

УДК 519.63

ОСОБЕННОСТИ РАСЧЕТА ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СХЕМ РАЗЛИЧНЫХ ПОРЯДКОВ АППРОКСИМАЦИИ

© 2015 г. *А.И. Лопато, П.С. Уткин*

ФГБУН Институт автоматизации проектирования Российской академии наук
Московский физико-технический институт
lopato2008@rambler.ru, pavel_utk@mail.ru

Целью работы является математическое моделирование распространения детонационной волны с использованием ENO-схем с порядками аппроксимации с первого по четвертый. Математическое описание волны детонации основывается на системе уравнений Эйлера, дополненной одностадийной моделью кинетики химических реакций. Для модельной водородно-воздушной смеси для всех рассмотренных численных методик наблюдается переход от регулярного распространения волны к нерегулярному с последующим затуханием детонационного режима горения.

Ключевые слова: численное моделирование, волна детонации, одностадийная модель кинетики, ENO-схема, метод Рунге-Кутты.

THE DETAILS OF THE DETONATION WAVE CALCULATION USING NUMERICAL SCHEMES OF DIFFERENT APPROXIMATION ORDERS

A.I. Lopato, P.S. Utkin

Institute for Computer Aided Design of the Russian Academy of Sciences
Moscow Institute of Physics and Technology

The goal of the work is the mathematical modeling of detonation wave propagation using ENO-schemes with the approximation orders from the first to the fourth. Mathematical description of the detonation wave is based on the Euler equations supplemented with the one-stage chemical kinetics model. For the model hydrogen-air mixture for all numerical approaches concerned the transition from the regular detonation mode to the irregular one with the subsequent detonation combustion breakup is observed.

Key words: numerical modeling, detonation wave, one-stage chemical kinetics model, ENO-scheme, Runge-Kutta method.

1. Введение

Математическое моделирование распространения пульсирующей детонационной волны (ДВ) было, по-видимому, впервые выполнено в работах В.П. Коробейникова, В.А. Левина, В.В. Маркова, см. обзор [1]. Множество последующих численных исследований посвящено проблемам распространения одномерных ДВ с использованием уравнений Эйлера и различных моделей кинетики химических реакций. Вопросы устойчивости рас-

пространения ДВ рассмотрены в [2], где численные исследования проводятся с использованием схемы типа Годунова второго порядка аппроксимации (ПА) и глобальной одностадийной модели кинетики химических реакций. Показано, что для получения количественно верного решения требуется не менее 50 расчетных точек на половину толщины зоны химических реакций. Исследование, представленное в [3], сосредоточено на влиянии величины энергии активации на развитие детонации. Авторы выделяют четыре режима распространения пульсирующей ДВ в зависимости от периода осцилляций, который, в свою очередь, зависит от величины энергии активации. Эволюция ДВ рассчитана с использованием метода Рунге для определения численного потока при интегрировании системы уравнений Эйлера и двухшаговой модели протекания химических реакций, состоящей из раздельного учета периода индукции и стадии энерговыделения.

Каждая из упомянутых выше работ характеризуется использованием какой-либо одной конкретной разностной схемы для изучения распространения ДВ. Целью работы является математическое моделирование распространения пульсирующей ДВ с использованием ENO-схем с первого по четвертый ПА включительно, в физически ясной постановке, соответствующей недавней работе [4], с прямым инициированием детонационного режима горения у закрытого конца канала. Требуется провести классификацию получившихся режимов распространения ДВ и описать влияние используемой расчетной методики на результат.

2. Математическая модель и вычислительный алгоритм расчета распространения волны детонации

Исследования проводятся в одномерной постановке. В начальный момент времени канал, заполненный покоящейся реагирующей смесью, разделен на две части. В левой, относительно короткой части заключен газ с повышенными значениями давления и температуры. В правой части канала находится газ при нормальных условиях. Длина всего канала составляет 0.8 м. Газ, заполняющий канал, представляет собой модельную стехиометрическую водородно-воздушную или ацетилено-воздушную смесь. Физические параметры смесей брались из [5, 6]. На обеих границах расчетной области устанавливаются граничные условия непротекания. Используется равномерная расчетная сетка с числом ячеек 160 000.

Математическая модель основана на системе нестационарных уравнений Эйлера, дополненной одностадийной моделью кинетики химической реакции [5, 6]. В качестве уравнения состояния используется уравнение идеального газа. В основе вычислительного алгоритма – метод расщепления по физическим процессам, когда на временном шаге сначала интегрируются уравнения газовой динамики, а затем учитывается протекание химических реакций при отсутствии конвекции. Ключевые этапы процедуры интегрирования уравнений газовой динамики – (1) ENO-реконструкция сеточных функций для повышения порядка аппроксимации по пространственной координате [7]; (2) использование монотонного консервативного сеточно-характеристического варианта схемы Куранта-Изаксона-Рис для расчета численного потока [8]; (3) повышение порядка аппроксимации методами Рунге-Кутты. Система обыкновенных дифференциальных уравнений химической кинетики решается с использованием неявного метода Эйлера.

Свойства описанного выше вычислительного алгоритма для численного интегрирования уравнений газовой динамики, а также корректность его реализации были проверены на тесте [9]. В тесте [9] рассматривается взаимодействие ударной волны с синусо-

соидальными волнами плотности. Решение включает лидирующий скачок и примыкающую непрерывную часть, поэтому данный тест оказывается хорошей моделью распространения ДВ. На рис.1 показано, что схемы низких ПА не позволяют разрешить все тонкие структуры решения. Схемы же высокого ПА дают качественно иной результат, хорошо соотносящийся с опорным решением из [9], полученным с применением ENO-реконструкции третьего ПА.

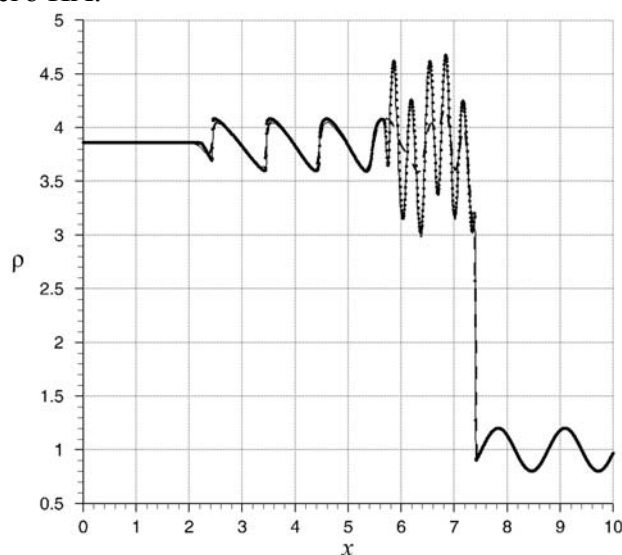


Рис.1. Рассчитанные профили безразмерной плотности в тесте [9]: сплошная кривая – опорное решение из [9], пунктирная кривая – расчет по схеме первого ПА, точки – расчет по схеме четвертого ПА.

3. Результаты вычислительных экспериментов

Детонация в ацетилено-воздушной смеси относится к категории устойчивых. Полученные профили волны с использованием схем с первого по четвертый ПА имеют классический вид, включающий лидирующий скачок, химический пик, или пик фон Неймана (ФН), и примыкающую к нему волну разрежения, или волну Тейлора. Рассчитанные профили давления наглядно демонстрируют улучшение разрешающей способности вычислительного алгоритма при повышении ПА схемы. Кроме того, наблюдается отличное соответствие между полученными в расчете параметрами Чепмена-Жуге (ЧЖ) и их теоретическими значениями. Опишем динамику распространения ДВ на примере расчета по схеме наивысшего из рассмотренных, четвертого ПА. В соответствии с постановкой задачи, приведенной выше, узкая область инициирования, примыкающая к левой границе расчетной области, заполнена реагирующей смесью при значительном давлении и температуре. Это приводит к первичному взрыву, обеспечивающему формирование взрывной волны, которая распространяется по свежей смеси. По истечении времени задержки самовоспламенения сжатая и нагретая этой волной смесь взрывается – происходит вторичный взрыв. После этого наблюдается типичная для экспериментов по прямому инициированию детонации – фаза ослабления лидирующей волны и ее переход из пересжатого режима к самоподдерживающемуся режиму ЧЖ. Далее ДВ распространяется с постоянной средней скоростью и параметрами за фронтом. Вместе с тем, даже в этом случае давление в пике ФН не является постоянным, а высокочастотно пульсирует с амплитудой около 2 атм около средней величины. Данные результаты качественно соответствуют приведенным в [4].

Рассмотрим теперь характер распространения ДВ в водородно-воздушной смеси, качественно отличающийся от описанного выше для ацетилено-воздушной. Для случая использования схемы первого ПА после начальной стадии влияния области инициирования на профиль ДВ он приобретает классический вид. ДВ при этом является пересажтой, и происходит постепенное уменьшение давления в пике ФН (область I на рис.2а). При приближении этого давления к теоретическому значению 36атм регулярный высокочастотный режим распространения ДВ меняется на регулярный низкочастотный с большей амплитудой (область II на рис.2а), что соответствует результатам [4]. Амплитуда колебаний продолжает нарастать, и регулярная детонация переходит в нерегулярную, маргинальную (область III на рис.2а), что, в свою очередь, согласуется с результатами [10]. В момент времени около 0.19мс происходит окончательное затухание ДВ, а вместо нее образуется комплекс из ударной волны и «пламени». Таким образом, долговременное распространение ДВ в описанной постановке в расчете по схеме первого ПА не наблюдается.

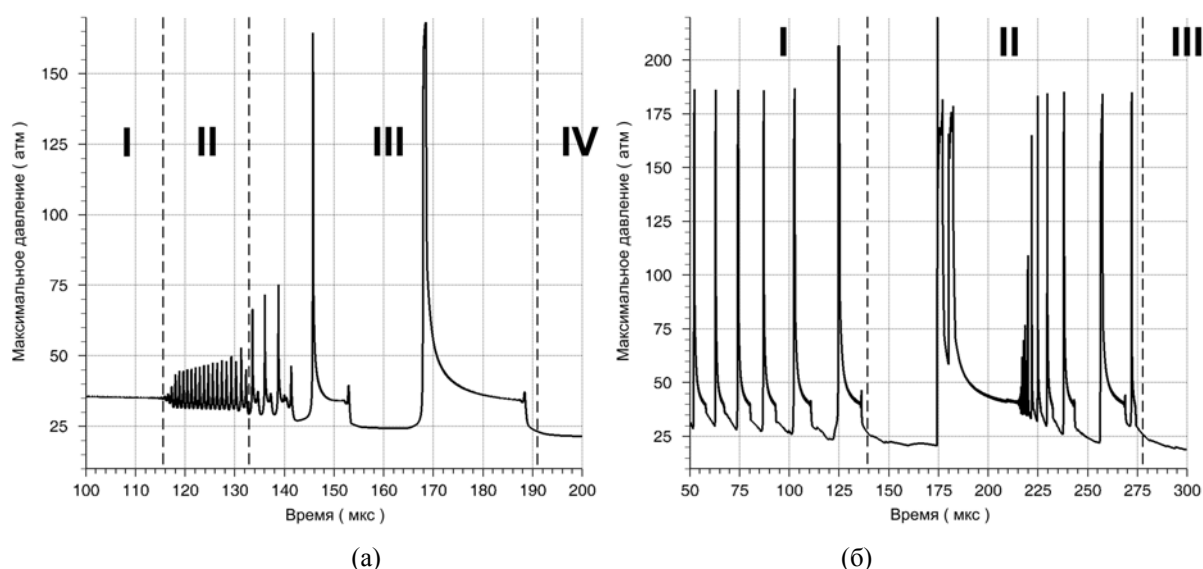


Рис.2. Динамика изменения максимального давления в расчетной области при распространении волны детонации в водородно-воздушной смеси в расчетах по схеме (а) первого ПА и (б) второго ПА.

Результаты вычислительного эксперимента с использованием схемы второго ПА существенно отличаются от описанного выше сценария для схемы первого ПА. В условиях лучшего разрешения зоны химических реакций ДВ распространяется в низкочастотном режиме в виде последовательных, четко отличимых локальных взрывов (область I на рис.2б). Пространственное распределение параметров за фронтом ДВ характеризуется наличием регулярных структур на волне Тейлора. Однако с течением времени взрывы перестают быть периодическими (момент времени около 0.14мс), появляется нерегулярность в их возникновении, а потом взрывы и вовсе перестают происходить (момент времени около 0.28мс).

Использование схем третьего и четвертого ПА также не приводит к устойчивому распространению ДВ. Истории максимального давления в этих случаях демонстрируют дополнительные структуры на регулярном участке распространения ДВ. В остальном

численные профили соотносятся между собой и с профилями, полученными по схеме второго ПА.

4. Заключение

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Л.И. Седов, В.П. Коробейников, В.В. Марков. Теория распространения взрывных волн // Труды Математического института АН СССР, 1986, т.175, с.178-214.
L.I. Sedov, V.P. Korobeinikov, V.V. Markov. Teoriia rasprostraneniia vzryvnykh voln // Trudy Matematicheskogo instituta AN SSSR, 1986, t.175, s.178-214.
2. G.J. Sharpe, S.A. Falle. Numerical simulations of pulsating detonations: I. Nonlinear stability of steady detonations // *Combustion Theory and Modeling*, 2000, v.4, p.557-574.
3. C. Leung, M.I. Radulescu, G.J. Sharpe. Characteristics analysis of the one dimensional pulsating dynamics of chain-branching detonations // *Physics of Fluids*, 2010, v.22, paper 126101, 15 p.
4. L.K. Cole, A.R. Karagozian, J.-L. Cambier. Stability of flame-shock coupling in detonation waves: 1D dynamics // *Combustion Science and Technology*, 2012, v.184, issues 10-11, p.1502-1525.
5. E.S. Oran, V.N. Gamezo. Origins of the deflagration-to-detonation transition in gas-phase combustion // *Combustion and Flame*, 2007, v.148, p.4-47.
6. V. Gamezo, T. Ogawa, E. Oran. Flame acceleration and DDT in channels with obstacles: Effect of obstacle spacing // *Combustion and Flame*, 2008, v.155, p.302-315.
7. C.-W. Shu. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws // NASA/CR-97-206253, ICASE Report N 97-65, 1997.
8. А.С. Холодов. О построении разностных схем с положительной аппроксимацией для уравнений гиперболического типа // *ЖВМ и МФ*, 1978, т.18, №6, с.116-132.
A.S. Kholodov. O postroenii raznostnykh skhem s polozhitelnoi approksimatsiei dlia uravnenii giperbolicheskogo tipa // Zhurnal vychislitelnoi matemat. i matematich. fiziki, 1978, t.18, №6, s.116-132.
9. C.-W. Shu, S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes // *Journal of Computational Physics*, 1988, v.77, p.439-471.
10. Y. Daimon, A. Matsuo. Detailed features of one-dimensional detonations // *Physics of Fluids*, 2003, v.15, №1, p.112-122.

Поступила в редакцию 30.03.2015.