pulsating one-dimensional detonations // *Physics of Fluids.* 1966. **9**, N 5. 903–916.
11. *Bourlioux A., Majda A.J., Roytburd V.* Theoretical and numerical structure for unstable one-dimensional detonations // *SIAM Journal of Applied Mathematics.* 1991. **51**, N 2. 303–343.
12. *Lee H.I., Stewart D.S.* Calculation of linear detonation instability: one-dimensional instability of plane detonation // *Journal of Fluid Mechanics.* 1990. **216**. 103–132.
13. *Clavin P., He L.* Stability and nonlinear dynamics of one-dimensional overdriven detonations in gases // *Journal of Fluid Mechanics.* 1996. **306**. 353–378.
14. *Henrick A.K., Aslam T.D., Powers J.M.* Simulations of pulsating one-dimensional detonations with true fifth order accuracy // *Journal of Computational Physics.* 2006. **213**, N 1. 311–329.
15. *Quirk J.J.* Godunov-type schemes applied to detonation flows // *Combustion in High-Speed Flows.* Vol. 1. Dordrecht: Springer, 1994. 575–596.
16. *Papalexandris M.V., Leonard A., Dimotakis P.E.* Unsplit algorithms for multidimensional systems of hyperbolic conservation laws with source terms // *Computers and Mathematics with Applications.* 2002. **44**, N 1–2. 25–49.
17. *Hwang P., Fedkiw R.P., Merriman B., et al.* Numerical resolution of pulsating detonation waves // *Combustion Theory and Modeling.* 2000. **4**, N 3. 217–240.
18. *Cole L.K., Karagozian A.R., Cambier J.-L.* Stability of flame-shock coupling in detonation waves: 1D dynamics // *Combustion Science and Technology.* 2012. **184**, N 10–11. 1502–1525.
19. *Лопато А.И., Уткин П.С.* Математическое моделирование пульсирующей волны детонации с использованием ENO-схем различных порядков аппроксимации // *Компьютерные исследования и моделирование.* 2014. **6**, № 5. 643–653.
20. *Лопато А.И., Уткин П.С.* О двух подходах к математическому моделированию детонационной волны // *Математическое моделирование.* 2016. **28**, № 2. 133–145.

21. Головизнин В.М., Самарский А.А. Некоторые свойства разностной схемы “Кабаре” // Математическое моделирование. 1998. **10**, № 1. 101–116.
22. Головизнин В.М., Карабасов С.А. Нелинейная коррекция схемы Кабаре // Математическое моделирование. 1998. **10**, № 12. 107–123.
23. Головизнин В.М., Карабасов С.А., Кобринский И.М. Балансно-характеристические схемы с разделенными консервативными и потоковыми переменными // Математическое моделирование. 2003. **15**, № 9. 29–48.
24. Головизнин В.М. Балансно-характеристический метод численного решения одномерных уравнений газовой динамики в эйлеровых переменных // Математическое моделирование. 2006. **18**, № 11. 14–30.
25. Karabasov S.A., Goloviznin V.M. Compact accurately boundary-adjusting high-resolution technique for fluid dynamics // J. Comput. Phys. 2009. **228**, N 19. 7426–7451.
26. Кондаков В.Г. Обобщение схемы КАБАРЕ на многомерные уравнения задач газовой динамики. Канд. дис. М.: МГУ, 2014.
27. Данилин А.В., Соловьев А.В. Модификация схемы “кабаре” для расчета течения многокомпонентных газовых смесей // Вычислительные методы и программирование. 2015. **16**. 18–25.
28. Данилин А.В., Соловьев А.В., Зайцев А.М. Модификация схемы “кабаре” для численного моделирования течений многокомпонентных газовых смесей в двумерных областях // Вычислительные методы и программирование. 2015. **16**. 436–445.
29. Головизнин В.М., Соловьев А.В., Исаков В.А. Аппроксимационный алгоритм обработки звуковых точек в схеме “кабаре” // Вычислительные методы и программирование. 2016. **17**. 166–176.

Поступила в редакцию
18.11.2016

A Modification of the CABARET Scheme for Numerical Simulation of One-Dimensional Detonation Flows Using a One-Stage Irreversible Model of Chemical Kinetics

A. V. Danilin¹, A. V. Solovjev², and A. M. Zaitsev³

¹ Nuclear Safety Institute, Russian Academy of Sciences; ulitsa Bol'shaya Tul'skaya 52, Moscow, 115191, Russia; Junior Scientist, e-mail: adanilin@ibrae.ac.ru

² Nuclear Safety Institute, Russian Academy of Sciences; ulitsa Bol'shaya Tul'skaya 52, Moscow, 115191, Russia; Ph.D., Leading Scientist, e-mail: solovjev@ibrae.ac.ru

³ Nuclear Safety Institute, Russian Academy of Sciences; ulitsa Bol'shaya Tul'skaya 52, Moscow, 115191, Russia; Junior Scientist, e-mail: azai@ibrae.ac.ru

Received November 18, 2016

Abstract: An algorithm for numerical simulation of one-dimensional detonation using a one-stage irreversible model of chemical kinetics is proposed. The discretization of the convective parts of governing equations is made in accordance with the balance-characteristic CABARET (Compact Accurately Boundary Adjusting-REsolution Technique) approach. The approximation of source terms is performed implicitly without splitting into physical processes with a regulated order of approximation. It is shown that the numerically obtained Chapman-Jouget detonation parameters are in exact agreement with the analytical solution. It is also shown that, in the case of unstable detonation, the numerical results are dependent on the order of approximation chosen for the right-hand sides of the governing equations.

Keywords: one-velocity multicomponent medium, systems of hyperbolic equations, CABARET scheme, computational fluid dynamics (CFD), conservative methods, detonation, Arrhenius reaction.

References

1. D. L. Chapman, “On the Rate of Explosion in Gases,” *Philos. Mag.* **47**, 90–104 (1899).
2. E. Jouguet, “On the Propagation of Chemical Reactions in Gases,” *J. Math. Pures Appl.* **1**, 347–425 (1905).
3. E. Jouguet, *Mécanique des Explosifs* (Octave Doin, Paris, 1917).
4. Yu. P. Raizer, *Introduction to Hydrogasdynamics and the Theory of Shock Waves for Physicists* (Intellekt, Dolgoprudnyi, 2011) [in Russian].

5. Ya. B. Zeldovich, "To the Theory of Detonation Propagation in Gaseous Systems," *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **10** (5), 542–568 (1940).
6. J. von Neumann, *Collected Works*, Vol. 6 (Pergamon, New York, 1963).
7. W. Döring, "On Detonation Processes in Gases," *Ann. Phys.* **43**, 421–436 (1943).
8. J. J. Erpenbeck, "Stability of Steady-State Equilibrium Detonations," *Phys. Fluids* **5** (5), 604–614 (1962).
9. K. I. Shchelkin, "Instability of Combustion and Detonation of Gases," *Usp. Fiz. Nauk* **87** (2), 273–302 (1965) [*Sov. Phys. Usp.* **8** (5), 780–797 (1966)].
10. W. Fickett and W. W. Wood, "Flow Calculations for Pulsating One-Dimensional Detonations," *Phys. Fluids* **9** (5), 903–916 (1966).
11. A. Bourlioux, A. J. Majda, and V. Roytburd, "Theoretical and Numerical Structure for Unstable One-Dimensional Detonations," *SIAM J. Appl. Math.* **51** (2), 303–343 (1991).
12. H. I. Lee and D. S. Stewart, "Calculation of Linear Detonation Instability: One-Dimensional Instability of Plane Detonation," *J. Fluid Mech.* **216**, 103–132 (1990).
13. P. Clavin and L. He, "Stability and Nonlinear Dynamics of One-Dimensional Overdriven Detonations in Gases," *J. Fluid Mech.* **306**, 353–378 (1996).
14. A. K. Henrick, T. D. Aslam, and J. M. Powers, "Simulations of Pulsating One-Dimensional Detonations with True Fifth Order Accuracy," *J. Comput. Phys.* **213** (1), 311–329 (2006).
15. J. J. Quirk, "Godunov-Type Schemes Applied to Detonation Flows," in *Combustion in High-Speed Flows* (Springer, Dordrecht, 1994), Vol. 1, pp. 575–596.
16. M. V. Papalexandris, A. Leonard, and P. E. Dimotakis, "Unsplit Algorithms for Multidimensional Systems of Hyperbolic Conservation Laws with Source Terms," *Comput. Math. Appl.* **44** (1–2), 25–49 (2002).
17. P. Hwang, R. P. Fedkiw, B. Merriman, et al., "Numerical Resolution of Pulsating Detonation Waves," *Combust. Theory Model.* **4** (3), 217–240 (2000).
18. L. K. Cole, A. R. Karagozian, and J.-L. Cambier, "Stability of Flame-Shock Coupling in Detonation Waves: 1D Dynamics," *Combust. Sci. Technol.* **184** (10–11), 1502–1525 (2012).
19. A. I. Lopato and P. S. Utkin, "Mathematical Modeling of Pulsating Detonation Wave Using ENO-Schemes of Different Approximation Orders," *Komput. Issled. Model.* **6** (5), 643–653 (2014).
20. 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)].
21. V. M. Goloviznin and A. A. Samarskii, "Some Characteristics of Finite Difference Scheme 'Cabaret'," *Mat. Model.* **10** (1), 101–116 (1998).
22. V. M. Goloviznin and S. A. Karabasov, "Nonlinear Correction of Cabaret Scheme," *Mat. Model.* **10** (12), 107–123 (1998).
23. V. M. Goloviznin, S. A. Karabasov, and I. M. Kobrinskii, "Balance-Characteristic Schemes with Separated Conservative and Flux Variables," *Mat. Model.* **15** (9), 29–48 (2003).
24. V. M. Goloviznin, "Balanced Characteristic Method for 1D Systems of Hyperbolic Conservation Laws in Eulerian Representation," *Mat. Model.* **18** (11), 14–30 (2006).
25. S. A. Karabasov and V. M. Goloviznin, "Compact Accurately Boundary-Adjusting High-Resolution Technique for Fluid Dynamics," *J. Comput. Phys.* **228** (19), 7426–7451 (2009).
26. V. G. Kondakov, *A Generalization of the 'Cabaret' Scheme to Multidimensional Equations of Gas Dynamics*, Candidate's Dissertation in Mathematics and Physics (Moscow State Univ., Moscow, 2014).
27. A. V. Danilin and A. V. Solovjev, "A Modification of the CABARET Scheme for the Computation of Multicomponent Gaseous Flows," *Vychisl. Metody Programm.* **16**, 18–25 (2015).
28. A. V. Danilin, A. V. Solovjev, and A. M. Zaitsev, "A Modification of the CABARET Scheme for Numerical Simulation of Multicomponent Gaseous Flows in Two-Dimensional Domains," *Vychisl. Metody Programm.* **16**, 436–445 (2015).
29. V. M. Goloviznin, A. V. Solovjev, and V. A. Isakov, "An Approximation Algorithm for the Treatment of Sound Points in the CABARET Scheme," *Vychisl. Metody Programm.* **17**, 166–176 (2016).