

УДК: 519.63

## Математическое моделирование пульсирующей волны детонации с использованием ENO-схем различных порядков аппроксимации

А. И. Лопато<sup>а</sup>, П. С. Уткин<sup>б</sup>

Институт автоматизации проектирования РАН,  
Россия, 123056, г. Москва, 2-ая Брестская ул., д. 19/18  
Московский физико-технический институт,  
Россия, 141700, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский пер., д. 9  
E-mail: <sup>а</sup>lopato2008@rambler.ru, <sup>б</sup>pavel\_utk@mail.ru

Получено 20 июня 2014 г.,  
после доработки 3 сентября 2014 г.

Представлены результаты численных исследований распространения пульсирующей волны детонации с использованием ENO-схем с порядками аппроксимации с первого по четвертый включительно. Результаты, полученные с использованием схем различного порядка аппроксимации, показывают, что характер распространения детонационной волны в ацетилено-воздушной смеси как качественно, так и количественно соответствует аналитическим оценкам. Для водородно-воздушной смеси ни для какой из рассмотренных схем не удалось получить устойчивое распространение волны. Наблюдается переход от регулярного распространения к маргинальному с последующим затуханием волны детонации.

Ключевые слова: пульсирующая детонационная волна, ENO-схемы, схемы Рунге–Кутты

### Mathematical modeling of pulsating detonation wave using ENO-schemes of different approximation orders

A. I. Lopato, P. S. Utkin

*Institute for Computer Aided Design of RAS, 19/18 2nd Brestskaya str., Moscow, 123056, Russia*  
*Moscow Institute of Physics and Technology, 9 Institutskiy lane, Dolgoprudny, Moscow region, 141700, Russia*

**Abstract.** — The results of the numerical investigations of pulsating detonation wave propagation using the ENO-schemes with the approximation orders from the first to the fourth inclusively are presented. The results obtained with the use of the schemes of different approximation orders demonstrate that the pattern of detonation wave propagation in acetylene-air mixture corresponds to the analytical estimates both qualitatively and quantitatively. For the hydrogen-air mixture none of the schemes concerned provides the stable detonation wave propagation. The transition from the regular mode to the marginal one with the subsequent detonation breakup is observed.

Keywords: pulsating detonation wave, ENO-schemes, Runge–Kutta schemes

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2014, vol. 6, no. 5, pp. 643–653 (Russian).

## Введение

Под детонационной волной (ДВ) подразумевается самоподдерживающийся комплекс, состоящий из лидирующей ударной волны (УВ) и присоединенной зоны химических реакций, распространяющийся со сверхзвуковой скоростью относительно невозмущенной среды. С возникновением неконтролируемого детонационного процесса связаны наиболее разрушительные аварии в добывающей отрасли. В то же время явление детонации лежит в основе функционирования ряда изделий как военной промышленности (объемно-детонирующие боеприпасы), так и гражданской (дробление и газификация бытовых отходов). Также стоит отметить, что детонационное горение является термодинамически выгодным способом сжигания топлива, поэтому детонация потенциально может применяться в рабочем процессе в камерах сгорания перспективных энергетических установок, таких как импульсные детонационные двигатели [Roy et al., 2004] или двигатели, основанные на непрерывной детонации [Wolanski, 2013].

Математическое моделирование распространения пульсирующей ДВ было, по-видимому, впервые выполнено в работах В. П. Коробейникова, В. А. Левина, В. В. Маркова (см. обзор [Седов и др., 1986]). Множество последующих численных исследований посвящено проблемам распространения одномерных ДВ с использованием уравнений Эйлера и различных моделей кинетики химических реакций. Вопросы устойчивости распространения ДВ рассмотрены в [Sharpe, Falle, 2000], где численные исследования проводятся с использованием схемы типа Годунова второго порядка аппроксимации (ПА) и глобальной одностадийной модели кинетики химических реакций. Показано, что для получения количественно верного решения требуется не менее 50 расчетных точек на половину толщины зоны химических реакций. Исследование, представленное в [Leung et al., 2010], сосредоточено на влиянии величины энергии активации на развитие детонации. Авторы выделяют четыре режима распространения пульсирующей ДВ в зависимости от периода осцилляций, который, в свою очередь, зависит от величины энергии активации. Эволюция ДВ рассчитана с использованием метода Рои для определения численного потока при интегрировании системы уравнений Эйлера и двухшаговой модели протекания химических реакций, состоящей из раздельного учета периода индукции и стадии энергосвободного развития. Механизм развития осцилляций также рассмотрен в [Daimon, Matsuo, 2003], где проведена серия вычислительных экспериментов для различных значений величины  $f = (D / D_{CJ})^2$ , где  $D$  — скорость волны детонации, а  $D_{CJ}$  — скорость детонации Чепмена–Жуге (ЧЖ). Степень пересечения  $f$  существенно влияет на динамику процесса и особенно на значения амплитуды давления за фронтом ДВ и на число мод осцилляций. Также было выделено четыре типа осцилляций давления за фронтом ДВ, особенности каждого типа описаны при помощи  $x - t$ -диаграмм. Уравнения Эйлера интегрировались явно с использованием non-MUSCL TVD схемы второго ПА по времени и координате. Химические превращения моделировались одношаговой необратимой реакцией в соответствии с кинетикой Аррениуса. Подобные исследования проведены и в [Hwang et al., 2000] с использованием метода ENO третьего ПА и схемы Лакса–Фридрихса для расчета численного потока.

Каждая из упомянутых выше работ характеризуется использованием какой-либо одной конкретной разностной схемы для изучения распространения ДВ. Другой отличительной особенностью данных работ является постановка задачи, напоминающая исследования ДВ в рамках модели Зельдовича, Неймана, Деринга (ЗНД), когда рассматривается стационарная ДВ в набегающем потоке. В подобной ситуации требуется задание искусственного граничного условия истечения, вопрос влияния которого на результаты исследования остается открытым, как убедительно показано в [Daimon, Matsuo, 2003].

Целью работы является математическое моделирование распространения пульсирующей ДВ с использованием ENO-схем с первого по четвертый ПА включительно, в физически ясной постановке, соответствующей недавней работе [Cole et al., 2010], с прямым инициированием детонационного режима горения у закрытого конца канала. Требуется провести классификацию получившихся режимов распространения ДВ и описать влияние используемой расчетной методики на результат.

## Постановка задачи

Исследования проводятся в одномерной постановке. В начальный момент времени канал, заполненный покоящейся реагирующей смесью, разделен на две части. В левой, относительно короткой части заключен газ с повышенными значениями давления и температуры. Таким образом моделируется мгновенное действие электрического разряда для инициирования детонации. В правой части канала находится газ при нормальных условиях.

Длина всего канала составляет 0.8 м. Газ, заполняющий канал, представляет собой модельную стехиометрическую водородно-воздушную (ВВС) или ацетилено-воздушную смесь (АВС). Размер области, обеспечивающей инициирование, составляет 10 мм для ВВС и 0.5 мм для АВС. В соответствии с работой [Cole et al., 2010] в этой области задаются давление 40 атм и температура 1500 К для ВВС и 10 атм и 1500 К для АВС. На обеих границах расчетной области устанавливаются граничные условия непротекания. Используется равномерная расчетная сетка с числом ячеек 160 000. Таким образом, размер ячейки расчетной сетки равен  $5 \cdot 10^{-3}$  мм.

## Математическая модель распространения волны детонации

Математическая модель основана на системе нестационарных уравнений Эйлера, дополненной одностадийной моделью кинетики химической реакции Аррениуса [Oran, Gamezo, 2007]:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(p + \rho v^2) = 0, \\ \frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}[(p + e)v] = -\rho Q\omega, \\ \frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho v Z}{\partial x} = \rho\omega, \end{cases} \quad (1)$$

$$e = \rho \varepsilon + \frac{1}{2} \rho v^2, \quad \varepsilon = \frac{p}{\rho(\gamma - 1)}, \quad p = \frac{\rho}{\mu} RT, \quad \omega = -A \rho Z \exp\left(-\frac{E}{RT}\right).$$

Здесь  $x$  — пространственная координата,  $t$  — время,  $\rho$  — суммарная плотность смеси,  $v$  — скорость,  $p$  — давление,  $e$  — полная энергия газа на единицу объема,  $Q$  — тепловой эффект химической реакции,  $\omega$  — скорость изменения массовой доли реагирующего компонента смеси,  $Z$  — массовая доля реагирующего компонента смеси,  $\varepsilon$  — удельная внутренняя энергия,  $\gamma$  — показатель адиабаты,  $R$  — универсальная газовая постоянная,  $\mu$  — молярная масса смеси,  $T$  — температура,  $A$  — предэкспоненциальный множитель,  $E$  — энергия активации. В качестве уравнения состояния используется уравнение идеального газа. Эффектами вязкости, молекулярной диффузии, теплопроводности пренебрежем. Физико-химические параметры АВС и ВВС взяты из работ [Oran, Gamezo, 2007; Gamezo et al., 2008] соответственно (см. таблицу 1). Безусловно, одностадийная модель кинетики не учитывает ряд процессов, имеющих место в реальности [Азатян, 2014], однако позволяет качественно и даже количественно верно моделировать основные особенности распространения ДВ, включая двумерную ячеистую структуру фронта и даже спиновый режим распространения [Левин и др., 2011; Semenov et al., 2011].

Таблица 1. Физико-химические параметры модельных смесей

	$\gamma$	$\mu$ , $\frac{\text{кг}}{\text{моль}}$	$Q$ , $\frac{\text{Дж}}{\text{кг}}$	$E$ , $\frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$	$A$ , $\frac{\text{м}^3}{\text{кг} \cdot \text{с}}$
Ацетилено-воздушная смесь	1.25	0.029	$2.94 \cdot 10^6$	$71 \cdot 10^3$	$10^9$
Водородно-воздушная смесь	1.17	0.021	$5.02 \cdot 10^6$	$113 \cdot 10^3$	$6.85 \cdot 10^9$

## Вычислительный алгоритм

Перепишем (1) в векторной форме:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x} = \mathbf{s}, \quad (2)$$

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho v \\ e \\ \rho Z \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p \\ (p + e)v \\ \rho uZ \end{bmatrix}, \quad \mathbf{s} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -\rho Q\omega \\ \rho\omega \end{bmatrix}.$$

Вычислительный алгоритм основан на принципе расщепления по физическим процессам [Того, 2009], восходящем к методу дробных шагов [Яненко, 1967]. При переходе с одного временного слоя на другой сначала интегрируются уравнения газовой динамики без учета протекания химических реакций ( $\mathbf{s} = 0$ ), 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 (2) методом конечных объемов:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} = \mathbf{L}(\mathbf{Q}) = -\frac{\mathbf{F}_{i+1/2} - \mathbf{F}_{i-1/2}}{\Delta x}, \quad (3)$$

где  $i$  — индекс ячейки расчетной сетки, грани которой обозначаются индексами  $i + 1/2$  и  $i - 1/2$ ;  $\Delta x$  — размер ячейки,  $\mathbf{Q}$  — искомая сеточная функция,  $\mathbf{F}$  — численный поток. Численный поток  $\mathbf{F}_{i+1/2}$  рассчитывается с использованием консервативного сеточно-характеристического варианта монотонной схемы Куранта–Изаксона–Рис [Холодов, 1978; Куликовский и др., 2001], расширенной для случая двухкомпонентного газа:

$$\mathbf{F}_{i+1/2} = \frac{1}{2} \left[ \mathbf{F}(\{\mathbf{Q}_i^n\}^+) + \mathbf{F}(\{\mathbf{Q}_{i+1}^n\}^-) \right] + \frac{1}{2} |A_{i+1/2}^n| \left( \{\mathbf{Q}_i^n\}^+ - \{\mathbf{Q}_{i+1}^n\}^- \right),$$

$$|A_{i+1/2}^n| = \frac{1}{2} \left[ \left\{ \Omega_i^n |\Lambda_i^n| (\Omega_i^n)^{-1} \right\}^+ + \left\{ \Omega_{i+1}^n |\Lambda_{i+1}^n| (\Omega_{i+1}^n)^{-1} \right\}^- \right], \quad (4)$$

$$|\Lambda| = \begin{bmatrix} |v+c| & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |v| & 0 & 0 \\ 0 & 0 & |v-c| & 0 \\ 0 & 0 & 0 & |v| \end{bmatrix}, \quad \Omega = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ v-c & v & v+c & v \\ h-vc & h-\frac{c^2}{\gamma-1} & h+vc & h-\frac{c^2}{\gamma-1} \\ Z & 0 & Z & 1 \end{bmatrix}.$$

Здесь  $n$  — индекс текущего слоя по времени,  $c$  — скорость звука,  $h$  — удельная энтальпия. Верхний индекс «+» соответствует параметрам на правой грани  $i$ -той ячейки, а индекс «−» отвечает параметрам на левой грани  $(i+1)$ -ой ячейки. Данные величины определяются в результате ENO-реконструкции характеристических переменных [Shu, 1997]. Процедура ENO-реконструкции заключается в построении интерполяционного полинома внутри каждой расчетной ячейки. Степень полинома при этом определяет ПА численного метода по пространственной переменной. Локальный интерполяционный полином строится в форме Ньютона и в процессе построения на каждом шаге добавляется тот из двух соседних узлов  $(x_i, \mathbf{Q}_i)$ , который характеризуется меньшей по модулю величиной разделенной разности. Алгоритм ENO-реконструкции является рекурсивным и потому позволяет в единой манере строить схемы различного ПА, что является положительным свойством с точки зрения целей настоящей работы. Интегрирова-

ние (3) по времени осуществляется явными методами Рунге–Кутты [Shu, Osher, 1988]. Например, схема второго ПА записывается в виде

$$\begin{cases} \mathbf{Q}_i^{(1)} = \mathbf{Q}_i^n + \Delta t \cdot \mathbf{L}_i(\mathbf{Q}^n), \\ \tilde{\mathbf{Q}}_i^{n+1} = \frac{1}{2}\mathbf{Q}_i^n + \frac{1}{2}\mathbf{Q}_i^{(1)} + \frac{1}{2}\Delta t \cdot \mathbf{L}_i(\mathbf{Q}^{(1)}). \end{cases} \quad (5)$$

Здесь  $\Delta t$  — шаг интегрирования по времени, который выбирается динамически из условия устойчивости, а верхняя тильда обозначает, что найденное решение является результатом первого этапа процедуры расщепления.

Второй этап предполагает решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ), описывающей протекание химических реакций, в каждой ячейке  $i$  расчетной сетки:

$$\begin{cases} \frac{dZ_i}{dt} = \omega_i = -A\rho_i Z_i e^{-\frac{E}{RT_i}}, \\ \frac{dT_i}{dt} = -\frac{(\gamma-1)\mu}{R} \omega_i Q. \end{cases} \quad (6)$$

Система (6) интегрируется от момента времени  $t^n$  до  $t^n + \Delta t$ . В качестве начального решения используется решение с предыдущего «газодинамического» этапа. В силу известного свойства жесткости системы уравнений химической кинетики для численного интегрирования (6) используется неявный метод Эйлера с линеаризацией по Ньютону при решении получающихся систем линейных алгебраических уравнений. Как известно [Toro, 2009], используемая методика расщепления по физическим процессам характеризуется итоговым первым ПА по времени, если ПА дифференциальных операторов на «газодинамическом» этапе (3)–(5) и «химическом» этапе (6) по крайней мере не ниже первого.

Несмотря на то что в работе исследуются особенности распространения ДВ в одномерной постановке, детальное разрешение узких зон протекания химических реакций требует использования расчетных сеток с числом ячеек до нескольких сотен тысяч, что делает рассматриваемые задачи вычислительно затратными. В связи с этим вычислительный алгоритм был распараллелен в идеологии метода декомпозиции расчетной области.

Пусть для проведения расчета используется  $N$  вычислительных устройств. Тогда расчетная область разбивается на  $N$  частей, содержащих одинаковое количество расположенных подряд друг за другом ячеек, и каждая часть затем обрабатывается отдельным вычислительным устройством. При использовании явных схем интегрирования по времени типа (5) информационная зависимость между различными вычислителями обусловлена лишь необходимостью обмена данными между  $M$  граничными ячейками соседних частей на каждом шаге по времени. Особенностью распараллеливания вычислительного алгоритма, основанного на ENO-схемах, является то, что число  $M$  равняется ПА используемой схемы из-за нелокальности сеточного шаблона. Таким образом, с увеличением ПА схемы возрастает объем межпроцессорных передач данных. Также стоит отметить, что нестационарные задачи распространения волн горения характеризуются неравномерной загрузкой вычислителей в процессе счета. Действительно, химические реакции протекают только в узкой области за фронтом лидирующей УВ, поэтому в каждый момент времени решение СОДУ (6) представляет собой вычислительно трудоемкую задачу лишь для некоторого числа расчетных ячеек. Вопрос эффективного использования алгоритмов балансировки нагрузки и динамической декомпозиции расчетной области представляет собой отдельный предмет исследования (см., например, [Семенов и др., 2011]). В настоящей работе использовался статический вариант декомпозиции.

Программная реализация осуществлена с использованием библиотеки MPI. Расчеты проводились на суперкомпьютере МВС-100k МСЦ РАН.

## Тестирование вычислительного алгоритма и его программной реализации

Свойства описанного выше вычислительного алгоритма для численного интегрирования уравнений газовой динамики, а также корректность его реализации были проверены на серии задач Римана [Toro, 2009], имеющих точное решение, и на тесте [Shu, Osher, 1989]. В тесте [Shu, Osher, 1989] рассматривается взаимодействие УВ с синусоидальными волнами плотности.

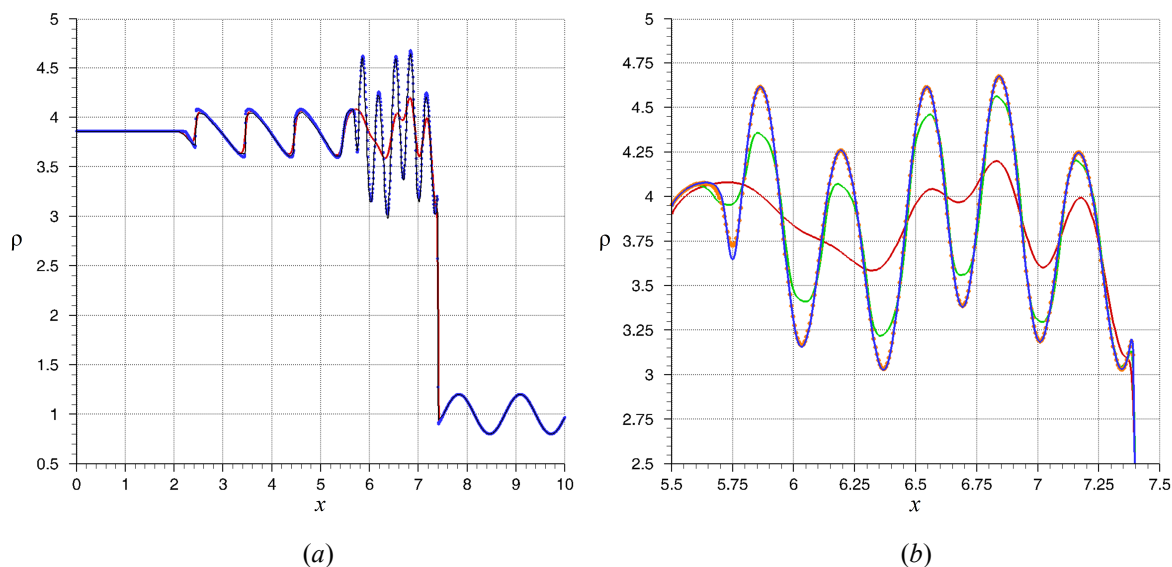


Рис. 1. Рассчитанные профили безразмерной плотности в тесте [Shu, Osher, 1989]: (a) вся расчетная область (черная кривая — опорное решение из [Shu, Osher, 1989], красная кривая — расчет по схеме первого ПА; синие точки — расчет по схеме четвертого ПА); (b) укрупненный фрагмент расчетной области (красная кривая, зеленая кривая, оранжевые точки, синяя кривая — расчеты по схемам с первого по четвертый ПА соответственно)

Решение включает лидирующий скачок и примыкающую непрерывную часть, поэтому данный тест оказывается хорошей моделью распространения ДВ. На рисунке 1 показано, что схемы низких ПА не позволяют разрешить все тонкие структуры решения. Схемы же высокого ПА дают качественно иной результат, хорошо соотносящийся с опорным решением из [Shu, Osher, 1989], полученным с применением ENO-реконструкции третьего ПА. Стоит сделать оговорку, что при сквозном расчете разрывных решений реальный ПА схем номинально высокого ПА, который может быть оценен с помощью процедуры Годунова–Рябенского, как известно, оказывается немногим больше единицы. Вместе с тем, как видно из рисунка 1, данный факт вовсе не свидетельствует об отсутствии необходимости использования неосциллирующих схем повышенного ПА.

Для оценки характерного пространственного масштаба зоны химических реакций за фронтом ДВ был выполнен анализ ЗНД-структуры стационарной ДВ. Модель ЗНД подразумевает решение задачи Коши для СОДУ, получаемой из (1) отбрасыванием членов  $\partial(\cdot)/\partial t$ , с параметрами фон Неймана (ФН) в качестве начальных данных (см., например, [Lee, 2008]). Численное интегрирование уравнений модели осуществляется с использованием неявного метода Эйлера. На рисунке 2 представлена рассчитанная ЗНД-структура ДВ в ВВС. Интегрирование производится от параметров ФН при  $x = 0$  до точки ЧЖ, соответствующей полному сгоранию реагента и равенству скорости газа относительно волны горения локальной скорости звука. В качестве характерного пространственного масштаба зоны протекания химических реакций обычно выбирается расстояние за фронтом лидирующей УВ, на котором величина  $Z$  уменьшается в два раза, до значения 0.5. Это расстояние обозначено на рисунке 2a как  $l_{1/2}$ . Для ВВС  $l_{1/2}$

получилось равным 0.2 мм, что соответствует данным, приведенным в [Gamezo et al., 2008]. Также величина  $l_{1/2}$  часто служит обоснованием для выбора пространственного разрешения при исследовании уже нестационарной задачи (1). Как видно, при использовании сетки с размером ячейки  $5 \cdot 10^{-3}$  мм на зону  $l_{1/2}$  в ВВС приходится 40 расчетных ячеек, что является хорошим разрешением.

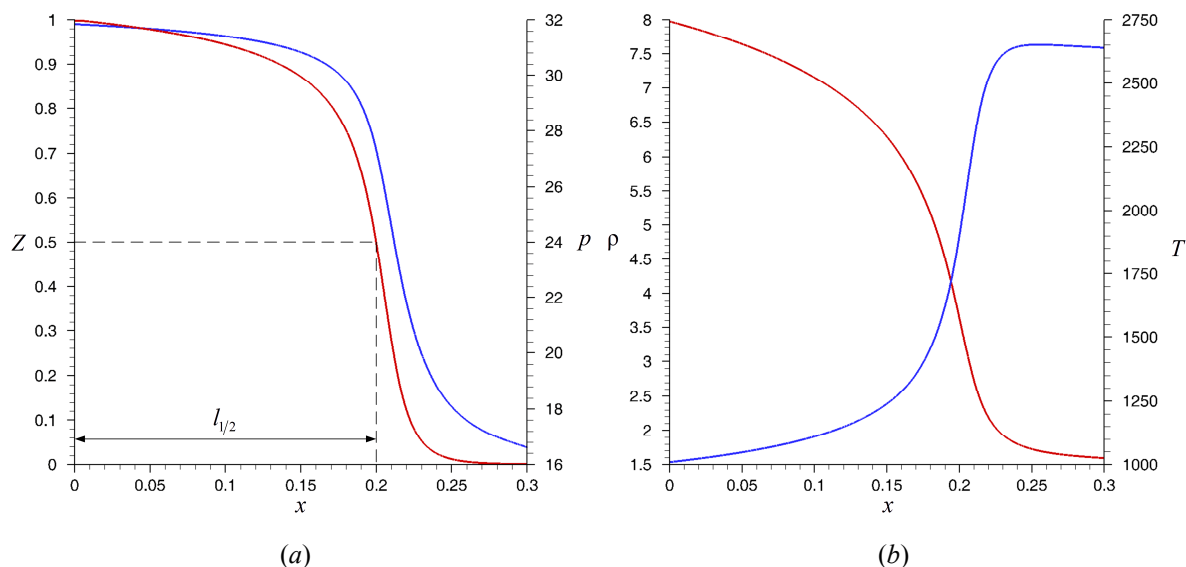


Рис. 2. ЗНД-структура ДВ в ВВС: (а) профили массовой доли реагента (левая шкала, красная линия) и давления (правая шкала, синяя линия); (б) профили плотности (левая шкала, красная линия) и температуры (правая шкала, синяя линия). Ось  $x$  — в мм, ось  $Z$  — безразмерная, ось  $p$  — в атм, остальные — в единицах СИ

## Результаты вычислительных экспериментов

### Распространение волны детонации в ацетилено-воздушной смеси

Рассмотрим динамику распространения пульсирующей ДВ в АВС. Как видно из таблицы 1, АВС характеризуется меньшей энергией активации по сравнению с ВВС, а потому является более легко детонируемой. Кроме того, детонация в АВС относится к категории слабо неустойчивой, в то время как в ВВС — сильно неустойчивой, что будет наглядно проиллюстрировано ниже (см. терминологию, например, в [Shepard, 2009]). Рисунок 3а иллюстрирует рассчитанные по схемам с ПА с первого по четвертый профили давления на один и тот же момент времени 60 мкс. Полученные профили имеют классический вид, включающий лидирующий скачок, химический пик, или пик ФН, и примыкающую к нему волну разрежения, или волну Тейлора. Реагент полностью сгорает на длине химического пика, и дальше распространяются уже продукты детонации. Рассчитанные профили давления наглядно демонстрируют улучшение разрешающей способности вычислительного алгоритма при повышении ПА схемы. Кроме того, как видно из таблицы 3, наблюдается отличное соответствие между полученными в расчете параметрами ЧЖ и их теоретическими значениями (см., например, [Lee, 2008]). Таким образом, получен качественно и количественно верный результат расчета распространения ДВ в АВС как с точки зрения теории ДВ, так и с точки зрения теории разностных схем.

Представленные на рисунке 3а мгновенные пространственные распределения давления не отражают динамики процесса распространения волны и не объясняют ее название — пульсирующая. Рассмотрим вместо мгновенных пространственных распределений историю максимального давления в расчетной области (см. рис. 3б). Опишем динамику распространения ДВ

на примере расчета по схеме наивысшего из рассмотренных, четвертого ПА. В соответствии с постановкой задачи, приведенной выше, узкая область инициирования, примыкающая к левой границе расчетной области, заполнена реагирующей смесью при значительном давлении и температуре. Это приводит к первичному взрыву, обеспечивающему формирование взрывной волны, которая распространяется по свежей смеси. По истечении времени задержки самовоспламенения сжатая и нагретая этой волной смесь взрывается — происходит вторичный взрыв. После этого наблюдаются типичная для экспериментов по прямому инициированию детонации [Васильев и др., 1987] фаза ослабления лидирующей волны и ее переход из пересжатого режима к самоподдерживающемуся режиму ЧЖ. Далее ДВ распространяется с постоянной средней скоростью и параметрами за фронтом. Вместе с тем даже в этом случае давление в пике ФН не является постоянным, а высокочастотно пульсирует с амплитудой около 2 атм около средней величины. Результаты, представленные на рисунке 3*b*, качественно соответствуют приведенным в [Cole et al., 2010].

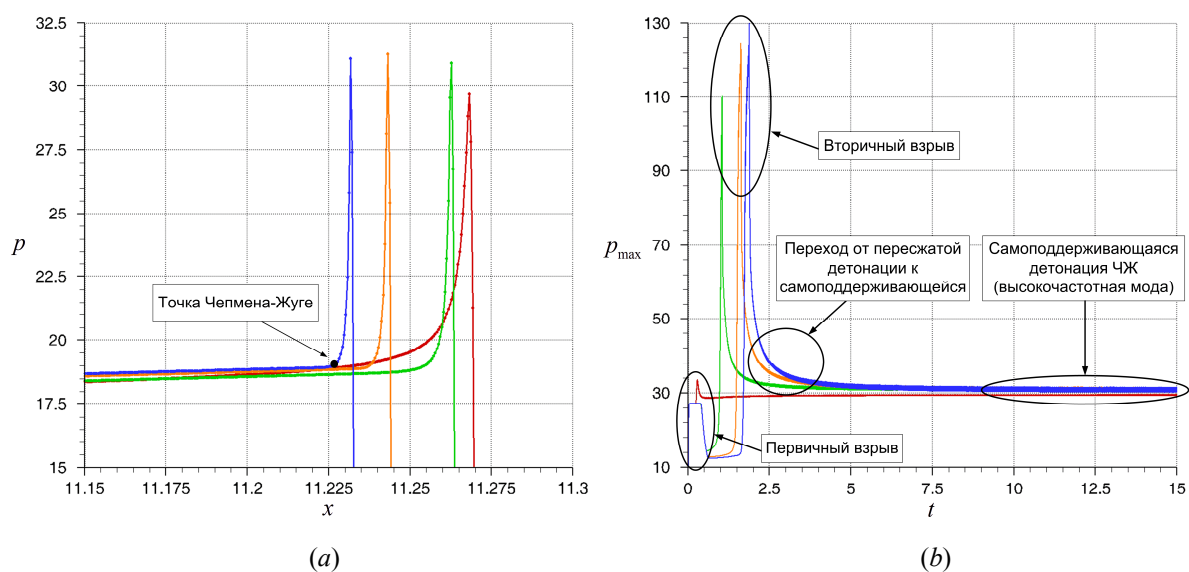


Рис. 3. (а) Рассчитанные пространственные профили давления в момент времени 60 мкс (точки соответствуют центрам расчетных ячеек, ось  $x$  в мм, ось  $p$  в атм) и (б) история максимального давления в расчетной области (ось  $t$  в мкс, ось  $p_{\max}$  в атм) для случая АВС. Красная, зеленая, оранжевая, синяя кривые — расчеты по схемам с первого по четвертый ПА соответственно

Таблица 2. Сравнение полученных в расчете и теоретически определенных параметров ЧЖ для АВС

	Параметр ЧЖ в расчете по схеме четвертого ПА	Теоретически определенный параметр ЧЖ
$p$ , атм	18.5	18.6
$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	2.0	2.0
$v$ , м/с	800.0	807.0
$T$ , К	3180.0	3175.0

Перейдем к влиянию свойств схемы на результаты моделирования. Рисунок 3*b* снова позволяет сделать вывод об улучшении разрешающей способности вычислительного алгоритма при увеличении ПА схемы. Вместе с тем наблюдается качественное изменение характера численного решения при увеличении ПА с первого до более высоких. Так, при использовании схемы первого ПА (красная кривая на рис. 3*b*) динамика распространения ДВ на начальной стадии процесса качественно описывается неверно, отсутствуют ярко выраженные стадии первичного и вторичного взрывов. Давление за фронтом ДВ при этом не снижается до давления за само-



поддерживающейся волной, а растет и выходит практически на ту же величину снизу. При использовании же схем более высокого ПА (начиная со второго) картина течения становится качественно верной, изменения претерпевают только некоторые количественные характеристики процесса — время до вторичного взрыва и его интенсивность. Обе эти величины растут с увеличением ПА схемы.

### ***Распространение волны детонации в водородно-воздушной смеси***

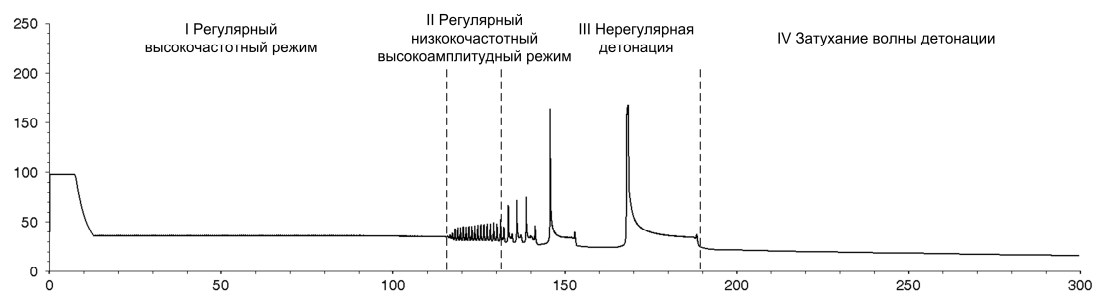
Рассмотрим теперь характер распространения ДВ в ВВС, качественно отличающийся от описанного выше для АВС. Для случая использования схемы первого ПА после начальной стадии влияния области инициирования на профиль ДВ он приобретает классический вид, сходный с представленным на рисунке 3а. ДВ при этом является пересжатой, и происходит постепенное уменьшение давления в пике ФН (область I на рис. 4а). При приближении этого давления к теоретическому значению 36 атм регулярный высокочастотный режим распространения ДВ меняется на регулярный низкочастотный с большей амплитудой (область II на рис. 4а), что соответствует результатам [Cole et al., 2010]. Амплитуда колебаний продолжает нарастать, и регулярная детонация переходит в нерегулярную, маргинальную (область III на рис. 4а), что, в свою очередь, согласуется с результатами [Daimon, Matsuo, 2003]. В момент времени около 0.19 мс происходит окончательное затухание ДВ, а вместо нее образуется комплекс из УВ и «пламени». Таким образом, долговременное распространение ДВ в описанной постановке в расчете по схеме первого ПА не наблюдается.

Результаты вычислительного эксперимента с использованием схемы второго ПА существенно отличаются от описанного выше сценария для схемы первого ПА. В условиях лучшего разрешения зоны химических реакций ДВ распространяется в низкочастотном режиме в виде последовательных, четко отличимых локальных взрывов (область I на рис. 4б). Пространственное распределение параметров за фронтом ДВ характеризуется наличием регулярных структур на волне Тейлора. Однако с течением времени взрывы перестают быть периодичными (момент времени около 0.14 мс), появляется нерегулярность в их возникновении, а потом взрывы и вовсе перестают происходить (момент времени около 0.28 мс).

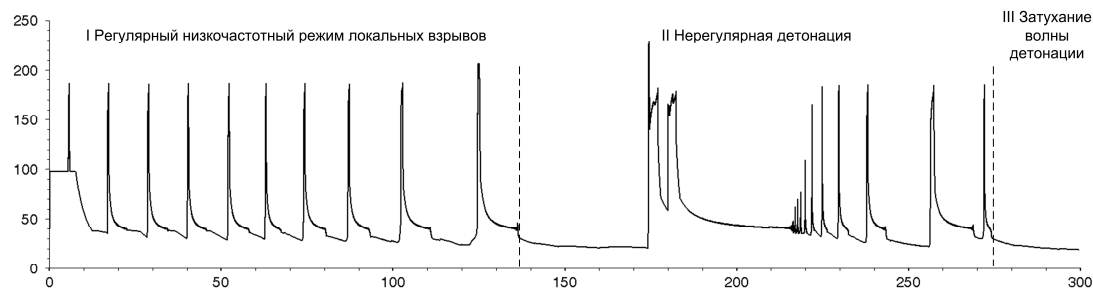
Использование схем третьего и четвертого ПА также не приводит к устойчивому распространению ДВ (см. рис. 4с, д). Истории максимального давления в этих случаях демонстрируют дополнительные структуры на регулярном участке распространения ДВ. В остальном численные профили соотносятся между собой и с профилями, полученными по схеме второго ПА.

## **Заключение**

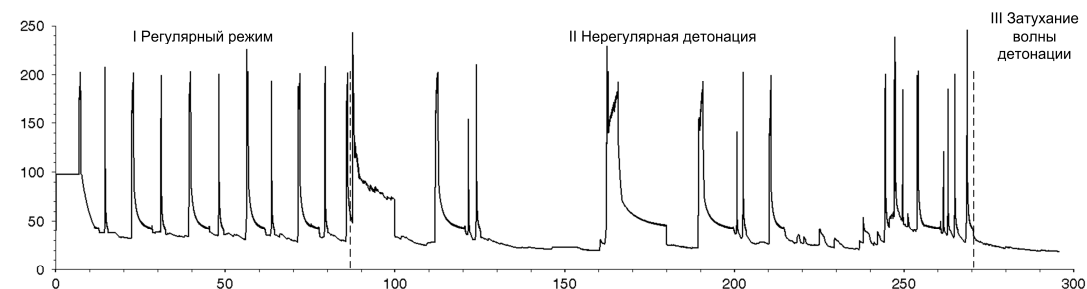
Проведено численное исследование распространения пульсирующей волны детонации в физически понятной постановке с прямым инициированием детонации у закрытого конца канала с использованием ENO-схем с порядками аппроксимации с первого по четвертый включительно для ацетилено-воздушной и водородно-воздушной смесей. Математическая модель основывается на системе уравнений Эйлера, дополненной одностадийной моделью кинетики химических реакций, вычислительный алгоритм — на комбинации ENO-схем для повышения порядка аппроксимации по пространственной переменной, схем Рунге-Кутты для повышения порядка аппроксимации по времени и метода Куранта–Изаксона–Рис расчета потоков. Результаты, полученные с использованием схем различного порядка аппроксимации, показывают, что характер распространения детонационной волны в ацетилено-воздушной смеси как качественно, так и количественно соответствует аналитическим оценкам. Для водородно-воздушной смеси ни для какой из рассмотренных схем не удается получить устойчивое распространение волны детонации. При этом всегда наблюдается переход от регулярного режима к нерегулярному, маргинальному, с последующим затуханием режима детонационного горения.



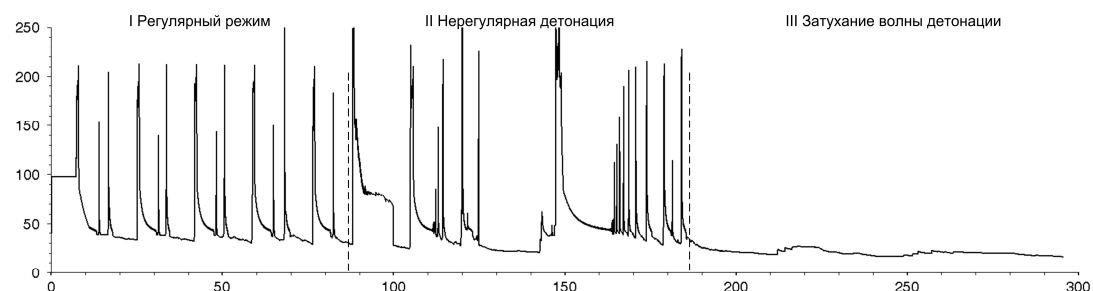
(a) Расчет по схеме первого ПА



(b) Расчет по схеме второго ПА



(c) Расчет по схеме третьего ПА



(d) Расчет по схеме четвертого ПА

Рис. 4. Истории максимальных давлений в расчетах распространения ДВ в ВВС по схемам с ПА с первого по четвертый. По оси абсцисс отложено время в мкс, по оси ординат — максимальное давление в расчетной области в атм

Принимая во внимание, что в природе распространение детонационной волны в газовой смеси в канале характеризуется существенно многомерными эффектами, полученные результаты следует рассматривать прежде всего как прояснение конкретных вопросов, связанных с численными методиками для расчета течений с детонационными волнами, а не с точки зрения реализующихся на практике механизмов распространения детонационной волны.

## Список литературы

- Азатян В. В. Газофазные процессы горения в свете теории неизотермических цепных реакций // Ж. физич. хим. — 2014. — Т. 88, № 2. — С. 245–253.
- Васильев А. А., Митрофанов В. В., Топчийн М. Е. Детонационные волны в газах // ФГВ. — 1987. — № 5. — С. 109–131.
- Куликовский А. Г., Погорелов Н. В., Семенов А. Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. — М.: Физматлит, 2001.
- Левин В. А., Мануйлович И. С., Марков В. В. Ячеистая структура расходящейся цилиндрической волны детонации // ДАН. — 2011. — Т. 439, № 1. — С. 48–50.
- Седов Л. И., Коробейников В. П., Марков В. В. Теория распространения взрывных волн // Тр. Матем. инст. АН СССР. — 1986. — Т. 175. — С. 178–214.
- Семенов И. В., Уткин П. С., Ахмедьянов И. Ф., Меньшов И. С. Применение многопроцессорной вычислительной техники для решения задач внутренней баллистики // Вычислительные методы и программирование. — 2011. — Т. 12. — С. 183–193.
- Холодов А. С. О построении разностных схем с положительной аппроксимацией для уравнений гиперболического типа // Ж. выч. мат. и мат. физ. — 1978. — Т. 18, № 6. — С. 1476–1492.
- Яненко Н. Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. — Новосиб.: Наука, Сиб. отд., 1967.
- Cole L. K., Karagozian A. R., Cambier J.-L. Stability of flame-shock coupling in detonation waves: 1D dynamics // Comb. Sci. Technology. — 2012. — Vol. 184. — P. 1502–1525.
- Daimon Y., Matsuo A. Detailed features of one-dimensional detonations // Phys. Fluids. — 2003. — Vol. 15, No. 1. — P. 112–122.
- Gamezo V., Ogawa T., Oran E. Flame acceleration and DDT in channels with obstacles: Effect of obstacle spacing // Comb. Flame. — 2008. — Vol. 155. — P. 302–315.
- Hwang P., Fedkiw R. P., Merriman B., Aslam T. D., Karagozian A. R., Osher S. J. Numerical resolution of pulsating detonation waves // Comb. Theor. Model. — 2000. — Vol. 4. — P. 217–240.
- Lee J. H. S. The Detonation Phenomenon. — Camb. Univ. Press, 2008.
- Leung C., Radulescu M. I., Sharpe G. J. Characteristics analysis of the one dimensional pulsating dynamics of chain-branching detonations // Phys. Fluids. — 2010. — Vol. 22. — Paper 126101.
- Oran E. S., Gamezo V. N. Origins of the deflagration-to-detonation transition in gas-phase combustion // Comb. Flame. — 2007. — Vol. 148. — P. 4–47.
- Roy G. D., Frolov S. M., Borisov A. A., Netzer D. W. Pulse detonation propulsion: challenges, current status, and future perspective // Progr. Ener. Comb. Sci. — 2004. — Vol. 30. — P. 545–672.
- Semenov I., Akhmedyanov I., Lebedeva A., Utkin P. Three-dimensional numerical simulation of shock and detonation waves propagation in tubes with curved walls // Sci. Tech. Energ. Mater. — 2011. — Vol. 72, No. 4. — P. 116–122.
- Shepard J. E. Detonation in gases // Proc. Comb. Inst. — 2009. — Vol. 32. — P. 83–98.
- Sharpe G. J., Falle S. A. Numerical simulations of pulsating detonations: I. Nonlinear stability of steady detonations // Comb. Theor. Model. — 2000. — Vol. 4. — P. 557–574.
- Shu C.-W. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws // NASA/CR-97-206253, ICASE Report N 97-65, 1997.
- Shu C.-W., Osher S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes // J. Comp. Phys. — 1988. — Vol. 77. — P. 439–471.
- Shu C.-W., Osher S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, II // J. Comp. Phys. — 1989. — Vol. 83. — P. 32–78.
- Toro E. F. Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics. — 3d Ed., 2009, Springer.
- Wolanski P. Detonative propulsion // Proc. Comb. Inst. — 2013. — Vol. 34. — P. 125–158.