

УДК: 534.222.2, 519.63

## Численное исследование механизмов распространения пульсирующей газовой детонации в неоднородной среде

А. И. Лопато<sup>1,а</sup>, Я. Э. Порошина<sup>2</sup>, П. С. Уткин<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт автоматизации проектирования Российской академии наук,  
Россия, 123056, г. Москва, ул. 2-я Брестская, д. 19/18

<sup>2</sup>Университет Куинс,  
Канада, Онтарио, г. Кингстон, Университетский пр., д. 99

<sup>3</sup>Харбинский политехнический университет,  
Китай, р-он Наньган, г. Харбин, ул. Уэст Дажи, д. 92

E-mail: <sup>а</sup> lopato2008@mail.ru

Получено 20.03.2023, после доработки — 18.04.2023.

Принято к публикации 18.05.2023.

В последние несколько лет наблюдаются значительные успехи в области создания двигательных установок для летательных аппаратов, основанных на сжигании топлива во вращающейся детонационной волне. В научных лабораториях по всему миру проводятся как фундаментальные исследования, связанные, например, с вопросами смесеобразования при раздельной подаче топлива и окислителя, так и прикладные по доводке уже существующих прототипов. В работе приводится краткий обзор основных результатов наиболее значимых недавних расчетных работ по изучению распространения одномерной пульсирующей волны газовой детонации в среде с неравномерным распределением параметров. Отмечаются общие тенденции, которые наблюдали авторы данных работ. В этих работах показано, что наличие возмущений параметров перед фронтом волны может приводить к регуляризации и к резонансному усилению пульсаций параметров за ее фронтом. В результате возникает привлекательная с практической точки зрения возможность влиять на устойчивость детонационной волны и управлять ею. Настоящая работа направлена на создание инструмента, который позволяет изучать газодинамические механизмы данных эффектов.

Математическая модель основана на одномерных уравнениях Эйлера, дополненных одностадийной моделью кинетики химических реакций. Определяющая система уравнений записана в системе координат, связанной с лидирующим скачком, что приводит к необходимости добавить уравнение для скорости лидирующей волны. Предложен способ интегрирования данного уравнения, учитывающий изменение плотности среды перед фронтом волны. Таким образом, предложен вычислительный алгоритм для моделирования распространения детонации в неоднородной среде.

С использованием разработанного алгоритма проведено численное исследование распространения устойчивой детонации в среде с переменной плотностью. Исследован режим с относительно небольшой амплитудой колебаний плотности, при котором колебания параметров за фронтом детонационной волны происходят с частотой колебаний плотности среды. Показана связь периода колебаний параметров со временем прохождения характеристик  $C_+$  и  $C_0$  по области, которую условно можно считать зоной индукции. Сдвиг по фазе между колебаниями скорости детонационной волны и плотности газа перед волной оценен как максимальное время прохождения характеристики  $C_+$  по зоне индукции.

Ключевые слова: математическое моделирование, детонационная волна, уравнения Эйлера, одностадийная химическая кинетика, пульсации, неоднородная среда

Исследование А. И. Лопато выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-71-00113). Исследование Я. Э. Порошиной выполнено, когда она являлась аспиранткой Московского физико-технического института.

© 2023 Александр Игоревич Лопато, Ярослава Эдуардовна Порошина, Павел Сергеевич Уткин  
Статья доступна по лицензии Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Unported License.  
Чтобы получить текст лицензии, посетите веб-сайт <http://creativecommons.org/licenses/by-nd/3.0/>  
или отправьте письмо в Creative Commons, PO Box 1866, Mountain View, CA 94042, USA.

UDC: 534.222.2, 519.63

## Numerical study of the mechanisms of propagation of pulsating gaseous detonation in a non-uniform medium

A. I. Lopato<sup>1,a</sup>, Ya. E. Poroshyna<sup>2</sup>, P. S. Utkin<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Institute for Computer Aided Design of the Russian Academy of Sciences,  
19/18 2nd Brestskaya st., Moscow, 123056, Russia

<sup>2</sup>Queen's University,  
ON K7L 3N6, 99 University Ave., Kingston, Canada

<sup>3</sup>Harbin Institute of Technology,  
92 West Dazhi st., Nangang District, Harbin, China

E-mail: <sup>a</sup> lopato2008@mail.ru

*Received 20.03.2023, after completion — 18.04.2023.*

*Accepted for publication 18.05.2023.*

In the last few years, significant progress has been observed in the field of rotating detonation engines for aircrafts. Scientific laboratories around the world conduct both fundamental researches related, for example, to the issues of effective mixing of fuel and oxidizer with the separate supply, and applied development of existing prototypes. The paper provides a brief overview of the main results of the most significant recent computational work on the study of propagation of a one-dimensional pulsating gaseous detonation wave in a non-uniform medium. The general trends observed by the authors of these works are noted. In these works, it is shown that the presence of parameter perturbations in front of the wave front can lead to regularization and to resonant amplification of pulsations behind the detonation wave front. Thus, there is an appealing opportunity from a practical point of view to influence the stability of the detonation wave and control it. The aim of the present work is to create an instrument to study the gas-dynamic mechanisms of these effects.

The mathematical model is based on one-dimensional Euler equations supplemented by a one-stage model of the kinetics of chemical reactions. The defining system of equations is written in the shock-attached frame that leads to the need to add a shock-change equations. A method for integrating this equation is proposed, taking into account the change in the density of the medium in front of the wave front. So, the numerical algorithm for the simulation of detonation wave propagation in a non-uniform medium is proposed.

Using the developed algorithm, a numerical study of the propagation of stable detonation in a medium with variable density as carried out. A mode with a relatively small oscillation amplitude is investigated, in which the fluctuations of the parameters behind the detonation wave front occur with the frequency of fluctuations in the density of the medium. It is shown the relationship of the oscillation period with the passage time of the characteristics  $C_+$  and  $C_0$  over the region, which can be conditionally considered an induction zone. The phase shift between the oscillations of the velocity of the detonation wave and the density of the gas before the wave is estimated as the maximum time of passage of the characteristic  $C_+$  through the induction zone.

**Keywords:** mathematical modeling, detonation wave, Euler equations, one-stage chemical kinetics, pulsations, non-uniform medium

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2023, vol. 15, no. 5, pp. 1263–1282 (Russian).

The work of A.I.Lopato was supported by the Russian Science Foundation (project No. 22-71-00113). The work of Ya. E. Poroshyna was carried out when she was a PhD student at the Moscow Institute of Physics and Technology.

## 1. Введение

В большинстве расчетных исследований течений сжимаемых сред с волнами детонации (сверхзвуковые режимы распространения горения) предполагается, что детонация распространяется по однородной покоящейся среде. Вместе с тем очень часто на практике газовая смесь перед детонационной волной (ДВ) является по тем или иным причинам неоднородной.

Отметим три наиболее значимые, с нашей точки зрения, статьи последнего времени [Ma, Wang, Han, 2020; Kim et al., 2021; Kasimov, Goldin, 2021], в которых численно исследовались особенности распространения одномерной пульсирующей газовой детонации в среде с неоднородным распределением параметров. Несмотря на различие в математических моделях и вычислительных алгоритмах, полученные авторами результаты во многом схожи. В то же время во всех этих работах отсутствует объяснение механизмов наблюдаемых эффектов с точки зрения газодинамики детонации, что послужило мотивирующим фактором для данной работы.

В [Ma, Wang, Han, 2020] распространение детонации в неоднородной среде моделировалось на основе решения одномерных уравнений Навье – Стокса с реалистичным детальным кинетическим механизмом горения водородно-кислородной смеси. Исследовалось влияние неравномерной концентрации реагента на характер пульсации давления и остальных параметров при распространении ДВ. Число молей водорода  $X$  изменялось по длине канала ( $x$  – пространственная координата,  $L$  – длина канала) по синусоидальному закону:

$$X = 1 - k \cdot \sin\left(\frac{\varphi x}{L}\right), \quad (1)$$

где варьируемыми параметрами были амплитуда ( $k$ ) и частота ( $\varphi$ ) возмущения. До определенной координаты в начальный момент времени в канале находилась однородная смесь, после начиналась область с синусоидальным изменением массовой доли водорода. Исследовались следующие диапазоны параметров в законе (1):  $k = 1, 0 \dots 0,01$ ;  $\varphi = \frac{5\pi}{6} \dots 400\pi$ . Показано, что наличие неоднородностей сильно влияет на динамику распространения детонации за счет взаимодействия лидирующей ударной волны (ЛУВ) с локальным градиентом мольной доли реагента. Расчеты проводились с разрешением 60 точек на длину полупревращения в решении Зельдовича – Неймана – Деринга (ЗНД) о распределении параметров за фронтом стационарной ДВ. При распространении по однородной водородно-кислородной смеси регулярные пульсации параметров за фронтом ДВ характеризуются четырьмя различными периодами. Данный режим перестраивается, встречая неоднородное распределение параметров. Отмечаются следующие тенденции. При увеличении амплитуды возмущений или при уменьшении их частоты наблюдается переход к хаотической динамике пульсаций. Для возмущений с достаточно большой амплитудой увеличение их частоты обеспечивает более быструю перестройку течения при изменении распределения параметров среды от равномерного к неравномерному. Для возмущений малой амплитуды наблюдается переход к иному регулярному пульсирующему режиму. При дальнейшем уменьшении амплитуды возмущений обнаружено, что при приближении частоты колебаний параметров перед фронтом к основной частоте пульсаций при распространении детонации в невозмущенной среде возникает регулярный режим пульсаций с двумя периодами. Если частоту возмущения уменьшить, регулярный режим теряет устойчивость. Основным результатом работы [Ma, Wang, Han, 2020]: наличие возмущений параметров перед фронтом ДВ может не только приводить к хаотизации пульсаций (это наиболее вероятный сценарий), но и, наоборот, regularизировать пульсации. Данный эффект может быть важен для ряда практических приложений, в частности при разработке детонационных двигателей, основанных на вращающейся детонации. В качестве инструмента для объяснения наблюдаемых тенденций авторы [Ma, Wang, Han, 2020] используют анализ характерных пространственных распределений давления, температуры и массовой доли реагента. Однако как таковых объяснений механизмов наблюдаемых эффектов не дается,

и основными результатами работы являются описанные выше закономерности, которые авторы установили, наблюдая за кривыми изменения максимального давления в расчетной области со временем.

В [Kim et al., 2021] похожие по сути исследования были выполнены для случая переменной плотности смеси перед фронтом распространяющейся ДВ. В отличие от предыдущей обсуждаемой работы [Ma, Wang, Han, 2020] описание ДВ базировалось на решении одномерных уравнений Эйлера с модельной одностадийной кинетической схемой [Erpenbeck, 1962], имеющей прежде всего теоретическую значимость и непосредственно не сопоставляемой с какой-либо реальной смесью. В [Kim et al., 2021] изучался диапазон безразмерных величин энергий активации  $E$  от 28,5 до 30,0, качественно соответствующих смесям, в которых наблюдается нерегулярная детонация. В работе показано, что наличие малого по амплитуде синусоидального возмущения плотности среды —

$$\rho_{\text{init}} = 1,0 + k \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right), \quad (2)$$

— может приводить к различным режимам пульсаций, в зависимости от длины волны возмущения  $\lambda$ . Если амплитуда возмущений  $k$  слишком велика, может происходить затухание детонации с последующим ее реиницированием. Данный режим не представлял интереса для авторов [Kim et al., 2021], поэтому исследования проводились для относительно небольшой амплитуды возмущений  $k = 0,1$ , для которой удалось продемонстрировать особенности распространения детонации в неоднородной среде с точки зрения теории динамических систем. В частности, как и в работе [Ma, Wang, Han, 2020], показано, что при некотором соотношении параметров задачи возможна регуляризация изначально хаотических пульсаций. Таким образом, за счет малых по амплитуде пульсаций параметров перед фронтом ДВ возможно добиться более устойчивого и потому предсказуемого характера ее распространения. Аналогичный эффект наблюдался в [Mi et al., 2017] для пламени при наличии возмущений в виде дискретных источников тепловыделения. В [Kim et al., 2021] отмечается, что подобный результат известен в нелинейной динамике и теории динамического хаоса [Ott, Grebogi, Yorke, 1990]. Стабилизация хаотической системы может быть реализована с помощью небольших возмущений начальных условий. В [Kim et al., 2021] использовался вычислительный алгоритм номинально второго порядка точности. Сеточное разрешение — 100 точек на длину полупревращения. Как можно заметить, это практически вдвое больше, чем в работе [Ma, Wang, Han, 2020]. Разумные вычислительные затраты при этом удалось обеспечить за счет другой постановки задачи. Рассматривалась короткая расчетная область, на одной из границ которой задавалось условие втекания с параметрами Чепмена–Жуге (ЧЖ). ДВ, таким образом, распространялась против набегающего потока. Авторы исследовали спектры пульсаций давления за фронтом детонационной волны. Для  $E = 28,5$  построена бифуркационная диаграмма, которая продемонстрировала наличие двух диапазонов длин волн возмущения плотности, при которых реализовался режим со стабилизацией детонации.

Исследование [Kasimov, Goldin, 2021] во многом обобщает результаты, полученные в [Ma, Wang, Han, 2020; Kim et al., 2021]. Особенность численного подхода [Kasimov, Goldin, 2021] состоит в том, что расчеты проводятся в системе координат, связанной с фронтом волны (СКФ). Преимущества использования подобного подхода по сравнению с более традиционными расчетами в лабораторной системе координат (см., например, [Лопато, Уткин, 2014; Брагин, Рогов, 2020]) обсуждаются в [Порошина, Лопато, Уткин, 2022]. В [Kasimov, Goldin, 2021] используется вычислительный алгоритм [Henrick, Aslam, Powers, 2006], развитый для случая неоднородных параметров среды перед фронтом ДВ. Чтобы приблизить постановку к реальным процессам смешения в двигателе с вращающейся детонацией, перед фронтом волны одновременно меняются и плотность смеси, и массовая доля реагента. Исследования проводились для  $E = 25$  (устойчивая

детонация) и  $E = 26$  (слабонеустойчивая детонация). Для каждого из значений  $E$  исследовался достаточно широкий спектр значений волнового числа в законе изменения плотности и массовой доли реагента. По результатам каждого расчета был проведен фурье-анализ зависимости скорости ДВ от времени. Результаты представлены в виде спектрограмм в плоскости (фурье-частоты сигнала, волновое число возмущений среды перед фронтом ДВ), на основании анализа которых были сделаны выводы о возможных режимах распространения ДВ в неоднородной среде. Авторы выделяют два основных результата. Для определенного диапазона волновых чисел возмущений среды амплитуда пульсаций параметров за фронтом ДВ может резонансным образом увеличиваться. С другой стороны, как и в работах [Ma, Wang, Han, 2020; Kim et al., 2021], получено, что для некоторых возмущений среды возможна регуляризация пульсаций. Отметим, что хотя выводы в [Kasimov, Goldin, 2021] делались на основе обобщения гораздо большего числа вычислительных экспериментов при варьировании параметров возмущения среды перед волной, по сравнению с [Ma, Wang, Han, 2020; Kim et al., 2021], рассмотренные энергии активации были ниже и качественно хуже соответствовали реалистичным распространяемым на практике топливно-воздушным смесям.

Настоящая работа продолжает наши исследования [Лопато, Уткин, 2016; Poroshyna, Lopato, Utkin, 2021; Порошина, Лопато, Уткин, 2022]. Работа преследует две цели. Первой целью является разработка вычислительного алгоритма для моделирования распространения ДВ в СКФ в среде с переменной плотностью в рамках одностадийной модели кинетики химических реакций. Данный алгоритм является развитием нашей предыдущей работы [Порошина, Лопато, Уткин, 2022], в которой рассматривался случай инертной среды, то есть моделировалось распространение ударной волны (УВ) в газе с переменной плотностью. Второй целью работы является описание газодинамического механизма распространения устойчивой ДВ в среде с переменной плотностью с использованием разработанного вычислительного алгоритма.

## 2. Математическая модель и постановка задачи

Определяющая система уравнений представляет собой одномерные уравнения Эйлера, дополненные одностадийной моделью кинетики химических реакций и уравнением состояния идеального газа, которые записываются в системе координат  $(x, t)$ , связанной с фронтом ЛУВ:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{f} - D\mathbf{u}) = \mathbf{s}, \quad x = x^l - \int_0^t D(\tau) d\tau, \quad (3)$$

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho v \\ e \\ \rho Z \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p \\ (e + p)v \\ \rho Z v \end{bmatrix}, \quad \mathbf{s} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -\rho Q \omega \\ \rho \omega \end{bmatrix}, \quad (4)$$

$$e = \rho \varepsilon + \frac{1}{2} \rho v^2, \quad \varepsilon = \frac{p}{\rho(\gamma - 1)}, \quad p = \rho \frac{R}{\mu} T, \quad (5)$$

$$\omega = -AZ \exp\left(\frac{-E\rho}{p}\right). \quad (6)$$

Здесь  $\rho$  — плотность газа,  $v$  — скорость газа в лабораторной системе координат  $(x^l, t)$ ,  $D$  — скорость ЛУВ,  $p$  — давление газа,  $e$  — полная энергия газа на единицу объема,  $\varepsilon$  — удельная внутренняя энергия газа,  $\gamma$  — показатель адиабаты,  $Q$  — тепловой эффект химических реакций,  $Z$  — массовая доля реагирующего компонента смеси,  $\omega$  — скорость изменения  $Z$  в результате протекания химических реакций,  $R$  — универсальная газовая постоянная,  $\mu$  — молярная масса смеси,  $T$  — температура,  $A$  — предэкспоненциальный множитель,  $E$  — энергия активации смеси.

Эффектами вязкости, молекулярной диффузии и теплопроводности пренебрегается. Отметим, что скорость  $v$  в (3) связана со скоростью ЛУВ посредством уравнения

$$v = u + D,$$

где  $u$  — скорость газа в СКФ.

Как и в работах [Kim et al., 2021; Kasimov, Goldin, 2021], определяющая система уравнений (3)–(6) записана в безразмерном виде. В качестве характерного масштаба длины выбрана «длина полупревращения», то есть расстояние за фронтом ДВ, на котором массовая доля реагента уменьшается в два раза, от 1 до  $\frac{1}{2}$ , в стационарном решении ЗНД. В качестве характерных масштабов для всех остальных величин выбраны параметры перед фронтом ДВ. Данный подход, по-видимому, впервые был использован в работе [Erpenbeck, 1962]. Сегодня он является стандартным в теоретических исследованиях особенностей течений с волнами детонации, когда делается попытка найти общие закономерности для определенного класса смесей без привязки к кинетической модели какой-либо конкретной смеси. Детали процедуры приведения исходной системы уравнений к безразмерному виду можно найти в [Лопато, Уткин, 2016]. В выбранных масштабах физико-химические свойства реагирующей смеси полностью определяются заданием трех безразмерных параметров —  $\gamma$ ,  $Q$  и  $E$ . С учетом того, что плотность среды перед волной является переменной, изменяющейся по синусоидальному закону (см. далее), в качестве характерного масштаба плотности использовалось среднее значение плотности перед ЛУВ.

В общем случае показатель адиабаты свежей смеси и показатель продуктов детонации различаются как минимум из-за различного их состава. Кроме того, при температуре продуктов в несколько тысяч градусов Кельвина заметной становится температурная зависимость термодинамических свойств индивидуальных компонентов смеси. Это приводит к тому, что эффективный показатель адиабаты продуктов детонации может на десятки процентов отличаться от показателя адиабаты свежей смеси. По этой причине учет температурной зависимости термодинамических параметров задачи желателен для получения корректных количественных характеристик ДВ, особенно при использовании реалистичных детальных кинетических механизмов протекания химических реакций, и особенно в многомерном случае. Вместе с тем отсутствие учета температурной зависимости показателя адиабаты смеси не меняет качественной картины течения с точки зрения газодинамики детонации. В качестве примера можно привести работы, которые обсуждались во введении. В исследовании [Ma, Wang, Han, 2020] математическая модель учитывала детальный кинетический механизм реакций горения водорода, а также температурную зависимость коэффициентов теплоемкости компонентов смеси. В исследованиях [Kim et al., 2021; Kasimov, Goldin, 2021] использовался упрощенный подход с одной модельной реакцией и постоянным показателем адиабаты. При этом во всех указанных работах удалось получить и исследовать эффект стабилизации пульсаций параметров ДВ при ее распространении в среде с неоднородным распределением параметров.

Для определения скорости ЛУВ в СКФ определяющая система уравнений (3)–(6) записывается в характеристической форме вдоль характеристики  $C_+$ :

$$\begin{cases} \frac{dp}{dt} + \rho c \frac{dv}{dt} - (\gamma - 1)Q\rho\omega = 0, \\ \frac{dx}{dt} = v + c - D, \\ \rho_{\text{init}} = \rho_{\text{init}}(t), \quad p_{\text{init}} = p_{\text{init}}(t), \quad v_{\text{init}} = v_{\text{init}}(t), \end{cases} \quad (7)$$

где в первом уравнении системы через  $\frac{d}{dt}$  обозначена материальная производная вдоль характеристики  $C_+$ ,  $c$  — скорость звука. Индексом  $\text{init}$  обозначены параметры перед фронтом ЛУВ. В лабораторной системе координат это известные функции пространственной координаты. В рамках

настоящей работы

$$\rho_{\text{init}} = \rho_{\text{init}} \left( x_{\text{init}} + \int_0^t D(\tau) d\tau \right), \quad p_{\text{init}} = \text{const}, \quad v_{\text{init}} = 0. \quad (8)$$

Через  $x_{\text{init}}$  обозначена начальная координата ДВ. Идея определения скорости ЛУВ в результате рассмотрения системы уравнений (7) следует работе [Kasimov, Stewart, 2004], в которой изучалась динамика распространения ДВ в однородной среде, то есть в случае  $\rho_{\text{init}} = \text{const}$ .

Определяющая система уравнений решается на фиксированном отрезке  $[-H; 0]$ . Правая граница соответствует фронту ЛУВ. На ней выставляются граничные условия, определяемые соотношениями Ренкина–Гюгонно на скачке, движущемся с текущей скоростью  $D$ , которая находится в результате решения системы уравнений (7), (8) (см. следующий раздел). Длина расчетной области  $H$  выбиралась достаточно большой, чтобы для рассматриваемой задачи левая граница области не влияла на динамику движения фронта ЛУВ. Левая граница области считалась свободной, использовались граничные условия экстраполяции нулевого порядка. В качестве начального условия используется решение ЗНД. Конкретные формулы для начальных распределений параметров могут быть найдены, например, в [Лопато, Уткин, 2016].

С физической точки зрения сформулированная математическая постановка задачи описывает распространение ДВ в плоском канале с поперечным размером, превышающим критический, заполненном, например, водородно-кислородной смесью со значительным содержанием аргона. Детонация в подобной смеси является регулярной или слабонерегулярной [Strehlow, 1969]. Фронт волны является неплоским, но поперечные волны слабые, ячеистая структура ДВ регулярная. В этом случае характер распространения волны в наибольшей степени соответствует одномерной невязкой модели. Отметим, однако, что одномерные модели могут быть полезны для исследования динамических характеристик детонационных течений и в более общем случае, для смесей с нерегулярной детонацией, и в ситуациях, когда многомерные и вязкие эффекты играют роль. Ключевой идеей является выбор процедуры усреднения экспериментальных или расчетных данных, полученных с помощью более реалистичных моделей, с целью определения эффективных параметров упрощенной одномерной модели с глобальной кинетикой вида (6). Так, в [Radulescu, 2017] параметры  $A$  и  $E$  были определены калибровкой одномерной модели по кривой скорости ДВ в натурном эксперименте по распространению ДВ в расширяющемся канале, заполненном стехиометрической пропано-кислородной смесью. Далее найденные параметры использовались для одномерного расчета прямого инициирования детонации в этой же смеси. Было получено отличное количественное соответствие расчетных и экспериментальных данных для целого диапазона значений начального давления смеси, то есть была продемонстрирована прогностическая способность подобного подхода.

### 3. Вычислительный алгоритм

Вычислительный алгоритм основан на принципе расщепления по физическим процессам [Яненко, 1967; Strang, 1968]. При переходе с одного временного слоя на другой сначала интегрируются уравнения газовой динамики без учета протекания химических реакций ( $s = 0$  в (3)), и таким образом выполняется первый этап процедуры расщепления, а затем рассчитывается вклад химических реакций без учета конвекции (второй этап расщепления).

Опишем первый этап алгоритма. Дискретизация пространственной части (3) осуществляется с использованием метода конечных объемов, для интегрирования по времени используется явная схема Эйлера:

$$\frac{\tilde{Q}_i^{n+1} - Q_i^n}{\Delta t^n} + \frac{F_{i+1/2} - F_{i-1/2}}{\Delta x} = 0, \quad (9)$$

где  $i$  — индекс ячейки расчетной сетки, грани которой обозначаются индексами  $i + \frac{1}{2}$  и  $i - \frac{1}{2}$ ;  $\Delta x$  — размер ячейки;  $\Delta t^n$  — шаг интегрирования по времени, который выбирается динамически из условия устойчивости;  $\mathbf{Q}$  — искомая сеточная функция;  $\mathbf{F}$  — численный поток. Верхняя тильда обозначает, что найденное решение является результатом первого этапа процедуры расщепления по физическим процессам. Расчетная сетка является равномерной, число ячеек обозначим через  $N$ . Расчетные ячейки нумеруются от 1 до  $N$ . Численный поток  $\mathbf{F}_{i+1/2}$  рассчитывается с использованием сеточно-характеристического варианта монотонной схемы Куранта – Изако – Рис [Холодов, 1978], расширенной для случая двухкомпонентного газа и записанной в СКФ:

$$\mathbf{F}_{i+1/2} = \frac{1}{2} [\mathbf{F}(\mathbf{Q}_i^{n+}) + \mathbf{F}(\mathbf{Q}_{i+1}^{n-})] + \frac{1}{2} |\mathbf{B}|_{i+1/2} (\mathbf{Q}_i^{n+} - \mathbf{Q}_{i+1}^{n-}), \quad (10)$$

где

$$|\mathbf{B}|_{i+1/2} = \frac{1}{2} [\Omega_i^n |\Lambda_i| (\Omega_i^n)^{-1}]^+ + \frac{1}{2} [\Omega_{i+1}^n |\Lambda_{i+1}| (\Omega_{i+1}^n)^{-1}]^-,$$

$$|\Lambda_i| = \begin{bmatrix} |v_i^n - c_i^n - D^{n+1}| & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |v_i^n - D^{n+1}| & 0 & 0 \\ 0 & 0 & |v_i^n + c_i^n - D^{n+1}| & 0 \\ 0 & 0 & 0 & |v_i^n - D^{n+1}| \end{bmatrix}, \quad (11)$$

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

Здесь  $n$  — индекс текущего слоя по времени,  $h$  — удельная энтальпия. Верхний индекс «+» соответствует параметрам на правой грани  $i$ -й ячейки, а индекс «-» отвечает параметрам на левой грани  $(i + 1)$ -й ячейки. Данные величины определяются в результате minmod-восполнения вектора консервативных переменных [Куликовский, Погорелов, Семенов, 2012]. Использование именно численного потока Куранта – Изако – Рис, традиционно записываемого для уравнений Эйлера в лабораторной системе координат, продиктовано возможностью его прямого обобщения на случай системы уравнений (3). При этом происходит изменение только матрицы собственных векторов  $\Lambda$  (см. (11)).

На втором этапе процедуры расщепления по физическим процессам учитывается вклад источниковых членов, связанных с протеканием химических реакций, в результате решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dZ}{dt} = \omega = -AZ \exp\left(-\frac{E\rho}{p}\right), \\ \frac{d}{dt}\left(\frac{\rho}{p}\right) = -(\gamma - 1)Q\omega, \\ \rho = \text{const.} \end{cases}$$

Данная система решается в каждой расчетной ячейке явным методом Эйлера. Интегрирование производится от момента времени  $t^n$  до  $t^n + \Delta t^n$ . В качестве начального условия используется решение с предыдущего газодинамического этапа.

Основное отличие от предыдущих работ [Лопато, Уткин, 2016; Poroshyna, Lopato, Utkin, 2021] в части вычислительного алгоритма связано со способом интегрирования уравнений для нахождения скорости ЛУВ в связи с тем, что параметры среды перед ДВ теперь неоднородные.



Дискретизация системы уравнений (7) выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} [p_s^{n+1} - p_*^n] + \frac{1}{2} [(\rho c)_*^n + (\rho c)_s^{n+1}] = (\gamma - 1) Q \rho_s^{n+1} \omega_s^{n+1} \Delta t^n, \\ -x_*^n = (v_*^n + c_*^n - D^n) \cdot \Delta t^n, \\ \rho_{\text{init}}^{n+1} = \rho_{\text{init}} \left( x_{\text{init}} + L^n + \sqrt{\gamma \frac{P_{\text{init}}}{\rho_{\text{init}}^{n+1}}} M^{n+1} \Delta t^n \right). \end{cases} \quad (12)$$

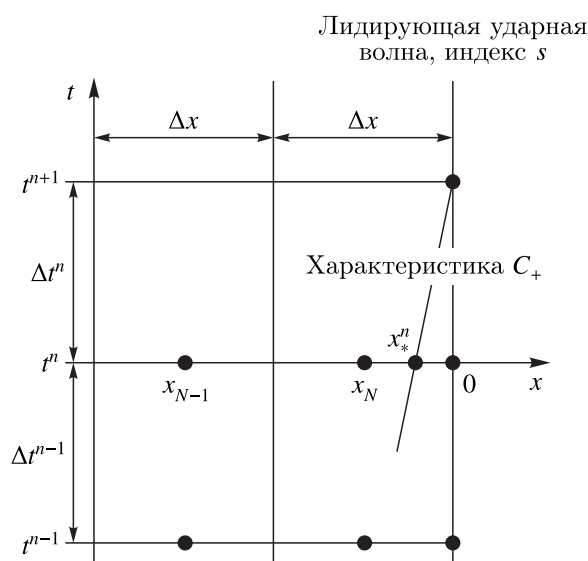


Рис. 1. Сеточный шаблон разностной схемы для расчета скорости ЛУВ

Индексом  $s$  обозначим параметры на скачке при  $x_s = 0$ , индексом  $*$  — параметры в точке пересечения характеристики  $C_+$  с осью  $x$  (см. рис. 1). Через  $L^n$  обозначен путь, пройденный ДВ на момент времени  $t^n$ :

$$L^n = \sum_{j=0}^n D^j \Delta t^j.$$

Параметры со звездочкой находятся с помощью линейной интерполяции по известным параметрам в точках  $x_N = -\frac{\Delta x}{2}$  (центр последней ячейки в расчетной области) и  $x_s = 0$ :

$$\begin{aligned} p_*^n &= p_s^n + \frac{x_*^n}{\Delta x} \cdot (p_s^n - p_N^n), & v_*^n &= v_s^n + \frac{x_*^n}{\Delta x} \cdot (v_s^n - v_N^n), \\ \rho_*^n &= \rho_s^n + \frac{x_*^n}{\Delta x} \cdot (\rho_s^n - \rho_N^n), & c_*^n &= \sqrt{\gamma \frac{p_*^n}{\rho_*^n}}. \end{aligned} \quad (13)$$

Из второго уравнения системы (7) следует выражение для координаты точки пересечения характеристики  $C_+$  с осью  $x$ :

$$x_*^n = -\frac{(c_s^n + v_s^n - D^n) \cdot \Delta t^n}{1 + 2 \cdot (c_s^n - c_N^n + v_s^n - v_N^n) \cdot \frac{\Delta t^n}{\Delta x}}. \quad (14)$$

Параметры в точке  $x_s = 0$  в момент времени  $t = t^{n+1}$  определяются из соотношений Ренкина–Гюгонио:

$$\begin{aligned} p_s^{n+1} &= p_{\text{init}} \cdot \left( 1 + \frac{2\gamma \left[ (M^{n+1})^2 - 1 \right]}{\gamma + 1} \right), & \rho_s^{n+1} &= \rho_{\text{init}}^{n+1} \cdot \frac{(\gamma + 1)(M^{n+1})^2}{(\gamma - 1)(M^{n+1})^2 + 2}, \\ v_s^{n+1} &= 2c_s^{n+1} \cdot \frac{(M^{n+1})^2 - 1}{(\gamma + 1)M^{n+1}}, & c_s^{n+1} &= \sqrt{\gamma \frac{p_s^{n+1}}{\rho_s^{n+1}}}. \end{aligned} \quad (15)$$

Скорость протекания химических реакций непосредственно за фронтом ЛУВ описывается формулой (6) с учетом того, что  $Z_s^{n+1} = 1,0$ :

$$\omega_s^{n+1} = -A \exp\left(\frac{-E\rho_s^{n+1}}{p_s^{n+1}}\right). \quad (16)$$

Подстановка (13)–(16) в первое и третье уравнения (12) приводит к системе из двух нелинейных алгебраических уравнений относительно неизвестных  $M^{n+1}$  и  $\rho_{\text{init}}^{n+1}$ , которая решается численно методом Ньютона.

Отметим, что численные методы решения нелинейных систем уравнений гиперболического типа, так или иначе основанные на характеристическом подходе, продолжают развиваться и в работах других авторов. Например, в работе [Суров, 2021] был предложен многомерный узловый метод характеристик для решения системы уравнений, описывающей течения двухфазных сред. В [Суров, 2023] представлен вариант обратного метода характеристик, в алгоритм которого введен дополнительный дробный временной шаг, что позволяет повысить точность вычислений за счет более точной аппроксимации характеристик.

Граничные условия реализуются путем задания параметров в фиктивных ячейках. Для расчета потоков через левую и правую грани расчетной области вводятся фиктивные ячейки с индексами  $m = 0$  и  $m = N + 1$ . На левой границе расчетной области применяется экстраполяция 0-го порядка:

$$\mathbf{Q}_0^n = \mathbf{Q}_1^n.$$

На правой границе параметры в фиктивной ячейке равняются текущим параметрам за фронтом ЛУВ:

$$\rho_{N+1}^n = \rho_s^n, \quad v_{N+1}^n = v_s^n, \quad p_{N+1}^n = p_s^n.$$

В [Порошина, Лопато, Уткин, 2022] описанный в данном разделе вычислительный алгоритм в случае инертной газовой смеси ( $s = 0$  в (3)) был верифицирован на задаче о распространении УВ в среде с участком конечной длины, на котором плотность среды увеличивается или уменьшается линейно. Также вычислительный алгоритм проверялся для случая непрерывно меняющейся по синусоидальному закону плотности среды [Shu, Osher, 1989]. В первом случае полученные численные решения сравнивались с приближенными аналитическими решениями [Chisnell, 1955; Whitham, 1958]. Во втором случае — с расчетным решением [Shu, Osher, 1989]. Полученные результаты свидетельствовали о корректности предложенной методики и ее численной реализации как минимум в случае инертной среды.

#### 4. Результаты вычислительных экспериментов

Выберем в качестве физико-химических параметров смеси следующие значения:

$$\gamma = 1,2, \quad Q = 50, \quad E = 25. \quad (17)$$

Из линейного анализа устойчивости решения ЗНД для случая одностадийной модели кинетики химических реакций известно [Erpenbeck, 1962], что при данных параметрах ДВ является устойчивой. В этом случае при равномерном распределении параметров среды перед фронтом ДВ она должна распространяться с постоянной скоростью ЧЖ:

$$D_{\text{CJ}} = \sqrt{\gamma + \frac{1}{2}(\gamma^2 - 1)Q} + \sqrt{\frac{1}{2}(\gamma^2 - 1)Q} \approx 6,81,$$

без пульсаций параметров за ее фронтом. Параметры (17) являются каноническими и использовались при изучении механизмов распространения ДВ в [Kasimov, Stewart, 2004; Henrick, Aslam, Powers, 2006; Лопато, Уткин, 2016; Kasimov, Goldin, 2021] и многих других работах. Длина расчетной области выбиралась равной  $H = 20$ . Расчет проводился на сетке с числом ячеек  $N_1 = 2000$ . Таким образом, на длину полупревращения приходилось 100 расчетных узлов. Как можно видеть из анализа работ во введении, это соответствует качеству сеточного разрешения в подобных исследованиях других авторов.

До момента времени  $t_1 = 500$  единиц ДВ распространялась по смеси с равномерным распределением параметров. Это было сделано для того, чтобы гарантированно установился самоподдерживающийся режим без влияния периода перестройки начального решения. Далее плотность среды менялась по синусоидальному закону (2) при  $k = 0,1$ :

$$\rho_{\text{init}} = 1,0 + 0,1 \cdot \sin \left( \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \int_{t_1}^t D(\tau) d\tau \right). \quad (18)$$

Относительно небольшая амплитуда возмущений  $k$  была выбрана на основе результатов работ, которые обсуждались во введении. Характерный масштаб  $k$  — общее место этих работ. Далее мы провели серию расчетов при варьировании длины волны возмущений  $\lambda$  от нескольких десятков до нескольких сотен единиц. В результате были получены несколько различных режимов пульсаций скорости ДВ и нелинейная зависимость амплитуды этих пульсаций от  $\lambda$  с резонансным усилением пульсаций для некоторого диапазона  $\lambda$ . Данный эффект был получен в [Kasimov, Goldin, 2021]. Вычислительный алгоритм, который предлагается в данной работе, задумывался с целью описания газодинамических механизмов подобных явлений. Подробный анализ наиболее сложных нелинейных режимов является предметом дальнейшей работы. Здесь же остановимся на более простом режиме при  $\lambda = 25$ , который тем не менее также подлежит характеристическому анализу в СКФ.

При  $\lambda = 25$  реализуется режим, близкий или в точности совпадающий с режимом *surfing mode* из [Kasimov, Goldin, 2021]. О полном совпадении мы судить не беремся, так как в [Kasimov, Goldin, 2021] среда характеризовалась не только переменной плотностью, но и массовой долей реагента. Данный режим обязан своим названием тем, что изменения параметров ДВ плавно следуют за изменением параметров среды перед ней. ДВ движется как по волне на серфинге.

На рис. 2 показывается, что действительно реализуется режим с периодом колебаний параметров, очень близким частоте колебаний плотности перед волной. Полученный результат может служить фактором верификации предлагаемого вычислительного алгоритма для случая химически реагирующей смеси. Для дополнительной проверки также были проведены расчеты на сетках с числом ячеек  $N_2 = 1500$  и  $N_3 = 1000$  (см. рис. 3). Наблюдается сеточная сходимость результатов моделирования. Действительно, обозначим через  $t_1$ ,  $t_2$  и  $t_3$  координаты первого локального максимума кривой скорости ДВ на рис. 3 на соответствующей расчетной сетке с мелкостью разбиения  $\Delta x_1 = \frac{1}{2000}$ ,  $\Delta x_2 = \frac{1}{1500}$ ,  $\Delta x_3 = \frac{1}{1000}$ :

$$t_1 \approx 602,88, \quad t_2 \approx 603,02, \quad t_3 \approx 603,25. \quad (19)$$

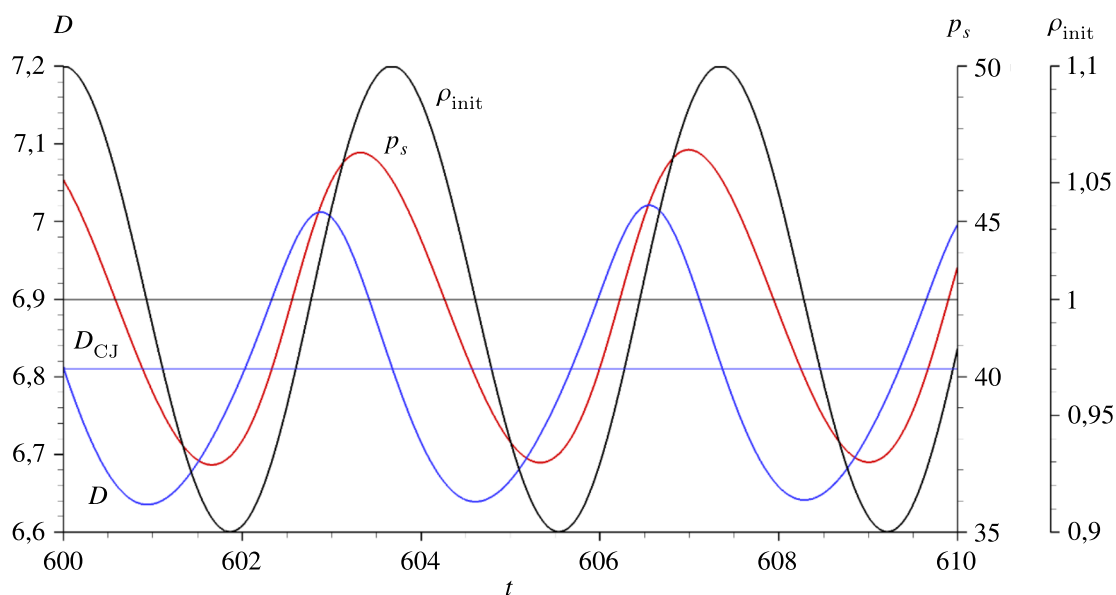


Рис. 2. Динамика изменения скорости ДВ (синяя кривая) и давления за ее фронтом (красная кривая). Черная кривая иллюстрирует динамику изменения плотности газа перед волной. Синяя горизонтальная линия — уровень скорости ЧЖ. Черная горизонтальная линия — средняя плотность газа перед волной

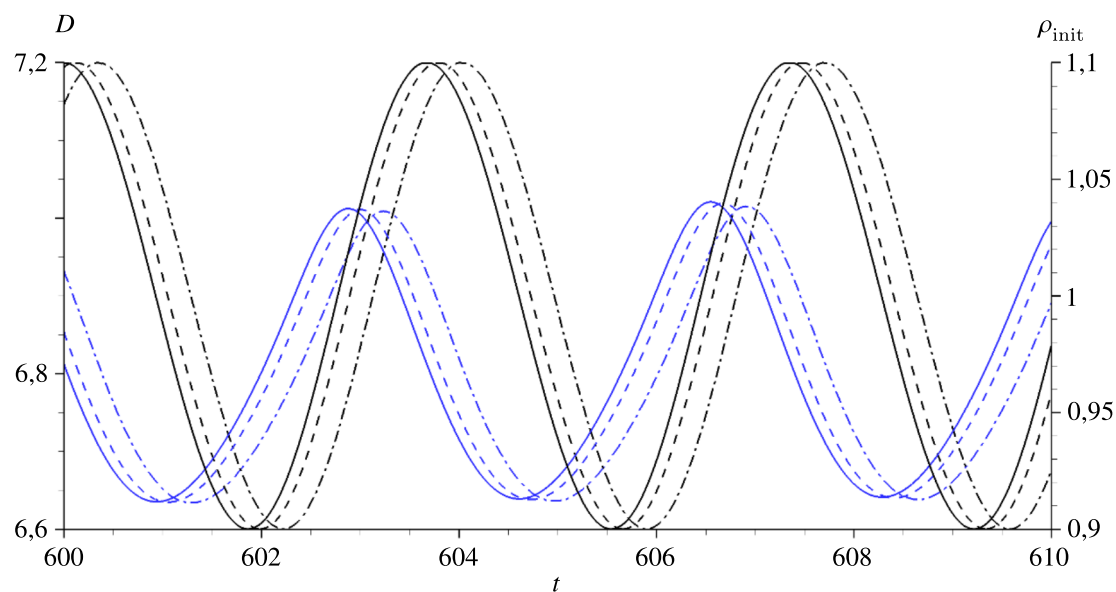


Рис. 3. Динамика изменения скорости ДВ (синий цвет) и плотности газа перед волной (черный цвет). Сплошные линии — расчет на сетке с числом ячеек  $N_1 = 2000$ , пунктирные — на сетке с числом ячеек  $N_2 = 1500$ , пунктирные с точкой — на сетке с числом ячеек  $N_3 = 1000$

Тогда оценка порядка точности вычислительного алгоритма  $k$  может быть выполнена с использованием экстраполяции Ричардсона. Погрешность определения координаты максимума скорости на каждой из трех сеток оценивается как

$$\begin{cases} t_1 - t_{\text{exact}} \approx C \Delta x_1^k, \\ t_2 - t_{\text{exact}} \approx C \Delta x_2^k, \\ t_3 - t_{\text{exact}} \approx C \Delta x_3^k, \end{cases} \quad (20)$$

где через  $t_{\text{exact}}$  обозначено неизвестное точное положение локального максимума скорости, а  $C$  — константа, не зависящая от расчетной сетки. Комбинируя попарно первое и второе уравнения (20), а также второе и третье уравнения, получим

$$r(k) = \frac{t_3 - t_2}{t_2 - t_1} \approx \frac{\Delta x_3^k - \Delta x_2^k}{\Delta x_2^k - \Delta x_1^k}. \quad (21)$$

Значение левой части (21), рассчитанное по реально получающимся значениям (19), составляет  $r_{\text{practice}} \approx 1,64$ . Значения правой части (21), полученной в результате теоретической оценки:  $r_{\text{theory}}(1) = 1,66$ . Таким образом, несмотря на то, что в вычислительном алгоритме реализовано кусочно-линейное восполнение сеточных функций внутри расчетных ячеек, на практике вычислительный алгоритм характеризуется первым порядком точности. Полученный результат не является неожиданным, данный вопрос рассматривался ранее в [Лопато, Уткин, 2016]. Итоговый первый порядок точности всего алгоритма связан с соответствующей точностью его составной части (12)–(16), отвечающей за определение скорости ЛУВ. В [Лопато, Уткин, 2016] показано, что если вместо линейного приближения характеристики в окрестности ЛУВ (см. рис. 1) использовать квадратичное приближение, то точность всего алгоритма повышается до значения, приближающегося на практике к двум.

Вернемся к анализу механизма распространения ДВ в неоднородной среде. В отличие от инертного случая, например, в задаче [Shu, Osher, 1989], которая рассматривалась с использованием разработанного подхода в [Порошина, Лопато, Уткин, 2022], в данном случае имеет место асинхронность колебаний параметров за фронтом ДВ и плотности газа перед волной. Асинхронность колебаний вызвана тем, что наряду с газодинамическим механизмом взаимодействия ДВ с неоднородностями плотности добавляется химический механизм. Попытаемся формализовать вклад химического механизма с количественной точки зрения.

Рис. 4 иллюстрирует рассчитанные пространственные распределения давления и абсолютной величины скорости протекания химических реакций в четыре последовательных момента времени, укладывающихся в один период колебаний параметров за фронтом ДВ. Для наглядности на графики также нанесено стационарное решение ЗНД для случая равномерного распределения параметров перед ЛУВ. В [Kasimov, Goldin, 2021] утверждается, что при распространении ДВ в режиме *surfing mode* в каждый момент времени распределения параметров за фронтом ДВ таковы, как если бы они были в стационарном решении ЗНД для текущих параметров перед фронтом волны. Как видно из рис. 4, это справедливо с некоторой степенью точности. Наиболее близкими сплошные и пунктирные линии должны быть на рис. 4 при  $t = 602,5$ , когда плотность газа перед фронтом ДВ наиболее близка к 1. Заметно, что по мере движения ДВ перестройка профилей под изменяющиеся перед волной условия происходит с некоторой задержкой. Так, градиент давления газа в окрестности ЛУВ в момент времени  $t = 602,5$  в нестационарном расчете сильно отличается от градиента давления в решении ЗНД.

Анализ рассчитанных распределений на рис. 4 позволяет сделать следующие интуитивно понятные выводы, в общем случае справедливые для любых одномерных расчетов детонации. Область интенсивного тепловыделения колеблется, то приближаясь, то отдаляясь от фронта ЛУВ. В момент наибольшего отдаления точки, в которой достигается максимум  $|\omega|$ , давление за фронтом ЛУВ минимально (см. рис. 4,  $t = 601,5$ ).

В момент наибольшего приближения максимума  $|\omega|$  давление за фронтом ЛУВ, наоборот, максимально (см. рис. 4,  $t = 603,5$ ). Подобные выводы не требуют разработки сложных вычислительных алгоритмов, однако распределения на рис. 4 не содержат информации о причинах происходящего.

Понимание механики распространения ДВ в рамках реализованного численного подхода во многом обеспечивается за счет следующего способа визуализации рассчитанных результатов. В плоскости  $(x, t)$  было построено семейство характеристических линий. Для построения

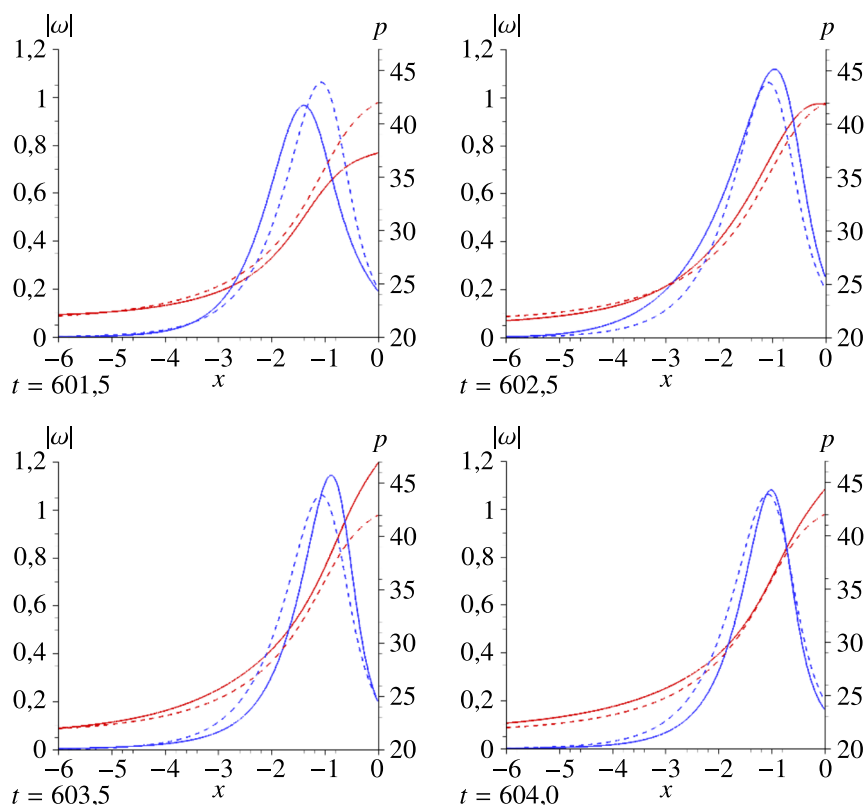


Рис. 4. Рассчитанные распределения давления (красный цвет) и скорости протекания химических реакций (синий цвет) в последовательные моменты времени. Пунктир — стационарное решение в случае распространения ДВ в однородной среде с плотностью 1. Распределения построены в СКФ, граница  $x = 0$  — всегда ЛУВ

характеристик  $C_+$ ,  $C_-$  и  $C_0$  решались уравнения

$$\begin{cases} \frac{dx_+}{dt} = v_+ + c_+ - D_{CJ}, \\ \frac{dx_-}{dt} = v_- - c_- - D_{CJ}, \\ \frac{dx_0}{dt} = v_0 - D_{CJ}, \end{cases} \quad (22)$$

где индекс  $i = +, -, 0$  указывает на принадлежность параметров к семейству характеристик  $C_i$ . Данные уравнения решаются численно с помощью явной схемы Эйлера:

$$\begin{cases} x_+^{n+1} = x_+^n + \Delta t^n \cdot (v_+ + c_+ - D_{CJ}), \\ x_-^{n+1} = x_-^n + \Delta t^n \cdot (v_- - c_- - D_{CJ}), \\ x_0^{n+1} = x_0^n + \Delta t^n \cdot (v_0 - D_{CJ}). \end{cases} \quad (23)$$

Скорость газа и скорость звука в точках  $x_i^n$  определяются с помощью линейной интерполяции по параметрам в центрах ячеек, между которыми попадает характеристика:

$$\begin{cases} v_i^n = v_m^n + \frac{v_{m+1}^n - v_m^n}{\Delta x} \cdot (x_i^n - x_m), & x_m \leq x_i^n \leq x_{m+1}, \\ c_i^n = c_m^n + \frac{c_{m+1}^n - c_m^n}{\Delta x} \cdot (x_i^n - x_m), & x_m \leq x_i^n \leq x_{m+1}. \end{cases} \quad (24)$$

В наших предыдущих работах характеристики строились в той же системе координат, в которой проводился расчет, то есть в СКФ. Поэтому в правых частях уравнений (22) и (23) вычиталась текущая скорость ЛУВ  $D$ . В данном случае характеристики строятся в системе координат, движущейся против волны со скоростью  $D_{СД}$ , то есть со средней скоростью движения ДВ. За счет этого удастся визуализировать траекторию движения фронта ДВ в этой системе координат, что дает дополнительное понимание динамики движения ДВ. Для рассматриваемых в статье задач характеристики  $C_+$  направлены по направлению к правой границе расчетной области, то есть к ЛУВ. Остальные характеристики имеют противоположный наклон. Уравнения для характеристик  $C_+$  решаются, пока они не придут на правую границу расчетной области. Уравнения для характеристик  $C_-$  и  $C_0$  решаются, пока они не выйдут за пределы расчетной области слева. Все характеристики  $C_+$  выпускались из точек на оси  $t = 0$ , находящихся на равном расстоянии друг от друга. Характеристики  $C_-$  и  $C_0$  выпускались из точек на правой границе, также находящихся на равном расстоянии друг от друга.

Проанализируем механизм распространения ДВ на том же самом отрезке времени от 600 до 610 единиц, что и на рис. 2, но с использованием характеристик в пространстве  $(x, t)$  (см. рис. 5). Цветовая карта соответствует пространственным распределениям  $|\omega|$ , построенным в промежуточные моменты времени на рассматриваемом временном интервале. Вообще говоря, ДВ представляет собой сложную структуру, состоящую из зоны индукции, в которой происходит накопление активных радикалов без тепловыделения, и зоны реакции, в которой происходит тепловыделение. В рамках используемой одностадийной модели кинетики невозможно явно отделить одну зону от другой, поскольку для данной модели кинетики тепловыделение, пусть с небольшой скоростью, начинается сразу за фронтом ЛУВ, а заканчивается в бесконечности. Это значительный недостаток одностадийной кинетической схемы. Однако в качестве меры зоны индукции в каждый момент времени можно предложить выбрать расстояние за фронтом ЛУВ, на котором  $|\omega|$  достигает максимума. Данное предположение оказалось плодотворным для дальнейшего анализа. По точкам, в которых достигается максимум  $|\omega|$  в каждый момент времени, на рис. 5 была построена линия  $|\omega|_{\max}$ .

Выберем на кривой  $|\omega|_{\max}$  одну из точек, максимально отстоящих от фронта ЛУВ, и обозначим ее через  $A_1$ . Среди множества построенных по описанному выше принципу (22)–(24) характеристик  $C_+$  выберем ту, которая проходит через точку  $A_1$ , конечно, с определенной степенью точности. Точку пересечения этой характеристики с ЛУВ обозначим как  $B_1$ . Далее среди множества характеристик  $C_0$  выберем ту, которая проходит через точку  $B_1$ . Напомним, в данной задаче характеристики  $C_+$  и  $C_0$  имеют наклоны разных знаков. Вдоль характеристик  $C_+$  направо распространяются возмущения, определяющие скорость движения ЛУВ. Характеристики  $C_0$  — это траектории жидких частиц, которые проходят через фронт ЛУВ и двигаются за ним дальше. Обозначим через  $A_2$  точку пересечения характеристики  $C_0$  с кривой  $|\omega|_{\max}$ . Обратим внимание, что с высокой степенью точности найденная таким образом точка  $A_2$  оказалась одной из точек на кривой  $|\omega|_{\max}$ , максимально приближенной к фронту ЛУВ. Далее проведем построения, аналогичные только что проделанным. Возьмем характеристику  $C_+$ , проходящую через точку  $A_2$ . Получим точку  $B_2$ . И далее возьмем характеристику  $C_0$ , проходящую через точку  $B_2$ , и получим точку  $A_3$ . Точка  $A_3$  оказывается точкой, максимально отстоящей от фронта ЛУВ. Таким образом, один период пульсаций параметров ДВ оказывается описанным с точки зрения характеристик, по которым в сжимаемой среде распространяются возмущения.

Тот факт, что в анализе не участвовали характеристики  $C_-$ , является свойством конкретного рассмотренного режима. Полученный характеристический механизм распространения ДВ очень напоминает механизм, описанный в [Leung, Radulescu, Sharpe, 2010] для так называемого высокочастотного режима распространения детонации в рамках двухстадийной кинетики химических реакций. Базовым элементом там также являлся характеристический треугольник

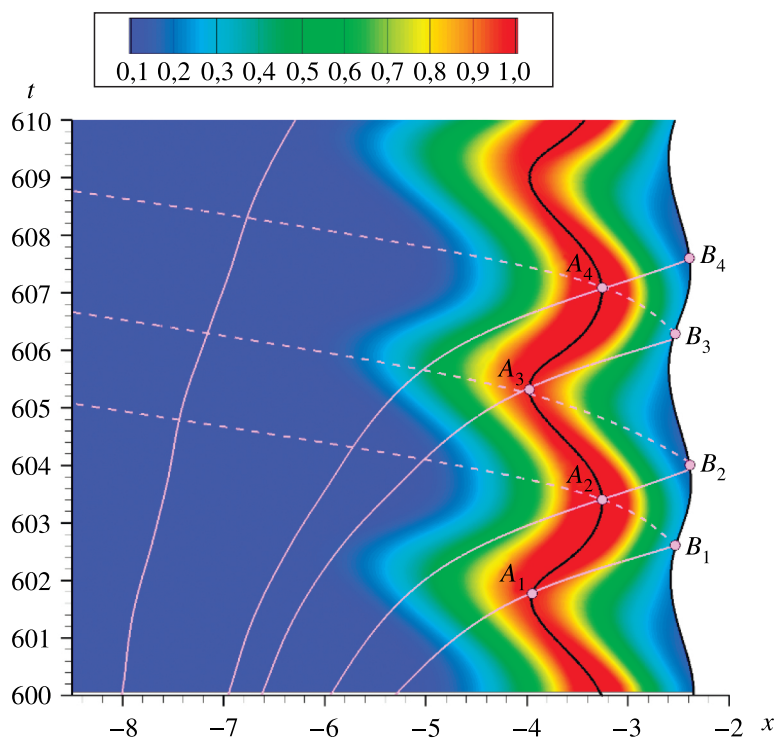


Рис. 5. Динамика распространения ДВ в плоскости  $(x, t)$ , закрашенной распределением  $|\omega|$ . Сплошные розовые линии — характеристики  $C_+$ , пунктирные розовые линии — характеристики  $C_0$ . Черная кривая  $B_1B_2B_3B_4$  — ЛУВ, черная кривая  $A_1A_2A_3A_4$ , она же  $|\omega|_{\max}$ , построена по точкам, в которых достигается максимум  $|\omega|$  в каждый момент времени

вида  $B_1A_2B_2$  из характеристик  $C_0$  и  $C_+$ . Высокочастотный режим в [Leung, Radulescu, Sharpe, 2010] характеризовался периодом собственных пульсаций ДВ, превышающим, но соизмеримым с периодом индукции. В данном случае также период пульсаций параметров составляет около шести единиц времени, то есть около шести единиц характерного временного масштаба задачи, который можно трактовать как период индукции. Возможно, это и определило схожесть реализующихся механизмов.

Рис. 5 содержит не только качественную, но и количественную информацию о механизме распространения ДВ. Характеристический анализ позволяет оценить максимальное и минимальное время распространения возмущений вдоль характеристик  $C_+$  в «зоне индукции», то есть в области между кривой  $|\omega|_{\max}$  и ЛУВ. Максимальное время определяется характеристикой  $A_1B_1$ , оно составляет  $\Delta t_{\max} = t_{B_1} - t_{A_1} \approx 0,8$ . Минимальное время определяется характеристикой  $A_2B_2$  и составляет  $\Delta t_{\min} = t_{B_2} - t_{A_2} \approx 0,5$ . Время  $\Delta t_{\max}$  в точности соответствует сдвигу по фазе колебаний кривой скорости ДВ и плотности газа перед волной, черной и синей кривых на рис. 2. Другими словами, сдвиг по фазе оценивается как максимальное время распространения акустических возмущений внутри зоны индукции.

## 5. Заключение

Итак, в настоящей работе предложен вычислительный алгоритм для моделирования одномерных течений газа с волнами детонации в системе координат, связанной с лидирующим скачком, в рамках одностадийной модели кинетики химических реакций для случая переменной плотности газа перед волной. Основная идея алгоритма основывается на работе [Kasimov,



Stewart, 2004]. В течение нескольких последних лет мы развивали этот алгоритм в работах [Лопато, Уткин, 2016] (повышение точности алгоритма за счет квадратичной аппроксимации характеристики), [Poroshyna, Lopato, Utkin, 2021] (развитие алгоритма для двухстадийной модели кинетики) и [Порошина, Лопато, Уткин, 2022] (развитие алгоритма для неоднородной плотности перед волной, инертный случай). Текущая работа во многом мотивирована исследованиями в области создания двигателей, использующих вращающуюся детонацию (см., например, [Фролов, Иванов, 2021; Левин, Мануйлович, Марков, 2022; Быковский, Ждан, Ведерников, 2022]), которые в настоящее время интенсивно проводятся по всему миру. Сведения о том, как происходит смешение топливно-воздушной смеси [Solomatin, Semenov, 2021], как детонация распространяется в неоднородных средах и, главное, каким образом можно управлять устойчивостью этих процессов, представляют сегодня значительный интерес.

Разработанный алгоритм был применен для описания распространения устойчивой детонации. Для однородной среды данный режим является каноническим и широко изученным. Амплитуда и длина волны возмущения плотности были выбраны такими, что реализовался известный в литературе достаточно мягкий режим распространения детонации. Частоты колебаний параметров за фронтом детонационной волны соответствовали частоте колебаний параметров среды перед ней. В результате проведенного характеристического анализа было показано, что в этом случае один цикл колебаний параметров за фронтом ДВ можно схематично разложить на два прохода характеристик  $C_+$  и два прохода характеристик  $C_0$  по условной зоне индукции. В качестве зоны индукции была выбрана область между ЛУВ и кривой из точек максимальной скорости тепловыделения в каждый момент времени. Сдвиг по фазе между кривыми колебания скорости ДВ и плотности газа перед волной может быть оценен как максимальное время прохождения характеристики  $C_+$  по зоне индукции.

Предложенный в работе алгоритм понятным образом расширяем для случая, когда среда характеризуется не только переменной плотностью, но и другими параметрами. Дополнительные условия на другие параметры по аналогии с плотностью могут быть добавлены в систему уравнений (12). Также алгоритм может быть применен для исследования прохождения детонационной волны через один или несколько слоев инертного газа различной ширины (см., например, [Tropin, Bedarev, 2021]). Другим естественным расширением алгоритма может быть учет потерь импульса и энергии за счет взаимодействия детонации со стенками канала или с частицами / пористой средой в канале (детонация с потерями); см. [Bivol, Golovastov, 2021]. Представляется, что описанная методика может быть также полезна для описания структуры детонации в многофазной среде, когда структура детонационной волны становится еще более сложной (см., например, [Хмель, Федоров, 2018]). Расчет в системе координат, связанной с лидирующим скачком, с высоким пространственным разрешением позволяет при умеренных вычислительных затратах, на порядок меньших, чем при использовании традиционных подходов, выявить ключевые особенности структуры течения. Данный подход также может представлять интерес с точки зрения образовательного процесса в области вычислительной механики сжимаемых сред. Он базируется на существенных свойствах определяющей системы уравнений и наглядно демонстрирует понятие характеристик при решении конкретных задач.

Наши дальнейшие исследования будут связаны с анализом газодинамических механизмов резонансного усиления и регуляризации детонации, которые могут реализовываться при распространении детонационной волны в неоднородной среде. Интерес представляют режимы, которые реализуются при различных длинах волн и амплитудах возмущений параметров среды перед волной в (18). Вероятно, в дальнейших исследованиях предпочтение стоит отдавать моделям кинетики химических реакций с конечной зоной индукции/реакции для более наглядного поведения характеристических линий (двухстадийная модель кинетики или одностадийная модель с нецелым порядком реакции).

## Список литературы (References)

- Брагин М. Д., Рогов Б. В.* Високоточные бикомпактные схемы для численного моделирования течений многокомпонентных газов с несколькими химическими реакциями // Математическое моделирование. — 2020. — Т. 32, № 6. — С. 21–36.  
*Bragin M. D., Rogov B. V.* High-order bicomcompact schemes for numerical modeling of multispecies multi-reaction gas flow // Mathematical Models and Computer Simulations. — 2020. — Vol. 13. — P. 106–115. (Original Russian paper: *Bragin M. D., Rogov B. V.* Vysokotochnye bikompaktnye skhemy dlya chislenogo modelirovaniya techenii mnogokomponentnykh gazov s neskol'kimi khimicheskimi reaktsiyami // Matematicheskoe modelirovanie. — 2020. — Vol. 32, No. 6. — P. 21–36.)
- Быковский Ф. А., Ждан С. А., Ведерников Е. Ф.* Непрерывная спиновая детонация смеси «керосин – воздух» в проточной вихревой радиальной камере диаметром 500 мм // Физика горения и взрыва. — 2022. — Т. 58, № 1. — С. 40–52.  
*Bykovskii F. A., Zhdan S. A., Vedernikov E. F.* Continuous spin detonation of the kerosine-air mixture in a flow-type radial vortex combustor 500 mm in diameter // Combustion, Explosion, and Shock Waves. — 2022. — Vol. 58, No. 1. — P. 34–45. (Original Russian paper: *Bykovskii F. A., Zhdan S. A., Vedernikov E. F.* Nepreryvnaya spinovaya detonatsiya smesi kerosin – vozdukh v protochnoi vikhrevoi radial'noi kamere diametrom 500 mm // Fizika goreniya i vzryva. — 2022. — Vol. 58, No. 1. — P. 40–52.)
- Куликовский А. Г., Погорелов Н. В., Семенов А. Ю.* Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. — М.: Физматлит, 2012.  
*Kulikovskii A. G., Pogorelov N. V., Semenov A. Yu.* Matematicheskoe voprosy chislenogo resheniya giperbolicheskikh sistem uravnenii [Mathematical issues of numerical solution of hyperbolic systems of equations]. — Moscow: Fizmatlit, 2012 (in Russian).
- Левин В. А., Мануйлович И. С., Марков В. В.* Многоголовая вращающаяся детонация в кольцевом зазоре // Доклады Российской академии наук. Физика, технические науки. — 2022. — Т. 502, № 1. — С. 45–49.  
*Levin V. A., Manuylovich I. S., Markov V. V.* Multiheaded rotating detonation in an annular gap // Doklady Physics. — 2022. — Vol. 67, No. 1. — P. 23–26. (Original Russian paper: *Levin V. A., Manuylovich I. S., Markov V. V.* Mnogogolovaya vrashchayushchayasya detonatsiya v kol'tsevom zazore // Doklady Rossiiskoi akademii nauk. Fizika, tekhnicheskije nauki. — 2022. — Vol. 502, No. 1. — P. 45–49.)
- 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. — Т. 56, № 5. — С. 856–868.  
*Lopato A. I., Utkin P. S.* Detailed simulation of the pulsating detonation wave in the shock-attached frame // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 2016. — Vol. 56, No. 5. — P. 841–853. (Original Russian paper: *Lopato A. I., Utkin P. S.* Detal'noe matematicheskoe modelirovanie pul'siruyushchei detonatsionnoi volny v sisteme koordinat, svyazannoi s lidiruyushchim skachkom // Zhurnal vychislitel'noi matematiki i matematicheskoi fiziki. — 2016. — Vol. 56, No. 5. — P. 856–868.)
- Лопато А. И., Уткин П. С.* Математическое моделирование пульсирующей волны детонации с использованием ENO-схем различных порядков аппроксимации // Компьютерные исследования и моделирование. — 2014. — Т. 6, № 5. — С. 643–653.  
*Lopato A. I., Utkin P. S.* Matematicheskoe modelirovanie pul'siruyushchei volny detonatsii s ispol'zovaniem ENO-shem razlichnykh porjadkov approksimatsii [Mathematical modeling of pulsating detonation wave using ENO-schemes of different approximation orders] // Computer Research and Modeling. — 2014. — Vol. 6, Issue 5. — P. 643–653 (in Russian).
- Порошина Я. Э., Лопато А. И., Уткин П. С.* Характеристический анализ динамики распространения ударной волны в среде с неравномерным распределением плотности // Химическая физика. — 2022. — Т. 41, № 8. — С. 48–58.  
*Poroshyna Ya. E., Lopato A. I., Utkin P. S.* Characteristic analysis of the dynamics of shock wave propagation in a medium with a nonuniform density distribution // Russian Journal of Physical Chemistry B. — 2022. — Vol. 16, No. 4. — P. 670–679. (Original Russian paper: *Poroshyna Ya. E., Lopato A. I., Utkin P. S.* Kharakteristicheskiy analiz dinamiki rasprostraneniya udarnoy volny v srede s neravnomernym raspredeleniem plotnosti // Khimicheskaya fizika. — 2022. — Vol. 41, No. 8. — P. 48–58.)
- Суров В. С.* Многомерный узловый метод характеристик для гиперболических систем // Компьютерные исследования и моделирование. — 2021. — Т. 13, № 1. — С. 19–32.  
*Surov V. S.* Mnogomernyi uzlovoi metod kharakteristik dlya giperbolicheskikh sistem [Multidimensional nodal method of characteristics for hyperbolic systems] // Computer Research and Modeling. — 2021. — Vol. 13, Issue 1. — P. 19–32 (in Russian).

- Суров В. С.* Об одной модификации узлового метода характеристик // Компьютерные исследования и моделирование. — 2023. — Т. 15, № 1. — С. 29–44.  
*Surov V.S.* Ob odnoy modifikatsii uzlovogo metoda kharakteristik [About one version of the nodal method of characteristics] // Computer Research and Modeling. — 2023. — Vol. 15, Issue 1. — P. 29–44 (in Russian).
- Фролов С. М., Иванов В. С.* Прорыв в теории прямооточных двигателей // Химическая физика. — 2021. — Т. 40, № 4. — С. 68–75.  
*Frolov S.M., Ivanov V.S.* Breakthrough in the theory of ramjets // Russian Journal of Physical Chemistry B. — 2021. — Vol. 15, No. 2. — P. 318–325. (Original Russian paper: *Frolov S.M., Ivanov V.S.* Proryv v teorii pryamotochnykh dvigatelei // Khimicheskaya fizika. — 2021. — Vol. 40, No. 4. — P. 68–75.)
- Хмель Т. А., Федоров А. В.* Моделирование плоских волн детонации в газозвеси наноразмерных частиц алюминия // Физика горения и взрыва. — 2018. — Т. 56, № 2. — С. 73–82.  
*Khmel T.A., Fedorov A.V.* Modeling of plane detonation waves in a gas suspension of aluminum nonaparticles // Combustion, Explosion, and Shock Waves. — 2018. — Vol. 54, No. 2. — P. 189–199. (Original Russian paper: *Khmel T.A., Fedorov A.V.* Modelirovanie ploskikh voln detonatsii v gazovzvesi nanorazmernykh chastits alyuminiya // Fizika goreniya i vzryva. — 2018. — Vol. 54, No. 2. — P. 73–82.)
- Холодов А. С.* О построении разностных схем с положительной аппроксимацией для уравнений гиперболического типа // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 1978. — Т. 18, № 6. — С. 1476–1492.  
*Kholodov A.S.* Construction of difference schemes with a positive approximation for equations of hyperbolic type // USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 1978. — Vol. 18, No. 6. — P. 116–132. (Original Russian paper: *Kholodov A.S.* O postroenii raznostnykh skhem s polozhitel'noi approksimatsiei dlya uravnenii giperbolicheskogo tipa // Zhurnal vychislitel'noi matematiki i matematicheskoi fiziki. — 1978. — Vol. 18, No. 6. — P. 1476–1492.)
- Яненко Н. Н.* Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. — М.: Наука, 1967.  
*Janenko N.N.* Metod drobnnykh shagov reshenija mnogomernykh zadach matematicheskoi fiziki [Fractional steps method for solving multidimensional problems of mathematical physics]. — Moscow: Nauka, 1967 (in Russian).
- Bivol G. Yu., Golovastov S. V.* Suppression of hydrogen-air detonation using porous materials in the channels of different cross section // International Journal of Hydrogen Energy. — 2021. — Vol. 46, No. 24. — P. 13471–13483.
- Chisnell R. F.* The normal motion of a shock wave through a non-uniform one-dimensional medium // Proceedings of the Royal Society A. — 1955. — Vol. 232, No. 1190. — P. 350–370.
- Erpenbeck J.J.* Stability of steady-state equilibrium detonations // Physics of Fluids. — 1962. — Vol. 5. — P. 604–614.
- 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. — Vol. 213. — P. 311–329.
- Kasimov A.R., Goldin A. Yu.* Resonance and mode locking in gaseous detonation propagation in a periodically nonuniform medium // Shock Waves. — 2021. — Vol. 31. — P. 841–849.
- 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. — Vol. 16, No. 10. — P. 3566–3578.
- Kim M., Mi X., Kiyanda C.B., Ng H.D.* Nonlinear dynamics and chaos regularization of one-dimensional pulsating detonations with small sinusoidal density perturbations // Proceedings of the Combustion Institute. — 2021. — Vol. 38. — P. 3701–3708.
- Leung C., Radulescu M.I., Sharpe G.J.* Characteristics analysis of the one-dimensional dynamics of chain-branching detonations // Physics of Fluids. — 2010. — Vol. 22. — Paper 126101.
- Ma W.J., Wang C., Han W.H.* Effect of concentration inhomogeneity on the pulsating instability of hydrogen–oxygen detonations // Shock Waves. — 2020. — Vol. 30. — P. 703–711.
- Mi X., Higgins A.J., Goroshin S., Berghthorson J.M.* The influence of spatial discreteness on the thermo-diffusive instability of flame propagation with infinite Lewis number // Proceedings of the Combustion Institute. — 2017. — Vol. 36, Issue 2. — P. 2359–2366.
- Ott E., Grebogi C., Yorke J.A.* Controlling chaos // Physical Review Letters. — 1990. — Vol. 64, Issue 11. — P. 1196–1199.

- Poroshyna Ya., Lopato A., Utkin P.* Nonlinear dynamics of pulsating detonation wave with two-stage chemical kinetics in the shock-attached frame // *Journal of Inverse and Ill-Posed Problems*. — 2021. — Vol. 29, No. 4. — P. 557–576.
- Radulescu M. I.* The usefulness of a 1D hydrodynamic model for the detonation structure for predicting detonation dynamic parameters // *Proceedings of the 26th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems*. Boston, MA, USA, July 30th – August 4th, 2017. — Paper 1140. — <http://www.icders.org/ICDERS2017/abstracts/ICDERS2017-1140.pdf>
- Shu C.-W., Osher S.* Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, II // *Journal of Computational Physics*. — 1989. — Vol. 83. — P. 32–78.
- Solomatin R. S., Semenov I. V.* Modelling of hydrogen-air supersonic mixing and combustion in near-wall region // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*. — 2021. — Vol. 36, No. 2. — P. 101–115.
- Strang G.* On the construction and comparison of difference schemes // *SIAM Journal on Numerical Analysis*. — 1968. — Vol. 5, No. 3. — P. 560–517.
- Strehlow R.* The nature of transverse waves in detonations // *Acta Astronautica*. — 1969. — Vol. 14. — P. 539–548.
- Tropin D., Bedarev I.* Physical and mathematical modeling of interaction of detonation waves with inert gas plugs // *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. — 2021. — Vol. 72. — Paper No. 104595.
- Whitham G. B.* On the propagation of shock waves through regions of non-uniform area or flow // *Journal of Fluid Mechanics*. — 1958. — Vol. 4, Issue 4. — P. 337–360.