

УДК 519.634

doi 10.26089/NumMet.v18r429

## ОСОБЕННОСТИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕЧЕНИЙ С ВОЛНАМИ ДЕТОНАЦИИ НА НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ РАСЧЕТНЫХ СЕТКАХ

А. И. Лопато<sup>1</sup>, П. С. Уткин<sup>2</sup>

Представлены математическая модель и вычислительный алгоритм для математического моделирования двумерных течений с волнами детонации на полностью неструктурированных расчетных сетках с треугольными ячейками. Рассмотрена задача о формировании ячеистой детонации в плоском канале для случая устойчивой детонации при различном сеточном разрешении и с использованием схем первого и второго порядков аппроксимации.

**Ключевые слова:** математическое моделирование, детонационная волна, неструктурированные сетки с треугольными расчетными ячейками, детонационная ячейка.

**1. Введение.** Математическое моделирование двумерных течений с волнами детонации (сверхзвуковыми волнами горения) в результате решения уравнений Эйлера для невязкого газа, дополненных моделью кинетики химических реакций, берет свое начало в конце 1970-х годов [1, 2]. С тех пор с развитием численных методов решений задач газовой динамики, совершенствованием кинетических схем и ростом доступных вычислительных мощностей происходило постоянное уточнение качественных (например, получение трехмерного спинового режима распространения, тонкой структуры ячеистой детонации) и количественных (например, детонационные пределы) характеристик процесса. Можно согласиться с работой [3], в которой текущее понимание механизмов распространения детонационной волны (ДВ) ставится в прямую зависимость от максимальной достигнутой на данный момент производительности вычислительной техники. В то же время, развитие вычислительных мощностей и, как следствие, возможности проводить расчеты со все более и более детальным пространственно-временным разрешением выявили ряд необычных эффектов при моделировании детонации, полного объяснения которым нет до сих пор. К их числу относится возможное затухание детонации для параметров кинетики, близких к углеводородным топливам, в двумерных расчетах длительного распространения ДВ в плоском канале [4]. Таким образом, несмотря на, казалось бы, почти сорокалетнюю историю расчетных работ в области детонации, остается еще ряд фундаментальных вопросов математического моделирования ДВ.

Отдельным вопросом является исследование проблем инициирования и распространения волн детонации в областях сложной формы. Эти задачи возникают в большом количестве при исследовании проблем взрывобезопасности, разработки перспективных силовых установок и энергетических систем [5–7]. В контексте представленного в настоящей статье исследования интерес представляют вычислительные технологии, которые используют авторы в подобных расчетах. Так, в [4, 6] для проведения трехмерных расчетов инициирования и распространения ДВ в областях сложной формы используются блочно-структурированные сетки, классическая схема Годунова первого порядка аппроксимации (ПА) [6] или ее модификация с использованием некоторых интерполяционных схем для повышения ПА [4]. В то же время, применительно к задачам газовой динамики химически инертных сред к настоящему времени значительно развит аппарат схем высокого ПА на полностью неструктурированных расчетных сетках, включая ударно-волновые проблемы, см. наиболее известную работу [8]. Анализ публикаций по вопросу применения подобных подходов при исследовании высокоскоростных течений с химическими реакциями дает крайне незначительное число работ [9–11], причем в [10, 11] применяется конечно-элементный подход. Наиболее вероятной причиной является тот факт, что хотя интегрирование уравнений газовой динамики является ключевым элементом вычислительного алгоритма расчета высокоскоростных течений с химическими реакциями, наличие сильно нелинейных источников в правых частях уравнений существенно сужает возможности использования многих численных методов, которые успешно справляются с задачами газовой динамики инертных сред. Этот тезис будет проиллюстрирован в настоящей работе.

<sup>1</sup> Институт автоматизации проектирования РАН, ул. 2-ая Брестская, д. 19/18, 123056, г. Москва; мл. науч. сотр., e-mail: lopato2008@mail.ru

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

Целью работы является разработка вычислительного алгоритма повышенного ПА на полностью неструктурированной расчетной сетке для расчета двумерных течений с волнами детонации, пригодного для моделирования течений в областях произвольной формы, и его тестирование при решении канонической задачи о формировании ячеистой структуры ДВ. Представленная здесь статья является продолжением и развитием предыдущего исследования [12], в котором изучаются особенности распространения пульсирующей ДВ в модельных ацетилено- и водородно-воздушных смесях в одномерной постановке с использованием ENO-схем (Essentially NonOscillatory schemes) с первого по четвертый ПА включительно.

**2. Постановка задачи и математическая модель.** Рассматривается задача инициирования и распространения ДВ в плоском канале шириной  $H$  и длиной  $L$  с жесткими непроницаемыми стенками. Детонация инициируется в результате мгновенного выделения энергии в области длиной  $l$ , примыкающей к левой стенке канала. В начальный момент времени канал заполнен покоящимся реагирующим газом с давлением  $p_a$  и плотностью  $\rho_a$ , в области инициирования задаются параметры  $p_i$  и  $\rho_i$ .

Математическая модель основывается на двумерной системе уравнений Эйлера, записанной в декартовой системе координат  $(x, y)$  в векторной дивергентной форме, дополненной глобальной моделью кинетики химических реакций:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = \mathbf{S},$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ e \\ \rho Z \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (e + p)u \\ \rho Zu \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho vu \\ \rho v^2 + p \\ (e + p)v \\ \rho Zv \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\rho Q\omega \\ \rho\omega \end{bmatrix}, \quad (1)$$

$$e = \frac{\rho \mathbf{w}^2}{2} + \rho\epsilon, \quad \epsilon = \frac{p}{\rho(\gamma - 1)}, \quad \omega = -AZ \exp\left(-\frac{E\rho}{p}\right).$$

Здесь  $t$  – время,  $\rho$  – плотность газа,  $\mathbf{w}$  – вектор скорости газа с компонентами  $u$  и  $v$ ,  $p$  – давление,  $\epsilon$  – внутренняя удельная энергия газа,  $e$  – полная энергия газа на единицу объема,  $Q$  – тепловой эффект химической реакции,  $Z$  – массовая доля реагирующего компонента смеси,  $\omega$  – скорость изменения  $Z$ ,  $A$  – предэкспоненциальный множитель,  $E$  – энергия активации. Газ подчиняется уравнению состояния идеального газа с показателем адиабаты  $\gamma$ .

Данная определяющая система уравнений записана в безразмерном виде [13], где в качестве характерных масштабов плотности и давления использованы параметры  $\rho_{\text{ref}} = \rho_a$  и  $p_{\text{ref}} = p_a$  перед фронтом ДВ, в качестве масштаба скорости –  $w_{\text{ref}} = \sqrt{\frac{p_a}{\rho_a}}$ . Тепловой эффект масштабируется на величину  $w_{\text{ref}}^2$ , энергия активации – на  $\mu w_{\text{ref}}^2$ , где  $\mu$  – молярная масса смеси. Масштаб длины обозначается через  $l_{1/2}$  (длина “полупревращения”) и выбирается равным расстоянию за фронтом ДВ, на котором массовая доля реагента уменьшается до 1/2 в решении Зельдовича–Неймана–Деринга (ЗНД) [14]. При использовании описанных безразмерных переменных выражение для  $A$  приобретает вид

$$A = \int_{1/2}^1 \frac{w_0(Z) - D_{CJ}}{Z \exp(-E\rho_0(Z)/p_0(Z))} dZ,$$

где  $D_{CJ}$  – скорость детонации Чепмена–Жуге (ЧЖ), а  $w_0(Z)$ ,  $\rho_0(Z)$  и  $p_0(Z)$  – распределения скорости, плотности и давления, соответствующие решению ЗНД [15]:

$$w_0(Z) = \frac{1}{\gamma + 1} \frac{D_{CJ}^2 - \gamma}{D_{CJ}} (1 + \sqrt{Z}),$$

$$\rho_0(Z) = \left( \frac{\gamma}{\gamma + 1} \frac{D_{CJ}^2 + 1}{D_{CJ}^2} \left[ 1 - \frac{D_{CJ}^2 - \gamma}{\gamma(D_{CJ}^2 + 1)} \sqrt{Z} \right] \right)^{-1}, \quad p_0(Z) = \frac{D_{CJ}^2 + 1}{\gamma + 1} \left[ 1 + \frac{D_{CJ}^2 - \gamma}{D_{CJ}^2 + 1} \sqrt{Z} \right].$$

В выбранных единицах физико-химические свойства реагирующей смеси полностью определяются заданием трех безразмерных параметров  $\gamma$ ,  $Q$  и  $E$ , что делает описанный подход привлекательным для

теоретических исследований различных режимов распространения ДВ. Например, при задании параметров  $\gamma = 1.2$  и  $Q = 50$  при  $E = 25$  получаем устойчивую ДВ (в том смысле, что решение ЗНД оказывается устойчивым в линейном приближении), при  $E = 26$  — слабо неустойчивую, при  $E = 28$  — нерегулярную, при  $E = 35$  — сильно неустойчивую [13, 16, 17]. Далее в работе будет рассмотрен случай устойчивой ДВ.

**3. Вычислительный алгоритм.** Основной особенностью численной методики является использование полностью неструктурированных расчетных сеток с треугольными ячейками. Для построения сеток использовалась триангуляция Делоне расчетной области, основанная на расстановке узлов расчетной сетки таким образом, чтобы выполнялось условие Делоне. Условие Делоне заключается в том, что внутрь окружности, описанной вокруг любого построенного треугольника, не должен попадать ни один из узлов. Сеточное разрешение определяется количеством узлов, приходящимся на длину “полупревращения”  $l_{1/2}$ . Все треугольники расчетной сетки нумеруются сквозным образом.

Вычислительный алгоритм основан на принципе расщепления по физическим процессам [18]. При переходе с одного временного слоя на другой сначала интегрируются уравнения газовой динамики без учета протекания химических реакций ( $S = 0$ ). Таким образом выполняется первый этап процедуры расщепления, а затем рассчитывается вклад химических реакций без учета конвекции (второй этап расщепления).

Рассмотрим первый этап алгоритма. Выполним дискретизацию пространственной части системы (1) методом конечных объемов:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \equiv \mathbf{L}(\mathbf{U}) = -\frac{1}{S_k} \sum_{\sigma=1}^3 (\mathbf{F}_{k,\sigma} l_{k,\sigma}). \quad (2)$$

Здесь пространственный индекс  $k$  соответствует номеру рассчитываемой ячейки площади  $S_k$ , суммирование ведется по всем ребрам  $\sigma$  ячейки  $k$ ,  $l_{k,\sigma}$  — длина ребра с индексом  $\sigma$ ,  $\mathbf{F}_{k,\sigma}$  — вектор численного потока через ребро  $\sigma$  в направлении внешней к ребру единичной нормали  $\mathbf{n}_{k,\sigma} = (n_{k,\sigma_x}, n_{k,\sigma_y})$ .

В дальнейшем при записи формул расчета потока  $\mathbf{F}_{k,\sigma}$  в направлении нормали  $\mathbf{n}_{k,\sigma}$  будем опускать индекс  $k$ , имея в виду, что речь идет о потоке через ребро  $\sigma$  ячейки  $k$ . Для расчета потока

$$\mathbf{F}_\sigma = \mathbf{F}_\sigma(\mathbf{U}_k^n, \mathbf{U}_{k,\sigma}^n) \equiv \mathbf{F}(\mathbf{U}^L, \mathbf{U}^R) \quad (3)$$

перейдем из исходной, глобальной системы координат  $(x, y)$  в локальную, связанную с внешней нормалью  $\mathbf{n}_\sigma$  к ребру  $\sigma$  и с касательным вектором  $\boldsymbol{\tau}_\sigma = (-n_{\sigma_y}, n_{\sigma_x})$ . Через  $\mathbf{U}_{k,\sigma}^n$  обозначен вектор консервативных переменных в ячейке, соседствующей с ячейкой  $k$  по ребру  $\sigma$ . При этом вектора консервативных переменных слева и справа от ребра  $\sigma$  преобразуются следующим образом:

$$\mathbf{U}_{\mathbf{n}_\sigma}^L = T_{\mathbf{n}_\sigma} \mathbf{U}^L, \quad \mathbf{U}_{\mathbf{n}_\sigma}^R = T_{\mathbf{n}_\sigma} \mathbf{U}^R. \quad (4)$$

Здесь матрица перехода  $T_{\mathbf{n}_\sigma}$  имеет вид (выпишем также матрицу  $T_{\mathbf{n}_\sigma}^{-1}$ , требующуюся для дальнейшего изложения):

$$T_{\mathbf{n}_\sigma} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_{\sigma_x} & n_{\sigma_y} & 0 & 0 \\ 0 & -n_{\sigma_y} & n_{\sigma_x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad T_{\mathbf{n}_\sigma}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_{\sigma_x} & -n_{\sigma_y} & 0 & 0 \\ 0 & n_{\sigma_y} & n_{\sigma_x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

В рамках нашей работы поток в локальной системе координат рассчитывается методом AUSM (Advection Upstream Splitting Method) [19], расширенным для случая двухкомпонентной смеси:

$$\mathbf{F}_{\mathbf{n}_\sigma} = \mathbf{F}_{\text{AUSM}}(\mathbf{U}_{\mathbf{n}_\sigma}^L, \mathbf{U}_{\mathbf{n}_\sigma}^R) = \frac{1}{2} M_{1/2} \left( \begin{bmatrix} \rho c \\ \rho u c \\ \rho v c \\ \rho H c \\ \rho Z \end{bmatrix}_L + \begin{bmatrix} \rho c \\ \rho u c \\ \rho v c \\ \rho H c \\ \rho Z \end{bmatrix}_R \right) + \frac{1}{2} |M_{1/2}| \left( \begin{bmatrix} \rho c \\ \rho u c \\ \rho v c \\ \rho H c \\ \rho Z \end{bmatrix}_L - \begin{bmatrix} \rho c \\ \rho u c \\ \rho v c \\ \rho H c \\ \rho Z \end{bmatrix}_R \right) + \begin{bmatrix} 0 \\ p_{1/2} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$M_{1/2} = M_L^+ + M_R^-, \quad p_{1/2} = p_L^+ + p_R^-, \quad M_L = u_L/c_L, \quad M_R = u_R/c_R,$$

$$M_L^+ = \begin{cases} \frac{1}{4}(M_L + 1)^2, & \text{если } M_L \leq 1, \\ \frac{1}{2}(M_L + |M_L|), & \text{если } M_L > 1, \end{cases}$$

$$M_R^- = \begin{cases} -\frac{1}{4}(M_R - 1)^2, & \text{если } M_R \leq 1, \\ \frac{1}{2}(M_R - |M_R|), & \text{если } M_R > 1, \end{cases}$$

$$p_L^+ = \begin{cases} \frac{1}{4}p_L(M_L + 1)^2(2 - M_L), & \text{если } M_L \leq 1, \\ \frac{1}{2}p_L \frac{M_L + |M_L|}{M_L}, & \text{если } M_L > 1, \end{cases}$$

$$p_R^- = \begin{cases} \frac{1}{4}p_R(M_R - 1)^2(2 + M_R), & \text{если } M_R \leq 1, \\ \frac{1}{2}p_R \frac{M_R - |M_R|}{M_R}, & \text{если } M_R > 1. \end{cases}$$

Здесь  $H = e + p$  — энтальпия единицы объема газа,  $c$  — скорость звука. Наконец, для нахождения потока в исходной глобальной системе координат выполним обратное преобразование

$$F_\sigma = T_{n_\sigma}^{-1} F_{n_\sigma}. \quad (5)$$

То, что выражение (5) в конечном итоге действительно определяет численный поток в исходной глобальной системе координат, следует из известного свойства инвариантности уравнений Эйлера относительно преобразования поворота (см., например, [18]).

Описанный выше алгоритм характеризуется первым ПА по пространственным переменным. Для повышения ПА используется следующая реконструкция сеточных функций [20]. Для векторов консервативных переменных

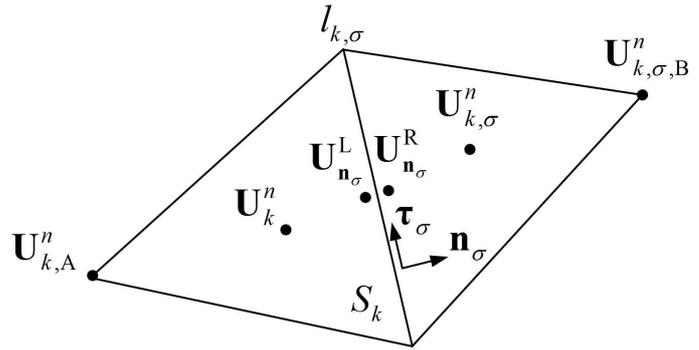


Рис. 1. К процедуре восполнения сеточных функций

Для повышения ПА используется следующая реконструкция сеточных функций [20]. Для векторов консервативных переменных

- в рассчитываемом треугольнике  $k$ ;
- в соседнем с ним по ребру  $\sigma$  треугольнике  $k, \sigma$ ;
- в треугольниках, имеющих с треугольником  $k$  общую вершину, противоположную ребру  $\sigma$  (обозначим множество этих треугольников, включая треугольник  $k$ , через  $C_A$ );
- в треугольниках, имеющих с треугольником  $k, \sigma$  общую вершину, противоположную ребру  $\sigma$  (обозначим множество этих треугольников, включая треугольник  $k, \sigma$ , через  $C_B$ )

осуществим переход в локальную систему координат по формуле (4). Численный поток  $F_{n_\sigma}$  в локальной системе координат рассчитывается по следующим параметрам слева и справа от разрыва (рис. 1):

$$\begin{aligned} U_{n_\sigma}^L &= T_{n_\sigma} U_k^n + \frac{1}{2} \Psi(T_{n_\sigma} U_k^n - T_{n_\sigma} U_{k,A}^n, T_{n_\sigma} U_{k,\sigma}^n - T_{n_\sigma} U_k^n), \\ U_{n_\sigma}^R &= T_{n_\sigma} U_{k,\sigma}^n - \frac{1}{2} \Psi(T_{n_\sigma} U_{k,\sigma}^n - T_{n_\sigma} U_k^n, T_{n_\sigma} U_{k,\sigma,B}^n - T_{n_\sigma} U_{k,\sigma}^n), \\ U_{k,A}^n &= \frac{1}{|C_A|} \sum_{i \in C_A} U_i^n, \quad U_{k,\sigma,B}^n = \frac{1}{|C_B|} \sum_{i \in C_B} U_i^n. \end{aligned} \quad (6)$$

В качестве ограничителя  $\Psi$  были рассмотрены ограничитель  $\text{minmod}$  [21] и ограничитель ван Лиры [22]:

$$\Psi_{\text{minmod}}(a, b) = \frac{1}{2} \text{sign}(a + b) \min(|a|, |b|), \quad \Psi_{\text{vanLeer}}(a, b) = (\text{sign}(a) + \text{sign}(b)) \frac{|ab|}{|a| + |b| + \epsilon}. \quad (7)$$

В случае, когда аргументы функции-ограничителя являются векторами, как в (6), ограничитель применяется покомпонентно. В расчетах с ограничителем ван Лиры малый параметр в знаменателе (7) брался равным  $\epsilon = 10^{-5}$ .

В настоящей статье рассматривается применение вычислительных алгоритмов как первого (используется условие (4)), так и второго ПА (используется условие (6)). В первом случае аппроксимация временной части системы (2) осуществляется по явной схеме Эйлера первого ПА:

$$\frac{\partial U}{\partial t} \approx \frac{\tilde{U}_k^{n+1} - U_k^n}{\tau^n}. \quad (8)$$

Во втором случае используется явный метод Рунге–Кутты второго ПА [23]:

$$\begin{cases} \mathbf{U}_k^{(1)} = \mathbf{U}_k^n + \tau^n \cdot \mathbf{L}_k(\mathbf{U}^n), \\ \tilde{\mathbf{U}}_k^{n+1} = \frac{1}{2}\mathbf{U}_k^n + \frac{1}{2}\mathbf{U}_k^{(1)} + \frac{1}{2}\tau^n \cdot \mathbf{L}_k(\mathbf{U}^{(1)}). \end{cases} \quad (9)$$

Верхняя тильда обозначает, что найденное решение является результатом первого этапа процедуры расщепления. Шаг интегрирования по времени  $\tau^n$  выбирается из условия устойчивости [24]:

$$\tau^n = \text{CFL} \cdot \min_k \left( \frac{S_k}{\sum_{\sigma=1}^3 [l_{k,\sigma} A_{k,\sigma}]} \right), \quad A_{k,\sigma} = |u_k n_{k,\sigma_x} + v_k n_{k,\sigma_y}| + c_k,$$

где CFL (Courant–Friedrichs–Lewy) — коэффициент запаса, лежащий в пределах от 0 до 1.

В соответствии с постановкой задачи на всех границах выставляется условие непротекания. С точки зрения реализации при расчете численного потока через граничное ребро треугольника в рассмотрение вводится фиктивный треугольник, лежащий вне расчетной области. Пусть в качестве примера на рис. 1 треугольник с индексом  $k$  является рассчитываемым, а с индексом  $k, \sigma$  — фиктивным. Тогда при расчете потока через граничное ребро  $\sigma$  для схем и первого, и второго ПА вектор  $\mathbf{U}_{n_\sigma}^R$  полагается равным

$$\mathbf{U}_{n_\sigma}^R(i) = \mathbf{U}_{n_\sigma}^L(i), \quad i = 1, 3, 4, 5, \quad \mathbf{U}_{n_\sigma}^R(2) = -\mathbf{U}_{n_\sigma}^L(2),$$

где  $i$  — номер компоненты вектора. На этом заканчивается описание первого, “газодинамического” этапа вычислительного алгоритма.

Второй этап вычислительного алгоритма предполагает решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающей протекание химических реакций, в каждой ячейке  $k$  расчетной сетки:

$$\frac{dZ_k}{dt} = \omega_k = -AZ_k \exp\left(-\frac{E\rho_k}{p_k}\right), \quad \frac{d}{dt}\left(\frac{p_k}{\rho_k}\right) = -(\gamma - 1)Q\omega_k. \quad (10)$$

Система (10) интегрируется от момента времени  $t_n$  до  $t_n + \tau^n$ . В качестве начального решения используется решение с предыдущего, “газодинамического” этапа. В силу известного свойства жесткости системы уравнений химической кинетики для численного интегрирования (10) используется неявный метод Эйлера с внутренним шагом интегрирования  $\tau^n/2$  и линеаризацией по Ньютону при решении получающихся систем нелинейных алгебраических уравнений с точностью  $10^{-3}$  в евклидовой норме. Как известно [18], используемая методика расщепления по физическим процессам характеризуется итоговым первым ПА по времени, если ПА дифференциальных операторов на “газодинамическом” и “химическом” этапах по крайней мере не ниже первого. Далее методику (2)–(5), (8) мы будем называть вычислительным алгоритмом первого ПА, а (2), (3), (5)–(7), (9) — алгоритмом второго ПА, имея в виду аппроксимацию по пространственным переменным.

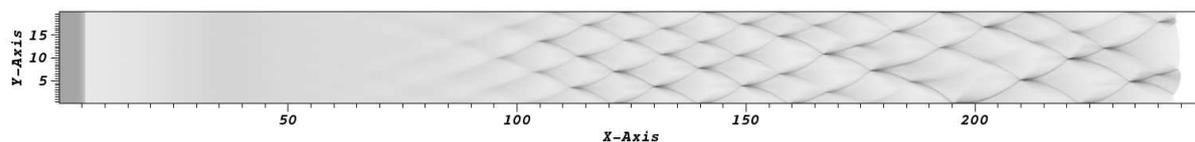
**4. Результаты вычислительных экспериментов.** Рассматривается инициирование и распространение ДВ в плоском канале шириной  $H = 20$  и длиной  $L = 250$ , заполненном покоящейся реагирующей смесью, характеризующейся параметрами  $\gamma = 1.2$ ,  $Q = 50$ ,  $E = 25$ . Все параметры безразмерные (см. раздел. 2) и соответствуют так называемому устойчивому режиму распространения ДВ. Детонация инициируется в результате мгновенного выделения энергии в короткой области длиной  $l = 6.0$ , примыкающей к левой стенке канала, на всю ширину канала. В данной области в начальный момент времени задаются повышенные по сравнению с остальной частью канала плотность  $\rho_i = 3.0$  и давление  $p_i = 60.0$ . Расчеты проводятся с использованием вычислительных алгоритмов первого и второго ПА для обоих типов ограничителей (7) на двух расчетных сетках, одну из которых условно назовем “трубой” (около 1.7 миллионов расчетных ячеек), а другую “детальной” (около 3.5 миллионов расчетных ячеек). В случае грубой сетки пространственное разрешение составляет около 10 точек на масштаб  $l_{1/2}$ , в случае детальной — около 14 точек. В [25] для аналогичной рассматриваемой модельной смеси, но с гораздо меньшей энергией активации, было показано, что для исследования влияния гидродинамических неустойчивостей Кельвина–Гельмгольца и Рихтмайера–Мешкова на формирование ячеистой детонации требуется разрешение не меньше 300 точек на  $l_{1/2}$ . Для описания процесса взаимодействия вихревых структур со скачками, приводящему к формированию вторичных структур и нерегулярных детонационных ячеек, требуется

уже 600 точек на  $l_{1/2}$ . В нашей работе не преследуется цель достигнуть подобных рекордных разрешений, внимание сосредоточено на особенностях, связанных с использованием неструктурированных расчетных сеток. Нумерация части вычислительных экспериментов, которые будут анализироваться далее, представлена в таблице. Число CFL по всех расчетах равно 0.8, если специально не оговариваются иные значения.

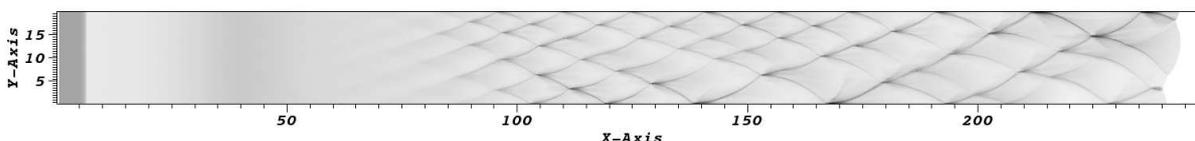
Энергии в области инициирования достаточно для формирования пересжатой плоской ДВ (см. терминологию, например, в [26]), которая начинает распространяться в канале. Для визуализации картины течения будем использовать “численные следовые отпечатки” (рис. 2). Для их построения в каждой расчетной ячейке за все время расчета запоминается максимальное давление. Визуализация осуществлялась в системе с открытым исходным кодом VisIt [27]. Подобная визуализация отвечает экспериментальной методике регистрации многомерных структур ДВ при использовании закопченной фольги или пластин, установленных на стенке канала, по которому распространяется ДВ.

Параметры вычислительных экспериментов

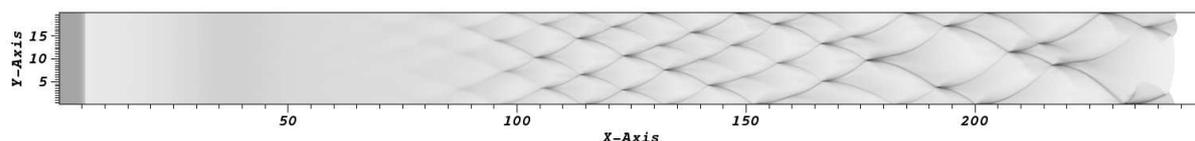
№	Порядок аппроксимации	Сеточное разрешение	Ограничитель
1	1	~ 10 узлов на $l_{1/2}$	—
2	2	~ 10 узлов на $l_{1/2}$	minmod
3	1	~ 14 узлов на $l_{1/2}$	—
4	2	~ 14 узлов на $l_{1/2}$	minmod



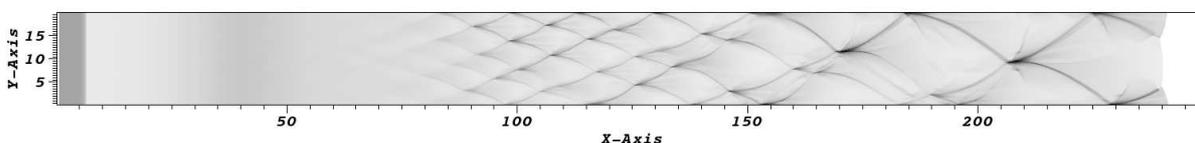
а) расчет № 1



б) расчет № 2



в) расчет № 3



г) расчет № 4

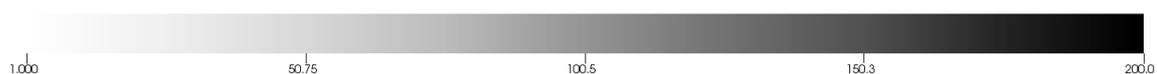


Рис. 2. “Численные следовые отпечатки” при инициировании и распространении ДВ в плоском канале

Примерно на одном и том же расстоянии от места инициирования — около 80 единиц — во всех расчетах фронт ДВ перестает быть плоским, и появляется система поперечных волн, типичная для двумерной детонации. В расчетах для появления данной структуры не используется никаких возмущающих факторов. Триггером к появлению так называемой ячеистой структуры ДВ служат погрешности машинного

счета. Несмотря на то что само появление детонационных ячеек обусловлено случайными факторами, характерный вырабатываемый поперечный масштаб ячеек определяется уже макроскопическими параметрами задачи, что типично для задач развития гидродинамической неустойчивости. Во всех расчетах поперечный размер ячейки имеет тенденцию к увеличению по мере распространения ДВ.

В расчете № 1 после того, как фронт ДВ перестает быть плоским, вырабатывается режим с тремя регулярными детонационными ячейками. По мере распространения ДВ в канале формируется переходной режим с двумя-тремя ячейками. Сеточное разрешение и низкий ПА не позволяют получить характерные структуры в виде пары слабых поперечных следов, расходящихся от тройной точки соударения поперечных волн, хорошо заметных на рис. 2г. Механизм возникновения данных слабых следов обсуждается в [28]. Результаты расчетов № 2 и № 3 не имеют качественных различий с результатами расчета № 1. При использовании детальной сетки и вычислительного алгоритма второго ПА (расчет № 4) можно наблюдать, что переходной режим завершился формированием двух поперечных волн и одной ярко выраженной детонационной ячейки на всю ширину канала.

Вычислительные эксперименты показали устойчивость расчетов по схемам первого ПА и второго с использованием ограничителя `minmod`. Результаты данных расчетов приведены на рис. 2. В то же время, использование ограничителя `ван Лиры` и для грубой, и для детальной сеток приводит к возникновению в некоторый момент времени в процессе распространения ДВ численной неустойчивости с аварийной остановкой, которую не удастся устранить понижением коэффициента CFL. Полученный результат иллюстрирует тезис о том, что следует с аккуратностью подходить к использованию численных методов на неструктурированных сетках, даже работоспособных для расчетов течений с разрывами, в случае моделирования течений с нелинейными источниковыми членами.

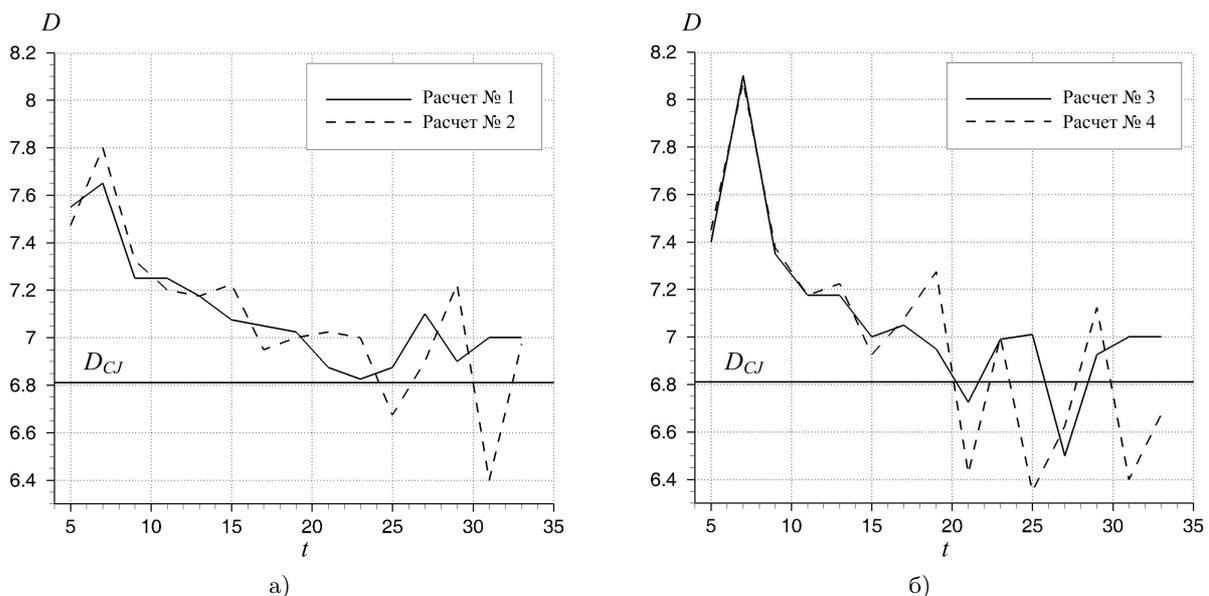


Рис. 3. Динамика изменения средней скорости ДВ для случая (а) грубой расчетной сетки и (б) детальной расчетной сетки

Длина канала выбиралась равной 250 единицам с целью получения самоподдерживающегося режима распространения ДВ. Для подтверждения факта выхода ДВ на уровень ЧЖ были построены зависимости средней скорости лидирующей волны от времени для всех успешных расчетов (рис. 3). Начиная с момента времени 5 средняя скорость в момент времени  $t$  определялась по формуле

$$D(t) = \frac{x_{DW}(t) - x_{DW}(t-2)}{2},$$

где  $x_{DW}(t)$  — абсцисса “самой правой” точки фронта ДВ в момент времени  $t$ . Для рассматриваемых физико-химических параметров смеси теоретическое значение скорости детонации ЧЖ равно

$$D_{CJ} = \sqrt{\gamma + \frac{1}{2}(\gamma^2 - 1)Q} + \sqrt{\frac{1}{2}(\gamma^2 - 1)Q} \approx 6.809. \quad (11)$$

Горизонтальный уровень на рис. 3 соответствует (11). Вид кривой скорости лидирующей волны типичен для экспериментов по прямому инициированию детонации. Наблюдается падение скорости ДВ до уровня

ЧЖ и одновременно с этим развитие колебательного процесса, связанного с распространением поперечных волн. В расчете № 1 по схеме первого ПА на грубой сетке средняя скорость едва достигает уровня ЧЖ, оставаясь выше. При повышении ПА на грубой сетке средняя скорость ДВ начинает пульсировать вокруг значения  $D_{CJ}$  после момента времени  $\sim 25$  единиц, при измельчении сетки для схемы первого ПА — после момента времени  $\sim 20$ , т.е. раньше. Наибольшие пульсации средней скорости с отклонениями до 7% относительно  $D_{CJ}$  наблюдаются в расчете № 4, когда в канале формируются две поперечные волны, и вырабатывается режим с одной детонационной ячейкой. Масштаб пульсаций не так велик, как это бывает при моделировании смесей углеводородов с воздухом, что связано с рассматриваемыми физико-химическими константами смеси, отвечающими устойчивому в линейном приближении решению ЗНД.

**5. Заключение.** В настоящей статье продемонстрирована возможность математического моделирования инициирования и распространения волн газовой детонации в двумерном случае на полностью неструктурированной расчетной сетке с треугольными ячейками. Представлен и подробно описан конечно-объемный вычислительный алгоритм второго порядка аппроксимации по пространственным переменным. На примере распространения ячейистой детонации в модельной смеси, химические реакции в которой описываются одностадийной кинетикой для случая устойчивого детонационного режима, показано, что использование ограничителя `minmod` при выполнении сеточных функций обеспечивает устойчивый расчет, в то время как ограничитель ван Лира неустойчив.

Рассмотрена задача об инициировании детонации в плоском канале с последующим формированием ячейистой структуры для двух расчетных сеток с разрешением около 10 точек на масштаб  $l_{1/2}$  и около 14 точек с использованием вычислительных алгоритмов первого и второго порядков аппроксимации по пространственным переменным. В расчетах продемонстрирована динамика выхода детонации из пересжатого режима на уровень Чепмена–Жуге с постепенным укрупнением поперечного размера детонационной ячейки. В расчете на наиболее детальной сетке с использованием алгоритма второго порядка аппроксимации получен режим с одной детонационной ячейкой на всю ширину канала.

Отметим, что численное моделирование нерегулярных режимов распространения детонации, возникающих при больших значениях энергии активации смеси, в общем случае может потребовать использования более детального сеточного разрешения и более внимательного отношения к используемому численному методу [16, 17]. Распространение детонационной волны в подобных смесях в двумерном случае характеризуется многомасштабной ячейистой структурой, связанной с первичными и вторичными поперечными волнами, требующими пространственного разрешения. Исследование применимости вычислительных алгоритмов на полностью неструктурированных расчетных сетках для моделирования нерегулярных детонационных режимов является предметом дальнейшей работы.

Исследование А.И. Лопато выполнено при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16–31–00408). Исследование П.С. Уткина выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Москвы (грант № 15–31–70004).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Taki S., Fujiwara T.* Numerical analysis of two-dimensional nonsteady detonations // *AIAA Journal*. 1978. **16**, N 1. 73–77.
2. *Марков В.В.* Численное моделирование образования многофронтной структуры детонационной волны // Доклады Академии наук СССР. 1981. **258**, № 2. 314–317.
3. *Higgins A.J.* Approaching detonation dynamics as an ensemble of interacting waves // Proc. of 25th Int. Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS). 2nd–7th August 2015. Leeds, UK. Paper PL3.
4. *Semenov I., Utkin P., Akhmedyanov I.* Mathematical modeling of detonation initiation via flow cumulation effects // *Progress in Propulsion Physics*. Vol. 8. 2016. **8**. 389–406. doi 10.1051/eucass/201608389.
5. *Семенов И.В., Уткин П.С., Марков В.В.* Численное моделирование двумерных детонационных течений на многопроцессорной вычислительной технике // *Вычислительные методы и программирование*. 2008. **9**. 119–128.
6. *Левин В.А., Мануйлович И.С., Марков В.В.* Иницирование и распространение многомерных волн детонации // *Физика горения и взрыва*. 2015. **51**, № 1. 47–56.
7. *Дубровский А.В., Иванов В.С., Зангиев А.Э., Фролов С.М.* Трехмерное численное моделирование характеристик прямогоочной воздушно-реактивной силовой установки с непрерывно-детонационной камерой сгорания в условиях сверхзвукового полета // *Химическая физика*. 2016. **35**, № 6. 49–63.
8. *Hu C., Shu C.-W.* Weighted essentially non-oscillatory schemes on triangular meshes // *Journal of Computational Physics*. 1999. **150**, N 1. 97–127.
9. *Figueira da Silva L.F., Azevedo J.L.F., Korzenowski H.* Unstructured adaptive grid flow simulations of inert and reactive gas mixtures // *Journal of Computational Physics*. 2000. **160**, N 2. 522–540.

10. *Togashi F., Löhner R., Tsuboi N.* Numerical simulation of H<sub>2</sub>/air detonation using unstructured mesh // *Shock Waves*. 2009. **19**, N 2. 151–162.
11. *Shen H., Parsani M.* The role of multidimensional instabilities in direct initiation of gaseous detonations in free space // *Journal of Fluid Mechanics*. 2017. **813**. doi 10.1017/jfm.2017.5.
12. *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.
13. *Erpenbeck J.J.* Stability of steady-state equilibrium detonations // *Physics of Fluids*. 1962. **5**, N 5. 604–614.
14. *Lee J.H.S.* The detonation phenomenon. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2008.
15. *Semenko R., Faria L.M., Kasimov A.R., Ermolaev B.S.* Set-valued solutions for non-ideal detonation // *Shock Waves*. 2016. **26**, N 2. 141–160.
16. *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.
17. *Лопато А.И., Уткин П.С.* Детальное математическое моделирование пульсирующей детонационной волны в системе координат, связанной с лидирующим скачком // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2016. **56**, № 5. 856–868.
18. *Toro E.F.* Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction. Berlin: Springer, 2009.
19. *Liou M.-S., Steffen C.J.Jr.* A new flux splitting scheme // *Journal of Computational Physics*. 1993. **107**, N 1. 23–39.
20. *Chen G., Tang H., Zhang P.* Second-order accurate Godunov scheme for multicomponent flows on moving triangular meshes // *Journal of Scientific Computing*. 2008. **34**, N 1. 64–86.
21. *Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю.* Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. М.: Физматлит, 2001.
22. *van Leer B.* Towards the ultimate conservative difference schemes, V. A second-order sequel to Godunov's method // *Journal of Computational Physics*. 1979. **32**. 101–136.
23. *Shu C.-W., Osher S.* Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes // *Journal of Computational Physics*. 1988. **77**, N 2. 439–471.
24. *Mavriplis D.J.* Solution of the two-dimensional Euler equations on unstructured triangular meshes. PhD Thesis. Princeton: Princeton Univ., 1987.
25. *Mahmoudi Y., Mazaheri K.* High resolution numerical simulation of the structure of 2-D gaseous detonations // *Proceedings of the Combustion Institute*. 2011. **33**, N 2. 2187–2194.
26. *Митрофанов В.В.* Детонация однородных и гетерогенных систем. Новосибирск: Изд-во Ин-та гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, 2003.
27. VisIt. Электронный ресурс. Режим доступа: <https://wci.llnl.gov/simulation/computer-codes/visit/>. Дата доступа 6.10.2017.
28. *Gamezo V.N., Desbordes D., Oran E.S.* Two-dimensional reactive flow dynamics in cellular detonation waves // *Shock Waves*. 1999. **9**, N 1. 11–17.

Поступила в редакцию  
11.08.2017

---

## Specific Features of Mathematical Modeling of Flows with Detonation Waves on Unstructured Computational Grids

A. I. Lopato<sup>1</sup> and P. S. Utkin<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Institute for Computer Aided Design, Russian Academy of Sciences;  
ulitsa 2nd Brestskaya 19/18, Moscow, 123056, Russia; Junior Scientist, e-mail: lopato2008@mail.ru*

<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*

Received August 11, 2017

**Abstract:** A mathematical model and a numerical algorithm for the mathematical modeling of two-dimensional flows with detonation waves on fully unstructured computational grids with triangular cells are proposed. The problem concerning the formation of cellular detonation in a plane channel in the case of stable detonation for different grid resolutions and with the use of first and second order schemes is considered.

**Keywords:** mathematical modeling, detonation wave, unstructured grids with triangular computational cells, detonation cell.

### References

1. S. Taki and T. Fujiwara, “Numerical Analysis of Two-Dimensional Nonsteady Detonations,” *AIAA J.* **16** (1), 73–77 (1978).
2. V. V. Markov, “Numerical Simulation of the Formation of a Multifrontal Detonation-Wave Structure,” *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **258** (2), 314–317 (1981) [*Sov. Phys. Dokl.* **26** (2), 503–506 (1981)].
3. A. J. Higgins, “Approaching Detonation Dynamics as an Ensemble of Interacting Waves,” in *Proc. 25th Int. Conf. on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS), Leeds, UK, August 2–7, 2015*, Paper PL3.
4. I. Semenov, P. Utkin, and I. Akhmedyanov, “Mathematical Modeling of Detonation Initiation via Flow Cumulation Effects,” in *Progress in Propulsion Physics*, Vol. 8, pp. 389–406 (2016). doi 10.1051/eucass/201608389
5. I. V. Semenov, P. S. Utkin, and V. V. Markov, “Numerical Modeling of Two-Dimensional Flows with Detonation Waves Using High Performance Computing,” *Vychisl. Metody Programm.* **9**, 119–128 (2008).
6. V. A. Levin, I. S. Manuilovich, and V. V. Markov, “Initiation and Propagation of Multidimensional Detonation Waves,” *Fiz. Goreniya Vzryva* **51** (1), 47–56 (2015) [*Combust., Expl., Shock Waves* **51** (1), 36–44 (2015)].
7. A. V. Dubrovskii, V. S. Ivanov, A. E. Zangiev, and S. M. Frolov, “Three-Dimensional Numerical Simulation of the Characteristics of a Ramjet Power Plant with a Continuous-Detonation Combustor in Supersonic Flight,” *Khim. Fiz.* **35** (6), 49–63 (2016) [*Russ. J. Phys. Chem. B* **10** (3), 469–482 (2016)].
8. C. Hu and C.-W. Shu, “Weighted Essentially Non-Oscillatory Schemes on Triangular Meshes,” *J. Comput. Phys.* **150** (1), 97–127 (1999).
9. L.F. Figueira da Silva, J. L. F. Azevedo, and H. Korzenowski, “Unstructured Adaptive Grid Flow Simulations of Inert and Reactive Gas Mixtures,” *J. Comput. Phys.* **160** (2), 522–540 (2000).
10. F. Togashi, R. Löhner, and N. Tsuboi, “Numerical Simulation of H<sub>2</sub>/Air Detonation Using Unstructured Mesh,” *Shock Waves* **19** (2), 151–162 (2009).
11. H. Shen and M. Parsani, “The Role of Multidimensional Instabilities in Direct Initiation of Gaseous Detonations in Free Space,” *J. Fluid Mech.* **813** (2017). doi 10.1017/jfm.2017.5
12. 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).
13. J. J. Erpenbeck, “Stability of Steady-State Equilibrium Detonations,” *Phys. Fluids* **5** (5), 604–614 (1962).
14. J. H. S. Lee, *The Detonation Phenomenon* (Cambridge University Press, Cambridge, 2008).
15. R. Semenko, L. M. Faria, A. R. Kasimov, and B. S. Ermolaev, “Set-Valued Solutions for Non-Ideal Detonation,” *Shock Waves* **26** (2), 141–160 (2016).
16. 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).
17. 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 (2019)].
18. E. F. Toro, *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction* (Springer, Berlin, 2009).
19. M.-S. Liou and C. J. Steffen, “A New Flux Splitting Scheme,” *J. Comput. Phys.* **107** (1), 23–39 (1993).
20. G. Chen, H. Tang, and P. Zhang, “Second-Order Accurate Godunov Scheme for Multicomponent Flows on Moving Triangular Meshes,” *J. Sci. Comput.* **34** (1), 64–86 (2008).
21. A. G. Kulikovskii, N. V. Pogorelov, and A. Yu. Semenov, *Mathematical Aspects of Numerical Solution of Hyperbolic Systems* (Fizmatlit, Moscow, 2001; CRC Press, Boca Raton, 2001).
22. B. van Leer, “Towards the Ultimate Conservative Difference Schemes, V. A Second-Order Sequel to Godunov’s Method,” *J. Comput. Phys.* **32**, 101–136 (1979).
23. C.-W. Shu and S. Osher, “Efficient Implementation of Essentially Non-Oscillatory Shock-Capturing Schemes,” *J. Comput. Phys.* **77** (2), 439–471 (1988).
24. D. J. Mavriplis, *Solution of the Two-Dimensional Euler Equations on Unstructured Triangular Meshes*, PhD Thesis (Princeton Univ., Princeton, 1987).
25. Y. Mahmoudi and K. Mazaheri, “High Resolution Numerical Simulation of the Structure of 2-D Gaseous Detonations,” *Proc. Combust. Inst.* **33** (2), 2187–2194 (2011).
26. V. V. Mitrofanov, *Detonation of Homogeneous and Heterogeneous Systems* (Lavrentyev Inst. Hydrodynamics, Novosibirsk, 2003) [in Russian].
27. VisIt. <https://wci.llnl.gov/simulation/computer-codes/visit/>. Cited October 6, 2017.

28. V. N. Gamezo, D. Desbordes, and E. S. Oran, "Two-Dimensional Reactive Flow Dynamics in Cellular Detonation Waves," *Shock Waves* **9** (1), 11–17 (1999).