

Учреждение Российской академии наук  
Институт автоматизации проектирования РАН

СЕМЕНОВ Илья Витальевич, УТКИН Павел Сергеевич

Научно-образовательный курс

# ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ГАЗАХ

При поддержке Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 г.г., в рамках реализации мероприятия № 1.2.2 Проведение научных исследований научными группами под руководством кандидатов наук, контракт № П359

МОСКВА – 2011

## СОДЕРЖАНИЕ

СОДЕРЖАНИЕ .....	2
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ СОКРАЩЕНИЙ .....	3
ВВЕДЕНИЕ.....	4
Глава 1. Общие понятия и терминология теории взрывных и детонационных процессов .....	7
1.1. История открытия и основные этапы изучения детонации .....	7
1.2. Терминология теории взрывных и детонационных процессов .....	10
Глава 2. Теория экзотермического скачка .....	14
Глава 3. Математические модели многомерных течений реагирующих многокомпонентных газовых смесей с волнами детонации .....	20
3.1. Математическая модель потоков реагирующих газовых смесей.....	22
3.1.1. Трехмерная постановка в криволинейной системе координат....	23
3.1.2. Двумерная постановка .....	25
3.1.3. Моделирование химических реакций .....	28
3.2. Анализ систем реакций на собственные значения.....	31
Глава 4. Одностадийная кинетическая модель воспламенения пропана.....	35
4.1. Параметры за стационарной детонационной волной .....	36
4.2. Структура стационарной детонационной волны .....	40
4.3. Сравнение рассчитанных и экспериментальных задержек самовоспламенения .....	44
Глава 5. Численный метод расчета течений с волнами детонации .....	47
5.1. Метод расщепления по физическим процессам.....	47
5.2. Метод конечных объемов.....	47
5.3. Схема С.К. Годунова вычисления потоков.....	53
5.4. Кусочно-линейная реконструкция численного решения .....	59
5.5. Разностная схема для решения уравнений газовой динамики .....	61
5.6. Решение уравнений химической кинетики.....	63
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ .....	68

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ СОКРАЩЕНИЙ

ДВ – детонационная волна

ЧЖ – Чепмен – Жуге

УВ – ударная волна

Модель ЗНД – модель Зельдовича – Неймана – Деринга

ВВ – взрывчатое вещество

КГ – кривая Гюгонио

ПД – продукты детонации

СОДУ – системы обыкновенных дифференциальных уравнений

МКО – метод конечных объемов

ВР – волна разрежения

КР – контактный разрыв

ФДН – формулы дифференцирования назад

## ВВЕДЕНИЕ

*Детонация* – это гидродинамический волновой процесс распространения по веществу зоны экзотермической реакции со сверхзвуковой скоростью [1]. *Детонационная волна* (ДВ) представляет собой самоподдерживающийся ударный разрыв (или головную ударную волну), за фронтом которого непрерывно инициируется химическая реакция вследствие нагрева при адиабатическом сжатии.

Настоящий курс ориентирован на изучение прежде всего *газовой детонации*, поскольку рассмотрение детонации конденсированных сред существенно осложняется такими факторами, как гетерогенность, пористость или особенности устройства кристаллической решетки вещества.

Несмотря на то, что явление газовой детонации имеет более чем вековую историю исследования – пионерские работы Чепмена и Жуге датируются 1899 и 1904 годами, до сих пор природа многомерных детонационных структур, образующихся в газовых реагирующих смесях при различных условиях, до конца не исследована.

ДВ характеризуются высокими давлениями, составляющими несколько десятков атмосфер для газовых взрывчатых смесей при атмосферном давлении, и распространяются со скоростями несколько километров в секунду. Более того, детонация в газах сопровождается образованием сложной неоднородной и нестационарной структуры течения за ее передним фронтом. В частности, с 1926 года известно явление *спиновой детонации*, суть которого в том, что в трубах вблизи детонационных пределов наиболее яркое свечение фронта волны сосредотачивается у стенки – в «голове» спина, вращающейся по окружности одновременно с поступательным движением фронта [1] (см. Рис. 1). Спиновый режим впервые наблюдался С. Кемпбеллом, Д.В. Вудхедом и А.С. Финчем как периодические неоднородности на фоторазвертках самосвечения детонации в смесях окиси углерода с кислородом.

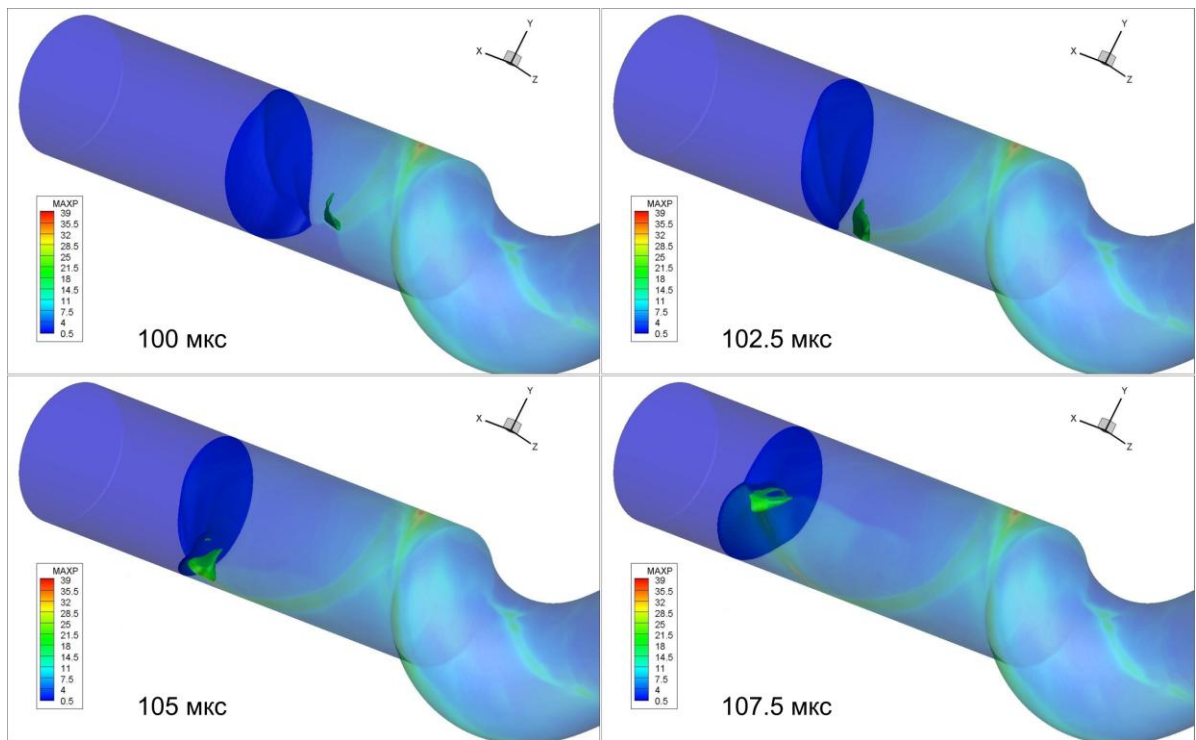


Рис. 1. Распространение спиновой детонации. «Численные следовые отпечатки» – распределение максимумов давления на поверхности трубы в МПа. Лидирующая волна – изоповерхность температуры 298 К синего цвета, «голова» спина – изоповерхность давления 95 атм зеленого цвета [2]

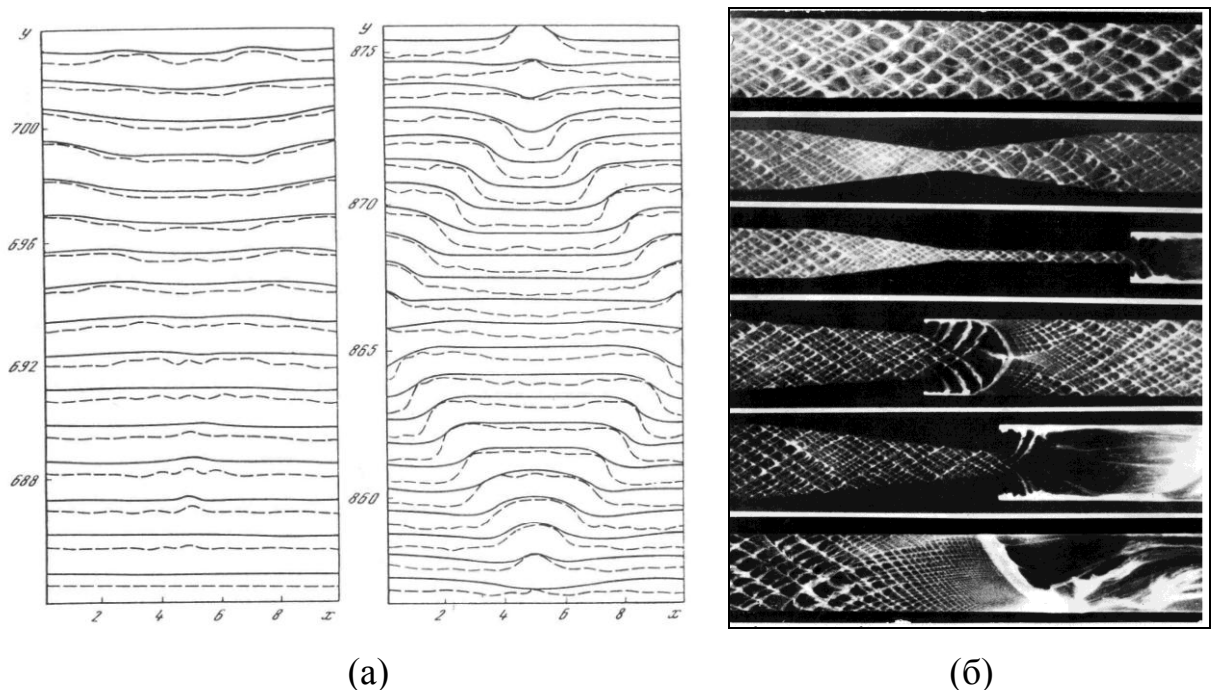


Рис. 2. Ячеистая структура ДВ: (а) последовательные положения ударной волны (сплошные кривые) и фронта горения (пунктирные кривые) в вычислительном эксперименте [4], (б) натурные эксперименты [3]

Другим примером являются экспериментально обнаруженные в 1957 – 1958 гг. *ячеистые структуры* детонационного фронта вдали от пределов, обусловленные наличием сильных неоднородностей – *поперечных волн* в зоне за лидирующим скачком [1] (см. Рис. 2).

С подобным многообразием проявлений природы детонационных процессов в газовых реагирующих смесях связан ряд сложностей проведения как натуральных, так и вычислительных экспериментов. Для экспериментального исследования детонационных явлений требуется разработка прецизионных методов измерений различных газодинамических величин, и часто эти методы сами по себе являются предметом серьезного научного исследования.

Похожая картина наблюдается и в вычислительных экспериментах. Исторически сложилось так, что натуральный эксперимент в вопросах исследования газовой детонации долгое время являлся фактически единственным инструментом. Тем не менее, результаты, полученные исследователями при использовании уже первых ЭВМ, помогли существенно прояснить природу детонационных явлений [4]. На Рис. 2а представлены одни из первых в мире результатов моделирования многофронтной структуры ДВ, выполненные на машине БЭСМ-6, которые позволили во многом объяснить наблюдаемые в экспериментах ячеистые структуры (см. Рис. 2б). Сегодня вычислительный эксперимент – неотъемлемый этап исследования механики быстропротекающих процессов [5]. Более того, современные многопроцессорные вычислительные комплексы позволяют выявить очень тонкие эффекты, обнаружить которые в натурном эксперименте без привлечения средств математического моделирования весьма затруднительно или практически невозможно.

Практическая значимость курса обусловлена возрастающей потребностью в понимании детонационных процессов в реагирующих газовых смесях из-за необходимости решения широкого класса прикладных проблем, связанных с разработкой методов обеспечения взрывобезопасности на производствах, с попытками использовать детонационное горение в силовых установках и в военных технологиях.

# Глава 1. Общие понятия и терминология теории взрывных и детонационных процессов

## 1.1. История открытия и основные этапы изучения детонации

В данном разделе кратко изложены основные исторические этапы в изучении явления газовой детонации (по материалам [6, 8]).

Еще с пятнадцатого века людям было известно, что некоторые соединения, например, фульминат ртути или гремучая ртуть, способны подвергаться бурному химическому распаду при механическом воздействии, например, при ударе. Однако, долгое время не существовало соответствующего оборудования для наблюдения и определения скорости подобной быстрой волны горения. По-видимому, первым, кто определил скорость волны детонации в пироксилиновом порохе был Ф. Абель (1869).

Катастрофические взрывы в угольных шахтах в конце 19-го столетия побудили ученых ряда стран заняться детальным исследованием распространения пламени в трубах. Одним из наиболее важных результатов этих работ было открытие в 1881 г. четырьмя французскими учеными (Е. Малляром и Г. Ле-Шателье и, независимо от них, М. Бертло и П. Вьелем) явления детонации в газах – распространения горения с равномерной, вполне определенной для каждого горючего состава, сверхзвуковой скоростью порядка 2 – 3 км/с. Этот быстрый процесс горения был назван «фальшивым горением», или детонацией (от французского *détonner*: фальшивить, звучать не в тон).

Для большого количества смесей взрывчатых газов (например,  $H_2$ ,  $C_2H_4$ ,  $C_2H_2$ ) с различными окислителями (например,  $O_2$ ,  $NO$ ,  $N_2O_4$ ), разбавленных инертным азотом, систематические измерения скорости детонации были выполнены Бертло и Вьелем (1881 – 1883). Малляр и Ле-Шателье (1883) использовали барабанный киносъёмочный аппарат, чтобы наблюдать переход горения в детонацию, продемонстрировав тем самым возможность существования обоих режимов горения в одной и той же взрывчатой смеси.

Они же высказали предположение, что химические реакции в ДВ связаны с адиабатическим сжатием смеси.

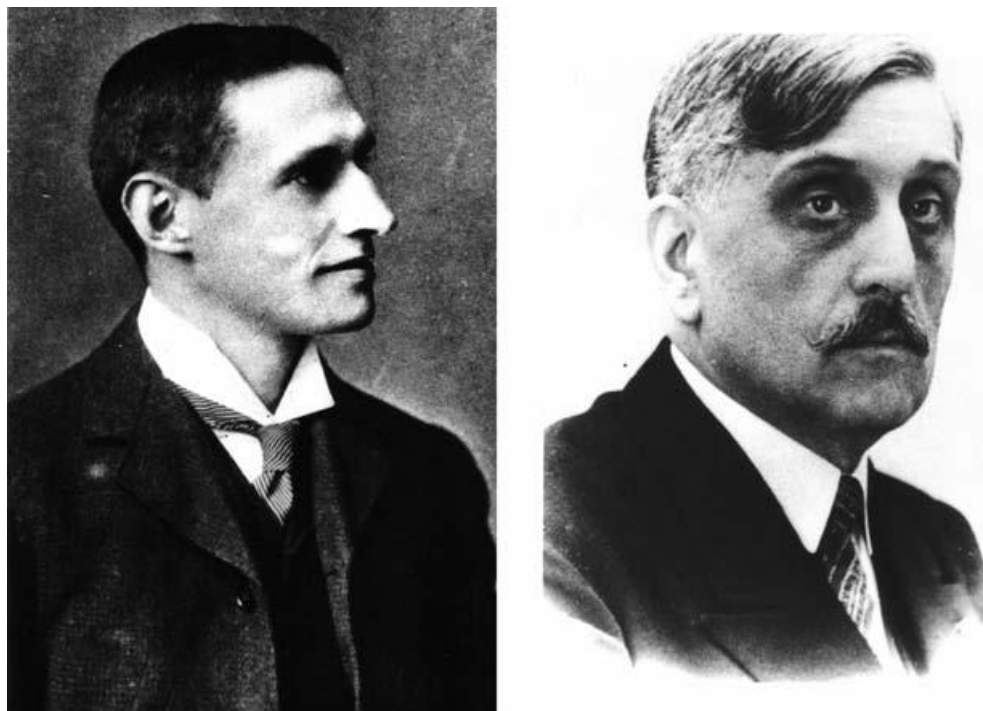


Рис. 1.1. Д.Л. Чепмен (1869 – 1958) и Е. Жуге (1871 – 1943) (фотографии из [6])

Качественная теория, которая предсказывает скорость ДВ в конкретной взрывчатой смеси, была предложена Д.Л. Чепменом (1889), Е. Жуге (1904 – 1905) (см. Рис. 1.1) и В.А. Михельсоном (1893) вскоре после открытия явления детонации. Данная теория детонации, которая стала называться теорией Чепмена – Жуге (ЧЖ) и которая заложила основы *гидродинамической* теории детонации, базируется на работах Рэнкина (1870) и Гюгонио (1887, 1889), анализировавших законы сохранения на ударной волне (УВ). Более подробно теория идеальной детонации ЧЖ или теория экзотермического скачка будет рассмотрена ниже (см. Глава 2). Сейчас только отметим *гипотезу ЧЖ* о том, что скорость звука в продуктах детонации в точности равна скорости стационарной детонации относительно этих продуктов.

Появление новых экспериментальных данных, которые не укладывались в рамки классической теории, привело к необходимости более детального теоретического изучения структуры фронта и механизма распространения газовой детонации. В 1940 г. Я.Б. Зельдовичем была предложена физическая



модель фронта детонации и дана четкая связь между условиями протекания реакции и принципом минимума скорости детонации, также являвшемся ранее постулатом теории ЧЖ. Тем самым было положено начало второго этапа в исследованиях детонации, которое одновременно оказалось и окончательным, завершающим шагом первого этапа (сделавшим однозначными выводы гидродинамической теории и доказавшим справедливость гипотезы ЧЖ). Вопрос был назревшим, и неудивительно, что в разных странах практически одновременно и, по-видимому, независимо появились очень близкие по идее работы: Зельдовича (СССР, 1940 г.), фон Неймана (США, 1942 г.), Деринга (Германия, 1943 г.) и Гриба (СССР, 1944 г.) (см. Рис. 1.2), опубликованные со значительным опозданием по условиям военного времени. Важнейший вывод теории Зельдовича-Неймана-Деринга (ЗНД) – существование области повышенного давления во фронте ДВ – получил впоследствии экспериментальное подтверждение при исследовании детонации газов и конденсированных сред.



Рис. 1.2. Я.Б. Зельдович (1914 – 1987), Дж. фон Нейман (1903 – 1957) и В. Деринг (1911 – 2006) (фотографии из [6])

Дальнейшее существенное развитие применительно к газовым смесям теория детонации получила главным образом благодаря работам Ю.Б. Харитона (пределы возбуждения и распространения детонации), Л.Д. Ландау (не-

установившееся движение сплошных сред), А.А. Гриба (гидродинамическая теория взрывных волн), К.И. Щелкина и Я.К. Трошина (универсальная неустойчивость детонационного фронта), Р.И. Солоухина, В.В. Митрофанова, М.Е. Топчияна (детонация в газах), и др.

Вместе с тем, предпринятое в 1950-60-х годах детальное экспериментальное изучение проблемы газовой детонации позволило обнаружить, что фронт реальной ДВ обладает сложной ячеистой структурой, обусловленной наличием сильных неоднородностей – поперечных волн в зоне за лидирующим скачком (см. Рис. 2б). Идеализированная одномерная модель ЗНД с гладким фронтом оказалась неустойчивой в случае реальных химических реакций, которые обладают сильной зависимостью от температуры.

Таким образом, любая детонация в газах сопровождается образованием сложной неоднородной и нестационарной структуры течения за ее передним фронтом. Единственным инструментом решения подобных задач сегодня являются средства математического моделирования с технологиями вычислительного эксперимента, чему и посвящен настоящий курс.

## 1.2. Терминология теории взрывных и детонационных процессов

В данном разделе приведены основные понятия и определения [1, 6], которые активно будут использоваться при дальнейшем изложении. Часть из представленных понятий уже затрагивалась и обсуждалась выше.

*Взрывом* называют быстрое, термодинамически необратимое изменение состояния вещества, сопровождающееся нарушением механического равновесия с внешней средой, быстрым расширением (разлетом) вещества или резким повышением давления с возбуждением ударных или упругих волн в окружающей среде. Возможность совершать с помощью взрыва большую механическую работу определила их разнообразное применение. Хотя коэффициент полезного использования выделяющейся при взрыве энергии, ввиду сильной неравновесности процесса, невысок и редко превы-

шает 10%, взрыв часто оказывается незаменимым как простой источник большой импульсной мощности.

*Взрывчатыми веществами* (ВВ) называют метастабильные химические соединения и смеси, относительно устойчивые при нормальных условиях, но способные после определенного начального воздействия (инициирующего импульса) к взрыву путем самоподдерживающегося внутреннего химического превращения с выделением тепла и газообразных продуктов.

Наиболее быстрой формой протекания взрывного превращения в зарядах ВВ является детонация, которая, повторимся, представляет собой гидродинамический волновой процесс распространения по веществу зоны экзотермической реакции со сверхзвуковой скоростью. Зона основного энерговыделения и перестройки состояния вещества – *фронт волны* – имеет при этом малую толщину по сравнению с размерами заряда в направлении распространения детонации. Фронт волны вместе с примыкающей областью течения продуктов взрыва образует *детонационную волну*.

Химическое превращение ВВ может протекать не только в режиме детонации. Существует другой, гораздо более медленный процесс распространения зоны химической реакции – *нормальное (послойное) горение*. Дозвуковые режимы горения объединяются общим термином *дефлаграция*. Зона реакции при послойном горении сосредоточена в тонком слое – *фронте пламени*. *Пламенем* принято называть область горения, испускающую видимый свет. Иначе пламя можно определить как стационарную относительно лабораторной системы координат волну дефлаграции в горелочном устройстве при набегании реагирующей смеси. Пламя содержит высокую концентрацию химически активных частиц, обладает заметной электропроводностью. Скорость фронта пламени относительно исходного вещества всегда дозвуковая. Механизм распространения послойного горения тепловой или диффузионно-тепловой: воспламенение свежих слоев вещества происходит за счет их прогрева теплом, поступающим из зоны химической реакции, и за счет диффузии химически активных частиц.

В газовых смесях фронт нормального горения (ламинарное пламя) распространяется со скоростями от десятков сантиметров до десятка метров в секунду. Его скорость является весьма важной величиной в теории горения газов; она может быть надежно вычислена теоретически, если известны химико-кинетические и физические свойства смеси. При турбулизации газового потока скорость горения и эффективная толщина его фронта возрастают за счет конвективного переноса пламени местными пульсационными течениями. Такое горение называют *турбулентным*.

Начальная стадия развития экзотермической реакции в некотором объеме вещества, завершающаяся резким ростом температуры за счет тепловыделения и появления пламени, носит название *воспламенения*. Различают *самовоспламенение*, возникающее за счет самопроизвольных внутренних процессов при определенных начальных термодинамических параметрах системы и граничных условиях, и *вынужденное воспламенение (зажигание)*, производимое с помощью постороннего источника, например, нагретого тела, электрической искры, лазера или путем подвода горячих продуктов сгорания.

При детонации воспламенение реагирующей смеси происходит в результате адиабатического сжатия в лидирующей УВ, которая предшествует зоне химических реакций. За лидирующей волной обычно следует *зона индукции*, в которой происходит диссоциация и формирование активных радикалов. Термодинамические параметры в зоне индукции обычно меняются слабо. За зоной индукции следует области активной рекомбинации в резким увеличением температуры в результате экзотермических реакций.

Обратимся теперь к некоторым особенностям дозвуковых режимов горения [6]. Волны дефлаграции распространяются с относительно низкой, дозвуковой, скоростью относительно реагирующей смеси. Таким образом, возмущения, возникающие за фронтом волны дефлаграции, могут распространяться вверх по потоку и влиять на начальное состояние взрывчатой смеси. Следовательно, на скорость распространения волны дефлаграции влияет не только начальное состояние взрывчатой смеси, но и граничные ус-

ловия, например, открытый или закрытый конец трубы. Дефлаграция представляет собой волну разрежения, а продукты горения ускоряются вдали от волны в направлении противоположном направлению распространения волны горения. Расширение продуктов горения приводит и к движению свежей взрывчатой смеси перед фронтом волны дефлаграции. Таким образом, фронт горения распространяется по движущейся в направлении распространения горения смеси. Тогда скорость дефлаграции в лабораторной системе координат равняется сумме скорости потока свежей взрывчатой смеси и скорости фронта горения относительно смеси. В результате движения смеси по фронте волны дефлаграции формируются также волны сжатия, поэтому обычно дефлаграция представляет собой комплекс из лидирующей УВ и следующего за ней фронта реакции.

Самоподдерживающиеся дефлаграционные режимы по своей природе неустойчивы, и существует огромное количество механизмов развития этих неустойчивостей, обеспечивающих турбулизацию фронта реакции, и как следствие, увеличение скорости распространения волны. Таким образом, самоподдерживающиеся волны дефлаграции ускоряются и при наличии соответствующих граничных условий переходят в детонацию. До перехода турбулентные дефлаграционные режимы могут достигать существенных сверхзвуковых скоростей относительно лабораторной системы координат. Под термином «высокоскоростная» дефлаграция обычно понимают описанный режим распространения дефлаграции, предшествующий переходу в детонацию. При распространении в трубах с сильно шероховатыми стенками скорость детонации может быть существенно ниже, чем скорость детонации ЧЖ. Подобные низкоскоростные детонационные режимы называются «квази-детонационными». Между высокоскоростной дефлаграцией и квази-детонацией иногда бывает трудно провести четкую грань.

## Глава 2. Теория экзотермического скачка

В детонационной волне имеется переходная зона, в которой исходное ВВ превращается в продукты детонации (ПД). Размер длины переходной зоны для употребительных ВВ редко превышает 1 см, а часто составляет лишь доли миллиметра. Для решения целого ряда задач теории детонации переходную зону можно заменить сильным газодинамическим разрывом.

В данной главе исследуются свойства экзотермического скачка, то есть сильного разрыва с тепловыделением [1]. ВВ и ПД будем описывать в терминах сплошной среды, характеризуя их удельным объемом  $V$ , плотностью  $\rho = 1/V$ , давлением  $p$ , температурой  $T$ , энтропией  $S$ , внутренней энергией  $E$ , энтальпией  $J = E + pV$  и скоростью звука  $c = \sqrt{(\partial p / \partial \rho)_s}$ .

В качестве основных независимых переменных используем  $p$  и  $V$ . Экзотермичность перехода, то есть условие положительности теплового эффекта при данных  $p$  и  $V$ , запишется в виде:

$$Q_{p,V} = E^o(p,V) - E(p,V) = J^o(p,V) - J(p,V) > 0.$$

Здесь верхний индекс  $o$  означает, что внутренняя энергия вычислена для вещества с начальным химическим составом. Величины без индексов относятся к состоянию за скачком, с нижним индексом  $0$  – к начальному состоянию (см. далее).

Предполагается, что состояние термодинамической системы меняется только за счет изменения объема и внутренних процессов типа химических реакций, а теплообмен с внешней средой из-за малой длительности процесса обычно не успевает произойти (процесс адиабатический). Будем также считать, что среда за скачком удовлетворяет следующим условиям:

$$(\partial p / \partial V)_s < 0, \quad (\partial^2 p / \partial V^2)_s > 0, \quad (\partial p / \partial S)_v > 0, \quad (2.1)$$

первое из которых справедливо для устойчивых состояний вещества, а остальные два являются предположениями, которые выполняются для большинства сред.

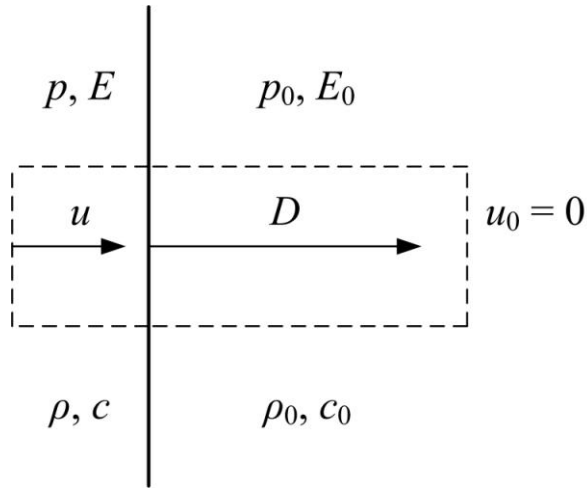


Рис. 2.1. Изменение параметров среды при прохождении скачка

Выпишем соотношения между величинами до и после скачка (см. Рис. 2.1), используя систему координат, в которой исходное вещество покоится (будем называть ее далее неподвижной). Поток массы через скачок сохраняется:

$$\rho_0 D = \rho(D - u). \quad (2.2)$$

Здесь  $u$  – скорость газа за скачком,  $D$  – скорость скачка. Изменение импульса вещества в единицу времени равно разности действующих на него сил:

$$p - p_0 = \rho_0 u D. \quad (2.3)$$

Работа сил давления равна изменению полной энергии вещества, проходящего через скачок в единицу времени:

$$p u = \rho_0 D \left( E + u^2/2 - E_0 \right). \quad (2.4)$$

Из (2.2) и (2.3) сразу следует:

$$u/D = 1 - \rho_0/\rho, \quad p - p_0 = \rho_0 D^2 (1 - \rho_0/\rho), \quad (2.5)$$

или

$$(p - p_0)/(V - V_0) = -\rho_0^2 D^2, \quad (p - p_0)(V_0 - V) = u^2. \quad (2.6)$$

Вычитая из (2.4) соотношение (2.3), умноженное на  $u$ , и затем переходя от  $E$  к  $J$ , находим:

$$E - E_0 = u^2/2 + p_0 u / (\rho_0 D), \quad (2.7)$$

$$J - J_0 = D^2 \left[ 1 - (\rho_0/\rho)^2 \right] / 2. \quad (2.8)$$

Исключив величины  $u/D$ ,  $u^2$ ,  $D^2$  из (2.7) и (2.8) с помощью (2.5), (2.6), получим соотношения Гюгонио:

$$E(p, V) - E^0(p_0, V_0) = (p + p_0)(V_0 - V)/2,$$

$$J(p, V) - J^0(p_0, V_0) = (p - p_0)(V_0 + V)/2.$$

Любое из последних уравнений определяет кривую Гюгонио (КГ) в плоскости  $(p, V)$ , на которой лежат все возможные состояния вещества за скачком. Будем считать, что функция  $E(p, V)$  определена для термодинамически равновесного состава продуктов. В случае, когда  $E(p, V) \equiv E^0(p, V)$ , получим КГ для ударной волны – ударную адиабату – в среде с фиксированным составом, на которой  $Q_{p,v} = 0$ .

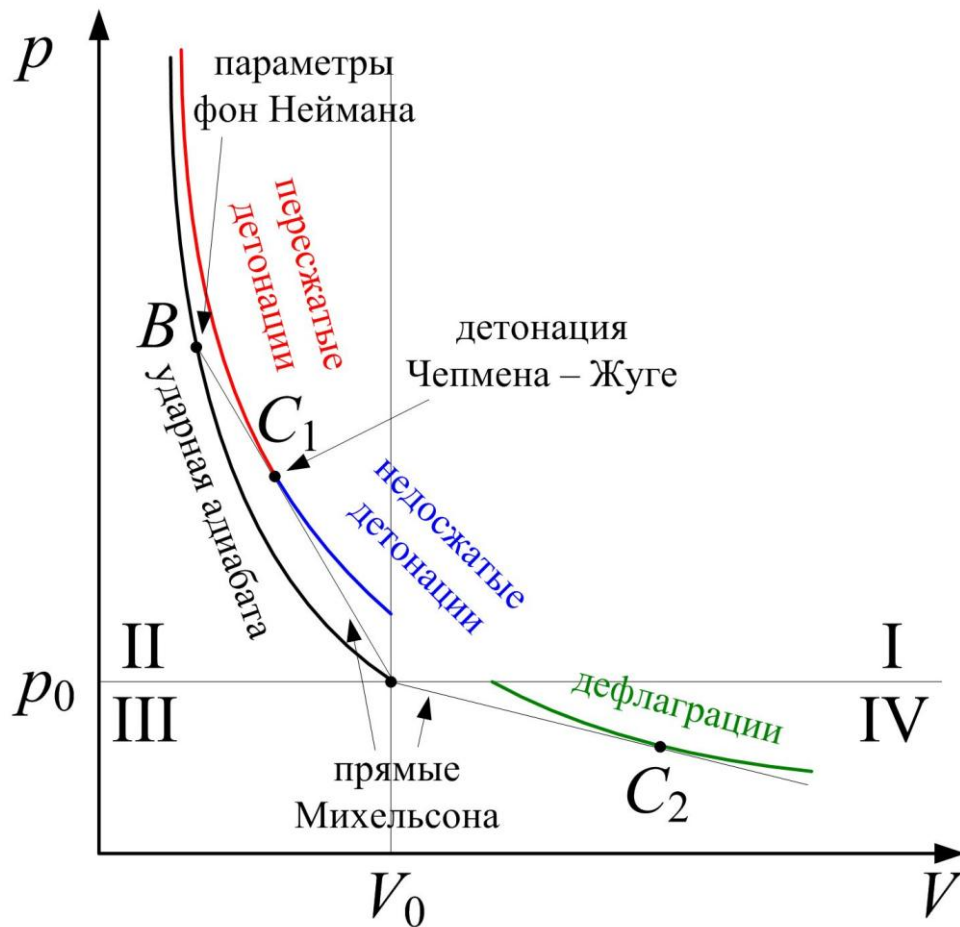


Рис. 2.2. Ударная адиабата (черная) и кривая Гюгонио (разноцветная)



Перейдем теперь к анализу свойств КГ. Проведем в плоскости  $(p, V)$  ударную адиабату (черная линия на Рис. 2.2, участок адиабаты при  $p < p_0$  является физически нереальным [7], и потому не изображается), а также линии  $p = p_0$  и  $V = V_0$ , которые делят квадрант положительных значений  $p$  и  $V$  на четыре области: I, II, III и IV. Из соотношений (2.6) следует, что КГ проходит только через области II и IV. Можно также показать, что КГ для экзотермического скачка лежит всюду выше ударной адиабаты.

Прямая, проведенная через точку  $(p_0, V_0)$  и какую-либо точку на КГ, называется прямой Михельсона или прямой Рэля. Следующее свойство КГ заключается в том, что прямая Михельсона пересекает КГ не более, чем в двух точках. Таким образом, из приведенных выше свойств следует, что КГ – достаточно плавная кривая, распадающаяся на две отдельные ветви, из которых верхняя целиком лежит в области II, а нижняя – в области IV, как показано на Рис. 2.2.

Перейдем теперь к более содержательным с точки зрения теории детонационных процессов выводам, которые можно сделать, основываясь на анализе поведения КГ. На КГ имеются две точки касания с прямыми Михельсона, по одной на каждой ветви, причем верхней точке  $C_1$  соответствует минимальная скорость скачка для верхней ветви, нижней точке касания  $C_2$  – максимальная скорость скачка для нижней. Скорость скачка для всех точек верхней ветви КГ сверхзвуковая, а для нижней ветви – дозвуковая относительно исходного вещества. Таким образом, детонационным скачкам соответствует только верхняя ветвь КГ. Ее называют детонационной адиабатой. Нижняя ветвь (на Рис. 2.2 – зеленая) отвечает скачкам горения, иначе, дефлаграции.

Точки  $C_1$  и  $C_2$  представляют интерес еще и потому, что в них имеет место одновременное касание прямых Михельсона с КГ и изоэнтропами вещества за скачком. При этом стационарное значение энтропии на КГ есть минимум в верхней точке касания и максимум в нижней. Важным дополне-

нием данного факта является следующее утверждение: приращение энтропии на фронте самоподдерживающейся ДВ всегда меньше, чем при сгорании в постоянном теплоизолированном объеме. Отсюда следует, что ПД при рациональном использовании их кинетической энергии могут совершить большую механическую работу, чем продукты сгорания (взрыва) в постоянном объеме.

В точках касания  $C_1$  и  $C_2$  скорость продуктов превращения относительно скачка равна местной скорости звука:

$$u + c = D. \quad (2.9)$$

Для участков каждой ветви КГ, лежащих выше точек касания, относительная скорость за скачком дозвуковая:

$$u + c > D.$$

Ниже точек касания на каждой ветви КГ скорость потока относительно скачка сверхзвуковая:

$$u + c < D.$$

Установившаяся детонация, соответствующая точке касания к детонационной адиабате, называется детонацией ЧЖ (см. раздел 1.1). Чепмен и Жуге предполагали, что реальные самоподдерживающиеся детонации отвечают именно точке касания (гипотеза Чепмена – Жуге, о которой говорилось выше, или *правило отбора ЧЖ*). Во многих случаях это оказалось так, но не всегда. Равенство (2.9) называется *условием ЧЖ*, а точка любых координат, в которой оно выполняется – *точкой ЧЖ*.

Детонации, отвечающие участку КГ выше точки ЧЖ (на Рис. 2.2 – красный), называют *пересжатыми*, так как плотность ПД за их фронтом выше, чем в точке ЧЖ. На участке КГ ниже точки ЧЖ (на Рис. 2.2 – синий) детонации соответственно называют *недосжатыми*.

На фронте ДВ всегда  $p > p_0$  и  $V < V_0$ , поэтому при распространении самоподдерживающейся детонации за ее фронтом всегда возникает волна разрежения, в которой ПД расширяются. Поскольку фронт волны разрежения

движется вдоль характеристик со скоростью  $u + c$ , с волной разрежения при  $D = const$  совместимы лишь состояния ПД, в которых  $u + c \leq D$ . В случае  $u + c > D$  волна разрежения догоняет фронт детонации и сохранение его параметров постоянными становится невозможно.

Пересжатые ДВ не могут быть самоподдерживающимися, но они реально существуют. Их свойства близки к свойствам ударных волн. Так как фронт пересжатых ДВ догоняют звуковые возмущения, чаще всего эти ДВ нестационарны. Однако существуют и стационарные пересжатые ДВ в условиях, когда позади фронта возмущения отсутствуют и все течения в прилегающей к фронту области стационарны. Такая ситуация создается, например, перед поршнем в трубе, движущемся с достаточно большой скоростью.

### Глава 3. Математические модели многомерных течений реагирующих многокомпонентных газовых смесей с волнами детонации

Современные возможности проведения вычислительного эксперимента позволяют моделировать многомерные течения с волнами детонации в реагирующих газовых смесях с использованием детальной химической кинетики. До появления достаточно мощной вычислительной техники рассматривались упрощенные модели ДВ, которые, тем не менее, позволили получить ряд фундаментальных результатов.

Наиболее простой моделью ДВ является модель *идеальной бесконечно тонкой детонации*, основные положения которой, а также некоторые результаты, полученные в рамках данной модели, обсуждались выше (см. Глава 2).

Более совершенной моделью ДВ в виде одномерного комплекса из УВ и присоединенной зоны реакции, протекающей в течение конечного промежутка времени, является модель ЗНД.

В рамках модели ЗНД были получены следующие результаты:

1. Рассмотрение необратимого экзотермического химического превращения за фронтом ДВ позволило впервые строго обосновать правило отбора скорости детонации, т.е. гипотезу ЧЖ.

2. На скорость и структуру фронта ДВ, распространяющейся в трубе, влияют потери на трение о стенки трубы, в результате которых изменяется период индукции. При определенном уровне потерь режим самоподдерживающейся детонации становится невозможным, и происходит прогрессирующее разделение лидирующей УВ и фронта реакции.

3. Характерной чертой модели является наличие непосредственно за передним скачком области, где давление выше, чем в продуктах детонации. Эту область между ударным фронтом и плоскостью ЧЖ называют *химпиком*. Химпик зарегистрирован экспериментально в большинстве исследованных

составов, хотя его параметры, например, форма, длительность, высота, не всегда совпадают с рассчитанными по модели ЗНД.

Модель ЗНД обеспечила оценки критических условий развития детонации и положила начало математическому моделированию детонационных явлений [1]. Тем не менее, идеализированная одномерная модель ЗНД с гладким фронтом оказалась неустойчивой в случае реальных химических реакций, скорость протекания которых обладают сильной зависимостью от температуры. Как уже отмечалось выше, экспериментальные исследования в 1950-х, позволили обнаружить, что фронт реальной ДВ не является плоским, а обладает сложной ячеистой структурой. В настоящее время модель ЗНД часто используется для оценки толщины зоны протекания химических реакций за фронтом ДВ, и подобный анализ предшествует полномасштабному численному исследованию (см. раздел 4.2).

*Модель Коробейникова – Левина* учитывает протекающие с конечной скоростью химические реакции с тепловыделением, которые начинаются после истечения периода индукции. Уравнения, описывающие химические реакции в данной модели, могут быть записаны в следующей форме [9]:

$$\frac{dc}{dt} = -k_1 p^{n_1} \rho^{l_1} \exp\left(-\frac{E_1 \rho}{p}\right), \quad (3.1)$$

$$\frac{d\beta}{dt} = -k_2 \beta^{m_1} p^{n_2} \rho^{l_2} \exp\left(-\frac{E_2 \rho}{p}\right) + k_3 (1-\beta)^{m_2} p^{n_3} \rho^{l_3} \exp\left(-\frac{E_3 \rho}{p}\right), \quad (3.2)$$

где  $\beta$  – массовая доля несгоревшей смеси,  $p$  – давление,  $\rho$  – плотность смеси,  $c$  – доля периода индукции, константы  $k_i$ ,  $n_i$ ,  $l_i$ ,  $E_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ ,  $m_1$ ,  $m_2$  определяются исходя из экспериментальных данных.

Уравнение (3.1) моделирует стадию накопления в частице активных радикалов при химической реакции. В начальный момент времени  $c = 1$ , и период индукции заканчивается при  $c = 0$ . После этого начинается вторая стадия реакции, которая описывается уравнением (3.2) с начальным значением  $\beta = 1$ . Первый член в правой части уравнения (3.2) учитывает выгорание

основного вещества в прямых реакциях, а второй член – образование основного вещества за счет обратных реакций.

В отличие от модели ЗНД, т.е. теории плоской ДВ как стационарного комплекса, распространяющегося с постоянной скоростью в индуцированном нестационарном поле течения газа, и тем более модели идеальной детонации, модель Коробейникова – Левина, дополняя модель невязкого газа, позволяет рассчитывать многомерные нестационарные течения с волнами детонации, имеющими сложную многофронтную структуру. Таким образом, математическая формулировка модели включает в себя уравнения газовой динамики, а также два уравнения (3.1) и (3.2) для доли периода индукции  $c$  и массовой доли несгоревшей смеси  $\beta$  соответственно. При этом выражение для внутренней энергии газа должно измениться на следующее:

$$\varepsilon = \frac{P}{(\gamma - 1)\rho} + \beta Q.$$

Модель Коробейникова – Левина хорошо описывает одномерные течения с волнами детонации, а также двумерные при исследовании ДВ с ячеистой структурой в плоских каналах (см. Рис. 2а). Одним из основных факторов, ограничивающих область применения данной модели, является некоторая нефизичность параметра доли периода индукции  $c$ . Проявляется эта проблема при Эйлеровом подходе, прежде всего, в многомерных расчетах, когда за счет переноса между ячейками расчетной сетки величины  $c$  период индукции может усредняться на некоторый объем и неоправданно затягиваться.

### 3.1. Математическая модель потоков реагирующих газовых смесей

Приведенные в предыдущих разделах модели ДВ имеют несомненную ценность в плане качественного понимания закономерностей многих процессов, протекающих при детонации, однако едва ли могут быть использованы для количественного исследования многомерных детонационных процессов

в областях со сложной геометрией с учетом реальной кинетики протекания химических реакций.

Для описания быстропротекающих взрывных процессов в газовых реагирующих смесях традиционно используется модель невязкого сжимаемого многокомпонентного реагирующего газа. Математическая формулировка модели включает в себя *систему уравнений газовой динамики в форме Эйлера*, которая решается совместно с системой обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ), описывающей химические превращения, а также термическое и калорическое уравнения состояния среды. Используемая модель не учитывает процессы переноса, т.е. вязкость, диффузию и теплопроводность, которые на характерных временах являются эффектами более высокого порядка малости и, как показывает опыт, оказывают незначительное влияние на исследуемые процессы.

Детальный учет эффектов переноса играет крайне важную роль при моделировании более медленных режимов горения, например, распространения медленного пламени, которое обусловлено диффузией и теплопроводностью (см. раздел 1.2). В этом случае математическая формулировка модели должна включать *систему уравнений Навье-Стокса*.

### 3.1.1. Трехмерная постановка в криволинейной системе координат

Уравнения нестационарного движения сжимаемого невязкого химически реагирующего многокомпонентного газа в произвольной криволинейной системе координат  $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$  имеют следующий вид [10]:

- *Уравнение неразрывности:*

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_k \mathbf{U}) = \dot{\omega}_k, \quad k = 1, \dots, N. \quad (3.3)$$

Здесь  $\mathbf{U} = (U_{\xi_1}, U_{\xi_2}, U_{\xi_3})$  – вектор скорости,  $\rho_k$  – плотность  $k$ -го компонента смеси,  $\dot{\omega}_k$  – скорость изменения плотности  $k$ -го компонента смеси за счет

химических реакций, величина которой будет определена в данной главе далее.

Плотность смеси  $\rho$  определяется как суммарная плотность компонентов:

$$\rho = \sum_{k=1}^N \rho_k.$$

Просуммировав уравнения (3.3) для различных  $k$ , получим закон сохранения массы для газовой смеси:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{U}) = 0. \quad (3.4)$$

- *Закон сохранения импульса:*

$$\rho \frac{d\mathbf{U}}{dt} = \operatorname{div} \hat{\mathbf{P}}, \quad (3.5)$$

где  $d/dt = \partial/\partial t + (\mathbf{U}, \nabla)$  – индивидуальная производная по времени,  $\hat{\mathbf{P}}$  – тензор напряжений:

$$\hat{\mathbf{P}} = -p\hat{\mathbf{I}},$$

где  $p$  – давление,  $\hat{\mathbf{I}}$  – единичный тензор.

- *Закон сохранения энергии:*

$$\rho \frac{dE}{dt} - \operatorname{div}(\hat{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{U}) = 0, \quad (3.6)$$

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 (U_{\xi_i})^2 + \varepsilon, \quad \varepsilon = \sum_{k=1}^N w_k h_k - p/\rho, \quad (3.7)$$

где  $E$  – полная удельная энергия газа,  $\varepsilon$  – удельная внутренняя энергия газа,  $w_k = \rho_k/\rho$  – массовая доля,  $h_k = h_{0,k} + e_k + p_k/\rho_k$  – удельная энтальпия,  $e_k = c_{V,k} T$  – удельная внутренняя энергия,  $c_{V,k}$  – удельная теплоемкость при постоянном объеме<sup>1</sup>,  $h_{0,k}$  – удельная энтальпия образования, т.е. химическая

<sup>1</sup> Часто для получения достоверных результатов достаточно находиться в рамках допущения  $c_{V,k} = \text{const}_k$  (см., например, Таб. 4.1). В общем случае удельная теплоемкость компонента смеси зависит от температуры газа и может аппроксимироваться, например, полиномиальной зависимостью [11].



энергия, которую нужно затратить для получения  $k$ -го компонента смеси<sup>2</sup>,  
 $p_k$  – парциальное давление  $k$ -го компонента смеси:

$$p_k = \rho_k R_k T, \quad k = 1, \dots, N,$$

$R_k = R/\mu_k$  – газовая постоянная  $k$ -го компонента,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $\mu_k$  – молярная масса  $k$ -го компонента,  $T$  – температура газа.

• Для нахождения  $(N + 5)$ -ти неизвестных величин  $\rho_1(\xi, t)$ , ...,  $\rho_N(\xi, t)$ ,  $U_{\xi_1}(\xi, t)$ ,  $U_{\xi_2}(\xi, t)$ ,  $U_{\xi_3}(\xi, t)$ ,  $p(\xi, t)$  и  $T(\xi, t)$ , таким образом, выпишаны  $N + 4$  уравнений (3.3), (3.5) и (3.6). Система замыкается *термическим уравнением состояния* смеси в форме:

$$p = \sum_{k=1}^N p_k = \sum_{k=1}^N \rho_k R_k T. \quad (3.8)$$

• При постановке задачи Коши в качестве начальных данных задается распределение искомых величин в нулевой момент времени:

$$\rho_1^{нач} = \rho_1(\xi, 0), \dots, \rho_N^{нач} = \rho_N(\xi, 0), \mathbf{U}^{нач} = \mathbf{U}(\xi, 0), p^{нач} = p(\xi, 0). \quad (3.9)$$

• На границе расчетной области  $\mathbf{q}_{zp}$  задаются граничные условия:

$$\rho_1^{zp} = \rho_1(\xi_{zp}, t), \dots, \rho_N^{zp} = \rho_N(\xi_{zp}, t), \mathbf{U}^{zp} = \mathbf{U}(\xi_{zp}, t), p^{zp} = p(\xi_{zp}, t). \quad (3.10)$$

### 3.1.2. Двумерная постановка

Запишем теперь уравнения (3.3), (3.5) и (3.6) в двумерной декартовой ( $\xi_1 = x$ ,  $\xi_2 = y$ ) и цилиндрической ( $\xi_1 = r$ ,  $\xi_2 = z$ ) системах координат в осесимметричном случае ( $U_\varphi = 0$ ,  $\partial/\partial\varphi(\cdot) = 0$ ).

• *Уравнение неразрывности:*

в декартовой системе координат:

<sup>2</sup> Энтальпия образования  $H_{0,k}$ , зависящая только от состава компонента смеси, – предел, к которому стремится энтальпия  $h_k$  при  $T \rightarrow 0$  и  $p_k \rightarrow 0$  без изменения состава. Она характеризует потенциальную энергию связей в разгруженном холодном веществе. В таблицах обычно приводится энтальпия образования  $h_{0,k}$  при  $p_{н.у.} = 1$  атм и  $T_{н.у.} = 293$  К (см. для примера Таб. 4.1), которая отличается от  $H_{0,k}$  на небольшое постоянное слагаемое. Для простых веществ обычно полагают  $h_{0,k} = 0$ , тогда как для сложных веществ  $h_{0,k}$  равна теплоте химической реакции образования вещества при  $p_{н.у.}$  и  $T_{н.у.}$  [1].

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_k U_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho_k U_y) = \dot{\omega}_k, \quad k = 1, \dots, N, \quad (3.11)$$

в цилиндрической системе координат в осесимметричном случае:

$$\frac{\partial}{\partial t}(r\rho_k) + \frac{\partial}{\partial r}(r\rho_k U_r) + \frac{\partial}{\partial z}(r\rho_k U_z) = r\dot{\omega}_k, \quad k = 1, \dots, N. \quad (3.12)$$

При выводе уравнения (3.11) использовалось выражение для дивергенции в декартовой системе координат:

$$\operatorname{div}\mathbf{U} = \frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\partial U_y}{\partial y},$$

при выводе уравнения (3.12) – в цилиндрической системе координат:

$$\operatorname{div}\mathbf{U} = \frac{U_r}{r} + \frac{\partial U_r}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial U_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial U_z}{\partial z}.$$

• *Закон сохранения импульса в проекции на первое координатное направление:*

в декартовой системе координат:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho U_x) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho U_x^2 + p) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho U_x U_y) = 0, \quad (3.13)$$

в цилиндрической системе координат в осесимметричном случае:

$$\frac{\partial(r\rho U_r)}{\partial t} + \frac{\partial(r\rho U_r^2)}{\partial r} + \frac{\partial(r\rho U_r U_z)}{\partial z} = -r \frac{\partial p}{\partial r}. \quad (3.14)$$

Для вывода уравнений (3.13) и (3.14) к уравнению (3.5) прибавлялось уравнение (3.4), умноженное на соответствующую компоненту скорости –  $U_x$  или  $U_r$ . Аналогично для уравнений для закона сохранения импульса в проекции на второе координатное направление.

• *Закон сохранения импульса в проекции на второе координатное направление:*

в декартовой системе координат:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho U_y) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho U_y U_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho U_y^2 + p) = 0, \quad (3.15)$$

в цилиндрической системе координат:

$$\frac{\partial(r\rho U_z)}{\partial t} + \frac{\partial(r\rho U_z U_r)}{\partial r} + \frac{\partial(r\rho U_z^2)}{\partial z} = -r \frac{\partial p}{\partial z}. \quad (3.16)$$

- *Закон сохранения энергии:*

в декартовой системе координат:

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}([\rho E + p]U_x) + \frac{\partial}{\partial y}([\rho E + p]U_y) = 0, \quad (3.17)$$

в цилиндрической системе координат в осесимметричном случае:

$$\frac{\partial}{\partial t}(r\rho E) + \frac{\partial}{\partial r}(r[\rho E + p]U_r) + \frac{\partial}{\partial z}(r[\rho E + p]U_z) = 0. \quad (3.18)$$

Дивергентная форма уравнений Эйлера, которая будет применяться в дальнейшем для иллюстрации построения численного метода (см. Глава 5), для многокомпонентной реагирующей газовой смеси в декартовой системе координат в двумерном случае в матричной форме имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_1}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{f}_2}{\partial y} &= \mathbf{S}, \\ \mathbf{q} &= [\rho_1 \quad \dots \quad \rho_N \quad \rho U_x \quad \rho U_y \quad \rho E]^T, \\ \mathbf{f}_1 &= [\rho_1 U_x \quad \dots \quad \rho_N U_x \quad \rho U_x^2 + p \quad \rho U_x U_y \quad (\rho E + p)U_x]^T, \\ \mathbf{f}_2 &= [\rho_1 U_y \quad \dots \quad \rho_N U_y \quad \rho U_x U_y \quad \rho U_y^2 + p \quad (\rho E + p)U_y]^T, \\ \mathbf{S} &= [\dot{\omega}_1 \quad \dots \quad \dot{\omega}_N \quad 0 \quad 0 \quad 0]^T. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Напомним, что полная энергия газа здесь выражается формулой (3.7), и используются термическое и калорическое уравнения состояния совершенного газа:

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2}(U_x^2 + U_y^2) + \sum_{k=1}^N w_k h_k - p/\rho, \quad h_k = h_{0,k} + e_k + p_k/\rho_k, \\ e_k &= c_{V,k} T, \quad p = \sum_{k=1}^N p_k = \sum_{k=1}^N \rho_k R_k T. \end{aligned}$$

Дивергентная форма уравнений Эйлера в цилиндрической системе координат в осесимметричном случае в матричной форме имеет следующий вид [12]:

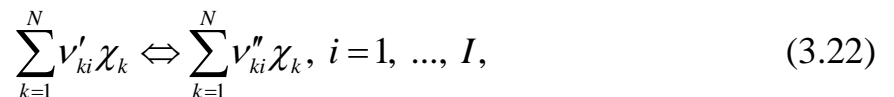
$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_1}{\partial r} + \frac{\partial \mathbf{f}_2}{\partial z} + \frac{\mathbf{f}_1}{r} + \frac{\mathbf{f}_3}{r} &= \mathbf{S}, \\
\mathbf{q} &= [\rho_1 \quad \dots \quad \rho_N \quad \rho U_r \quad \rho U_z \quad \rho E]^T, \\
\mathbf{f}_1 &= [\rho_1 U_r \quad \dots \quad \rho_N U_r \quad \rho U_r^2 + p \quad \rho U_r U_z \quad (\rho E + p) U_r]^T, \\
\mathbf{f}_2 &= [\rho_1 U_z \quad \dots \quad \rho_N U_z \quad \rho U_r U_z \quad \rho U_z^2 + p \quad (\rho E + p) U_z]^T, \\
\mathbf{f}_3 &= [0 \quad \dots \quad 0 \quad -p \quad 0 \quad 0]^T, \\
\mathbf{S} &= [\dot{\omega}_1 \quad \dots \quad \dot{\omega}_N \quad 0 \quad 0 \quad 0]^T, \\
E &= \frac{1}{2} (U_r^2 + U_z^2) + \sum_{k=1}^N w_k h_k - p/\rho.
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Системы (3.19) и (3.20) можно объединить в одну, введя параметр симметрии  $\nu$ , который принимает значение 1 для плоского случая ( $\xi_1 = x$ ,  $\xi_2 = y$ ) и 2 для осесимметричного ( $\xi_1 = r$ ,  $\xi_2 = z$ ):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_1}{\partial \xi_1} + \frac{\partial \mathbf{f}_2}{\partial \xi_2} &= \mathbf{f}_3 + \mathbf{S}, \\
\mathbf{q} &= \xi_1^{\nu-1} [\rho_1 \quad \dots \quad \rho_N \quad \rho U_{\xi_1} \quad \rho U_{\xi_2} \quad \rho E]^T, \\
\mathbf{f}_1 &= \xi_1^{\nu-1} [\rho_1 U_{\xi_1} \quad \dots \quad \rho_N U_{\xi_1} \quad \rho U_{\xi_1}^2 + p \quad \rho U_{\xi_1} U_{\xi_2} \quad (\rho E + p) U_{\xi_1}]^T, \\
\mathbf{f}_2 &= \xi_1^{\nu-1} [\rho_1 U_{\xi_2} \quad \dots \quad \rho_N U_{\xi_2} \quad \rho U_{\xi_1} U_{\xi_2} \quad \rho U_{\xi_2}^2 + p \quad (\rho E + p) U_{\xi_2}]^T, \\
\mathbf{f}_3 &= [0 \quad \dots \quad 0 \quad (\nu-1)p \quad 0 \quad 0]^T, \\
\mathbf{S} &= \xi_1^{\nu-1} [\dot{\omega}_1 \quad \dots \quad \dot{\omega}_N \quad 0 \quad 0 \quad 0]^T, \\
E &= \frac{1}{2} (U_{\xi_1}^2 + U_{\xi_2}^2) + \sum_{k=1}^N w_k h_k - p/\rho.
\end{aligned} \tag{3.21}$$

### 3.1.3. Моделирование химических реакций

Рассмотрим систему химических реакций вида



где  $I$  – число обратимых реакций,  $v'_{ki}$  и  $v''_{ki}$  – стехиометрические коэффициенты прямых и обратных реакций соответственно,  $\chi_k$  – символ для молекул  $k$ -го компонента [1]. Каждое из уравнений (3.22) описывает простую реак-

цию и показывает, сколько и каких молекул одновременно вступает во взаимодействие и образуется после него вновь в данной реакции. Стрелками обозначены прямые и обратные реакции.

Скорости изменения молярной концентрации  $\dot{\omega}_k^{мол}$  и плотности  $k$ -го компонента смеси  $\dot{\omega}_k$  определяются как:

$$\dot{\omega}_k^{мол} = \sum_{i=1}^I \nu_{ki} r_i, \quad \dot{\omega}_k = \mu_k \dot{\omega}_k^{мол}, \quad \nu_{ki} = \nu_{ki}'' - \nu_{ki}'.$$

Здесь  $r_i$  – скорость простой реакции, т.е. число актов реакции в единицу времени в единице объема, которая выражается через молярные концентрации компонентов смеси  $n_k = \rho_k / \mu_k$  следующим образом:

$$r_i = k_{fi} \prod_{k=1}^N [n_k]^{v_{ki}'} - k_{ri} \prod_{k=1}^N [n_k]^{v_{ki}''},$$

где  $k_{fi}$  и  $k_{ri}$  – константы скоростей прямых и обратных реакций, которые записываются в аррениусовской форме:

$$k_{fi} = A_{fi} T^{\beta_{fi}} \exp(-E_{fi}/RT), \quad k_{ri} = A_{ri} T^{\beta_{ri}} \exp(-E_{ri}/RT).$$

В последних выражениях  $E_{fi}$  и  $E_{ri}$  – энергии активации;  $A_{fi}$ ,  $\beta_{fi}$ ,  $A_{ri}$ ,  $\beta_{ri}$  – константы, определяющие предэкспоненциальные множители в прямой и обратной реакциях. Отметим, что константы скоростей реакций для газов, в которых можно пренебречь взаимодействием между соседними молекулами на средних расстояниях, зависят только от температуры. В более плотных смесях, где это взаимодействие существенно, предэкспоненциальный множитель может зависеть как от температуры, так и от давления.

В предыдущем разделе было описано, каким образом можно моделировать многомерные течения с волнами детонации с учетом детальной кинетики химических реакций. В уравнениях закона сохранения массы для каждого из компонентов смеси имеется источниковый член  $\dot{\omega}_k$ ,  $k = 1, \dots, N$ , а в выражении для удельной энтальпии компонента – энтальпия образования  $h_{0,k}$ , что позволяет определять состав смеси и его температуру в процессе реакций.

Несмотря на то что химическое превращение веществ при горении и детонации почти всегда представляет собой сложную реакцию, состоящую из значительного числа звеньев, достаточно часто процесс можно определить какой-либо одной реакцией или небольшим количеством реакций. Подобный упрощенный механизм описания химических превращений посредством одной определяющей реакции принято называть *глобальной* или *одностадийной кинетикой*. Скорость суммарной сложной реакции определяют как скорость производства конечного продукта или скорость расходования основного вещества.

Использование глобальной кинетики позволяет упростить описание стадии энерговыделения. Вместо использования энтальпий образования в правую часть уравнения энергии добавляется источниковый член, отвечающий за тепловой эффект реакции. Этот член имеет вид:

$$q^* = -Q\dot{\omega}_{\text{осн.вещ.}},$$

где  $Q$  – теплота сгорания основного вещества, а  $\dot{\omega}_{\text{осн.вещ.}}$  – скорость изменения его плотности. Стехиометрический коэффициент основного вещества в уравнении (3.22) обычно выбирают равным 1.

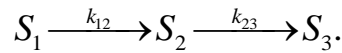
Таким образом, системы (3.19) и (3.20) при использовании глобальной кинетики можно переписать в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_1}{\partial \xi_1} + \frac{\partial \mathbf{f}_2}{\partial \xi_2} &= \mathbf{f}_3 + \mathbf{S}, \\ \mathbf{q} &= r^{\nu-1} \left[ \rho_1 \quad \dots \quad \rho_N \quad \rho U_{\xi_1} \quad \rho U_{\xi_2} \quad \rho E \right]^T, \\ \mathbf{f}_1 &= r^{\nu-1} \left[ \rho_1 U_{\xi_1} \quad \dots \quad \rho_N U_{\xi_1} \quad \rho U_{\xi_1}^2 + p \quad \rho U_{\xi_1} U_{\xi_2} \quad (\rho E + p) U_{\xi_1} \right]^T, \\ \mathbf{f}_2 &= r^{\nu-1} \left[ \rho_1 U_{\xi_2} \quad \dots \quad \rho_N U_{\xi_2} \quad \rho U_{\xi_1} U_{\xi_2} \quad \rho U_{\xi_2}^2 + p \quad (\rho E + p) U_{\xi_2} \right]^T, \\ \mathbf{f}_3 &= \left[ 0 \quad \dots \quad 0 \quad (\nu-1)p \quad 0 \quad 0 \right]^T, \\ \mathbf{S} &= r^{\nu-1} \left[ \dot{\omega}_1 \quad \dots \quad \dot{\omega}_N \quad 0 \quad 0 \quad q^* \right]^T, \\ E &= \frac{1}{2} (U_{\xi_1}^2 + U_{\xi_2}^2) + \sum_{k=1}^N w_k e_k, \quad q^* = -Q\dot{\omega}_{\text{осн.вещ.}}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Стоит отметить, что подобный подход в настоящее время приобретает все большую популярность среди исследователей, поскольку позволяет значительно сократить объем вычислений при решении уравнений химической кинетики, и в то же время получать те же характеристики смеси (задержки воспламенения, размеры детонационных ячеек, скорость ДВ и др.), что и при использовании детальной кинетики, за счет подбора констант.

### 3.2. Анализ систем реакций на собственные значения

Рассмотрим в качестве примера простейшую последовательность химических реакций, состоящую из двух элементарных стадий [13]:



Кинетические уравнения, описывающие скорость изменения во времени массовые доли компонентов  $S_1$ ,  $S_2$  и  $S_3$ , в этом случае примут следующий вид (для упрощения качественного анализа исключим из рассмотрения зависимость скоростей химических реакций от температуры):

$$\begin{cases} \frac{dw_1}{dt} = -k_{12}w_1, \\ \frac{dw_2}{dt} = k_{12}w_1 - k_{23}w_2, \\ \frac{dw_3}{dt} = k_{23}w_2. \end{cases} \quad (3.24)$$

Перепишем линейную систему обыкновенных дифференциальных уравнений (3.24) в векторном виде:

$$\frac{d\mathbf{Y}}{dt} = \mathbf{J}\mathbf{Y}, \quad (3.25)$$

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J} = \begin{pmatrix} -k_{12} & 0 & 0 \\ k_{12} & -k_{23} & 0 \\ 0 & k_{23} & 0 \end{pmatrix}.$$

Вычисление собственных значений  $\lambda_i$  и собственных векторов  $\mathbf{v}_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ , матрицы  $\mathbf{J}$  дает следующий результат:

$$\lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = -k_{23}, \quad \lambda_3 = -k_{12},$$

$$\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \mathbf{v}_3 = \begin{pmatrix} k_{12} - k_{23} \\ -k_{12} \\ k_{23} \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

В базисе из собственных векторов матрица  $J$  имеет диагональный вид и может быть представлена в виде:

$$J = V\Lambda V^{-1}, \Lambda = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -k_{23} & 0 \\ 0 & 0 & -k_{12} \end{pmatrix}, V = \begin{pmatrix} 0 & 0 & k_{12} - k_{23} \\ 0 & 1 & -k_{12} \\ 1 & -1 & k_{23} \end{pmatrix}, V^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \frac{k_{12}}{k_{12} - k_{23}} & 1 & 0 \\ \frac{1}{k_{12} - k_{23}} & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

и (3.25) после умножения обеих частей слева на  $V^{-1}$  переписывается в виде:

$$V^{-1} \frac{d\mathbf{Y}}{dt} = \Lambda V^{-1} \mathbf{Y}$$

или в покомпонентной записи:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}(w_1 + w_2 + w_3) = 0, \\ \frac{d}{dt} \left( \frac{k_{12}}{k_{12} - k_{23}} w_1 + w_2 \right) = -k_{23} \left( \frac{k_{12}}{k_{12} - k_{23}} w_1 + w_2 \right), \\ \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{k_{12} - k_{23}} w_1 \right) = -k_{12} \left( \frac{1}{k_{12} - k_{23}} w_1 \right). \end{cases}$$

Полученные дифференциальные уравнения можно теперь проинтегрировать независимо друг от друга, в результате чего получим:

$$\begin{cases} w_1 + w_2 + w_3 = w_{1,0} + w_{2,0} + w_{3,0}, \\ \frac{k_{12}}{k_{12} - k_{23}} w_1 + w_2 = \left( \frac{k_{12}}{k_{12} - k_{23}} w_{1,0} + w_{2,0} \right) \exp(-k_{23}t), \\ w_1 = w_{1,0} \exp(-k_{12}t). \end{cases} \quad (3.27)$$

Здесь нижний индекс «0» относится к массовым долям в начальный момент времени. Если теперь предположить, что в начальный момент времени в сис-



теме присутствует только компонент  $S_1$  ( $w_{2,0} = w_{3,0} = 0$ ), то из (3.27) получаем следующее аналитическое решение:

$$\begin{aligned} w_1 &= w_{1,0} \exp(-k_{12}t), \\ w_2 &= w_{1,0} \frac{k_{12}}{k_{12} - k_{23}} \left\{ \exp(-k_{23}t) - \exp(-k_{12}t) \right\}, \\ w_3 &= w_{1,0} \left\{ 1 - \frac{k_{12}}{k_{12} - k_{23}} \exp(-k_{23}t) + \frac{k_{23}}{k_{12} - k_{23}} \exp(-k_{12}t) \right\}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

В соответствии с полученными результатами все кинетические процессы в системе можно разделить на три группы с тремя различными масштабами характерных времен.

Первая группа процессов, которые соответствуют собственному значению  $\lambda_1 = 0$ , имеет масштаб характерных времен, равный бесконечности, и, таким образом, описывает закон сохранения массы при химических превращениях.

Вторая группа процессов, соответствующая собственному значению  $\lambda_2 = -k_{23}$ , объединяет процессы с масштабом характерных времен  $\tau_{23} = 1/k_{23}$ . Они описывают изменение некоторой величины со временем. Можно видеть, что соответствующий собственный вектор  $\mathbf{v}_2$  (см. (3.26)) отражает стехиометрические коэффициенты реакции  $S_2 \rightarrow S_3$  ( $0 \cdot S_1 + 1 \cdot S_2 - 1 \cdot S_3 = 0$ ).

Третья группа процессов, соответствующая собственному значению  $\lambda_3 = -k_{12}$ , объединяет процессы с масштабом характерных времен  $\tau_{12} = 1/k_{12}$ .

Теперь рассмотрим случай, когда одна реакция гораздо быстрее, чем другие. Рассмотрим сначала случай  $k_{12} \gg k_{23}$ . В этом случае третий процесс гораздо быстрее, чем второй. В течение весьма непродолжительного времени (экспоненциальный распад согласно последнему соотношению (3.27)) массовая доля  $w_1$  компонента  $S_1$  становится почти нулевой. Это значит, что частицы компонента  $S_1$  очень быстро реагируют с частицами компонента  $S_2$ , ко-

торый затем реагирует с частицами компонента  $S_3$  в относительно медленной последующей реакции.

Случай  $k_{23} \gg k_{12}$  соответствует тому, что компонент  $S_2$  – очень реакционноспособный и, таким образом, он имеет очень короткое время жизни. Решение (3.28) для случая  $k_{12}/k_{23} = 0.1$  иллюстрируется на Рис. 3.1. На этом рисунке  $\tau$  – характерное время жизни, за которое начальная массовая доля  $w_{1,0}$  уменьшается в  $e$  раз.

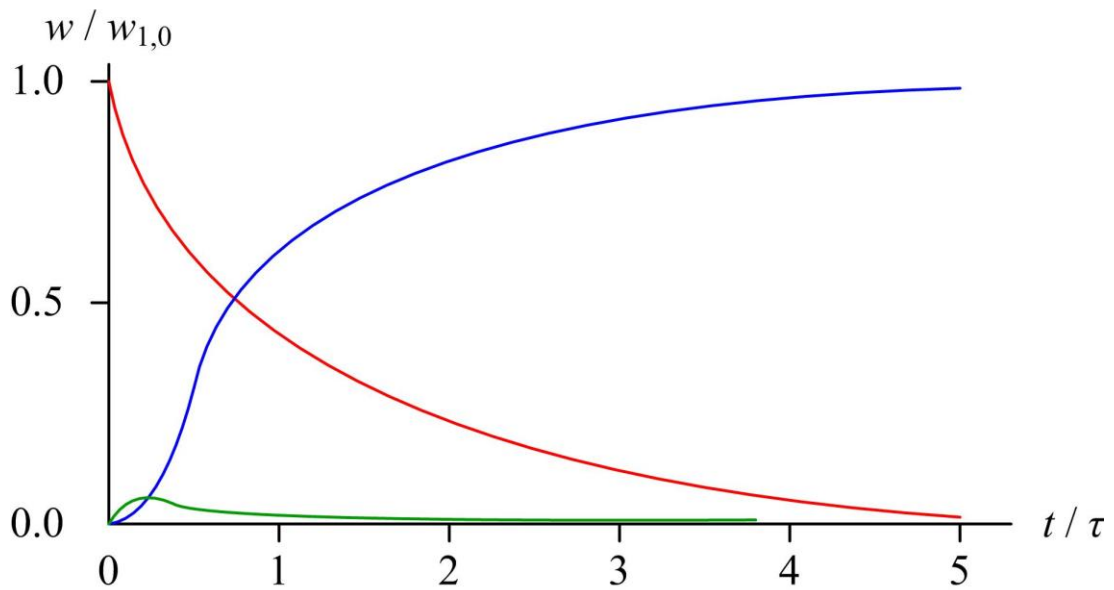


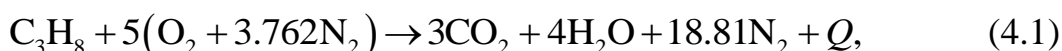
Рис. 3.1. Качественное поведение решения (3.28). Красная кривая соответствует компоненту  $S_1$ , зеленая –  $S_2$ , синяя –  $S_3$

## Глава 4. Одностадийная кинетическая модель воспламенения пропана

После качественного анализа, выполненного в предыдущем разделе, перейдем к исследованию одностадийной кинетической модели воспламенения пропана, которая может использоваться для многомерного численного исследования течений с волнами детонации.

Пропан считается одним из простейших углеводородов, который по своим характеристикам близок к более высоким углеводородам, используемым в приложениях. Детонационные свойства пропана близки к таким топливам, как JP-10 и керосин. По этой причине пропан часто используется в качестве модельного топлива для многих численных и натурных исследований детонации [14].

Будем считать, что химические реакции моделируются одностадийной кинетикой горения стехиометрической пропано-воздушной смеси [15]:



где  $Q$  – тепловой эффект реакции. Скорость изменения плотности пропана определяется как:

$$\dot{\omega}_1 = \mu_1 \dot{\omega}_1^{\text{мол}} = \mu_1 \left( k \frac{\rho_1}{\mu_1} \cdot \frac{\rho_2}{\mu_2} \right), \quad (4.2)$$

$$k = -7 \cdot 10^{14} p^{-0.2264} \exp(-E^*/RT) \text{ см}^3/(\text{моль} \cdot \text{с}), \quad E^* = 190,3 \text{ КДж/моль},$$

где  $\dot{\omega}_1^{\text{мол}}$  обозначает скорость изменения молярной концентрации пропана,  $p$  – давление в атмосферах,  $T$  – температура в градусах Кельвина. Скорости изменения плотностей остальных компонентов смеси вычисляются через  $\dot{\omega}_1^{\text{мол}}$  и стехиометрические коэффициенты в реакции (4.1):

$$\dot{\omega}_2 = 5\mu_2 \dot{\omega}_1^{\text{мол}}, \quad \dot{\omega}_3 = 0, \quad \dot{\omega}_4 = -3\mu_4 \dot{\omega}_1^{\text{мол}}, \quad \dot{\omega}_5 = -4\mu_5 \dot{\omega}_1^{\text{мол}}, \quad (4.3)$$

где индексы 2, 3, 4, 5 относятся соответственно к кислороду, азоту, углекислому газу и воде.

Тепловой эффект реакции на один моль реагента определяется по молярным энтальпиям образования компонентов реакции с учетом их стехиометрических коэффициентов следующим образом:

$$Q^{мол} = h_{0,1}^{мол} + 5h_{0,2}^{мол} - 3h_{0,4}^{мол} - 4h_{0,5}^{мол} = 2043154.0 \text{ Дж/моль}, \quad (4.4)$$

а на единицу массы реагента:

$$Q = Q^{мол} / \mu_1 = 46.4 \text{ МДж/кг}. \quad (4.5)$$

Для определения молярных энтальпий образования компонентов, участвующих в реакции (4.1), можно воспользоваться базой данных [11] (см. Таб. 4.1). Из этого же источника можно взять данные для определения удельных теплоемкостей при постоянном объеме компонентов. В Таб. 4.1 приведены значения теплоемкостей, которые определялись путем усреднения по двум температурным диапазонам.

	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	O <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O
Стандартная молярная энтальпия образования $h_{0,k}^{мол}$ , Дж/моль	-104680.0	0.0	0.0	-393510.0	-241826.0
Удельная теплоемкость при постоянном объеме $c_{V,k}$ , $10^7 \text{ см}^2/(\text{с}^2 \cdot \text{К})$	3.33	0.66	0.74	1.05	2.58

Таб. 4.1. Физико-химические характеристики компонентов реакции (4.1)

Скорость изменения энергии смеси в результате реакций равна:

$$q^* = -Q\dot{\omega}_1. \quad (4.6)$$

#### 4.1. Параметры за стационарной детонационной волной

Согласно гидродинамической теории (см. Глава 2), явление детонации обусловлено распространением по взрывчатой смеси УВ. Если амплитуда во фронте этой волны больше некоторой величины, то волна при своем распространении способна возбуждать за своим фронтом интенсивную химическую реакцию, за счет энергии которой поддерживается постоянство параметров волны и стационарный характер детонационного процесса в целом. Поверхность, разделяющая зону химической реакции и продуктов детонации при

стационарной детонации, называется *поверхностью ЧЖ*. Параметры продуктов детонации на этой поверхности соответствуют параметрам ЧЖ. Исходная реагирующая смесь отделяется от зоны химической реакции фронтом УВ. Все параметры ЧЖ будем отмечать нижним индексом «Н». Для описания стационарного процесса детонации достаточно сопоставить состояние исходного вещества и конечных продуктов реакции. Сама зона реакции может не рассматриваться, а ее толщину можно принять равной нулю.

В данном разделе будут получены *параметры стационарной ДВ* в общем случае ненулевого давления на фоне и различных показателей адиабаты для свежей смеси и продуктов детонации.

Обозначим через  $D$  – скорость ДВ,  $u_H$  – скорость продуктов детонации за фронтом волны,  $p_H$ ,  $\rho_H$  и  $T_H$  – параметры состояния за фронтом,  $p_0$ ,  $\rho_0$  и  $T_0$  – параметры состояния перед фронтом,  $v_0 = 1/\rho_0$ ,  $v_H = 1/\rho_H$  – удельный объем исходной реагирующей смеси перед фронтом и продуктов [8]. Запишем соотношения Ренкина-Гюгонио на УВ с учетом выделения тепла [1]:

$$\begin{cases} \rho_0(D - u_0) = \rho_H(D - u_H), \\ p_0 + \rho_0(D - u_0)^2 = p_H + \rho_H(D - u_H)^2, \\ \varepsilon_0 + p_0/\rho_0 + (D - u_0)^2/2 + Q = \varepsilon_H + p_H/\rho_H + (D - u_H)^2/2, \end{cases} \quad (4.7)$$

где  $\varepsilon(p, \rho)$  обозначает удельную внутреннюю энергию газа,  $Q$  – тепловыделение. Тепловыделение по суммарной массе реагентов вычисляется через тепловыделение по горючему как:

$$Q = Q_{гор} \cdot w_{гор},$$

где  $w_{гор}$  – массовая доля горючего в исходной реагирующей смеси.

Для количественной характеристики процессов детонации взрывчатых веществ необходимо знать следующие величины:  $p_H$ ,  $\rho_H$ ,  $T_H$ ,  $\varepsilon_H$ ,  $u_H$  и  $D$ , для определения которых имеются шесть основных уравнений, а именно, 3 закона сохранения (4.7), которые могут быть переписаны в виде:

$$\varepsilon_H - \varepsilon_0 = \frac{P_H + P_0}{2}(v_0 - v_H) + Q, \quad (4.8)$$

$$D = u_0 + v_0 \sqrt{\frac{P_H - P_0}{v_0 - v_H}}, \quad u_H = u_0 + (v_0 - v_H) \sqrt{\frac{P_H - P_0}{v_0 - v_H}},$$

термическое уравнение состояния, калорическое уравнение состояния, которые для идеального газа имеют вид:

$$p_H = \frac{\rho_H}{\mu_H} RT_H, \quad \varepsilon_H = \frac{P_H v_H}{\gamma_H - 1}, \quad (4.9)$$

где  $\mu_H$  – молярная масса продуктов детонации, а также правило отбора детонационной скорости ЧЖ (2.9), которое может быть представлено в виде:

$$\frac{P_H - P_0}{v_0 - v_H} = \frac{\gamma_H P_H}{v_H}. \quad (4.10)$$

В результате решения системы (4.8) – (4.10), которое может быть существенно облегчено, например, с помощью пакета символьных вычислений системы MATLAB 7.0, находится выражение для скорости детонации ЧЖ с учетом противодействия и различий в значениях показателя адиабаты на фоне и в продуктах детонации:

$$D = u_0 + \left\{ \frac{P_0}{\rho_0} \frac{\gamma_H^2 - \gamma_0}{\gamma_0 - 1} + Q(\gamma_H^2 - 1) + \frac{1}{\gamma_0 - 1} \left[ -\frac{P_0^2}{\rho_0^2} (\gamma_0^2 - \gamma_H^2)(\gamma_H^2 - 1) + \right. \right. \\ \left. \left. 2Q \frac{P_0}{\rho_0} (\gamma_0 - 1)(\gamma_H^2 - 1)(\gamma_H^2 - \gamma_0) + Q^2 (\gamma_0 - 1)^2 (\gamma_H^2 - 1)^2 \right]^{1/2} \right\}^{1/2}. \quad (4.11)$$

Нетрудно видеть, что при условии  $\gamma_H = \gamma_0 = \gamma$  и покоящейся смеси на фоне ( $u_0 = 0$ ) из (4.11) получается известное выражение для скорости детонации ЧЖ с учетом противодействия [8]:

$$D|_{\gamma_H=\gamma_0=\gamma, u_0=0} = \sqrt{\frac{\gamma^2 - 1}{2} Q + c_0^2} + \sqrt{\frac{\gamma^2 - 1}{2} Q}. \quad (4.12)$$

В свою очередь, из формулы для скорости детонации ЧЖ с учетом противодействия (4.12) несложно получить скорость сильной ДВ в предположении,

что фоновое давления пренебрежимо мало по сравнению с давлением за фронтом ДВ [16]:

$$D|_{\gamma_H=\gamma_0=\gamma, u_0=0, p_0=0} = \sqrt{2Q(\gamma^2 - 1)}.$$

Зная скорость ДВ, можно выразить и остальные параметры ЧЖ из соотношений (4.8) – (4.10):

$$p_H = \frac{p_0}{\gamma_H + 1} + \frac{\rho_0}{\gamma_H + 1} (D - u_0)^2, \quad \rho_H = \frac{\gamma_H + 1}{\gamma_H} \frac{\rho_0^2 (D - u_0)^2}{p_0 + \rho_0 (D - u_0)^2},$$

$$u_H = u_0 + \frac{\rho_0 (D - u_0)^2 - \gamma_H p_0}{(\gamma_H + 1) \rho_0 (D - u_0)}, \quad T_H = \frac{p_H}{R \sum_{\text{продукты}} \rho_{i,H} \mu_{i,H}}$$
(4.13)

где суммирование в знаменателе последнего выражения осуществляется по всем компонентам продуктов детонации.

В Таб. 4.2 приведены значения параметров ЧЖ, вычисленных по формулам (4.11), (4.13) с и без учета противодействия для значения параметра  $Q$ , полученного в по формулам (4.4) – (4.5) в соответствии с выбранной схемой химических реакций. Для сравнения использовались расчетно-экспериментальные данные [17].

Источник	$D$ , м/с	$p_H$ , атм	$u_H$ , м/с	$T_H$ , К	$\rho_H$ , кг/м <sup>3</sup>
Данные [17], $Q = 556$ кал/г	1799.9	18.24	1029	2821	–
Формулы (4.11), (4.13), $Q = 666$ кал/г, противодействие, $\gamma_0 = 1.32, \gamma_H = 1.31$	2050.2	22.08	864	3654	2.056
Формулы (4.11), (4.13), $Q = 666$ кал/г, без противодействия, $\gamma_0 = 1.32, \gamma_H = 1.31$	2000.0	20.60	866	3342	2.097

Таб. 4.2. Параметры ЧЖ для рассматриваемой модели для различных начальных данных

## 4.2. Структура стационарной детонационной волны

Для исследования свойств кинетической модели (4.1) – (4.6) была решена задача о структуре стационарной ДВ. Другими словами, ДВ исследовалась в рамках модели ЗНД.

Одномерная стационарная детонационная волна описывается системой (3.19) в предположении  $\partial(\cdot)/\partial t = 0$  и  $\partial(\cdot)/\partial y = 0$ :

$$\begin{cases} \frac{d}{dx}(\rho_i u) = \dot{\omega}_i, \quad i = 1, \dots, N, \\ \frac{d}{dx}(\rho u^2 + p) = 0, \\ \frac{d}{dx}([\rho E + p]u) = 0. \end{cases} \quad (4.14)$$

Здесь введено обозначение  $U_x = u$ .

Рассмотрим ДВ, распространяющуюся слева направо с постоянной скоростью  $D$  относительно покоящейся свежей смеси, параметрам которой далее будет приписан нижний индекс 0. Параметры за фронтом ДВ будем записывать без индексов. Перейдем в систему отсчета, связанную с ДВ, что приводит к рассмотрению неподвижной волны, на которую набегают поток газа со скоростью  $-D$ . Запишем теперь соотношения Ренкина-Гюгонио (4.7) связывающие параметры перед фронтом ДВ и за ним, причем в точке, где химические реакции еще не закончились, а не в плоскости ЧЖ, как раньше:

$$\begin{cases} -\rho_0 D = \rho u, \\ p_0 + \rho_0 D^2 = p + \rho u^2, \\ \varepsilon_0 + p_0/\rho_0 + D^2/2 + Q = \varepsilon + p/\rho + u^2/2 + QZ_1, \end{cases} \quad (4.15)$$

где  $Z_1$  – реакционная переменная, равная отношению текущей массовой доли реагента к его начальному значению, и поэтому изменяющаяся от 1 до 0 за фронтом ДВ. Выражая  $\rho$  и  $p$  из первых двух уравнений системы (4.15) и подставляя в третье, с учетом калорического уравнения состояния (4.9) получим квадратное уравнение относительно скорости газа  $u$  за фронтом ДВ:



$$\begin{cases} \rho = -\frac{\rho_0 D}{u}, \\ p = \rho_0 D u + p_0 + \rho_0 D^2, \\ \frac{u^2}{2} + \frac{\gamma}{\gamma+1} \left( D + \frac{p_0}{\rho_0 D} \right) u = -\frac{\gamma-1}{\gamma+1} \left[ Q(1-Z_1) + \frac{p_0 \gamma_0}{\rho_0 (\gamma_0 - 1)} + \frac{D^2}{2} \right], \end{cases} \quad (4.16)$$

решение которого дается выражениями:

$$\begin{cases} u_1 = -\frac{\gamma}{\gamma+1} \left( D + \frac{p_0}{\rho_0 D} \right) + \sqrt{\xi(Z_1)} = u_{CJ}^{omh} + \sqrt{\xi(Z_1)}, \\ u_2 = -\frac{\gamma}{\gamma+1} \left( D + \frac{p_0}{\rho_0 D} \right) - \sqrt{\xi(Z_1)} = u_{CJ}^{omh} - \sqrt{\xi(Z_1)}, \end{cases} \quad (4.17)$$

$$u_{CJ}^{omh} = -\frac{\gamma}{\gamma+1} \left( D + \frac{p_0}{\rho_0 D} \right),$$

$$\xi(Z) = \frac{\gamma^2}{(\gamma+1)^2} \left( D + \frac{p_0}{\rho_0 D} \right)^2 - 2 \frac{\gamma-1}{\gamma+1} \left[ Q(1-Z_1) + \frac{p_0 \gamma_0}{\rho_0 \gamma_0 - 1} + \frac{D^2}{2} \right]. \quad (4.18)$$

Нетрудно видеть, что

$$u_{CJ}^{omh} + D = -\frac{\gamma}{\gamma+1} \left( D + \frac{p_0}{\rho_0 D} \right) + D = \frac{D}{\gamma+1} - \frac{p_0 \gamma}{(\gamma+1) \rho_0 D},$$

и полученное выражение совпадает со скоростью продуктов детонации ЧЖ, полученное ранее (см. выражение для  $u_H$  (4.13) в случае покоящегося газа на фоне,  $u_0 = 0$ ). Таким образом,  $u_{CJ}^{omh}$  соответствует скорости продуктов детонации ЧЖ в системе координат, связанной с ДВ, а добавка  $\sqrt{\xi(Z_1)}$  определяет отклонение от этой величины в зоне протекания химических реакций. С такой интерпретацией становится понятным, что одно из решений (4.17), а именно  $u_2$ , является нефизичным, поскольку обеспечивает постепенный разгон продуктов детонации за фронтом ДВ по мере приближения к границе зоны химических реакций.

Перейдем теперь непосредственно к вычислению распределения основных величин за фронтом ДВ. В первом уравнении (4.14) для компонента, соответствующего пропану, с  $i = 1$  перейдем к реакционной переменной  $Z_1$ :

$$\frac{d}{dx}(\rho Z_1 w_1^0 u) = \dot{\omega}_1, \quad (4.19)$$

где  $w_1^0$  – начальная массовая доля пропана в смеси за фронтом ДВ, а также просуммируем уравнения неразрывности в (4.14) для всех компонентов смеси:

$$\frac{d}{dx}(\rho u) = 0, \quad (4.20)$$

так как сумма источниковых членов в соответствии с (4.1), (4.3) равна 0. С учетом (4.20) уравнение (4.19) переписывается в виде:

$$\frac{dZ_1}{dx} = \frac{\dot{\omega}_1}{\rho u w_1^0} \triangleq \psi_1, \quad (4.21)$$

а в соответствии с (4.3) скорости изменения реакционных переменных других компонентов определяются как:

$$\frac{dZ_2}{dx} = 5 \frac{\mu_1}{\mu_2} \psi_1, \quad \frac{dZ_3}{dx} = 0, \quad \frac{dZ_4}{dx} = -3 \frac{\mu_1}{\mu_4} \psi_1, \quad \frac{dZ_5}{dx} = -4 \frac{\mu_1}{\mu_5} \psi_1. \quad (4.22)$$

Дифференциальное уравнение для изменения относительной скорости продуктов получается как:

$$du/dx = (du/dZ_1)(dZ_1/dx), \quad (4.23)$$

где  $dZ_1/dx$  определяется соотношением (4.21), а  $du/dZ_1$  вычисляется в результате дифференцирования  $u_1$  в (4.17) с учетом (4.18):

$$\frac{du}{dx} = \frac{1}{2\sqrt{\xi(Z_1)}} \left( 2Q \frac{\gamma-1}{\gamma+1} \right) \frac{dZ_1}{dx} = \frac{\gamma-1}{\gamma+1} \frac{1}{\sqrt{\xi(Z_1)}} \frac{dZ_1}{dx}. \quad (4.24)$$

Остается вывести уравнения, описывающие изменение суммарной плотности, давления и температуры смеси за фронтом ДВ. Из (4.20) с учетом первого соотношения (4.16) уравнение для плотности смеси:

$$d\rho/dx = (\rho_0 D/u^2) du/dx. \quad (4.25)$$

Дифференцирование в левой части второго уравнения (4.14) с учетом (4.20) и первого соотношения (4.16) позволяет получить уравнение для давления:

$$dp/dx = -d(\rho u^2)/dx = -(\rho u)du/dx = (\rho_0 D)du/dx. \quad (4.26)$$

Наконец, уравнение для температуры получается из уравнения состояния:

$$\frac{dT}{dx} = \left( \frac{dp}{dx} - \sum_{i=1}^N \frac{d\rho_i}{dx} \frac{R}{\mu_i} T \right) / \left( \sum_{i=1}^N \frac{\rho_i}{\mu_i} R \right), \quad (4.27)$$

$$\rho_i = Z_i \rho w_i^0, \quad d\rho_i/dx = (\rho w_i^0) dZ_i/dx + (Z_i w_i^0) d\rho/dx.$$

В качестве начальных условий для СОДУ (4.21), (4.22), (4.24) – (4.27) задаются параметры фон Неймана (далее с индексом  $vN$ ), которые соответствуют параметрам за УВ с числом Маха, соответствующим скорости детонации ЧЖ (точка В на Рис. 2.2). Эти параметры могут быть найдены в результате решения системы (4.7) при  $Q = 0$  (модель ЗНД предполагает, что сначала происходит мгновенное сжатие газа в ударной волне, а затем начинаются химические реакции) и заданной скорости ДВ и фоновых параметров:

$$p_0 = 1 \text{ атм}, \quad \rho_0 = 1.19 \cdot 10^{-3} \text{ г/см}^3, \quad u_0^{abc} = 0, \quad D = 2091 \text{ м/с}, \quad \gamma_0 = \gamma = 1.32,$$

$$p_{vN} = 44.7 \text{ атм}, \quad \rho_{vN} = 7.44 \cdot 10^{-3} \text{ г/см}^3, \quad u_{vN}^{abc} = 1756 \text{ м/с},$$

где индекс «*abc*» соответствует скоростям в лабораторной системе координат. Интегрирование проводится по  $x$ , уменьшающемуся от некоторой константы  $x_0$  до 0.

На Рис. 4.1 представлены распределения реакционной переменной пропана, температуры и давления газа за фронтом ДВ, который в результате преобразования координаты помещен в точку  $x = 0$ .

Традиционно мерой толщины зоны химических реакций является размер области полупревращения, в которой реакционная переменная изменится с 1 до 0.5. В рассматриваемой задаче этот размер составляет около 0.2 мм. По мере продвижения за фронт ДВ параметры выходят на значения, близкие к значениям ЧЖ, представленным во второй строке Таб. 4.2:

$$T \approx 3770 \text{ К}, \quad p \approx 22.9 \text{ атм}, \quad u \approx 880 \text{ м/с}.$$

Анализ, проведенный выше в данной разделе, является, вообще говоря, одним из первых стандартных шагов при тестировании новой модели кинетики химических реакций при внедрении ее в программный комплекс.

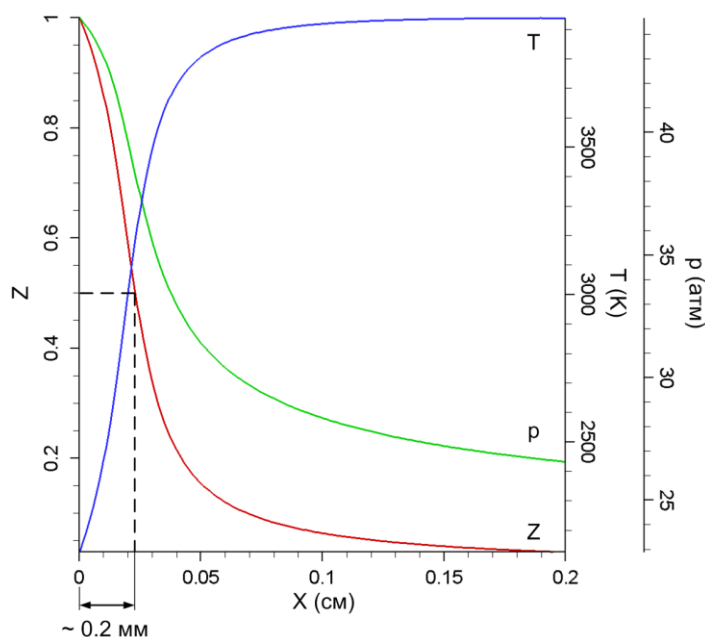


Рис. 4.1. Распределения реакционной переменной, температуры и давления за фронтом стационарной ДВ в модели ЗНД

### 4.3. Сравнение рассчитанных и экспериментальных задержек самовоспламенения

Для количественной верификации модели кинетики химических реакций в данном разделе приводятся результаты сравнения рассчитанных и экспериментальных задержек самовоспламенения в стехиометрической пропано-воздушной смеси.

Традиционно эксперименты по исследованию особенностей самовоспламенения смесей углеводородных топлив с окислителем проводятся в ударной трубе, в которой при отражении волны воспроизводятся условия, близкие к тем, которые имеют место при детонационных процессах (см. литературу в [14]). Для сравнения были выбраны относительно подробные экспериментальные исследования [14].

Не вдаваясь в детали организации натуральных опытов, хотя обращают на себя внимание различные подходы к определению задержки самовоспламе-

нения, приведем постановку вычислительных экспериментов. В одномерном приближении рассматривается ударная труба, на правом конце которой задаются граничное условие «стенка», а на левом – граничное условие втекания газа с параметрами  $\rho_1, T_1, p_1, u_1$ , обеспечивающими требуемые параметры за отраженной волной  $\rho_2, T_2, p_2$  (см. Рис. 4.2). В качестве начальных условий в расчетной области используются те же параметры, с которыми втекает газ на левой границе. Таким образом, начальный момент времени в расчете соответствует моменту отражения УВ от закрытого торца в опытах.

В опытах [14] контролировались плотность и температура газа за отраженной УВ, а также ее скорость для классификации наблюдаемых режимов горения. Параметры за падающей волной восстанавливались в результате решения системы Ренкина-Гюгонио, связывающей условия за падающей и отраженной волнами [18]:

$$\begin{cases} \rho_1(D - u_1) = \rho_2 D, \\ p_2 - p_1 = -\rho_2 u_1 D, \\ \gamma p_1 / \rho_1 (\gamma - 1) + (D - u_1)^2 / 2 = \gamma p_2 / \rho_2 (\gamma - 1) + D^2 / 2, \\ u_1 - D = C, \end{cases}$$

где  $D$  – скорость отраженной УВ, а  $C$  – известное из опыта значение. Параметры рассматриваемых опытов представлены в Таб. 4.3.

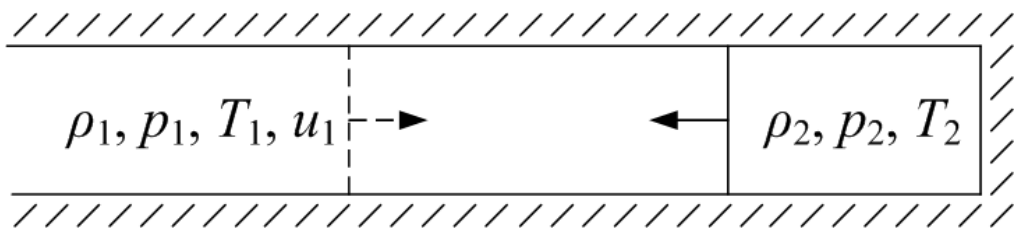


Рис. 4.2. Схема проведения вычислительных экспериментов

$T_2, \text{ К}$	1617	1516	1429	1350	1278
$u_1 - D, \text{ м/с}$	1532	1436	1370	1311	1256

Таб. 4.3. Параметры рассматриваемых опытов ( $\rho_2 = 4.42 \text{ кг/м}^3$ )

На Рис. 4.3 представлено сравнение экспериментальных и рассчитанных задержек самовоспламенения в стехиометрической пропано-воздушной

смеси, демонстрирующее хорошее соответствие. Задержка самовоспламенения  $\tau$  определялась по записи кривой давления на закрытом конце трубы (см. Рис. 4.4а). Типичная динамика процесса представлена на Рис. 4.4б.

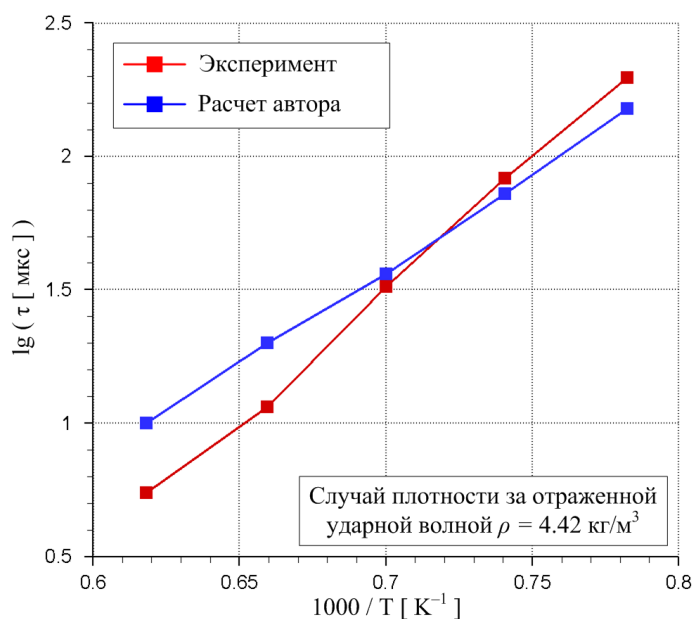


Рис. 4.3. Сравнение экспериментальных [14] и рассчитанных задержек самовоспламенения в стехиометрической пропано-воздушной смеси

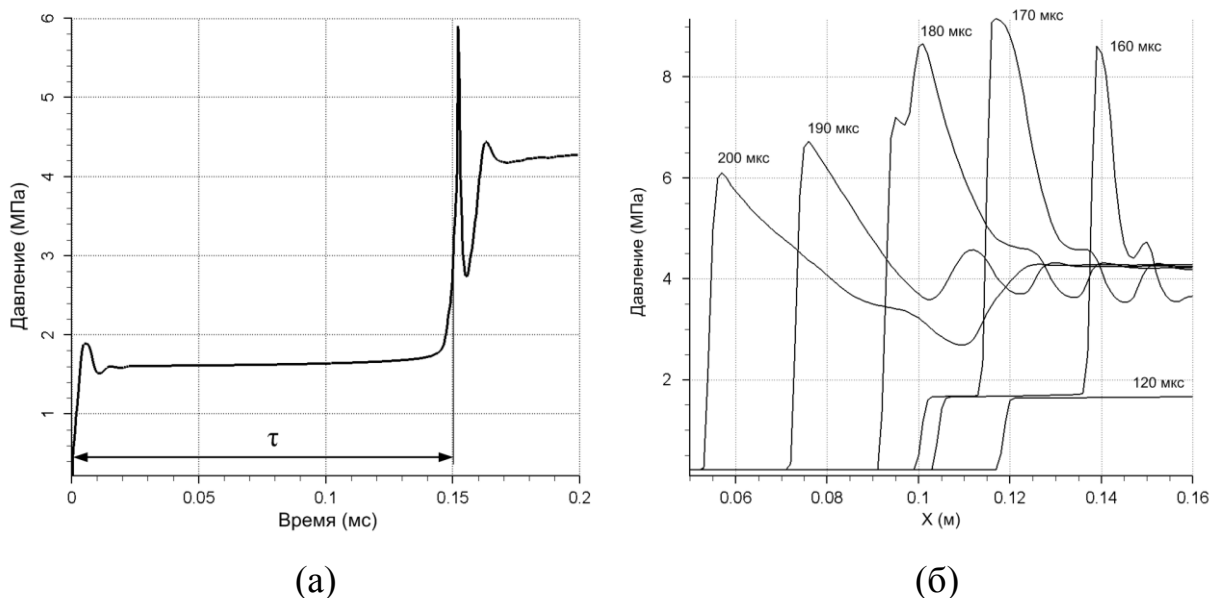


Рис. 4.4. (а) История изменения давления на закрытом конце трубы ( $T_1 = 649$  К,  $p_1 = 2.2$  атм,  $T_2 = 1278$  К,  $p_2 = 16$  атм,  $\tau \sim 150$  мкс); (б) динамика процесса самовоспламенения при отражении УВ от плоского торца трубы ( $X = 0.16$ ) при аналогичных условиях

## Глава 5. Численный метод расчета течений с волнами детонации

### 5.1. Метод расщепления по физическим процессам

Для решения системы уравнений (3.23) в плоском или осесимметричном случае часто используется *метод расщепления по физическим процессам*. Сначала решается система уравнений газовой динамики без учета члена  $S$  в правой части. Затем полученное решение корректируется с учетом источниковых членов, связанных с протекающими химическими реакциями. Без такого подхода при совместном решении системы потребовалось бы сильно снижать шаг расчета по времени, так как используется явная схема интегрирования по времени (см. раздел 5.2), а система уравнений химической кинетики является жесткой (см. раздел 5.6). Метод расщепления по физическим процессам восходит к методу дробных шагов Н.Н. Яненко [19], и преимущество этого подхода состоит в том, что для расчета различных членов в уравнениях допускается использование наиболее подходящих методов. Качественный критерий справедливости метода расщепления заключается в том, что величины физических переменных для любого отдельного процесса не должны изменяться слишком сильно за шаг по времени [20].

В данной главе, таким образом, сначала будет описан подход, который демонстрирует высокую работоспособность для численного интегрирования системы уравнений газовой динамики, а затем – метод численного решения СОДУ химической кинетики.

### 5.2. Метод конечных объемов

Метод конечных объемов (МКО) представляет собой класс разностных схем, служащих для аппроксимации линейных и нелинейных уравнений законов сохранения. Основными преимуществами этого класса схем являются: (1) *вычислительная робастность*, (2) *применимость для неструктурированных сеток*, (3) *локальная консервативность* [21, 22]. Эти схемы широко ис-

пользуются в настоящее время в задачах механики жидкости и газа, метеорологии, электромагнетизма, моделирования биологических процессов и пр.

В качестве примера, иллюстрирующего основные принципы построения дискретной модели с помощью МКО, а также свойств полученной модели, рассмотрим следующую задачу Коши для нелинейного уравнения закона сохранения, записанного в дивергентной форме, в качестве простейшего аналога решаемых в действительности систем (3.21):

$$\partial_t u + \nabla \cdot f(u) = 0, \quad (5.1)$$

$$u(x, 0) = u_0(x). \quad (5.2)$$

Здесь  $u(x, t): \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  обозначает искомую функцию,  $f(u) \in C^1(\mathbb{R})$  обозначает функцию потока, и  $u_0(x): \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  – начальное условие.

Функция  $u$ , следуя [23], является *классическим решением* задачи (5.1) – (5.2), если  $u \in C^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R})$  и удовлетворяет (5.1) и (5.2) поточечно. Классическое решение иногда существует только в течение конечного промежутка времени даже для гладких начальных данных  $u_0(x)$ , что может быть продемонстрировано с помощью метода характеристик [23].

С помощью введения понятия слабого решения задачи (5.1) – (5.2), а также дополнительной процедуры отбора решений, становится возможным определить класс решений, для которых существование и единственность гарантированы на большем промежутке времени. Это именно те решения, которые находятся методом конечных объемов.

Для введения понятия слабого решения будем полагать сначала, что  $u \in C^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R})$ . Проинтегрируем уравнение (5.1) на произвольном пространственном и временном отрезках  $[x_1, x_2]$  и  $[t_1, t_2]$ :

$$\int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} (u_t + f(u)_x) dt dx = 0. \quad (5.3)$$

Интеграл в (5.3) может быть преобразован к следующему виду:



$$\int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (u_t + f(u)_x) \phi(x, t) dt dx, \quad (5.4)$$

где функция  $\phi(x, t)$  имеет следующий вид:

$$\phi(x, t) = \begin{cases} 1 & \text{при } (x, t) \in [x_1, x_2] \times [t_1, t_2], \\ 0 & \text{иначе.} \end{cases} \quad (5.5)$$

Интеграл (5.4) может быть обобщен на случай произвольной гладкой функции  $\phi(x, t)$  с компактным носителем, тогда после интегрирования по частям получим:

$$\int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (u\phi_t + f(u)\phi_x) dt dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} u(x, 0)\phi(x, 0) dx. \quad (5.6)$$

Полученное равенство привлекательно тем, что в нем отсутствуют производные от  $u(x, t)$  и  $f(u)$ , поэтому оно имеет смысл даже когда функция  $u(x, t)$  не является непрерывной.

Функция  $u(x, t)$  называется *слабым решением* задачи (5.1) – (5.2), если она удовлетворяет соотношению (5.6) для любой функции  $\phi(x, t) \in C^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R})$  с компактным носителем [22].

Отметим, что предположение о непрерывной дифференцируемости функции  $\phi(x, t)$  исключает возможность ее выбора в виде (5.5), что приводило к (5.4). Однако функцию  $\phi(x, t)$  в представлении (5.5) можно сколь угодно точно аппроксимировать непрерывно дифференцируемой функцией.

Можно показать, что всегда существует, по крайней мере, одно слабое решение задачи (5.1) – (5.2), если функция потока  $f$  хотя бы непрерывная по Липшицу. Тем не менее, класс слабых решений слишком широк, чтобы гарантировать единственность решения. Выбор единственного решения из класса слабых решений осуществляется с помощью «метода исчезающей вязкости».

Для того чтобы определить условие отбора единственного слабого решения, полезно продемонстрировать, что для любого классического решения

существует дополнительный класс законов сохранения [21]. Пусть  $u(x, t)$  – классическое решение, функция  $\eta: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  – произвольная гладкая выпуклая функция. Умножение (5.1) на  $\eta'(u)$  дает:

$$0 = \eta'(u) \partial_t u + \eta'(u) \nabla \cdot f(u) = \partial_t \eta(u) + \nabla \cdot F(u), \quad (5.7)$$

где  $F$  является первообразной функции  $\eta' f'$ . Таким образом, для любого классического решения  $u(x, t)$  сохраняется функция  $\eta(u)$ , которая называется энтропийной функцией.

Соотношение (5.7) в общем случае не справедливо для слабых решений. Тем не менее, концепция энтропийной функции помогает определить единственное физически обоснованное слабое решение. Пусть  $u_\varepsilon$  – гладкое решение следующего уравнения:

$$\partial_t u_\varepsilon + \nabla \cdot f(u_\varepsilon) = \varepsilon \Delta u_\varepsilon, \quad \varepsilon > 0. \quad (5.8)$$

За счет введения малого члена  $\varepsilon \Delta u_\varepsilon$ , соответствующего с физической точки зрения диссипации в системе, уравнение (5.8) является параболическим, а для параболического уравнения можно доказать существование единственного гладкого решения для любых начальных данных при  $t > 0$  [22]. Умножим (5.8) на  $\eta'$ :

$$\partial_t \eta(u_\varepsilon) + \nabla \cdot F(u_\varepsilon) = \varepsilon \Delta \eta(u_\varepsilon) - \varepsilon \eta''(u_\varepsilon) |\nabla u|^2.$$

В силу предположения о выпуклости функции  $\eta$  ( $\eta'' > 0$ ) справедливо следующее неравенство:

$$\partial_t \eta(u_\varepsilon) + \nabla \cdot F(u_\varepsilon) \leq \varepsilon \Delta \eta(u_\varepsilon).$$

Можно показать [21], что в пределе при  $\varepsilon \rightarrow 0$ , последовательность функций  $\{u_\varepsilon\}$  будет стремиться к некоторой функции  $u$ , которая будет являться слабым решением и удовлетворять энтропийному неравенству

$$\partial_t \eta(u) + \nabla \cdot F(u) \leq 0. \quad (5.9)$$

Таким образом, строится единственное слабое решение, которое в силу упомянутого выше замечания о диссипативном члене называется «решением при исчезающей вязкости».

Рассмотрим теперь, каким образом строится разностная схема с помощью описанной выше идеологии. Вся расчетная область  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  сначала разбивается на совокупность неперекрывающихся контрольных (или конечных) объемов, которые полностью покрывают область. Обозначим через  $\Phi$  разбиение области  $\Omega$  контрольными объемами  $T \in \Phi$  так, что  $\bigcup_{T \in \Phi} \bar{T} = \bar{\Omega}$ . Для двух различных контрольных объемов  $T_i$  и  $T_j$  из  $\Phi$ , их пересечение есть либо ребро ( $n = 2$ ), либо грань ( $n = 3$ )  $e_{ij}$  (в дальнейшем будем называть  $e_{ij}$  гранями), либо множество меры не большей, чем  $n - 2$ .

Для каждого контрольного объема  $T_m$  может быть выписан закон сохранения в интегральной форме:

$$\frac{d}{dt} \int_{T_m} u(x, t) dx + \int_{\partial T_m} f(u) dS = 0.$$

где  $\partial T_m$  – граница конечного объема  $T_m$ . Эта запись интегрального закона сохранения получена после интегрирования по пространственным переменным уравнения (5.1) в области  $T_m$ , подобно тому, как это делалось в процедуре определения слабого решения, и применения теоремы Остроградского-Гаусса. МКО допускает гибкость в покрытии области контрольными объемами. Например, на Рис. 5.1 показан фрагмент двумерной треугольной разностной сетки и два типичных замощения расчетной области контрольными объемами. В МКО с *центрированной схемой* (см. Рис. 5.1а) треугольники сами служат контрольными объемами, и искомые значения функции хранятся в центрах треугольников. В случае *узловой схемы* (см. Рис. 5.1б) контрольные объемы двойственны исходным треугольникам в геометрическом смысле, и решения хранятся в узлах.

Дискретная аппроксимация методом конечных объемов задачи (5.1) – (5.2) с явной схемой Эйлера интегрирования по времени первого порядка точности записывается в следующем виде для объема  $T_m$  :

$$\frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{\Delta t} |T_m| + \sum_{\forall e_{mk} \in T_m} f_{mk}(u_m^n, u_k^n) = 0, \quad \forall T_m \in \Phi, \quad (5.10)$$

где суммирование ведется по всем граням  $e_{mk}$  объема  $T_m$ , по которым он граничит с объемами  $T_k$ ;  $|T_m|$  обозначает меру рассматриваемого контрольного объема;  $n$  – временной индекс;  $\Delta t = (t^{n+1} - t^n)$  – шаг интегрирования по времени;  $f_{mk}(u_m^n, u_k^n)$  – дискретная функция потока через грань  $e_{mk}$ .

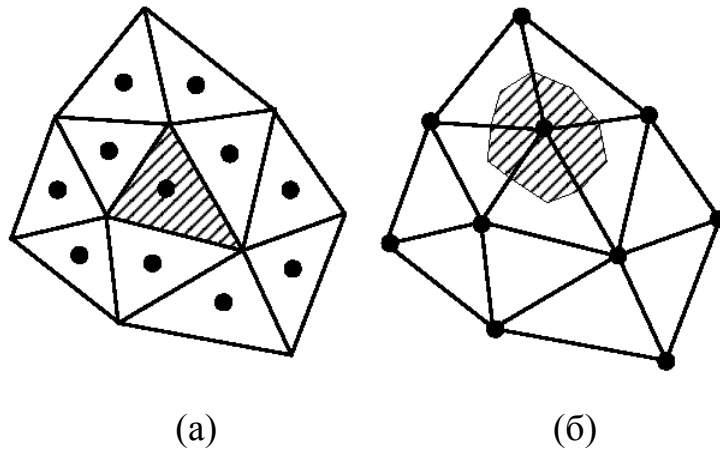


Рис. 5.1. Различные контрольные объемы в МКО: а) центрированная схема и б) узловая схема. Точками показаны узлы сетки, заштрихованные области – контрольные объемы [21]

Важный результат по сходимости построенной таким образом консервативной схемы дает *теорема Лакса-Вендроффа* (1960 г.) [21]:

Пусть  $\{u_k\}_{k \in \mathbb{N}}$  – последовательность дискретных решений, полученных с помощью МКО в одномерном случае для задачи (5.1) – (5.2). Предположим, что последовательность  $\{u_k\}_{k \in \mathbb{N}}$  почти всюду сходится к некоторой функции  $u$ . Тогда  $u$  является единственным слабым решением задачи, подчиняющимся энтропийному условию (5.9).

Отметим, что само по себе уравнение (5.1) не содержит членов, обеспечивающих диссипацию. Вообще говоря, при расчете с помощью МКО на заданной расчетной сетке требуется каким-то образом отбирать физически обоснованное решение, которое удовлетворяет энтропийному условию (5.9). Одним из способов преодоления указанной трудности является введение «искусственной» вязкости в схему для выполнения условия (5.9). Однако подобной процедуры можно избежать, принимая во внимание, что в реальном расчете всегда присутствует «схемная» или «аппроксимационная» вязкость, обусловленная самой процедурой дискретизации дифференциальных уравнений в частных производных на сетках. Таким образом, в конкретном расчете реализуется то решение, которое определяется используемой расчетной сеткой.

### 5.3. Схема С.К. Годунова вычисления потоков

Свойства конкретной разностной схемы зависят от выбора функции потока  $f_{mk}(u_m^n, u_k^n)$  в (5.10). В основе построения разностных схем для решения гиперболической системы уравнений газодинамики лежит задача Римана о распаде произвольного разрыва [23]. В 1957 г. С.К. Годунов предложил численный метод решения уравнений газовой динамики, который, по сути, представляет собой конечно-объемную схему типа (5.10), где для вычисления функции потока используется точное решение задачи Римана. Задача Римана является частным случаем задачи Коши для одномерной системы уравнений газовой динамики в консервативной форме со специальными начальными условиями:

$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0, \quad \mathbf{W} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho U \\ \rho E \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho U \\ \rho U^2 + p \\ (\rho E + p)U \end{bmatrix}, \quad \mathbf{W}(x, 0) = \begin{cases} \mathbf{W}_R & \text{при } x > 0, \\ \mathbf{W}_L & \text{при } x < 0. \end{cases} \quad (5.11)$$

Здесь  $\rho$ ,  $U$ ,  $E$  и  $p$  – плотность, скорость, полная удельная энергия и давления газа соответственно. Для простоты рассматривается однокомпонентный

газ. Наряду с вектором консервативных переменных  $\mathbf{W}$  введем в рассмотрение вектор неконсервативных переменных  $\mathbf{Q} = [\rho \ U \ E]^T$ .

Таким образом, в начальных данных имеется одна точка разрыва первого рода основных величин, которые по обе стороны от разрыва постоянны и не связаны априори никакими соотношениями. Сложное движение, возникающее из таких начальных данных, представляет собой комбинацию УВ, контактных разрывов (КР) и волн разрежения (ВР). В [24] приводится доказательство теоремы единственности для рассматриваемой задачи, которая утверждает, что задача о распаде произвольного разрыва имеет одно и только одно автомодельное решение. При анализе реализующихся решений используется метод  $p - V$  диаграмм [7].

Далее при выкладках в данном разделе будет рассматриваться только случай совершенного газа, хотя приведенные ниже результаты могут быть обобщены и на случай сред с более общим уравнением состояния [12, 25].

Схематически автомодельная картина возникающего течения на плоскости  $x - t$  изображается на одной из четырех возможных конфигураций, представленных на рисунке Рис. 5.2.

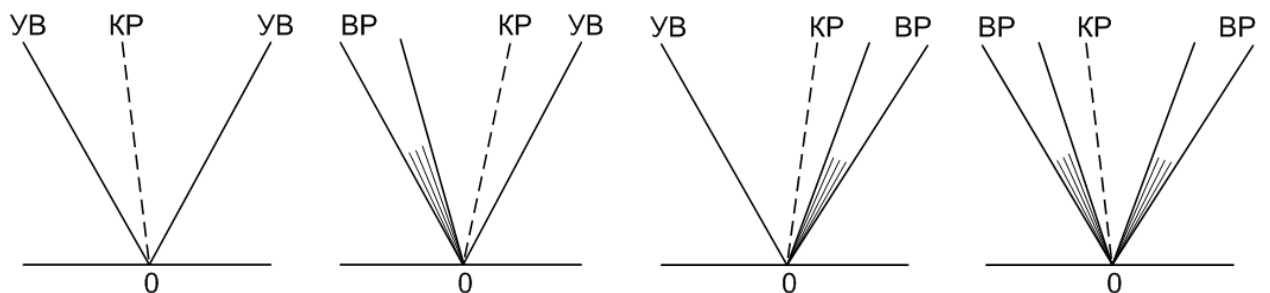


Рис. 5.2. Возможные конфигурации течения в задаче о распаде произвольного разрыва [25]

Они содержат КР, отмеченный штриховой линией, на котором испытывает скачок плотность, а давление и скорость непрерывны. Их одинаковые постоянные значения слева и справа от КР обозначим  $p_c$  и  $U_c$ , а различные значения плотности и, следовательно, внутренней энергии,  $\rho_L^*$ ,  $\varepsilon_L^*$  — для левой и

$\rho_R^*$ ,  $\varepsilon_R^*$  – для правой области. В свою очередь, эти области отделены от невозмущенных областей с параметрами  $(p_L, \rho_L, U_L)$  слева и  $(p_R, \rho_R, U_R)$  справа либо ударной волной, либо волной разрежения, которые условно называются «правой» и «левой» [25]. Остальные возможные с математической точки зрения конфигурации решения не являются физически обоснованными, в частности, они не удовлетворяют закону возрастания энтропии. С привлечением же этого закона удается доказать единственность решения задачи о распаде произвольного разрыва. Таким образом, возвращаясь к теме отбора единственного слабого решения, метод Годунова в силу своего построения сам по себе обеспечивает поиск единственного физически обоснованного слабого решения.

Система нелинейных уравнений для нахождения  $p_C$  и  $U_C$  включает в себя два соотношения, являющихся прямыми следствиями условий Ренкина-Гюгонио на левой и правой ударных волнах:

$$\begin{cases} U_C - U_L + \frac{p_C - p_L}{a_L} = 0, & a_L = \sqrt{\rho_L \left( \frac{\gamma_L + 1}{2} p_C + \frac{\gamma_L - 1}{2} p_L \right)}, \\ U_C - U_R - \frac{p_C - p_R}{a_R} = 0, & a_R = \sqrt{\rho_R \left( \frac{\gamma_R + 1}{2} p_C + \frac{\gamma_R - 1}{2} p_R \right)}, \end{cases} \quad (5.12)$$

где  $\gamma_L$  и  $\gamma_R$  – показатели адиабаты слева и справа от первоначального разрыва; а также два уравнения для левой и правой волн разрежения:

$$\begin{cases} U_C - U_L - \frac{2}{\gamma_L - 1} c_L \left[ 1 - \left( \frac{p_C}{p_L} \right)^{\frac{\gamma_L - 1}{2\gamma_L}} \right] = 0, \\ U_C - U_R + \frac{2}{\gamma_R - 1} c_R \left[ 1 - \left( \frac{p_C}{p_R} \right)^{\frac{\gamma_R - 1}{2\gamma_R}} \right] = 0, \end{cases} \quad (5.13)$$

где  $c_L$  и  $c_R$  – скорости звука слева и справа от начального разрыва соответственно:

$$c_L = \sqrt{\gamma_L \frac{p_L}{\rho_L}}, \quad c_R = \sqrt{\gamma_R \frac{p_R}{\rho_R}}.$$

Поскольку задача о распаде разрыва является массовым элементарным этапом при численном интегрировании нестационарных уравнений газовой динамики, существуют эффективные алгоритмы для ее решения. К числу таковых относится, например, итерационный процесс Ньютона-Рафсона, обеспечивающий квадратичную скорость сходимости при удачном выборе начального приближения [12, 25].

Исключив из соотношений (5.12) и (5.13) скорость КР  $U_C$ , получим следующее уравнение для давления  $p_C$ :

$$F(p_C) \equiv f_L(p_C) + f_R(p_C) = U_L - U_R, \quad (5.14)$$

где для  $k = L, R$

$$f_k(p_C) = \begin{cases} \frac{p_C - p_k}{\rho_k c_k \sqrt{\frac{\gamma_k + 1}{2\gamma_k} \frac{p_C}{p_k} + \frac{\gamma_k - 1}{2\gamma_k}}}, & \text{если } p_C \geq p_k, \\ \frac{2}{\gamma_k - 1} c_k \left( \left( \frac{p_C}{p_k} \right)^{\frac{\gamma_k - 1}{2\gamma_k}} - 1 \right), & \text{если } p_C < p_k. \end{cases} \quad (5.15)$$

Если  $p_C^{(i-1)}$  – полученное приближенное значение корня, то

$$p_C^{(i)} = p_C^{(i-1)} - \frac{f_L(p_C^{(i-1)}) + f_R(p_C^{(i-1)}) - (U_L - U_R)}{f_L'(p_C^{(i-1)}) + f_R'(p_C^{(i-1)})}. \quad (5.16)$$

В качестве одного из возможных алгоритмов расчета начального приближения  $p_C^{(0)}$  часто используется «звуковой распад разрыва»:

$$p_C^{(0)} = \frac{p_L \rho_R c_R + p_R \rho_L c_L + (U_L - U_R) \rho_R c_R \rho_L c_L}{\rho_R c_R + \rho_L c_L}.$$

Таким образом, с помощью приведенного итерационного процесса (5.14) – (5.16) вычисляются давление и скорость на контактной поверхности. В [25] приведены формулы для других величин – скоростей ударных волн и



крайних характеристик, ограничивающих ВР, а также плотностей слева и справа от КР –  $\rho_L^*$  и  $\rho_R^*$ , описывающих возможные конфигурации, изображенные на Рис. 5.2. Остается определить те значения газодинамических параметров  $U_\sigma$ ,  $p_\sigma$  и  $\rho_\sigma$ , которые будут использоваться для расчета функции потока. Для примера, рассмотрим случай, когда в результате распада направо будет распространяться УВ со скоростью  $D_R$ , а налево – ВР, ограниченная характеристиками  $D_L$  и  $D_L^*$  (см. Рис. 5.3,  $\xi = x/t$ ). Требуется определить, в какую из областей I, II, III, IV или V попадет луч  $\xi = 0$ , соответствующий оси времени. Нетрудно видеть, что при  $D_L \geq 0$  для вычисления потока через грань ячейки необходимо брать первоначальные значения слева от распада –  $U_\sigma = U_L$ ,  $p_\sigma = p_L$ ,  $\rho_\sigma = \rho_L$ ; при  $D_R \leq 0$  – первоначальные значения справа от распада –  $U_\sigma = U_R$ ,  $p_\sigma = p_R$ ,  $\rho_\sigma = \rho_R$ ; при  $D_L^* \leq 0$ ,  $U_C \geq 0$  – значения слева от КР –  $U_\sigma = U_C$ ,  $p_\sigma = p_C$ ,  $\rho_\sigma = \rho_L^*$ ; при  $U_C \leq 0$ ,  $D_R \geq 0$  – значения справа от КР –  $U_\sigma = U_C$ ,  $p_\sigma = p_C$ ,  $\rho_\sigma = \rho_R^*$ ; при  $D_L \leq 0$ ,  $D_L^* \geq 0$  – параметры внутри ВР, для которых в случае совершенного газа выписываются аналитические формулы [25].

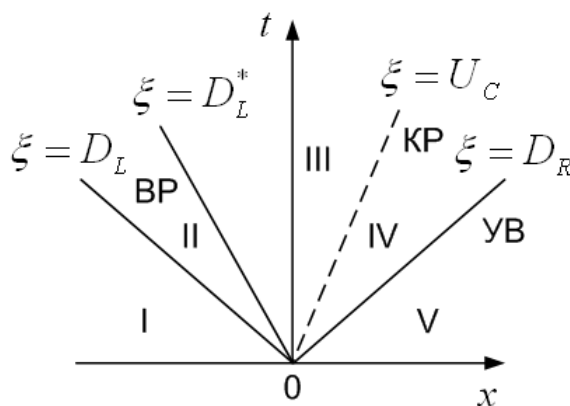


Рис. 5.3. Конфигурация одного из возможных решений задачи о распаде произвольного разрыва в плоскости  $x-t$

В [23] приведен обзор других способов вычисления потоков, основанных на приближенном решении задачи о распаде произвольного разрыва.

Особо стоит рассмотреть вопрос устойчивости описанной схемы. Ввиду того, что система газовой динамики является нелинейной, аналитические оценки устойчивости для нее получить сложно, если вообще возможно. Поэтому обычно рассматривают линеаризованную систему [25]. Условие на шаг интегрирования по времени для обеспечения устойчивости в одномерном случае на равномерной сетке с шагом  $\Delta x$  в текущей расчетной ячейке  $m$ , полученное методом спектрального анализа [23], имеет вид:

$$\Delta t_m^{n+1} = \frac{\Delta x}{\max\left(|U_m^{n+1} + c_m^{n+1}|, |U_m^{n+1} - c_m^{n+1}|\right)}, \quad (5.17)$$

где  $U_m^{n+1}$  и  $c_m^{n+1}$  – найденные на текущем шаге интегрирования по времени скорость газа и скорость звука в рассматриваемой ячейке. Новый шаг интегрирования по времени равен:

$$\Delta t^{n+1} = \text{CFL} \cdot \min_m \Delta t_m^{n+1}, \quad (5.18)$$

где CFL – число Куранта-Фридрихса-Леви – коэффициент «запаса», меньший единицы, который подбирается практически при расчетах для обеспечения устойчивости схемы в нелинейном процессе. Для численных исследований в рамках данной работы число CFL варьировалось в диапазоне от 0.3 до 0.1.

Классическая схема Годунова, описанная выше, обладает первым порядком точности по пространственным переменным и времени. К привлекательным с точки зрения вычислителя свойствам схемы Годунова относятся ее монотонность [25] и тот факт, что в силу процедуры построения, она автоматически удовлетворяет условию неубывания энтропии [21]. Стоит отметить также однородность и высокий внутренний параллелизм расчетного алгоритма, описанного в предыдущем разделе, что особенно актуально сегодня в связи с бурным развитием вычислительных мощностей. Перечисленные выше факторы определяют популярность метода Годунова среди людей, занимающихся проведением вычислительных экспериментов, в том числе, в области моделирования течений с волнами детонации. К недостаткам схемы

Годунова по сравнению со схемами, основанными на приближенном решении задачи Римана о распаде разрыва, можно отнести ее вычислительную трудоемкость, что зачастую определяет выбор в пользу приближенных методов.

#### 5.4. Кусочно-линейная реконструкция численного решения

Распространенным подходом для построения методов типа Годунова повышенного порядка точности по пространственным переменным является кусочно-полиномиальные восполнения функций с определенными ограничениями на величины коэффициентов соответствующих полиномов внутри дискретных ячеек [23]. Стоит отметить, что традиционно процедуру кусочно-линейного восполнения сеточных функций в расчетных ячейках, которое используется в работе, связывают с именами В.П. Колгана и Б. Ван Лира (Bram Van Leer).

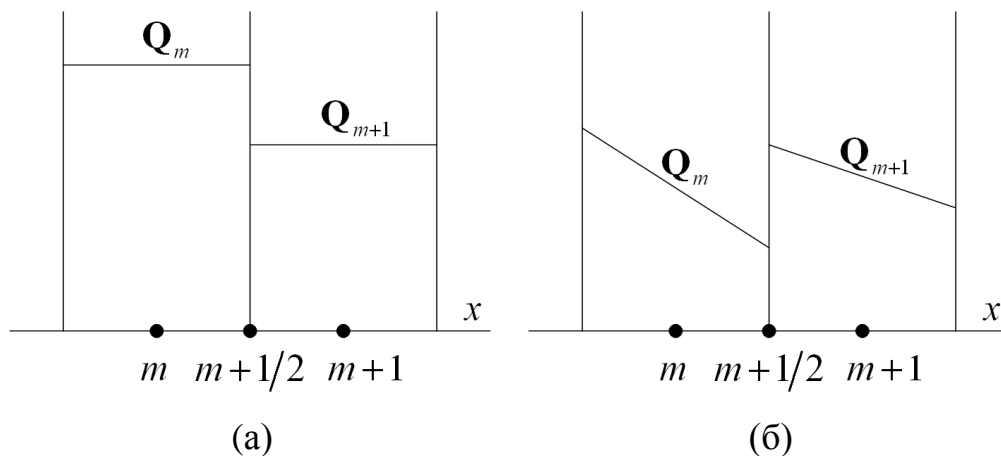


Рис. 5.4. Сеточная функция внутри расчетных ячеек: (а) кусочно-постоянная, (б) кусочно-линейная. Целые индексы соответствуют центрам ячеек, полуцелые – узлам сетки

Для простоты выкладок рассмотрим сначала одномерный случай. Выше при конструировании разностной схемы предполагалось, что все сеточные функции являются постоянными внутри каждой дискретной ячейки (см. Рис. 5.4а). Поэтому при расчете потока через грань  $m + 1/2$  полагалось:

$$Q_L = Q_m, \quad Q_R = Q_{m+1}.$$

Задача Римана для одномерной гиперболической системы уравнений в консервативной форме с начальными данными в виде кусочно-линейной функции (см. Рис. 5.4б) называется *обобщенной задачей Римана*. Стоит отметить, что обобщенная задача не имеет автомодельного решения [23]. Полное решение этой задачи методом асимптотического разложения найдено И.С. Меньшовым. Для конструирования схемы гудуновского типа повышенного порядка точности газодинамические параметры из центра расчетной ячейки можно экстраполировать на грань ячейки с учетом выбранного полиномиального распределения.

Обозначим через  $\alpha_m$  вектор производных неконсервативных величин в расчетной ячейке  $m$ . Для случая линейного распределения в качестве параметров слева и справа от разрыва используются величины:

$$\mathbf{Q}_L = \mathbf{Q}_m + \frac{1}{2} \Delta x \alpha_m, \quad \mathbf{Q}_R = \mathbf{Q}_{m+1} - \frac{1}{2} \Delta x \alpha_{m+1},$$

где  $\Delta x$  – шаг расчетной сетки. При этом, остается вопрос о расчете производных газодинамических параметров в ячейках, и, как показывает практика, неудачный выбор процедуры расчета производных может приводить к нефизичным осцилляциям решения и нарушению устойчивости. Следует подчеркнуть, что вычисленные производные должны удовлетворять естественному условию, чтобы численное решение, хотя бы локально по времени, имело свойства, аналогичные свойствам начальной сеточной функции  $\mathbf{Q}_m$ . Выполнение перечисленных условий достигается за счет использования тех или иных *ограничителей (limiters)* [23]. Одним из наиболее простых ограничителей является функция  $\text{minmod}$ . С помощью нее производная в одномерном случае определяется следующим образом:

$$\alpha_m = \text{minmod} \left( \frac{\mathbf{Q}_{m+1} - \mathbf{Q}_m}{\Delta x}, \frac{\mathbf{Q}_m - \mathbf{Q}_{m-1}}{\Delta x} \right), \quad \text{minmod}(a, b) = \frac{1}{2} (\text{sign}a + \text{sign}b) \min(|a|, |b|).$$

Функция  $\text{minmod}$  выбирает разностную производную с минимальным значением абсолютной величины при условии, что знаки обоих аргументов совпадают, и равна нулю в противоположном случае. В двумерном случае проце-

дура определения производных вектора неконсервативных переменных принципиально не отличается от описанной выше для одномерного случая.

## 5.5. Разностная схема для решения уравнений газовой динамики

В итоге, для рассматриваемой системы уравнений (3.19), соответствующей плоскому случаю, без правой части схема, построенная с помощью МКО, выглядит следующим образом:

$$\tilde{\mathbf{q}}_m^{n+1} = \mathbf{q}_m^n - \frac{\Delta t^n}{S_m} \sum_{\sigma=1}^K l_\sigma \mathbf{P}_\sigma.$$

Здесь пространственный индекс  $m$  пробегает все ячейки расчетной сетки;  $\mathbf{q}_m^n$  – консервативный вектор искоемых газодинамических величин на  $n$ -ом временном слое, отнесенный к центру ячейки  $m$ ;  $\tilde{\mathbf{q}}_m^{n+1}$  – вектор неизвестных на  $(n+1)$ -ом слое на газодинамическом этапе;  $S_m$  – площадь  $m$ -ой ячейки;  $K$  – количество ячеек, имеющих общую грань с  $m$ -ой ячейкой;  $l_\sigma$  – длина общей грани  $\sigma$ ;  $\mathbf{P}_\sigma$  – вектор потока через общую грань  $\sigma$ . Верхний индекс  $n$  в обозначении шага интегрирования по времени  $\Delta t^n$  необходим, поскольку шаг интегрирования динамически изменяется в процессе расчета для выполнения условия устойчивости, как было описано выше.

Опишем процедуру расчета потока  $\mathbf{P}_\sigma$ . В качестве примера рассмотрим грань  $\sigma$  между ячейками  $T_m$  и  $T_{m+1}$ , ориентированную внешней единичной нормалью  $\mathbf{n}_\sigma = (n_{\sigma,x}, n_{\sigma,y})$  и единичным касательным вектором  $\boldsymbol{\tau}_\sigma = (\tau_{\sigma,x}, \tau_{\sigma,y})$ . Сначала переменные (в неконсервативном представлении) экстраполируются из центра ячейки  $T_m$  на рассматриваемую грань  $\sigma$  в соответствии с процедурой кусочно-линейной реконструкции, описанной в предыдущем разделе. Обозначим получивший вектор консервативных перемен-

ных как  $\mathbf{q}_{m,\sigma}^n$ . Затем рассчитываются компоненты скорости газа в локальной системе координат  $(\mathbf{n}_\sigma, \boldsymbol{\tau}_\sigma)$ :

$$\begin{cases} U_m^n|_{\mathbf{n}_\sigma} = (U_x)_{m,\sigma}^n n_{\sigma,x} + (U_y)_{m,\sigma}^n n_{\sigma,y}, \\ U_m^n|_{\mathbf{n}_\tau} = (U_x)_{m,\sigma}^n \tau_{\sigma,x} + (U_y)_{m,\sigma}^n \tau_{\sigma,y}. \end{cases} \quad (5.19)$$

Аналогичная процедура проводится для соседней ячейки  $T_{m+1}$ , в результате чего находится вектор  $\mathbf{q}_{m+1,\sigma}^n$ , а также  $U_{m+1}^n|_{\mathbf{n}_\sigma}$  и  $U_{m+1}^n|_{\mathbf{n}_\tau}$ . Теперь можно воспользоваться процедурой расчета потоков методом Годунова, описанной в разделе 5.3. В постановке (5.11) направление  $x$  определяется направлением нормали  $\mathbf{n}_\sigma$ , а вектора  $\mathbf{W}_L$  и  $\mathbf{W}_R$  как

$$\mathbf{W}_L = \begin{bmatrix} \rho_{m,\sigma}^n \\ \rho_{m,\sigma}^n U_m^n|_{\mathbf{n}_\sigma} \\ (\rho E)_{m,\sigma}^n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{W}_R = \begin{bmatrix} \rho_{m+1,\sigma}^n \\ \rho_{m+1,\sigma}^n U_{m+1}^n|_{\mathbf{n}_\sigma} \\ (\rho E)_{m+1,\sigma}^n \end{bmatrix},$$

где под  $\rho$ , как и ранее, понимается суммарная плотность газовой смеси. Обозначим вектор неконсервативных переменных, являющийся решением задачи Римана о распаде произвольного разрыва, как  $\mathbf{Q}^* = [\rho^* \quad U^* \quad E^*]^T$ . По найденному  $\mathbf{Q}^*$  с учетом того, что тангенциальная компонента скорости  $U_m^n|_{\mathbf{n}_\tau}$  не изменилась, определяется одномерный вектор потока в направлении нормали  $\mathbf{n}_\sigma$ :

$$\mathbf{P}_{\mathbf{n}_\sigma} = \mathbf{f}_1(\mathbf{Q}^*) = \left[ \rho_1^* U^* \quad \dots \quad \rho_N^* U^* \quad \rho^* (U^*)^2 + p^* \quad \rho^* U^* U_m^n|_{\mathbf{n}_\tau} \quad (\rho^* E^* + p^*) U^* \right]^T.$$

Плотности отдельных компонентов смеси  $\rho_i^*$ ,  $i=1, \dots, N$  восстанавливаются через локальные значения массовых долей компонентов в ячейке. Наконец,  $(N+1)$ -ая и  $(N+2)$ -ая компоненты вектора  $\mathbf{P}_{\mathbf{n}_\sigma}$  преобразуются из локальной системы координат  $(\mathbf{n}_\sigma, \boldsymbol{\tau}_\sigma)$  в исходную, и искомый вектор  $\mathbf{P}_\sigma$  определяется как:

$$\mathbf{P}_\sigma = \left[ \rho_1^* U^* \quad \dots \quad \rho_N^* U^* \quad n_{\sigma,x} \mathbf{P}_{n_\sigma} (N+1) + \tau_{\sigma,x} \mathbf{P}_{n_\sigma} (N+2) \right. \\ \left. n_{\sigma,y} \mathbf{P}_{n_\sigma} (N+1) + \tau_{\sigma,y} \mathbf{P}_{n_\sigma} (N+2) \quad (\rho^* E^* + p^*) U^* \right]^T.$$

с учетом того, что  $n_{\sigma,x} = \tau_{\sigma,y}$ ,  $n_{\sigma,y} = -\tau_{\sigma,x}$ ,  $n_{\sigma,x}^2 + n_{\sigma,y}^2 = 1$ .

Для системы уравнений (3.20), соответствующей осесимметричному случаю, без источников членов, связанных с протеканием химических реакций, в правой части, схема, построенная с помощью МКО, имеет вид:

$$\tilde{\mathbf{q}}_m^{n+1} = \tilde{\mathbf{q}}_m^n - \Delta t^n \left( \frac{1}{S_m} \sum_{\sigma=1}^K l_\sigma \mathbf{P}_\sigma + \frac{(\mathbf{f}_1)_m}{r_m} + \frac{(\mathbf{f}_3)_m}{r_m} \right),$$

где  $(\mathbf{f}_1)_m/r_m$  и  $(\mathbf{f}_3)_m/r_m$  – источниковые члены, обусловленные осевой симметрией задачи, отнесенные к центру  $m$ -ой ячейки;  $r_m$  – расстояние от оси симметрии до центра  $m$ -ой ячейки. Поток  $\mathbf{P}_\sigma$  вычисляется аналогично тому, как описано выше для плоского случая.

## 5.6. Решение уравнений химической кинетики

На втором этапе решения системы (3.23) производится учет источниковых членов в правых частях уравнений, связанных с химическими реакциями:

$$\left. \frac{d\mathbf{q}_m^{xum}}{dt} \right|_{U_{\xi_1}=U_{\xi_2}=0} = \mathbf{S}, \quad t \in [t_n, t_n + \Delta t^n], \quad \mathbf{q}_m^{xum}(t_n) = \tilde{\mathbf{q}}_m^{n+1} \Big|_{U_{\xi_1}=U_{\xi_2}=0}. \quad (5.20)$$

Здесь  $t_n$  – текущее время. Отметим, что на данном этапе конвективные потоки считаются равными нулю ( $U_{\xi_1} = U_{\xi_2} = 0$ ). В качестве начального условия для СОДУ (5.20) берется решение, полученное на газодинамическом этапе. Построенное решение, взятое в момент времени  $t_n + \Delta t^n$ , и будет решением всей задачи за шаг по времени:

$$\mathbf{q}_m^{n+1} = \mathbf{q}_m^{xum}(t_n + \Delta t^n) \Big|_{\tilde{U}_{\xi_1}, \tilde{U}_{\xi_2}},$$

где  $\tilde{U}_{\xi_1}$  и  $\tilde{U}_{\xi_2}$  – компоненты вектора скорости газа, полученные на предыдущем газодинамическом этапе.

Перепишем систему (5.20), дополненную термическим уравнением состояния смеси, с учетом соотношений (4.2) – (4.6) в развернутом векторном виде, удобном для представления в дальнейшем численного метода решения, опуская для краткости нижние индексы  $m$  и верхние индексы «хим»:

$$\left\{ \begin{array}{l} d\mathbf{y}(t)/dt = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \\ \mathbf{y}(t) = [n_1 \quad n_2 \quad n_3 \quad n_4 \quad n_5 \quad T]^T, \\ \mathbf{f}(t, \mathbf{y}) = \left[ \begin{array}{cccccc} \dot{\omega}_1^{mol} & 5\dot{\omega}_1^{mol} & 0 & -3\dot{\omega}_1^{mol} & -4\dot{\omega}_1^{mol} & \frac{-\dot{\omega}_1^{mol} \mu_1 Q - \sum_{i=1}^N \dot{\omega}_i^{mol} \mu_i RT}{\sum_{i=1}^N \rho_i c_{V,i}} \end{array} \right], \\ \dot{\omega}_1^{mol} = -7 \cdot 10^{14} p^{-0.2264} n_1(t) n_2(t) \exp(-22900/T), \\ p = \sum_{i=1}^N n_i RT, \\ t \in [t_0, t_1], \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0, \end{array} \right. \quad (5.21)$$

где  $t_0 = t_n$ ,  $t_1 = t_n + \Delta t^n$ ,  $\Delta t^n$  – шаг в газодинамическом расчете. После определения концов отрезка интегрирования далее во избежание громоздкой системы двойных индексов в данном разделе под  $\{t_n\}$  будет пониматься сетка на отрезке  $[t_0, t_1]$  для интегрирования системы (5.21). Напомним, что через  $n = \rho/\mu$  обозначена молярная концентрация компонентов смеси. Система (5.21) представляет собой модель реактора постоянного объема, в роли которого в данном случае выступает рассматриваемая ячейка расчетной области.

Решение уравнений химической кинетики часто занимает большую часть времени процесса численного моделирования реагирующего течения. При моделировании пламени и детонации интегрирование уравнений химической кинетики может занимать на порядок величины больше времени, чем решение уравнений с членами, описывающими конвективный и диффузионный перенос. Время расчета определяется числом компонентов и числом реакций, протекающих между ними, и оно сильно зависит от конкретного вида выражений, определяющих скорости изменений плотностей компонентов смеси, в частности, возрастает, когда в них входят экспоненты или дробные



степени, что обычно имеет место в выражениях для констант скоростей химических реакций. СОДУ, которые используются при моделировании реагирующих потоков, как правило, являются жесткими [20].

Строгие с математической точки зрения определения жесткости СОДУ приведены в [26, 27]. Можно сказать, что СОДУ является жесткой, если ее матрица Якоби имеет хотя бы одно собственное значение, действительная часть которого отрицательная и ее модуль превосходит обратные характерные временные масштабы изменения решения [20]. В практических расчетах система оказывается жесткой, если размер шага, который следовало бы взять, основываясь на стоимости или времени счета, слишком велик для получения результата с требуемой точностью.

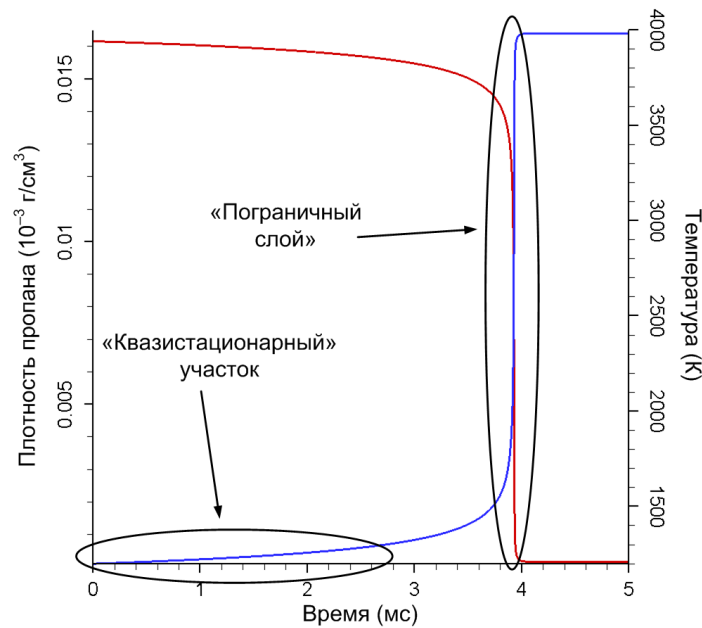


Рис. 5.5. Зависимость температуры (синяя кривая) и плотности пропана (красная кривая) от времени при самовоспламенении. Начальная температура 1200 К, начальное давление 1 атм

Жесткость системы (5.21) определяется, прежде всего, правой частью первого уравнения. Нетрудно видеть, что при малых температурах, не превышающих несколько сотен Кельвинов,  $\dot{\omega}_1^{mol} \approx 0$ , и получается, так называемый, «квазистационарный» участок решения [27]. В то же время при увели-

чении температуры до 1000 К и выше в правой части первого уравнения (5.21) появляется большая по модулю отрицательная величина, и возникает участок решения типа «пограничный слой». На Рис. 5.5 представлены типичные распределения концентрации пропана и температуры, которые получаются в результате решения системы (5.21).

В [20, 27] дается обзор употребительных методов для решения жестких СОДУ, в том числе химической кинетики. Стоит отметить, что хотя методы решения жестких СОДУ развиваются достаточно давно, эта работа продолжается и в настоящее время. В частности, за последние годы было разработано семейство одноитерационных методов Розенброка для решения СОДУ. Главной особенностью этого семейства методов является только одно вычисление и обращение матрицы Якоби на каждом шаге интегрирования, в то время как неявные методы Рунге-Кутты требуют многократного решения нелинейных систем алгебраических уравнений и, следовательно, множественного вычисления и обращения матриц Якоби.

Для решения СОДУ (5.21) в каждой ячейке расчетной области можно использовать семейство линейных многошаговых методов Гира или формул дифференцирования назад (ФДН), реализованных в солвере<sup>3</sup> DLSODE свободно распространяемого пакета программ ODEPACK, разработанного в Ливерморской национальной лаборатории США [20]:

$$\mathbf{y}_{n+k} = h_{n+k} \beta_k \mathbf{f}(t_{n+k}, \mathbf{y}_{n+k}) - \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j \mathbf{y}_{n+j}, \quad (5.22)$$

причем порядок метода равен числу шагов  $k$ . Для порядков от первого до шестого эти методы являются А- или  $A(\alpha)$ -устойчивыми, а методы с порядком аппроксимации семь и выше безусловно неустойчивы [27]. В Таб. 5.1 приведены величины коэффициентов в формулах (5.22).

---

<sup>3</sup> В настоящее время понятие «солвер» (от англ. solver – решающая программа) является общепринятым и широкоупотребительным в среде людей, занимающихся вычислениями, и означает совокупность методов и алгоритмов для решения определенной задачи, реализованных в виде программного кода.

$k$	$\beta_k$	$\alpha_j$						
1	1	-1	1					
2	2/3	1/3	-4/3	1				
3	6/11	-2/11	9/11	-18/11	1			
4	12/25	3/25	-16/25	36/25	-48/25	1		
5	60/137	-12/137	75/137	-200/137	300/137	-300/137	1	
6	600/147	10/147	-72/147	225/147	-400/147	450/147	-360/147	1

Таб. 5.1. Значения коэффициентов, используемых в ФДН [20]

На каждом шаге (5.22) представляет собой систему нелинейных алгебраических уравнений, которая решается модифицированным методом Ньютона:

$$\mathbf{y}_{n+k}^{(m+1)} = \mathbf{y}_{n+k}^{(m)} - \mathbf{F}(\mathbf{y}_{n+k}^{(m)}) \cdot \mathbf{P}^{-1}(\mathbf{y}_{n+k}^{(m)}), \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n+k}^{(m)}) = \mathbf{y}_{n+k}^{(m)} - h_{n+k} \beta_k \mathbf{f}(t_{n+k}, \mathbf{y}_{n+k}^{(m)}) + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j \mathbf{y}_{n+j}, \quad \mathbf{P}(\mathbf{y}_{n+k}^{(m)}) = \mathbf{I} - h_{n+k} \beta_k \mathbf{J},$$

где  $\mathbf{I}$  – единичная матрица, а  $\mathbf{J} = \partial \mathbf{f}(t_{n+k}, \mathbf{y}_{n+k}) / \partial \mathbf{y}$  – матрица Якоби или якобиан. Классический метод Ньютона требует вычисления значения якобиана на каждой итерации. В данном случае модифицированного метода Ньютона матрицы Якоби вычисляется только на нулевой итерации и только на шагах, где необходимо проводить его перевычисление, основываясь на таком критерии, как плохая сходимость. Отметим, что в солвере реализована периодическая смена шага интегрирования и порядка аппроксимации метода с целью минимизации вычислительных затрат при сохранении требуемой точности.

К недостаткам методов Гира, как и других многошаговых, является необходимость разгонного участка и трудность при автоматическом выборе шага [27]. В используемом солвере DLSODE эти проблемы решаются с помощью записи ФДН в, так называемом, представлении Нордсика.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. *Митрофанов В.В.* Детонация гомогенных и гетерогенных систем. – Новосибир.: Изд-во ИГиЛ СО РАН, 2003. – 200 С.
2. *Semenov I. et al.* Three-dimensional numerical simulation of shock and detonation waves propagation in tubes with curved walls // *Science and Technology of Energetic Materials*. – 2011. – Vol. 72, No. 4. – P. 116 – 122.
3. *Войцеховский Б.В. и др.* Структура фронта газовой детонации. – Новосибир.: Изд-во СО АН СССР, 1963. – 168 С.
4. *Марков В.В.* Численное моделирование образования многофронтной структуры детонационной волны // *ДАН*. – 1981. – Т. 258, № 2. – С. 314 – 17.
5. *Современные* проблемы исследования быстропротекающих процессов и явлений катастрофического характера / Под. ред. О.М. Белоцерковского и др. – М.: Наука, 2007. – 223 С.
6. *Lee J.H.S.* The Detonation Phenomenon. – Cambr. Univ. Pr., 2008. – 402 P.
7. *Самарский А.А., Попов Ю.П.* Разностные методы решения задач газовой динамики. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1992. – 424 С.
8. *Физика взрыва* / Под ред. Л.П. Орленко. – Изд. 3-е, испр. – В 2-ух т., Т. 1. – М.: Физматлит, 2004. – 832 С.
9. *Левин В.А., Коробейников В.П.* Сильный взрыв в горючей смеси газов // *Изв. АН СССР. Механ. жидк. и газа*. – 1969. – № 6. – С. 48 – 51.
10. *Шевелев Ю.Д.* Пространственные задачи вычислительной аэрогидродинамики. – М.: Наука, 1986. – 367 С.
11. *McBride B. et al.* Coefficients for Calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species // *NASA Report TM-4513*, October 1993.
12. *Toro E.F.* Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics. – Springer, 1999. – 2nd Edition. – 619 P.
13. *Варнатц Ю. и др.* Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ / Пер. с англ. Г.Л. Агафонова. Под ред. П.А. Власова. – М.: Физматлит, 2006. – 352 С.

14. *Penyazkov O.G. et al.* Autoignition of Propane-Air Mixtures Behind Reflected Shock Waves // Proc. Comb. Inst. – 2005. – V. 20. – P. 1941 – 1947.
15. *Frolov S.M. et al.* Detonation Propagation Through U-bends // Nonequil. Proc., V. 1: Comb. and Deton. / Eds. G. Roy et al. – 2005. – P. 348 – 364.
16. *Зельдович Я.Б., Компанеев А.С.* Теория детонации. – М.: Госуд. изд-во техн.-теор. литер., 1955. – 268 С.
17. *Васильев А.А.* Энергетические аспекты инициирования бытовых газов // ФГВ. – 2008. – Т. 45, № 1. – С. 96 – 101.
18. *Черный Г.Г.* Газовая динамика. – М.: Наука, 1988. – 424 С.
19. *Яненко Н.Н.* Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. – Новосибир.: Изд-во Наука, Сиб. отдел., 1967. – 197 С.
20. *Оран Э., Борис Дж.* Численное моделирование реагирующих потоков: Пер. с англ. – М.: Мир, 1990. – 660 С.
21. *Barth T., Ohlberger M.* Finite Volume Methods: Foundation and Analysis // Encyclopedia of Computational Mechanics. – 2004. – V. 1. – P. 439 – 470.
22. *Leveque R.J.* Finite-Volume Methods for Hyperbolic Problems. – Cambridge Texts in Applied Mathematics, 2002. – 558 P.
23. *Куликовский А.Г. и др.* Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. – М.: Физматлит, 2001. – 608 С.
24. *Овсянников Л.В.* Лекции по основам газовой динамики. – Москва – Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003. – 336 С.
25. *Годунов С.К. и др.* Численное решение многомерных задач газовой динамики. – М.: Гл. ред. физ.-мат. лит. изд-ва Наука, 1976. – 400 С.
26. *Холодов А.С. и др.* Разностные схемы для решения жестких обыкновенных дифференциальных уравнений в пространстве неопределенных коэффициентов: Мет. указ. к лаб. раб. кур. Нелин. выч. проц. – М.: МФТИ, 2001. – 49 С.
27. *Петров И.Б., Лобанов А.И.* Лекции по вычислительной математике: Учеб. пособ. – М.: Интер.-Унив. Инф. Техн.; Бином. Лаб. зн., 2006. – 523 С.