

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ  
ДВУМЕРНОЙ ГАЗОВОЙ ДЕТОНАЦИИ СМЕСИ  $H_2-O_2-Ar$ 

А. В. Троцюк

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск

Численно исследована двумерная структура детонационных волн в смеси  $2H_2 + O_2 + X Ar$  в широком диапазоне начальных давлений и степеней разбавления. Установлено хорошее количественное совпадение результатов расчетов с экспериментальными данными. Проведено исследование влияния способа инициирования (одним очагом или несколькими, симметричное или несимметричное) на установившуюся структуру детонационных волн. Изучены изменения структуры волны при вариации ширины канала. При этом установлено качественно различное поведение двумерной структуры волны для смесей с  $X = 0$  и  $X > 0$ .

Обширные экспериментальные и теоретические исследования детонации в газах [1, 2] показали, что реальная структура детонационного фронта сильно отличается от той, что следует из одномерной теории [3]. Течение за плоским фронтом детонационной волны (ДВ) неустойчиво [4, 5]. Рост начальных возмущений приводит к тому, что ведущий фронт перестает быть гладким и приобретает сложную, повторяющуюся во времени структуру. Основной элемент этой структуры — тройная конфигурация, состоящая из ножки Маха (пересеченная ДВ), падающей волны (затухающая ДВ) и примыкающей к ним в тройной точке отраженной (поперечной) волны.

Столкновения поперечных волн, движущихся по фронту ДВ во встречных направлениях, приводят к воспроизведению структуры фронта во времени. Траектории тройных точек представляют собой два пересекающихся семейства линий, которые образуют сетку из ромбовидных ячеек. Поперечный размер ячейки  $a$ , определяемый как среднее расстояние между траекториями одного семейства, измеренное в направлении, перпендикулярном к направлению распространения ДВ, является характерным размером структуры фронта ДВ.

Цель настоящей работы — численное моделирование многофронтной структуры двумерной ДВ. Решению этой проблемы посвящено значительное количество исследований [6–22]. При их анализе можно выявить следующие закономерности и различия в подходах к описанию течения сжимаемой химически реагирующей среды.

Динамика сплошной среды обычно описывалась уравнениями Эйлера. В [22] наряду с уравнениями Эйлера решались уравнения Навье — Стокса, проведено сравнение полученных результатов. В [18] упоминается об исследованиях, в которых использовались уравнения Навье — Стокса в усеченном виде (без учета молекулярной диффузии).

Термическое уравнение состояния вещества записывается в приближении идеального газа:  $p/\rho = RT/\mu$ , где  $p$  — давление,  $\rho$  — плотность,  $T$  — температура,  $\mu$  — средняя молярная масса смеси.

Основное различие наблюдается в использовании моделей кинетики химических реакций и энерговыделения. В [20–22] применена очень идеализированная модель одностадийной необратимой мономолекулярной реакции превращения  $A \rightarrow B$  с аррениусовской зависимостью скорости реакции от температуры. Аналогичная модель использована в [2] для описания детонационных течений и в [4, 5] для аналитического исследования устойчивости плоского детонационного фронта. В [6–9, 17] использовалась двухстадийная модель кинетики (первая стадия — период индукции, вторая — этап тепловыделения), впервые предложенная в [23]. Вторая стадия (тепловыделение) описывалась согласно кинетическому уравнению [3]. Однако в [24] показано, что и вид этого уравнения, и выбор констант в нем достаточно произвольны. Применение кинетики этого типа дает неправильную (очень сильную) зависимость скорости тепловыделения от температуры. Здесь же построена модель кинетики химических реак-

ций, основанная на анализе системы детальных уравнений с использованием физически ясных приближений.

В [10–16] также применялась двухстадийная модель кинетики. Однако, в отличие от упомянутых выше работ, здесь второй этап модели откалиброван по данным, полученным из расчета одномерной ДВ с использованием детального кинетического механизма. Упрощенный подход в [10–14] предполагал постоянную скорость тепловыделения в течение заданного отрезка времени (5 и 20 мкс в [13]) после окончания периода индукции. Более сложный подход в [13] заключался в построении набора функций для тепловыделения, средней молярной массы смеси и отношения удельных теплоемкостей  $\gamma = c_p/c_v$ . В [13] сравнением этих двух описаний выявлено влияние скорости и величины тепловыделения на структуру одномерной ДВ. В [15, 16] первую и вторую стадии описывали с помощью двух уравнений аррениусовского типа, в которых константы определены по детальным кинетическим расчетам. Численное моделирование в [17, 18] проведено с использованием детального описания кинетики химических реакций.

Другим важным аспектом модели является вид калорического уравнения состояния вещества  $U = U(\rho, T)$ , где  $U$  — внутренняя энергия. В [6–9, 14, 17, 18] приближение совершенного газа  $\gamma = \text{const}$  приводит к выражению для термодинамической части внутренней энергии:  $U_T = p/(\gamma - 1)\rho$ . Один из вариантов этого подхода в [11, 12] состоит в использовании различных постоянных значений  $\gamma$  до и после ударного скачка. В [13] изучалась структура ДВ с различными моделями  $\gamma$ , в том числе и такими, где  $\gamma$  — функция температуры и химического состава смеси.

Правильное описание  $\gamma$  очень важно, поскольку любая модель химической кинетики предполагает сильную (экспоненциальную) зависимость скорости химических реакций от температуры. Однако температура не определяется непосредственно из системы уравнений, описывающих динамику сплошной среды, а выводится из калорического уравнения состояния. Таким образом, неправильное описание поля температуры приведет к существенному искажению процесса тепловыделения. Через  $\gamma$  осуществляется связь между той частью модели, которая описывает движение сплошной среды, и той, что отвечает за процесс химического

превращения вещества [13].

Химические реакции, протекающие в ДВ, приводят к изменению химического состава смеси и, соответственно, средней молярной массы  $\mu$ . Несмотря на это, в [6–9, 17–20] предполагалось, что  $\mu = \text{const}$ . В [10–16] ничего не сообщается о решении этой проблемы. И только в [17, 18] детальная кинетика дает правильное описание изменения химического состава среды.

Подробный анализ использования моделей с постоянными  $\gamma$  и  $\mu$  дан в [25].

Как показано в [26], необходимо проводить согласование моделей химической кинетики и калорического уравнения состояния с учетом второго начала термодинамики. При таком согласовании именно в состоянии химического равновесия энтропия достигает своего максимального значения, а соответствующий термодинамический потенциал — минимального. Во всех упомянутых выше работах полностью отсутствует понимание необходимости указанной процедуры. Ставя перед собой задачу точного описания течения химически реагирующей среды, авторы [6–16, 19–22] произвольно комбинируют различные, лучшие с их точки зрения модели кинетики и термодинамики. В случае использования детальной кинетики противоречий со вторым началом термодинамики не возникает при условии согласования скоростей прямой и обратной реакций в соответствии с законом действующих масс [27] (при описании детального кинетического механизма, как правило, приводятся коэффициенты только для скоростей прямых реакций).

Таким образом, можно констатировать, что моделирование процессов химического превращения вещества в ДВ далеко от совершенства. Положение в значительной степени может исправить применение модели кинетики химических реакций, развитой в [24, 28, 29], и согласованного с ней калорического уравнения состояния [26]. При этом (при сопоставимой точности результатов кинетических расчетов\*) не предъявляется слишком жестких требований к быстродействию и объему оперативной памяти компьютеров, как в случае моделирования с привлечением детального кинетического механизма [17, 18].

Моделирование процесса детонации

\*По сообщению П. А. Фомина. Неопубликованные результаты расчетов по детальному кинетическому механизму и по модели [26].

в реальных химически активных газовых смесях проводилось для стехиометрической водородно-кислородной смеси при двух степенях разбавления, а именно  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 70\% \text{Ar}$  [13, 14, 17, 18],  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 70\% \text{N}_2$  [13, 17] и  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 60\% \text{Ar}$  [11, 12], для водородно-кислородной смеси с различным содержанием аргона [15] и водородно-воздушной смеси с различной концентрацией водорода [16]. В работе [10] ячейка в стехиометрической водородно-воздушной смеси, собственно, и не была получена, была исследована динамика распространения одной поперечной волны в узком канале. Указанные исследования проведены лишь при значениях начального давления смеси 65 [11, 12], 50 [13, 14, 17, 18] и 760 Торр [15, 16].

В настоящей работе численно исследована структура детонации стехиометрической водородно-кислородной смеси в широком диапазоне разбавления аргоном (0 ÷ 70 %) и интервале начальных давлений 0,0866 ÷ 0,405 бар. Начальная температура полагалась равной 298,15 К. Проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными. Изучено влияние способа инициирования и изменения ширины канала на конечную установившуюся структуру фронта. Получена зависимость скорости детонационного фронта от его местоположения по длине ячейки.

### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В дальнейшем будем использовать следующие обозначения:  $\rho$  — плотность;  $u, v$  — скорости в направлении  $x$  и  $y$  соответственно;  $E, U$  — полная энергия и внутренняя энергия на единицу массы;  $E_D$  — средняя энергия диссоциации продуктов реакции;  $\mu$  — средняя молярная масса смеси;  $\mu_a, \mu_{\min}, \mu_{\max}$  — молярные массы смеси в атомарном, предельно диссоциированном и предельно рекомбинированном состояниях соответственно;  $Y$  — параметр индукции, в начале зоны индукции  $Y = 1$ , в конце  $Y = 0$ ;  $p$  — давление;  $T$  — температура;  $R$  — газовая постоянная;  $a, b$  — ширина и длина детонационной ячейки; индекс нуль относится к начальному состоянию.

Динамику сжимаемой химически реагирующей среды будем описывать двумерными уравнениями Эйлера

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{q})}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}(\mathbf{q})}{\partial y} = \mathbf{W}, \quad (1)$$

где

$$\mathbf{q} = (\rho, \rho u, \rho v, \rho E, \rho \mu, \rho Y)^T,$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{q}) = (\rho u, \rho u^2 + p, \rho uv, u(\rho E + p), \rho \mu u, \rho Y u)^T,$$

$$\mathbf{G}(\mathbf{q}) = (\rho v, \rho v^2 + p, \rho uv, v(\rho E + p), \rho \mu v, \rho Y v)^T,$$

$$\mathbf{W} = (0, 0, 0, 0, \rho W_\mu, \rho W_Y)^T,$$

$$E = U + (u^2 + v^2)/2.$$

Здесь  $W_\mu$  и  $W_Y$  — скорости изменения  $\mu$  и  $Y$  соответственно; индексом «т» обозначено транспонирование.

Начало координат совместим с левым нижним углом плоского прямоугольного канала шириной  $H$ , закрытого с одного конца. Ось  $x$  направим вдоль нижней стенки канала в направлении распространения ДВ, ось  $y$  — вверх перпендикулярно оси  $x$ .

Для описания химического превращения вещества воспользуемся двухстадийной моделью кинетики [23]: если  $1 \geq Y > 0$ , то

$$W_Y = -\frac{1}{\tau_{ind}}, \quad \ddot{W}_\mu = 0, \quad (2)$$

$$U = \frac{1}{\gamma_0 - 1} \frac{p}{\rho} + E_D \left( \frac{1}{\mu_0} - \frac{1}{\mu_{\min}} \right),$$

если  $Y = 0$ , то

$$W_Y = 0, \quad W_\mu = W_\mu(T, \mu, \rho), \quad (3)$$

$$U = U(T, \mu).$$

В данной работе первая, индукционная стадия ( $1 \geq Y > 0$ ) моделировалась согласно кинетике [30]:

$$\tau_{ind} = 4,17 \cdot 10^{-14} \exp \frac{18100}{RT} \times$$

$$\times [\text{O}_2]^{-1/2} [\text{H}_2]^{-1/2} \left[ \frac{\text{МОЛЬ} \cdot \text{С}}{\text{СМ}^3} \right].$$

После истечения периода индукции  $Y = 0$ , и этап тепловыделения будем описывать, следуя модели [24, 28, 29]:

$$W_\mu(T, \mu, \rho) = 4K_+ \rho^2 \frac{1}{\mu} \left( 1 - \frac{\mu}{\mu_{\max}} \right)^2 -$$

$$- A_2 T^{3/4} \rho \left( 1 - \exp \left( -\frac{\theta}{T} \right) \right)^{3/2} \times$$

$$\times \exp \left( -\frac{E_D}{RT} \right) \left( \frac{\mu}{\mu_{\min}} - 1 \right)$$

совместно с калорическим уравнением состояния [26]

$$U(T, \mu) = E_D \left( \frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{\min}} \right) + \left( \frac{3}{4} \left( \frac{\mu}{\mu_a} + 1 \right) + \frac{3}{2} \left( \frac{\mu}{\mu_a} - 1 \right) \frac{\theta/T}{\exp(\theta/T) - 1} \right) \frac{RT}{\mu}. \quad (4)$$

Все константы, входящие в два последних уравнения и относящиеся к исследуемой газовой смеси, рассчитывали согласно [26, 28, 29] до проведения вычислительных экспериментов; в процессе моделирования ДВ они не подвергались никаким вариациям с целью достижения наилучшего согласования результатов расчетов с экспериментальными данными. Например, для смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$  при  $p_0 = 0,2$  бар и  $T_0 = 298,15$  К  $E_D = 459,2089$  кДж/моль,  $\mu_{\min} = \mu_a = 6,005$  кг/кмоль,  $\mu_{\max} = 18,016$  кг/кмоль,  $\mu_0 = 12,011$  кг/кмоль,  $A_2 = 4,646561 \cdot 10^{10}$  м<sup>3</sup>/(кмоль·с·К<sup>3/4</sup>),  $K_+ = 6 \cdot 10^8$  м<sup>6</sup>/(кмоль<sup>2</sup>·с),  $\theta = 4000$  К.

Систему определяющих уравнений замкнем термическим уравнением состояния идеального газа:

$$\frac{p}{\rho} = \frac{RT}{\mu}. \quad (5)$$

На верхней, нижней и левой стенках канала ставились условия непротекания. На правой границе задано условие невозмущенного начального состояния газа  $\mathbf{q} = \mathbf{q}_0$ , где

$$\mathbf{q}_0 = (\rho_0, 0, 0, \rho_0 E_0, \rho_0 \mu_0, \rho_0)^T.$$

### ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

Гиперболическая система (1) совместно с соотношениями (2)–(5) решалась численно. Для этого была проведена следующая дискретизация в пространстве и времени. По оси  $y$  использовалась равномерная неподвижная сетка с общим числом ячеек  $N_y$  и размером счетной ячейки  $h_y = H/N_y$ . По оси  $x$  применялась подвижная сетка с общим числом ячеек  $N_x$ . Из них  $N_{x,1}$  ячеек образовывали равномерную сетку с размером ячейки  $h_x$ . Почти во всех расчетах  $h_x = h_y$ . Равномерная сетка перемещалась вместе с ведущим ударным фронтом ДВ таким образом, чтобы охватить область течения с большими градиентами параметров и/или ударными скачками и тем самым добиться детального разрешения структуры ДВ.

Оставшиеся  $N_{x,2} = N_x - N_{x,1}$  ячеек образовывали неравномерную сетку, которая занимала область от закрытого левого конца канала до начала равномерной сетки. Применение техники адаптивных подвижных сеток с локальным измельчением позволило поддерживать высокое разрешение там, где это необходимо, пользуясь при этом существенно меньшим числом ячеек по сравнению с равномерным разбиением счетной области. Этот прием обеспечивает значительное уменьшение затрат машинного времени и снижение требований к объему памяти компьютера. Шаг по времени определялся на каждом временном слое решения по алгоритму [31] исходя из условия устойчивости.

Численное решение системы (1)–(5) на описанной выше двумерной сетке находилось с использованием конечно-объемных схем MUSCL TVD. Для расчета потоков через грани контрольного объема по оси  $x$  в зоне с равномерной сеткой применялась схема 4-го порядка точности [32, 33], а в зоне с неравномерной сеткой — модифицированная согласно [34] схема 3-го порядка [35]. По оси  $y$  потоки вычислялись с использованием схемы 4-го порядка точности [32, 33]. TVD-подход позволяет аккуратно и с большим разрешением рассчитывать ударные скачки без явного выделения гидродинамического разрыва. Это свойство TVD-схем особенно ценно, когда приходится моделировать двумерные течения со сложными, иногда заранее неизвестными ударно-волновыми конфигурациями. Тактика счета с явным выделением разрывов и разбиением поля течения на отдельные области значительно усложнила бы структуру программы. Применение техники сквозного счета для моделирования ДВ позволило рассчитать всю область течения единым способом.

Реализация схемы MUSCL требует для нахождения потоков через грани контрольного объема решения задачи Римана о распаде произвольного разрыва. Поскольку эта операция является массовой, нахождение точного решения этой задачи, тем более для случая химически реагирующего газа, привело бы к существенному увеличению затрат машинного времени. В настоящем исследовании использовали два приближенных метода решения задачи Римана, относящихся к различным классам римановских «решателей» (Riemann solvers): метод Роэ [36, 37], который принадлежит к классу локальной линеаризации (или расщепления раз-

ности потоков) и метод Ван Леера [38, 39], который относится к классу расщепления вектора потока. Обобщение метода Ван Леера на случай химически реагирующего газа с калорическим уравнением состояния (4) сделано согласно [40, 41]. Подобная процедура для метода Роэ выполнена на основе подхода [40], но несколько отличным способом.

Метод Ван Леера обладает большей схемной вязкостью по сравнению с методом Роэ, который, в свою очередь, в чистом виде [36, 37] допускает возникновение в расчетах ударных волн разрежения. Для предотвращения этого явления метод модифицирован согласно [42] путем добавления энтропийной вязкости. Многочисленные тестовые расчеты одномерных задач как не реагирующей, так и реагирующей газовой динамики не выявили преимуществ ни одного из методов. Поскольку для вычисления одного временного слоя решением методом Роэ требуется значительно большее число машинных операций, для моделирования двумерных течений использовался метод Ван Леера.

При реализации граничных условий непротекания применялся прием, описанный в [31].

Система уравнений (1) представляет собой гиперболическую систему уравнений законов сохранения с жесткими релаксационными членами. Жесткость этой системы при интегрировании по времени вызвана источником членом  $W$ , который моделирует термохимические процессы. Разработке методов интегрирования таких систем посвящено большое количество работ. В настоящем исследовании моделировались детонационные течения при достаточно низких начальных давлениях ( $p_0 < 1$  бар), жесткость системы не была ярко выражена. Поэтому интегрирование по времени удалось осуществить, применяя явный метод Эйлера. Характерные значения числа Куранта при этом составляли  $CFL = 0,2 \div 0,3$ . В настоящее время создан и отлажен вариант программы, использующий метод ASIRK [43] для интегрирования по времени со вторым порядком точности.

## РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Из эксперимента известно, что после выхода ДВ на самоподдерживающийся режим ее структура не зависит от способа и энергии инициирования. Поэтому начальные условия для системы (1)–(5) можно задавать в достаточно произвольном виде. Необходимо только, чтобы

величина энергии инициирования была больше критической. В описанных здесь вычислительных экспериментах начальное распределение представляло собой плоскую ДВ с мгновенной химической реакцией (модель прямоугольной волны К. И. Щёлкина): ударная волна конечной ширины с примыкающей к ней сзади точкой Чепмена—Жуге и последующей автомодельной химически равновесной волной разрежения. Для создания первоначальных поперечных возмущений в некоторые области на ударной волне вкладывалось дополнительное количество энергии. Ширина ударной волны, размер по оси  $y$  областей с повышенным энергосодержанием и их количество задавались так, чтобы обеспечить успешное иницирование ДВ. Определение критической энергии инициирования не входило в рамки данного исследования. На рис. 1–4 слева приведены схемы расположения очагов инициирования (заштрихованы).

Размер детонационной ячейки определяли, комбинируя процедуры [6–8] и [12]. С изменением числа и местоположения очагов инициирования изменялось число первоначальных поперечных волн. Варьирование ширины канала влияло на число остающихся поперечных волн на фронте самоподдерживающейся ДВ, и тем самым определялся размер ячейки.

При этом была замечена одна интересная особенность: реакция структуры волны на изменение  $H$  зависит от химического состава смеси. На рис. 1 приведены структуры фронта для смеси  $2H_2 + O_2 + 60\% Ag$  при  $p_0 = 65$  Торр = 0,0866 бар и  $H = a; 2a; 1,5a$ , а на рис. 2 — для смеси  $2H_2 + O_2$  при  $p_0 = 0,2$  бар и  $H = a; 1,5a$ . Здесь и далее на всех рисунках изоляции плотности проведены по уровням  $\rho/\rho_0 = 1; 1,5; 1,5 \cdot 1,1; 1,5 \cdot 1,1^2, \dots$ . Указанные в подписях к рисункам значения скорости детонации Чепмена — Жуге  $D_{CJ}$  рассчитаны по программе [44]; значения  $D$  соответствуют средней скорости детонации на длине ячейки  $b$ . Иницирование во всех случаях было симметричным. Сравнивая рис. 1, а, в с рис. 2, можно заметить, что увеличение  $H$  в 1,5 раза в одном случае приводит к появлению новой, только зарождающейся пары поперечных волн, а в другом случае структуры ДВ топологически эквивалентны. Из экспериментальных данных известно, что смеси, разбавленные Ag, обладают очень регулярной ячеистой структурой, а стехиометрическая смесь  $2H_2 + O_2$  — нерегуляр-

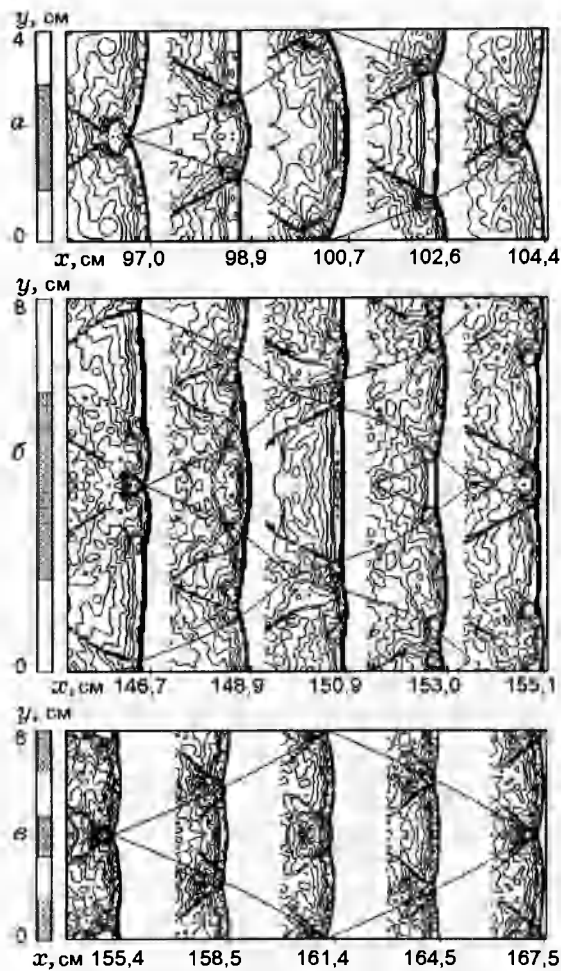


Рис. 1. Изолинии плотности за фронтом ДВ, распространяющейся в смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 60\% \text{Ar}$  при  $p_0 = 65 \text{ Торр} = 0,0866 \text{ бар}$  в канале шириной 4 (а), 8 (б), 6 см (в):

$N_x = 100$ ,  $h_x = 4 \cdot 10^{-2} \text{ см}$ ,  $h_y = 4 \cdot 10^{-2} \text{ см}$ ,  $D_{\text{CJ}} = 1727 \text{ м/с}$ ; а —  $N_y = 100$ ,  $D = 1646 \text{ м/с}$ ,  $a/b = 0,556$ ; б —  $N_y = 200$ ,  $D = 1728 \text{ м/с}$ ,  $a/b = 0,526$ ; в —  $N_y = 150$ ,  $D = 1698 \text{ м/с}$ ,  $a/b = 0,520$

ной. Нерегулярность структуры выражается в том, что на следовом отпечатке одновременно присутствуют ячейки с различными поперечными размерами, регулярная же структура состоит из одинаковых ячеек. Этим и объясняется столь различная реакция этих смесей на изменения  $H$ .

Также было исследовано влияние способа инициирования на конечную установившуюся структуру ДВ на примере смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ . На рис. 3 показана система поперечных волн ДВ при  $p_0 = 65 \text{ Торр} = 0,0866 \text{ бар}$  и  $H = a$  в случае несимметричного и симметричного иницииро-

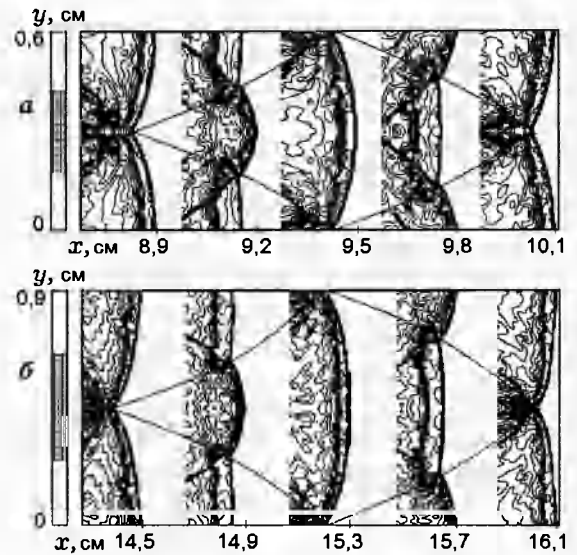


Рис. 2. Изолинии плотности за фронтом ДВ, распространяющейся в смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$  при  $p_0 = 0,2 \text{ бар}$  в канале шириной 0,6 (а) и 0,9 см (б):

$N_x = 100$ ,  $h_x = 6 \cdot 10^{-3} \text{ см}$ ,  $D_{\text{CJ}} = 2749 \text{ м/с}$ ; а —  $N_y = 100$ ,  $h_y = 6 \cdot 10^{-3} \text{ см}$ ,  $D = 2731 \text{ м/с}$ ,  $a/b = 0,5$ ; б —  $N_y = 180$ ,  $h_y = 5 \cdot 10^{-3} \text{ см}$ ,  $D = 2799 \text{ м/с}$ ,  $a/b = 0,554$

вания тремя очагами. В полном согласии с численными исследованиями [11, 12] и обширными экспериментальными данными ячеистая структура не зависит от начальных условий возбуждения детонации.

Иная ситуация возникает в случае  $H = 1,5a$ . На рис. 4,а приведены результаты моделирования ДВ в смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 60\% \text{Ar}$  при симметричном инициировании одним очагом. Сравнивая рис. 1,в и рис. 4,а, приходим к выводу о независимости ячеистой структуры и от количества очагов инициирования. Структуры эквивалентны, только изолинии плотности на рис. 4,а выведены через меньшие промежутки времени. Толстыми линиями показаны траектории главных тройных точек, тонкими — второстепенных. Однако качественно отличная структура образуется при несимметричном инициировании двумя очагами (см. рис. 4,б). Теперь вместо четырех поперечных волн (из которых две — главные и две — второстепенные) мы имеем три одинаковые поперечные волны. Такая конфигурация соответствует распространению по каналу ДВ, фронт которой состоит из полутора детонационных ячеек рис. 1,а. Верхние две трети структу-

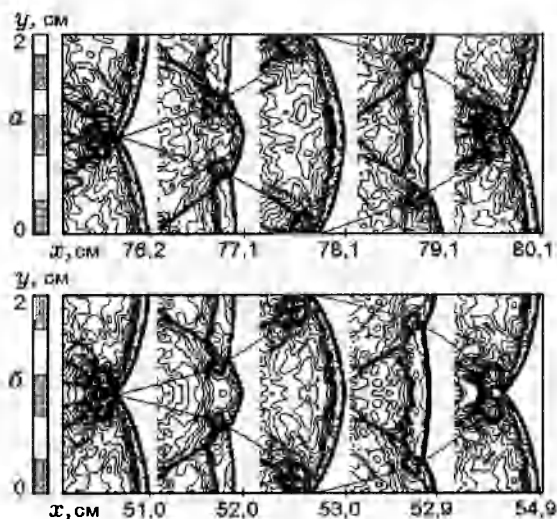


Рис. 3. Изолинии плотности за фронтом ДВ, распространяющейся в смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$  при  $p_0 = 65$  Торр = 0,0866 бар в канале шириной 2 см:

$N_x = 100, N_y = 100, h_x = 2 \cdot 10^{-2}$  см,  $h_y = 2 \cdot 10^{-2}$  см,  $D_{CJ} = 2704$  м/с; а -  $D = 2685$  м/с,  $a/b = 0,514$ ; б -  $D = 2674$  м/с,  $a/b = 0,516$

ры на рис. 4,б эквивалентны одной ячейке на рис. 1,а. Представляется интересным экспериментально проверить существование двух качественно различных конфигураций поперечных волн в канале с  $H = 1,5a$  и выявить факторы, которые определяют конечное состояние, к которому релаксирует структура ДВ.

На рис. 5 приведены результаты вычислительного эксперимента по определению размера ячейки  $a$  в зависимости от начального давления для смесей  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + X \text{Ag}$ , где  $X = 0, 50, 60, 70$  %. Полученные данные сравниваются с экспериментальными результатами [45, 46]. Очевидно хорошее количественное совпадение поперечных размеров детонационных ячеек. Это дает основание надеяться, что программа, созданная на основе модели (1)–(5) и современных схем высокого порядка точности, найдет успешное применение для моделирования структуры ДВ как в случае нестехиометрической системы  $\text{H}_2\text{--O}_2$ , так и в случае применения других инертных разбавителей.

Было проведено исследование влияния пространственного разрешения на получаемое численное решение. Для этого была рассчитана структура ДВ для смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 60\% \text{Ag}$  при  $p_0 = 65$  Торр = 0,0866 бар с удвоенным по каждой координате числом ячеек сетки ( $N_x = 200, N_y = 200$ ) по сравнению с расчетом рис. 1,а.

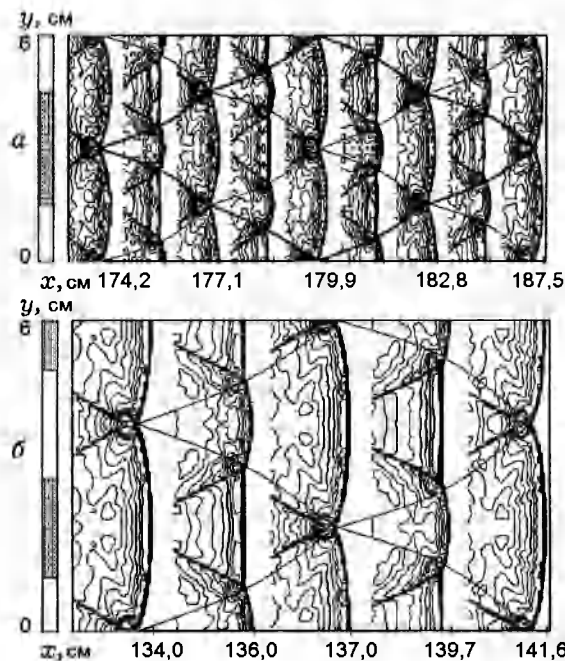


Рис. 4. Изолинии плотности за фронтом ДВ, распространяющейся в смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 60\% \text{Ag}$  при  $p_0 = 65$  Торр = 0,0866 бар в канале шириной 6 см:

$N_x = 100, N_y = 150, h_x = 4 \cdot 10^{-2}$  см,  $h_y = 4 \cdot 10^{-2}$  см,  $D_{CJ} = 1727$  м/с; а -  $D = 1704$  м/с,  $a/b = 0,520$ ; б -  $D = 1672$  м/с,  $a/b = 0,524$

Полученная структура ячейки ДВ совпадает со структурой решения на более грубой сетке (см. рис. 1,а) и здесь не приводится. Никаких новых деталей течения в ДВ не обнаружено. Размер ячейки остался прежним ( $a = 4$  см), другие характеристики детонационной ячейки изменились менее чем на 2 %:  $D = 1616$  м/с,  $a/b = 0,566$ . Исходя из данного исследования и результатов работы [18], можно сделать вывод о достижении приемлимой сходимости решения уже при  $N_x = 100, N_y = 100$  и, следовательно, о корректности полученных результатов на примененных сетках.

Однако кроме определения размера ячейки важно также правильно описывать и ее форму. Параметром, контролирующим форму ячейки, принято считать отношение поперечного размера ячейки к продольному ( $a/b$ ). В работе [47] экспериментально определялся тангенс среднего значения половинного угла между траекториями поперечных волн встречных направлений для разных смесей при различных начальных давлениях, что трактовалось как отношение средней скорости поперечных

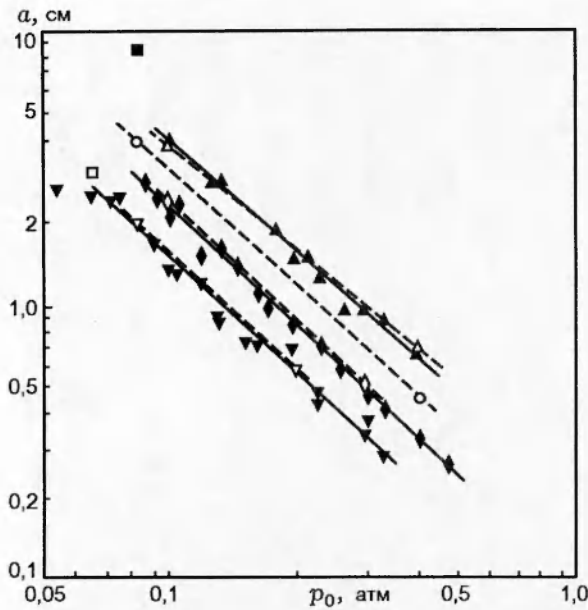


Рис. 5. Зависимость размера детонационной ячейки  $a$  от начального давления для смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + X \text{Ar}$ :

$\nabla, \nabla - X = 0$ ,  $\diamond, \diamond - X = 50\%$ ,  $\circ, \blacksquare - X = 60\%$ ,  $\blacktriangle, \triangle, \square - X = 70\%$ ;  $\nabla, \diamond, \circ, \triangle -$  результаты настоящей работы,  $\nabla, \diamond, \blacktriangle -$  экспериментальные данные [45, 46],  $\blacksquare -$  расчет [11],  $\square -$  расчет [17, 18]

волн к средней скорости детонации ( $\bar{v}/D$ ). Из геометрических соображений можно показать, что  $\text{tg } \alpha \equiv \bar{v}/D = a/b$  для двумерной ДВ в канале с  $H = na$ , где  $n = 1, 2, \dots$ . Из [47] следует, что для двумерных структур в плоском канале и очень регулярных структур в прямоугольном канале  $\text{tg } \alpha = 0,56 \pm 0,03$ . На рис. 6 приведены значения  $a/b$  для смесей, изученных в настоящей работе, в зависимости от  $p_0$ . Видно, что практически все точки лежат в указанном интервале.

Размер ячейки  $a$  принимается за характерный размер структуры вдоль детонационного фронта. Другим параметром, характеризующим форму фронта ДВ, является относительная высота выступов (неровностей) на фронте —  $h/a$ , где  $h$  — высота максимального выступа по отношению к самой нижней точке соседней впадины. Высота неровностей зависит от фазы взаимного положения поперечных волн и достигает наибольшего значения  $h^*$  в момент их столкновения на оси ячейки. В [47] по шпирен-снимкам детонации в плоском канале определялась средняя максимальная высота неровностей  $h^*/a$ . На рис. 7 показаны резуль-

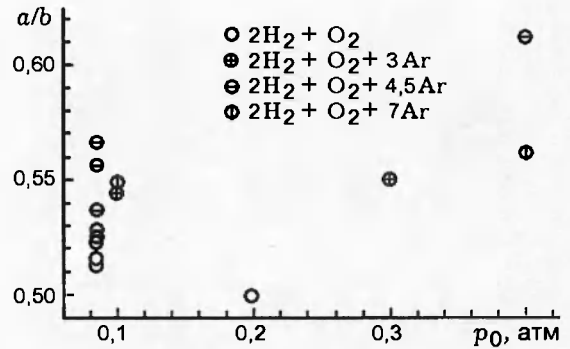


Рис. 6. Зависимость отношения  $a/b$  от начального давления

таты [47] и настоящего исследования для смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ . Как отмечено в [47], относительные значения неровностей для различных смесей лежат в основном в интервале  $0,12 \pm 0,03$  с тенденцией к увеличению при низких значениях  $p_0$ . Результаты численного эксперимента, как следует из рис. 7, полностью соответствуют данному экспериментальному обобщению.

На рис. 8 показана скорость ударного фронта (отнесенная к средней скорости ДВ  $D$ ) как функция положения фронта по оси ячейки для смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 60\% \text{Ar}$ ,  $p_0 = 65 \text{ Torr} = 0,0866 \text{ бар}$  (см. рис. 1, а). Поведение скорости фронта вдоль ячейки качественно согласуется с экспериментальными данными [2, 48]: быстрый спад в первой половине (до  $x/b \approx 0,4$ ) и затем плавное затухание во второй половине ячейки. В расчете получено изменение скорости фронта от  $1,32D$  до  $0,89D$ , что очень близко к результатам [18] при моделировании детонационной структуры в смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 70\% \text{Ar}$  при  $p_0 = 50 \text{ Torr} = 0,0666 \text{ бар}$  с использованием детального кинетического механизма химических реакций, а именно  $1,38D$  и  $0,85D$ . Имеет место особенность численного моделирования,



Рис. 7. Зависимость максимальной неровности фронта ДВ от начального давления для смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$



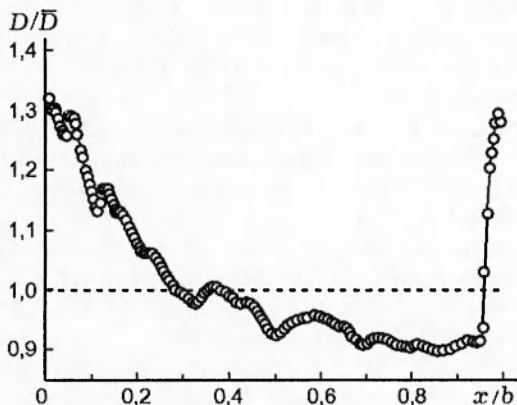


Рис. 8. Скорость ударного фронта ДВ вдоль ячейки для смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 60\% \text{Ar}$ ,  $p_0 = 65 \text{ Torr} = 0,00866 \text{ бар}$

впервые отмеченная в [49]. Максимальная расчетная скорость в начале ячейки более соответствует экспериментальным значениям скорости фронта в начале ячейки при околопредельном режиме распространения ДВ, а минимальная расчетная скорость в конце ячейки — экспериментальным значениям скорости фронта в конце ячейки при нормальном режиме детонации.

### ВЫВОДЫ

В представленной работе численно исследована структура ДВ в смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + X \text{Ar}$  при  $X = 0, 50, 60, 70\%$  в диапазоне начальных давлений  $0,0866 \div 0,405 \text{ бар}$ . Полученные данные о размере детонационной ячейки, ее форме, а также относительной высоте неровностей детонационного фронта демонстрируют хорошее количественное совпадение с экспериментальными результатами. Зависимость скорости детонационного фронта от его местоположения по длине ячейки согласуется с данными эксперимента и совпадает с аналогичной зависимостью, полученной в численном расчете [18], с точностью лучше 5%.

Проведено исследование влияния способа инициирования на конечную, установившуюся структуру ДВ. При этом обнаружена интересная особенность влияния расположения очагов инициирования на число и конечную конфигурацию поперечных волн в случае, когда  $H = 1,5a$ . Симметричное инициирование одним или несколькими очагами приводит к образованию структуры из четырех поперечных волн, две из которых главные, а две — второстепенные. При несимметричном инициировании дву-

мя очагами формируются три одинаковые поперечные волны. Также были изучены изменения в структуре волны при вариации ширины канала. При этом установлено качественно различное поведение двумерной структуры волны для смесей с  $X > 0$  и  $X = 0$ , для которых в эксперименте наблюдаются соответственно регулярная и нерегулярная детонационные ячейки.

Автор считает приятной обязанностью выразить свою благодарность А. Н. Кудрявцеву за плодотворные дискуссии и чрезвычайно полезные обсуждения численных методов вычислительной гидродинамики.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 98-01-00677).

### ЛИТЕРАТУРА

1. **Войцеховский Б. В., Митрофанов В. В., Топчийн М. Е.** Структура фронта детонации в газах. Новосибирск: Изд-во СО АН СССР, 1963.
2. **Fickett W., Davis W. C.** Detonation. Berkeley, CA: University of California Press, 1979.
3. **Зельдович Я. В., Компанец А. С.** Теория детонации. М.: Гостехиздат, 1955.
4. **Erpenbeck J. J.** Stability of idealized one-reaction detonations // Phys. Fluids. 1964. V. 7. P. 684–696.
5. **Lee H. I., Stewart D. S.** Calculation of linear detonation instability: one-dimensional instability of plane detonation // J. Fluid Mech. 1990. V. 216. P. 103–132.
6. **Taki S., Fujiwara T.** Numerical analysis of two-dimensional nonsteady detonations // AIAA Journal. 1978. V. 16, N 1. P. 73–77.
7. **Taki S., Fujiwara T.** Numerical simulation of triple shock behavior of gaseous detonation // 18th Symp. (Intern.) on Combustion. The Combustion Inst., 1981. P. 1671–1680.
8. **Taki S., Fujiwara T.** Numerical simulations of the establishment of gaseous detonation // Dynamics of Shock Waves, Explosions and Detonations / J. R. Bowen et al. (Eds). Progress in Astronautics and Aeronautics; V. 94. New York, 1983. P. 186–200.
9. **Марков В. В.** Численное моделирование образования многофронтной структуры детонационной волны // Докл. АН СССР. 1981. Т. 258, № 2. С. 314–317.
10. **Oran E. S., Boris J. P., Young T., et al.** Numerical simulations of detonations in hydrogen — air and methane — air mixtures // 18th Symp. (Intern.) on Combustion. The Combustion Inst., 1981. P. 1641–1649.

11. **Kailasanath K., Oran E. S., Boris J. P., Young T. R.** Determination of detonation cell size and the role of transverse waves in two-dimensional detonations // *Combust. Flame*. 1985. V. 61. P. 199–209.
12. **Oran E. S., Kailasanath K., Guirguis R. H.** Numerical simulations of the development and structure of detonations // *Dynamics of Explosions / A. L. Kuhl et al. (Eds). Progress in Astronautics and Aeronautics; V. 114. Washington, 1988. P. 155–169.*
13. **Lefebvre M. H., Oran E. S., Kailasanath K., Van Tiggelen P. J.** The influence of the heat capacity and diluent on detonation structure // *Combust. Flame*. 1993. V. 95. P. 206–218.
14. **Lefebvre M. H., Oran E. S., Kailasanath K., Van Tiggelen P. J.** Simulation of cellular structure in a detonation wave // *Dynamics Aspects of Detonations / A. L. Kuhl et al. (Eds). Progress in Astronautics and Aeronautics; V. 153. Washington, 1993. P. 64–77.*
15. **Kratzel T., Fischer M., Pantow E.** Vorticity induced recoupling of a decoupled detonation wave // *Proc. 16th ICDERS. Cracow, 1997. P. 168–171.*
16. **Pantow E., Fischer M., Kratzel T.** Detonation front structures in hydrogen combustibles // *Ibid.* P. 377–380.
17. **Oran E. S.** Numerical simulations of unsteady combustion // *Combustion, Detonation, Shock Waves: Proc. of the Zel'dovich Memorial. Moscow, 1994. P. 228–247.*
18. **Oran E. S., Weber J. W., Stefaniw E. I., Lefebvre M. H., Anderson J. D.** A numerical study of a two-dimensional  $H_2-O_2-Ar$  detonation using a detailed chemical reaction model // *Combust. Flame*. 1998. V. 113. P. 147–163.
19. **Schöffel S. U., Ebert F.** Numerical analyses concerning the spatial dynamics of an initially plane gaseous ZND detonation // *Dynamics of Explosions / A. L. Kuhl et al. (Eds). Progress in Astronautics and Aeronautics; V. 114. Washington, 1988. P. 3–31.*
20. **Cai W.** High-order hybrid numerical simulations of two-dimensional detonation waves // *AIAA Journal*. 1995. V. 33, N 7. P. 1248–1255.
21. **Sjögreen B.** Numerical computation of three dimensional detonation waves on parallel computers // *Report N 162/1994. Department of Scientific Computing, Uppsala University. Uppsala, Sweden, 1994.*
22. **Lindström D.** Numerical computation of viscous detonation waves in two space dimensions // *Report N 178/1996. Department of Scientific Computing, Uppsala University. Uppsala, Sweden, 1996.*
23. **Левин В. А., Коробейников В. П.** Сильный взрыв в горючей смеси газов // *Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа*. 1969. № 6. С. 48–51.
24. **Николаев Ю. А.** Модель кинетики химических реакций при высоких температурах // *Физика горения и взрыва*. 1978. Т. 14, № 4. С. 73–76.
25. **Фомин П. А., Троцюк А. В.** Приближенный расчет изоэнтропы химически равновесного газа // *Физика горения и взрыва*. 1995. Т. 31, № 4. С. 59–62.
26. **Николаев Ю. А., Зак Д. В.** Согласование моделей химических реакций со вторым началом термодинамики // *Физика горения и взрыва*. 1988. Т. 24, № 4. С. 87–90.
27. **Румер Ю. Б., Рывкин М. Ш.** Термодинамика, статистическая физика и кинетика. М.: Наука, 1977.
28. **Николаев Ю. А., Фомин П. А.** О расчете равновесных течений химически реагирующих газов // *Физика горения и взрыва*. 1982. Т. 18, № 1. С. 66–72.
29. **Николаев Ю. А., Фомин П. А.** Приближенное уравнение кинетики в гетерогенных системах типа газ — конденсированная фаза // *Физика горения и взрыва*. 1983. Т. 19, № 6. С. 49–58.
30. **White D. R.** Density induction times in very lean mixtures of  $D_2$ ,  $H_2$ ,  $C_2H_2$ , and  $C_2H_4$  with  $O_2$  // *11th Symp. (Intern.) on Combustion. Berkeley, 1966. P. 147–154.*
31. **Численное решение многомерных задач газовой динамики /** Под ред. С. К. Годунова. М.: Наука, 1976.
32. **Yamamoto S., Daiguji H.** Higher-order-accurate upwind schemes for solving the compressible Euler and Navier–Stokes equations // *Computer Fluids*. 1993. V. 22, N 2/3. P. 259–270.
33. **Daiguji H., Yuan X., Yamamoto S.** Stabilization of higher-order high resolution schemes for the compressible Navier–Stokes equation // *Intern. J. of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*. 1997. V. 7, N 2/3. P. 250–274.
34. **Lin S.-Y., Chin Y.-S.** Comparison of higher resolution Euler schemes for aeroacoustic computations // *AIAA Journal*. 1995. V. 33, N 2. P. 237–245.
35. **Chakravarthy S. R., Osher S.** A new class of high accuracy TVD schemes for hyperbolic conservation laws // *AIAA 23rd Aerospace Sciences Meeting. Reno, Nevada, 1985. AIAA Paper N 85–0363.*
36. **Roe P. L.** Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes // *J. Comput. Phys*. 1981. V. 43. P. 357–372.
37. **Roe P. L., Pike J.** Efficient construction and utilization of approximate Riemann Solutions // *Computing Methods in Applied Sciences and Engineering VI. / R. Glowinski and J.-L. Lions*

- (Eds). Amsterdam etc.: North-Holland, 1984. P. 499–513.
38. **Van Leer B.** Flux-vector splitting for the Euler equations // ICASE Report N 82-30. 1982. Lecture Notes in Physics; V. 170. New York; Berlin: Springer-Verlag, 1982. P. 507–512.
39. **Anderson W. K., Thomas J. L., van Leer B.** A comparison of finite volume flux vector splitting for the Euler equations // AIAA 23rd Aerospace Sciences Meeting. Reno, Nevada, 1985. AIAA Paper N 85-0122.
40. **Vinokur M., Montagne J.-L.** Generalized flux-vector splitting and Roe average for an equilibrium real gas // J. Comput. Phys. 1990. V. 89. P. 276–300.
41. **Vinokur M.** An analysis of finite-difference and finite-volume formulations of conservation laws // J. Comput. Phys. 1989. V. 81. P. 1–52.
42. **Harten A., Hyman J. M.** Self-adjusting grid methods for one-dimensional hyperbolic conservation laws // J. Comput. Phys. 1983. V. 50. P. 235–269.
43. **Shen J. W., Zhong X.** Semi-implicit Runge–Kutta schemes for non-autonomous differential equations in reactive flow computations // AIAA Paper N 96-1969. 1996.
44. **Николаев Ю. А., Топчиян М. Е.** Расчет равновесных течений в детонационных волнах в газах // Физика горения и взрыва. 1977. Т. 13, № 3. С. 393–404.
45. **Strehlow R. A., Engel C. D.** Transverse waves in detonations: II. Structure and spacing in  $H_2-O_2$ ,  $C_2H_2-O_2$ ,  $C_2H_4-O_2$ ,  $CH_4-O_2$  systems // AIAA Journal. 1969. V. 7, N 3. P. 492–496.
46. **Strehlow R. A.** Gas phase detonations: recent developments // Combust. Flame. 1968. V. 12, N 2. P. 81–101.
47. **Манжале́й В. И., Митрофанов В. В., Субботин В. А.** Измерение неоднородностей детонационного фронта в газовых смесях при повышенных давлениях // Физика горения и взрыва. 1974. Т. 10, № 1. С. 102–110.
48. **Edwards D. H., Hooper G., Job E. M., Parry D. J.** The behavior of the frontal and transverse shocks in gaseous detonation waves // Astronaut. Acta. 1970. V. 15, N 5–6. P. 323–333.
49. **Lefebvre M. H., Weber J. W., Oran E. S.** // Fluid Mechanics and Applications: Proc. of the IUTAM Symposium / B. Deshaies, L. F. da Silva (Eds). Kluwer Academic Publishers, 1997. V. 39. P. 347–358.

*Поступила в редакцию 5/I 1999 г.,  
в окончательном варианте – 15/III 1999 г.*

---