

НЕКОТОРЫЕ ЧИСЛЕННЫЕ АСПЕКТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ ДЕТОНАЦИОННЫХ ЯЧЕЕК

Дж.-Й. Чой¹, Ф. Ма², В. Янг²

¹Пусанский национальный университет, Пусан 609-735, Корея

²Пенсильванский государственный университет, Университетский парк, Пенсильвания 16802, США
vigor@psu.edu

Исследован ряд аспектов численного моделирования структуры детонационных ячеек. Рассмотрены различные режимы детонации: от слабой до сильнонеустойчивой. Используемый подход основан на рассмотрении двумерных уравнений динамики невязкой жидкости с одностадийной химической реакцией. Проведена серия расчетов, направленных на установление требований, выполнение которых позволяет добиться высокой точности численного моделирования структуры детонационных ячеек. Основное внимание уделено изучению динамики фронта ударной волны и эволюции ячеистых структур. Проведено систематическое исследование влияния предэкспоненциального множителя, шага сетки, временного шага, длины расчетной области и граничного условия на выходе на ячеистую структуру и размер ячеек. Определен требуемый шаг численной сетки, и проведено его сравнение с различными масштабами длины, связанными со структурой стационарной детонационной волны Зельдовича — Неймана — Дёринга. Впервые предложено общее правило для выбора разрешающей способности сетки: для корректного моделирования структуры детонационных ячеек необходимо, чтобы минимум 5 точек сетки приходилось на зону тепловыделения соответствующей стационарной детонационной волны Зельдовича — Неймана — Дёринга.

Ключевые слова: ударная волна, детонационные ячейки, численное моделирование.

ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известно, что волна газовой детонации обычно имеет ячеистую структуру, которая связана с тройной конфигурацией скачков уплотнения [1]. По мере распространения детонационной волны на стенках, покрытых тонким слоем сажи, или на покрытой копотью фольге остаются следы этой структуры — так называемые детонационные ячейки. В данной работе предпринята попытка установить требования к численным расчетам, которые обеспечивали бы точное предсказание ячеистой структуры двумерных детонационных волн в различных режимах устойчивости.

Численное моделирование структуры волны газовой детонации проводилось во многих работах [2–13]. В табл. 1 для каждой из этих работ приведены исходные реагенты, используемая кинетика химических реакций, расчетная область, разрешающая способность сетки, начальное возмущение и рассчитанный раз-

мер детонационной ячейки. В ранних работах использовались относительно простые подходы — в основном из-за ограниченных вычислительных ресурсов. В работе [2] при использовании одностадийной индукционной модели был продемонстрирован рост поперечных возмущений, возникающих в первоначально скошенной ударной волне. В работе [3] исследовалось поведение тройной конфигурации скачков уплотнения при детонации смеси H_2 — O_2 — Ar в узком канале. Обнаружено, что конечное число поперечных ударных волн нечувствительно к начальному количеству точечных источников тепла, введенных для возмущения детонационной волны Чепмена — Жуге. В работе [4] удалось оценить размер детонационной ячейки для смеси H_2 — O_2 — Ar путем последовательного изменения ширины канала. Пространственное разрешение в этих ранних работах составляло $40 \div 80$ точек сетки на размер ячейки.

Развитие вычислительной техники позволило использовать сетки намного меньшего шага и более полные механизмы химических реакций. В работе [5] на длину зоны полупревращения приходилось порядка 20 точек сетки. Применение такой сетки позволило разре-

Jeong-Yeol Choi¹, Fuhua Ma², Vigor Yang².

¹Pusan National University, Busan 609-735, Korea.

²The Pennsylvania State University, University Park, PA 16802, U.S.A.

Т а б л и ц а 1

Обзор работ по численному моделированию ячеистой структуры волны газовой детонации

Источник, год	Реагенты	Модель кинетики	Размер расчетной области	Шаг сетки	Ширина ячейки	Начальное возмущение
Oran et al. [2] 1981	H ₂ /воздух 1 атм 300 К	Одностадийная индукционная	82.5 × 0.45 см	0.15 мм	0.9 см	Скошенная ударная волна
Taki et al. [3] 1981	H ₂ /O ₂ /Ar 1 атм	Двухстадийная индукционная	100L _{ind} × 20L _{ind} (L _{ind} ≈ 2.25 мм)	L _{ind} /4	≈10L _{ind}	«Горячая точка» в начальной смеси
Kailasanath et al. [4] 1985	H ₂ /O ₂ /Ar 8.66 кПа 298 К	Одностадийная индукционная	W = 5 ÷ 10 см	0.1 ÷ 0.2 см	≈8.5 см	Эллиптический непрореагировавший «карман»
Bourlioux et al. [5] 1992	—	Одностадийная аррениусовского типа	W = 5.7L _½ (случай А)	L _½ /17	5.7L _½	Линейные неустойчивые движущиеся или стоячие волны
Oran et al. [6] 1998	H ₂ /O ₂ /Ar 6.67 кПа 298 К	48 реакций, 8 компонентов	W = 6 см	Δx = 0.15 мм Δy = 0.235 мм (базовый случай)	3 см	Прямоугольный непрореагировавший «карман»
Gamezo et al. [7] 1999	H ₂ /O ₂ 1 атм 293 К	Одностадийная аррениусовского типа	W = 0.3 см	0.01 мм	≈0.08 см	Нет
Singh et al. [8] 1999	—	—//—	W = 10L _½ (L _{ind} ≈ 5.4 мм)	L _½ /24 ÷ L _½ /2	≈10L _½	Синусоидальное возмущение
Nikolic et al. [9] 1999	—	—//—	W = (0.5 ÷ 100)L _½	L _½ /40 ÷ L _½ /20	(5 ÷ 15)L _½	Синусоидальное возмущение плотности в ударной волне
Gavrikov et al. [10] 2000	—	—//—	—	100 точек сетки на длину ячейки	—	Нет
Sharpe et al. [11] 2001	—	—//—	≈400L _½ × 10L _½	L _½ /64 ÷ L _½ /4	≈10L _½	Возмущение плотности перед ударной волной
Hu et al. [12] 2004	H ₂ /O ₂ /Ar 6.67 кПа 298 К	19 реакций, 9 компонентов	W = 2 см	0.025 ÷ 0.2 мм (L _{ind} ≈ 1.6 мм)	0.8 см	Случайным образом возмущенная удельная энергия
Liang et al. [13] 2005	—	4 реакции	50L _½ × (2.5 ÷ 10)L _½	L _½ /64	≈10L _½	Синусоидальное возмущение скорости
Данная работа	—	Одностадийная аррениусовского типа	W = 1 (в относительных единицах)	L _{hr} /5	—	Скошенная детонационная волна

П р и м е ч а н и е. L_{ind} — длина зоны индукции, L_½ — длина зоны полупревращения, L_{hr} — длина зоны тепловыделения.

шить детонационные ячейки в узких каналах при различных значениях интенсивности тепловыделения и энергии активации. Получено обнадеживающее согласие между рассчитанными значениями ширины ячеек и предсказаниями теории детонационной неустойчивости. В работе [6] с использованием детального механизма химических реакций проведено моделирование детонационных волн в смеси $\text{H}_2\text{—O}_2\text{—Ar}$ при низком давлении. Получено большое количество данных о ячейистой структуре, включая образование непрореагировавших «карманов», столкновение тройных конфигураций скачков уплотнения и эволюцию поперечных волн. Также был проведен анализ чувствительности к шагу сетки путем варьирования пространственного разрешения в диапазоне $100 \div 800$ точек на ширину ячейки (равной половине ширины канала). Обнаружено, что при использовании практически всех сеток размеры ячеек близки, за исключением самой крупной сетки, в расчетах с которой появляются две дополнительные тройные конфигурации скачков уплотнения. Таким образом, можно считать, что 130 точек на ширину ячейки (вторая сетка после самой крупной) обеспечивают достаточное разрешение детонационных ячеек для исследуемых случаев. В работе [7] изучалось влияние энергии активации на регулярность ячейистой структуры. В этих расчетах численный шум и «машинные» ошибки, по-видимому, оказались достаточно большими, чтобы можно было инициировать образование поперечных волн. На ширину каждой ячейки приходилось 80 точек сетки. В работе [8] проводилось моделирование как невязких, так и вязких течений с размерами сетки, изменяющимися от $L_{1/2}/24$ до $L_{1/2}/2$ ($L_{1/2}$ — длина зоны полупревращения). В случае крупных сеток численная диссипация превосходит физическую, что приводит к близким решениям для невязких и вязких течений. Однако в случае мелких сеток ситуация меняется. Численная диссипация и разрешение сетки, таким образом, играют значительную роль в определении ячейистой структуры в случае невязких течений. В работе [9] изучалось влияние ширины канала в диапазоне $(0.5 \div 100)L_{1/2}$ на размер детонационной ячейки. Ячейстая структура детонационной волны не наблюдалась в каналах шириной меньше $2.95L_{1/2}$. Половина ячейки, а затем и целая ячейка появились при увеличении ширины канала до $5L_{1/2}$. Ширина ячейки

достигла постоянного значения ($\approx 13L_{1/2}$) при детонации в каналах шириной более $40L_{1/2}$.

Недавно было предпринято дальнейшее исследование влияния разрешения расчетной сетки при моделировании структуры детонационных ячеек. В работе [10] сопоставление найденных размеров детонационной ячейки с характерными длинами реакционной зоны показало, что для получения необходимого разрешения ячейистой структуры нужно, чтобы на ширину каждой ячейки приходилось более 30 точек сетки. Влияние разрешения сетки на детали структуры внутри детонационной ячейки исследовалось в работе [11]. Для разрешения структуры волнового фронта авторы рекомендуют не менее 20 точек сетки на длину зоны полупревращения стационарной детонационной волны. В работе [12] для моделирования ячейистой структуры и ее эволюции в смеси $\text{H}_2\text{—O}_2\text{—Ar}$ при низком давлении использовался механизм химических реакций, включающий в себя 19 реакций для 9 компонентов. Разрешение сетки варьировалось от 8 до 64 точек на длину зоны индукции. Применение сеток разного шага приводит к различной степени детализации рассчитанной структуры, при этом размеры детонационной ячейки практически не меняются. В работе [13] структура детонационной волны изучалась на основе четырехстадийной модели цепных разветвленных химических реакций с использованием сеток с разрешением до 128 точек на длину зоны полупревращения. В соответствии с результатами экспериментальной работы [14] основные особенности течения за фронтом ударной волны наблюдаются в распределении массовых долей реагентов.

Несмотря на то, что к настоящему времени удалось достичь значительного прогресса в понимании ячейистой структуры детонации, все еще остается ряд нерешенных вопросов, касающихся численных требований, выполнение которых позволит добиться высокой точности. Как видно из табл. 1 и приведенного выше обсуждения, для того чтобы охарактеризовать разрешение сетки, используется несколько различных масштабов длины, включая ширину ячейки, длину зоны индукции и длину зоны полупревращения. До сих пор не предложено общего правила для выбора разрешения сетки, достаточного для разрешения геометрической структуры детонационных ячеек. Выбор подходящей расчетной области и влияние

численной диссипации также еще ясно не определены. В данной работе предпринята попытка прояснить эти вопросы. Основной упор сделан на определение влияния разрешения сетки, расчетной области и граничных условий на результат расчета структуры детонационных ячеек. Установлены общие требования к разрешению сеток, которые могут служить полезным ориентиром для будущих исследований структуры детонационных ячеек.

1. ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ БАЗИС И ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

1.1. Основные уравнения

Чтобы сосредоточиться на численных аспектах, была использована простая, но достаточно реалистичная постановка задачи. Анализ основывается на двумерных уравнениях сохранения для невязкого, химически реагирующего течения. Скорость реакции описывается с помощью одной переменной. Все параметры течения нормированы на характерные давление (p^*), температуру (T^*), плотность (ρ^*) и скорость ($u^* \equiv \sqrt{p^*/\rho^*}$). Характерные длина и время обозначены L^* и $t^* \equiv L^*/u^*$ соответственно. Система уравнений сохранения представлена в следующей безразмерной форме [15]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho e \\ \rho Z \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(\rho e + p) \\ \rho u Z \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial y} \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p \\ v(\rho e + p) \\ \rho v Z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dot{\omega} \end{bmatrix}, \quad (1)$$

где ρ — плотность, u, v — компоненты вектора скорости, e — удельная полная энергия. Переменная Z соответствует массовой доле продуктов. Химическая кинетика описывается с помощью одностадийной реакции аррениусовского типа:

$$\dot{\omega} = \rho(1 - Z)K \exp(-T_a/T), \quad (2)$$

где $\dot{\omega}$ — массовая скорость образования продукта, T_a — температура активации, K —

предэкспоненциальный множитель, нормированный на $K^* \equiv 1/t^*$. Давление p и температура T определяются из уравнений состояния:

$$p = (\gamma - 1)\rho\{e - (u^2 + v^2)/2 + Zq\}, \quad (3)$$

$$T = p/(\rho R), \quad (4)$$

где q — тепловыделение на единицу массы продуктов. Газовая постоянная R , нормированная на $R^* \equiv p^*/(\rho^*T^*)$, и отношение удельных теплостей γ для газовой смеси рассчитываются следующим образом:

$$R = R_1(1 - Z) + R_2Z, \quad (5)$$

$$\gamma = \frac{(1 - Z)R_1\gamma_1/(\gamma_1 - 1) + ZR_2\gamma_2/(\gamma_2 - 1)}{(1 - Z)R_1/(\gamma_1 - 1) + ZR_2/(\gamma_2 - 1)}, \quad (6)$$

где нижние индексы 1 и 2 относятся к исходным реагентам и продуктам соответственно.

Всего в описании модели участвуют семь параметров: отношения удельных теплостей (γ_1, γ_2), газовые постоянные реагентов и продуктов (R_1, R_2), тепловыделение q , предэкспоненциальный множитель K и температура активации T_a . Их значения будут обсуждаться позже.

1.2. Численный метод

Система уравнений решается численно методом конечного объема. Конвективные потоки рассчитываются методом, предложенным Рое (Roe) для приближенного алгоритма Римана, а газодинамические переменные интерполируются с помощью схемы TVD типа MUSCL третьего порядка точности. Дискретизованные уравнения интегрируются по времени с помощью схемы Рунге — Кутты четвертого порядка точности. Детали реализации численного алгоритма и его точность подробно обсуждены в работах [16, 17].

1.3. Масштабирование

Основная цель данной работы — установление требований к разрешающей способности сетки. Эта задача очень трудоемкая, особенно в случае, когда рассматривается широкий диапазон режимов течения. Чтобы упростить анализ, проблему разрешающей способности сетки будем рассматривать при варьировании значения безразмерного предэкспоненциального множителя K и при фиксированной сетке так, как описано ниже.

Безразмерное уравнение сохранения для реакционной переменной Z выражается следующим образом:

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u Z}{\partial x} + \frac{\partial \rho v Z}{\partial y} = \rho(1 - Z)K \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right), \quad (7)$$

где предэкспоненциальный множитель K связан с его размерным аналогом \tilde{K} через временной масштаб (характерное время) L^*/u^* :

$$K = \tilde{K}/K^* = \tilde{K}L^*/u^*. \quad (8)$$

Если \tilde{K} и u^* фиксированы, то K пропорционален рассматриваемому физическому масштабу длины. Таким образом, для данного безразмерного шага сетки высокое значение K соответствует большому масштабу длины и, следовательно, крупной сетке в реакционной зоне, тогда как малое значение \tilde{K} соответствует мелкой сетке. Следовательно, изучение влияния разрешающей способности сетки при фиксированном размерном предэкспоненциальном множителе \tilde{K} эквивалентно изучению влияния безразмерного предэкспоненциального множителя K с фиксированной сеткой.

2. УСЛОВИЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ

2.1. Модельная задача, граничные и начальные условия

Рассматривается модельная задача распространения детонационной волны в двумерном канале справа налево. Чтобы разрешить фронт детонационной волны и при этом избежать использования расчетной области большого размера, применяется система координат, схематически показанная на рис. 1. На левой границе (вход) исходные реагенты поступают в расчетную область со сверхзвуковой скоростью. Давление и температура предварительно заданы, а осевая скорость выбрана равной скорости детонации Чепмена — Жуге (ЧЖ).

На правой границе (выход) в случае достаточно длинной расчетной области может быть задано условие ЧЖ (т. е. число Маха M , равное единице). На практике для сокращения вычислительных затрат используется относительно короткая расчетная область, но при этом необходимо задать подходящее граничное условие

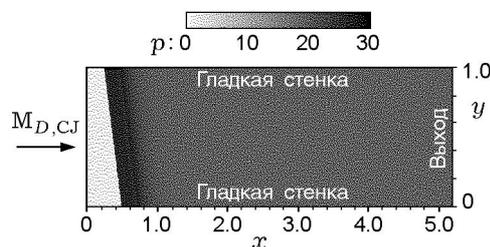


Рис. 1. Расчетная сетка с наложенным начальным распределением давления

на выходе. В работе [7] предложен релаксационный метод оценки параметров течения на выходе как средневзвешенного значения параметра в первой точке сетки, соседней с границей, и предварительно заданного значения параметра в дальней области. В данной работе используются и сравниваются три различных типа граничных условий на выходе. Первый тип связан с простой экстраполяцией параметров течения из внутренней области. При граничных условиях второго типа, для того чтобы удовлетворить состоянию ЧЖ, принудительно задаются либо экстраполяция из внутренней области, если скорость течения превышает скорость звука, либо условие достижения скорости звука наряду со значениями давления и температуры, соответствующими условию ЧЖ, если течение дозвуковое. Третий тип основан на характеристическом граничном условии, использующем в качестве условия в дальней области состояние ЧЖ:

$$p_{exit} = p_{CJ}, \quad (9)$$

$$\rho_{exit} = \rho_{exit-1} + (p_{exit} - p_{exit-1})/a_{CJ}^2, \quad (10)$$

$$u_{exit} = u_{exit-1} + (p_{exit} - p_{exit-1})/(\rho a)_{CJ}, \quad (11)$$

где нижний индекс $exit - 1$ соответствует значению в первой точке сетки, соседней с границей (выходом), a — скорость звука. Поперечная компонента скорости v просто экстраполируется. В данной статье в большинстве случаев используется третий тип граничных условий. Предполагается, что обе стенки гладкие и теплоизолированные.

В качестве начального условия при моделировании двумерного течения используется одномерная структура волны Зельдовича — Неймана — Дёринга (ЗНД). Волна скошена в поперечном направлении, как показано на рис. 1, чтобы обеспечить возмущения потока для реализации неустойчивости процесса.

Таблица 2

Характеристики расчетных сеток

Сетка	Минимальный шаг сетки	Размер расчетной области
301 × 101 однородная часть 201 × 101 + растянутая на 2 % 100 × 101	$\Delta x_{\min} = \Delta y = 0.01$	5.18 × 1.0
501 × 201 однородная часть 401 × 201 + растянутая на 3 % 100 × 201	$\Delta x_{\min} = \Delta y = 0.005$	5.13 × 1.0
901 × 401 однородная часть 801 × 401 + растянутая на 3 % 100 × 401	$\Delta x_{\min} = \Delta y = 0.0025$	5.22 × 2.0

Характерные давление p^* , температура T^* и плотность ρ^* соответствуют параметрам течения исходных реагентов, характерная скорость определяется как $u^* \equiv \sqrt{p^*/\rho^*}$, а в качестве характерной длины L^* выбирается размерная ширина канала.

2.2. Численный следовой метод

Известно, что тангенциальное напряжение вблизи тройной точки во фронте детонационной волны лежит в основе физического механизма образования следовых отпечатков, который может быть численно воспроизведен на основе значений максимального давления в поле течения [13]. В данной работе следовые отпечатки получают путем регистрации максимального давления за ударной волной в точках на ширине расчетной области, при этом система отсчета, движущаяся с ударной волной, преобразуется в лабораторную систему отсчета:

$$x = x_{shock} - u_1 t. \quad (12)$$

2.3. Расчетные сетки

Рассматривается двумерный канал шириной, равной единице. Расчетная область содержит частую сетку с высоким разрешением в области $0 \leq x \leq 2$, для того чтобы «поймать» фронт детонационной волны и зарегистрировать протекание реакции в реагирующем потоке, и редкую сетку при $x \geq 2$. Шаги частой сетки в аксиальном и поперечном направлениях одинаковы. Это необходимо для того, чтобы корректно описать поперечные ударные волны, которые являются неотъемлемой

частью тройной конфигурации скачков уплотнения, оставляющей ячеистый следовой отпечаток. При $x \geq 2$ сетка растянута в осевом направлении с целью уменьшения вычислительных затрат. Длина расчетной области выбирается таким образом, чтобы состояние ЧЖ либо реализовалось в пределах расчетной области, либо примерно достигалось на выходе. Влияние разрешающей способности сетки оценивается путем варьирования предэкспоненциального множителя K . Кроме того, для дальнейшей проверки результатов используются, как указано в табл. 2, три различные сетки.

2.4. Параметры расчетов

В зависимости от термодинамических характеристик реагентов и параметров химических реакций структура детонационных ячеек может быть классифицирована по типу реализующегося режима детонации: слабо-, умеренно- или сильнонеустойчивого [18]. Репрезентативные случаи для этих режимов выбираются согласно работе [18]. В табл. 3 перечислены значения приведенной энергии активации (θ) и отношений удельных теплоемкостей для реагентов и продуктов. Первый параметр (известный так же как приведенная температура активации) представляет собой температуру активации, нормированную на число Неймана:

$$\theta \equiv \frac{T_a}{T_{VN}} \equiv \frac{E_a}{R_1 T_{VN}}, \quad (13)$$

где E_a — энергия активации, T_{VN} — температура, соответствующая пику Неймана. При высоких значениях E_a осуществляется менее стабильная (или нерегулярная) детонация [5].

Таблица 3

Моделируемые варианты

θ	Вариант	Длины зон полупревращения и тепловыделения
5.2	Слабонеустойчивая детонация $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 12\text{Ar}$, $\gamma_1 = 1.602$, $\gamma_2 = 1.288$	$L_{1/2} = 0.061$, $L_{hr} = 0.114$ ($K = 2000$)
6.9	Умеренно-неустойчивая детонация $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 5.6\text{N}_2$, $\gamma_1 = 1.405$, $\gamma_2 = 1.185$	$L_{1/2} = 0.140$, $L_{hr} = 0.222$ ($K = 2000$)
12.7	Сильнонеустойчивая детонация $\text{C}_3\text{H}_8 + 5\text{O}_2 + 9\text{N}_2$, $\gamma_1 = 1.336$, $\gamma_2 = 1.161$	$L_{1/2} = 14.799$, $L_{hr} = 5.956$ ($K = 2000$)

3. СТРУКТУРА ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ ЗНД

Сначала определяется структура детонационной волны ЗНД, которая служит основой для многомерного исследования детонации. В предположении стационарности и одномерности уравнения сохранения (1) сводятся к следующей системе нелинейных алгебраических уравнений:

$$\rho u = \rho_1 u_1, \quad (14)$$

$$\rho u^2 + p = \rho_1 u_1^2 + p_1, \quad (15)$$

$$\frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2} u^2 = \frac{\gamma_1}{\gamma_1 - 1} \frac{p_1}{\rho_1} + \frac{1}{2} u_1^2 + Zq, \quad (16)$$

$$\frac{\partial Z}{\partial x} = \frac{1}{u} (1 - Z) K \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right). \quad (17)$$

Давление p , плотность ρ и скорость u могут быть рассчитаны как функции реакционной переменной Z следующим образом:

$$\frac{p}{p_1} = \frac{\gamma_1 M_1^2 + 1}{\gamma M^2 + 1}, \quad (18)$$

$$\frac{\rho}{\rho_1} = \frac{\gamma_1 M_1^2 (\gamma M^2 + 1)}{\gamma M^2 (\gamma_1 M_1^2 + 1)}, \quad (19)$$

$$\frac{u}{u_1} = \frac{\gamma M^2 (\gamma_1 M_1^2 + 1)}{\gamma_1 M_1^2 (\gamma M^2 + 1)}, \quad (20)$$

где

$$M = \sqrt{\frac{[\gamma - (\gamma - 1)B] - \sqrt{\gamma^2 - (\gamma^2 - 1)B}}{\gamma(\gamma - 1)(B - 1)}}, \quad (21)$$

$$B = \frac{2\gamma_1^2 M_1^2 \left(1 + \frac{\gamma_1 - 1}{2} M_1^2 + Z\hat{q}\right)}{(\gamma_1 - 1)(\gamma_1 M_1^2 + 1)^2},$$

$$M_1 = \frac{u_1}{\sqrt{\gamma_1 p_1 / \rho_1}}, \quad \hat{q} = q \frac{(\gamma_1 - 1) \rho_1}{\gamma_1 p_1}. \quad (22)$$

Затем с помощью уравнения состояния (4) рассчитывается температура T . Кроме того, если число Маха набегающего потока M_1 равно числу Маха в состоянии ЧЖ, т. е.

$$M_1 = M_{D,CJ} \equiv \left[\left(\frac{\gamma_2^2 - 1}{\gamma_1 - 1} \hat{q} + \frac{\gamma_2^2 - \gamma_1}{\gamma_1^2 - \gamma_1} \right) + \sqrt{\left(\frac{\gamma_2^2 - 1}{\gamma_1 - 1} \hat{q} + \frac{\gamma_2^2 - \gamma_1}{\gamma_1^2 - \gamma_1} \right)^2 - \left(\frac{\gamma_2}{\gamma_1} \right)^2} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (23)$$

то уравнения (18)–(21) определяют параметры течения в состояниях Неймана и ЧЖ при $Z = 0$ и $Z = 1$ соответственно.

После подстановки u и T , выраженных через Z , в уравнение (17) получается обычное дифференциальное уравнение для реакционной переменной в форме задачи выбора начальных значений в пространстве. Оно решается численно четырехстадийным методом Рунге — Кутты в состоянии Неймана, принятым при $x = 0$. В процессе интегрирования при $Z = 1$ достигается конечное состояние, соответствующее условию ЧЖ. В качестве иллюстрации на рис. 2 показана рассчитанная структура детонационной волны ЗНД для случая $\theta = 6.9$, $K = 1000$.

Чтобы исследовать вопрос масштабирования, обсуждавшийся в § 1.3, проведена серия одномерных расчетов при $\theta = 6.9$, в которых предэкспоненциальный множитель K варьировался в диапазоне $500 \div 5000$. Длина расчетной области была фиксированной и равнялась 2.0, а число точек сетки составляло 201. На рис. 3

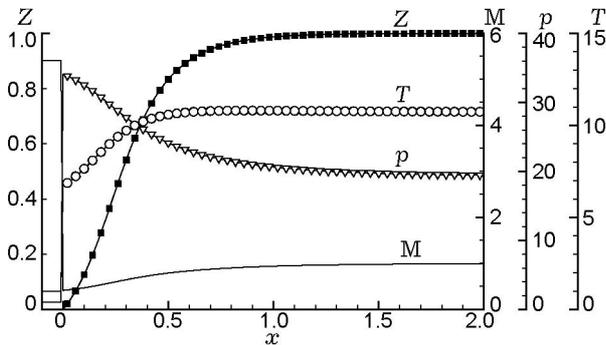


Рис. 2. Структура детонационной волны ЗНД, рассчитанная с шагом сетки $\Delta x = 0.01$ для случая $\theta = 6.9$, $K = 1000$

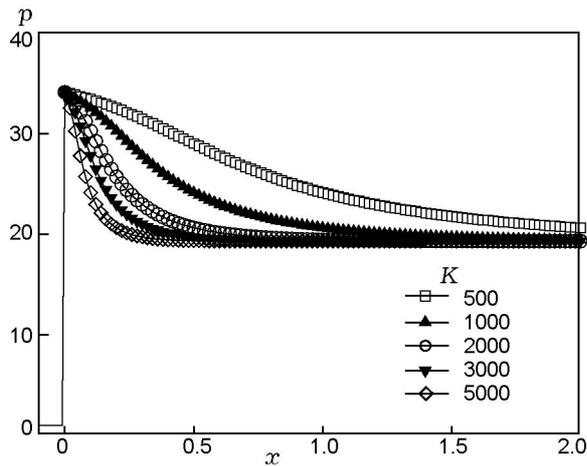


Рис. 3. Влияние предэкспоненциального множителя K на распределение давления в детонационной волне ЗНД ($\theta = 6.9$, $\Delta x = 0.01$)

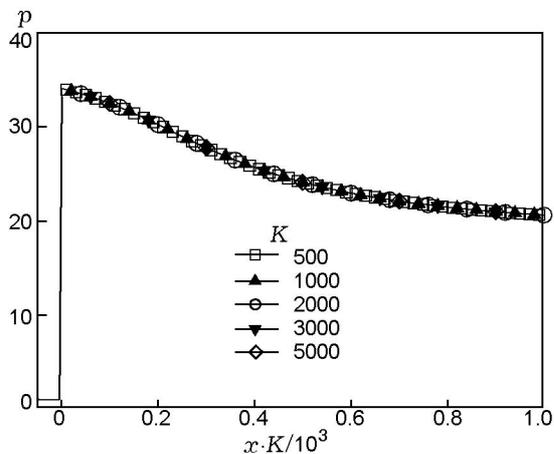


Рис. 4. Влияние предэкспоненциального множителя K на распределение давления в детонационной волне ЗНД (в зависимости от приведенной координаты $\theta = 6.9$, $\Delta x = 0.01$)

показаны распределения давления. При $K < 500$ расчетная область слишком мала, чтобы охватить всю структуру детонационной волны ЗНД; с другой стороны, если $K > 5000$, шаг сетки из-за численной жесткости становится слишком большим, чтобы разрешить структуру. Из рис. 4 видно, что все профили давления укладываются на одну кривую при перестройке их с использованием координаты, масштабированной на предэкспоненциальный множитель K , линейно пропорциональный длине. То же самое происходит, если варьируется шаг сетки, а K остается постоянным. Результаты, представленные на рис. 4, в явном виде связаны с вопросом о масштабировании, обсуждавшимся в § 1.3.

Структура детонационной волны ЗНД рассчитывалась для трех случаев, представленных в табл. 3. На рис. 5 показаны распределения реакционной переменной. В общем случае реакционная зона состоит из индукционной зоны и зоны тепловыделения, которые могут быть удобно и однозначно разделены точкой пересечения координаты x и касательной линии к профилю Z , проведенной в точке максимального наклона, как показано на рисунке. Индукционная зона простирается от точки начала координат до точки пересечения на оси x , а зона тепловыделения простирается от этой точки до точки пересечения касательной с линией $Z = 1$. Три различных режима детонации могут быть охарактеризованы с помощью длины зоны индукции (L_{ind}) и длины зоны тепловыделения (L_{hr}). Слабонеустойчивая детона-

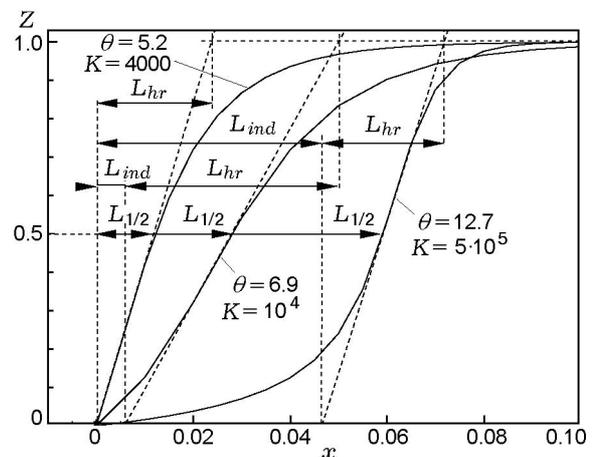


Рис. 5. Распределение реакционной переменной Z в структуре детонационной волны ЗНД и определение химических расстояний

ция практически не имеет индукционной зоны из-за низкой энергии активации и очень высокой температуры в пике Неймана. В случае умеренно-неустойчивой детонации зона индукции немного короче, чем зона тепловыделения. В случае сильнонеустойчивой детонации вследствие высокой энергии активации зона индукции в несколько раз длиннее зоны тепловыделения.

Зона полупревращения, определяемая как область от $Z = 0$ до $Z = 0.5$, также показана на рис. 5. Она включает в себя зону индукции и часть зоны тепловыделения. Длина зоны полупревращения ($L_{1/2}$) широко использовалась ранее для характеристики разрешающей способности сетки при моделировании структуры детонационных ячеек [5, 8, 9, 11, 13]. Однако, так как параметры течения в зоне индукции меняются медленно, а в зоне тепловыделения быстро, то разрешающая способность сетки в зоне тепловыделения, по всей видимости, играет более важную роль, чем во всей зоне целиком и в зоне полупревращения. При численном моделировании течений с учетом химической кинетики сильные изменения параметров течения в зоне тепловыделения часто вызывают проблемы, связанные с численной жесткостью. Поэтому в настоящей работе в качестве основного параметра выбрана разрешающая способность сетки в зоне тепловыделения детонационной волны ЗНД.

4. СЛАБОНЕУСТОЙЧИВАЯ ДЕТОНАЦИЯ

Для изучения двумерной детонации в различных режимах использовался подход, описанный в § 1. Сначала проводились расчеты для слабонеустойчивой детонации с приведенной температурой активации $\theta = 5.2$. Предэкспоненциальный множитель изменялся в диапазоне $K = 200 \div 20\,000$. Для инициирования образования детонационных ячеек, чтобы обеспечить начальные условия для расчета поля течения с использованием структуры детонационной волны ЗНД, скошенной в поперечном направлении, применялся одномерный анализ, описанный в § 3. На рис. 6 показаны распределения реакционной переменной Z для детонационных волн ЗНД, полученных в одномерных расчетах при $K = 500 \div 5\,000$. Длина расчетной области равнялась 2.0, шаг сетки $\Delta x = 0.01$. Реакция горения быстро протекает за пиком Неймана, без заметной индук-

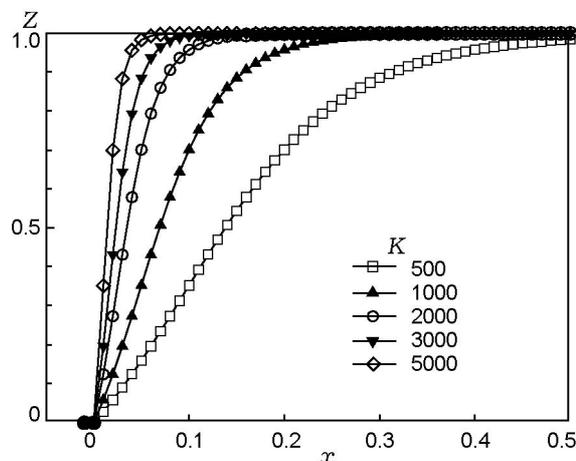


Рис. 6. Распределение реакционной переменной Z для детонационной волны ЗНД при различных значениях предэкспоненциального множителя (слабонеустойчивая детонация, $\theta = 5.2$, $\Delta x = 0.01$)

ционной зоны. Реакционная переменная увеличивается линейно за ударной волной и плавно подходит к равновесному условию ЧЖ. При $K < 500$ расчетная область недостаточно большая, чтобы вместить всю реакционную зону. С другой стороны, если $K > 5\,000$, то шаг сетки $\Delta x = 0.01$ становится слишком большим, чтобы разрешить структуру детонационной волны.

4.1. Базовый вариант при $K = 2\,000$

Сначала был смоделирован и тщательно изучен базовый вариант при $K = 2\,000$. Сетка содержала 501×201 ячеек, а длина расчетной области равнялась ≈ 5.1 (см. табл. 2). Шаг сетки $\Delta x = 0.005$ при $0 \leq x \leq 2$. Число Куранта — Фридрихса — Леви равнялось 0.5. На выходе использовались характеристические граничные условия.

На рис. 7 показана эволюция во времени полей температуры и давления. Каждый кадр захватывает пространственную область 0.22×1 , а временной промежуток между двумя соседними кадрами составляет 0.22. Хорошо видна детальная структура фронта детонационной волны. Наблюдаются также траектории тройных точек, которые формируют детонационные ячейки. На рис. 8 представлен соответствующий численный следовой отпечаток, на котором видны весьма регулярные ячейки. Полная ширина канала ($W = 1$) охватывает полторы ячейки. Ширина ячейки, равная 0.67,

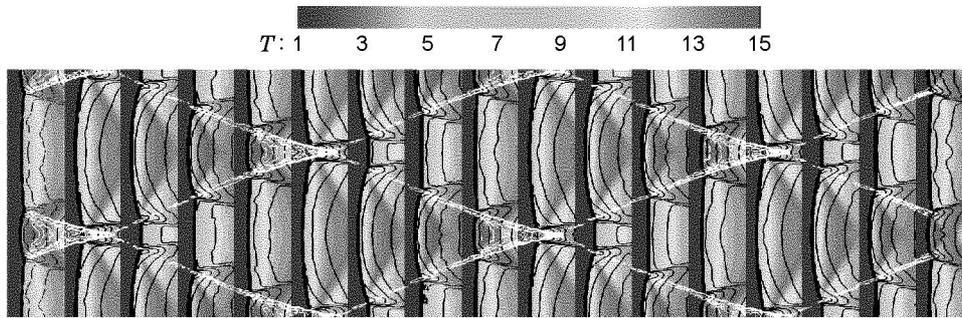


Рис. 7. Поля температуры и давления (темные линии) и следовой отпечаток (светлые линии), показывающие эволюцию фронта детонационной волны во времени для базового варианта ($\theta = 5.2$, $K = 2000$, $\Delta x = 0.005$)

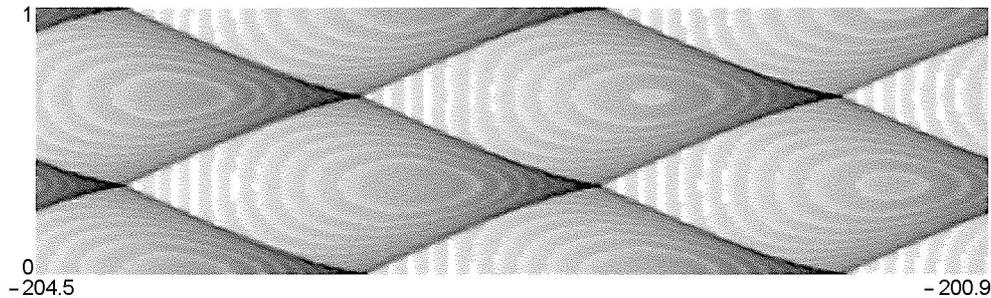


Рис. 8. Численный следовой отпечаток для слабонеустойчивой детонации, базовый вариант ($\theta = 5.2$, $K = 2000$, $\Delta x = 0.005$)

приблизительно в 28 раз больше, чем длина зоны полупревращения ($L_{1/2} = 0.024$).

4.2. Влияние предэкспоненциального множителя

Влияние безразмерного предэкспоненциального множителя K изучалось в диапазоне $200 \div 20\,000$ с сеткой 301×101 ($\Delta x = 0.01$). Это исследование также предоставляет прямую информацию о требованиях к разрешающей способности сетки, в соответствии с обсужденным в § 1.3 вопросом масштабирования. При $K > 10\,000$ в качестве начального условия использовалась структура детонационной волны ЗНД, полученная для $K = 5\,000$, так как при больших значениях K нельзя получить структуру детонационной волны ЗНД, используя шаг сетки $\Delta x = 0.01$. При $K < 200$ детонационная волна не могла полностью установиться и оказывалась вне расчетной области.

На рис. 9 показана структура фронта детонационной волны при $K = 500, 1\,000, 2\,000, 5\,000, 10\,000$ и $20\,000$. Каждый кадр охватывает пространственную область 1×1 , как в осе-

вом, так и в поперечном направлении. Линиями изображены контуры давления, наложенные на распределения реакционной переменной. При $K = 500$ и $1\,000$ наблюдается только одна тройная точка вместе с очень широкой реакционной зоной, что иллюстрирует типичную тройную конфигурацию скачков уплотнения, которая включает в себя маховскую ножку, а также падающую и поперечную ударные волны [1]. За относительно более слабой падающей ударной волной реакционная зона шире, чем за более сильной маховской ножкой. С увеличением предэкспоненциального множителя K возрастает скорость реакции, что приводит к сужению зоны горения. При $K = 2\,000$ и $5\,000$ количество тройных точек увеличивается и наблюдается слабонеустойчивая детонация с равномерно распределенными тройными точками. Однако при $K = 10\,000$ и $20\,000$ структура волнового фронта исчезает, главным образом из-за недостаточной разрешающей способности сетки для моделирования структуры тройной конфигурации скачков уплотнения. Тем не менее расчет все еще позволяет наблюдать волновой

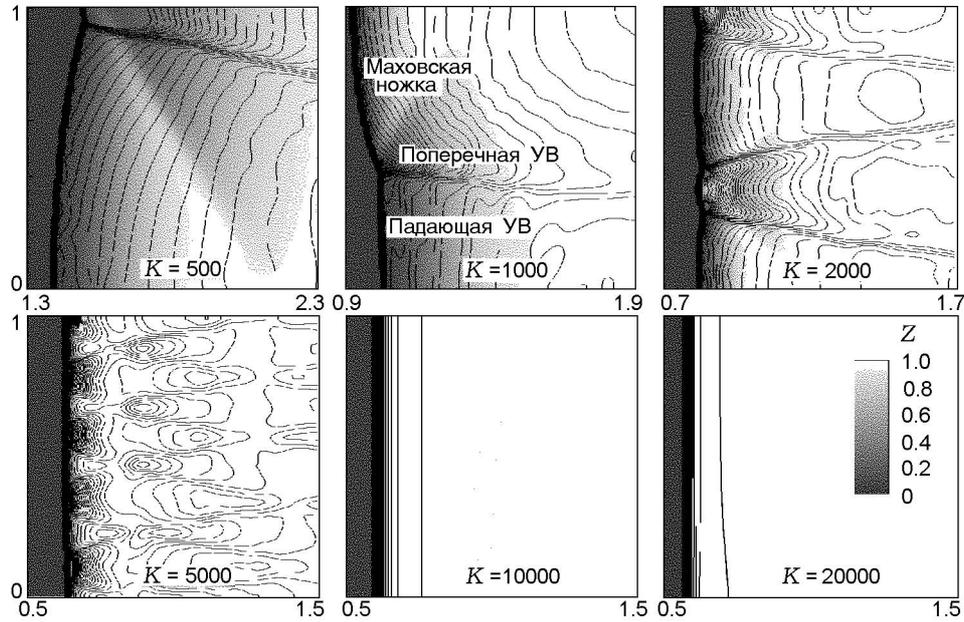


Рис. 9. Эпюры давления (линии) и распределения реакционной переменной при различных значениях предэкспоненциального множителя, иллюстрирующие структуру волнового фронта в случае слабонеустойчивой детонации (сетка 301×101 , $\Delta x = 0.01$)

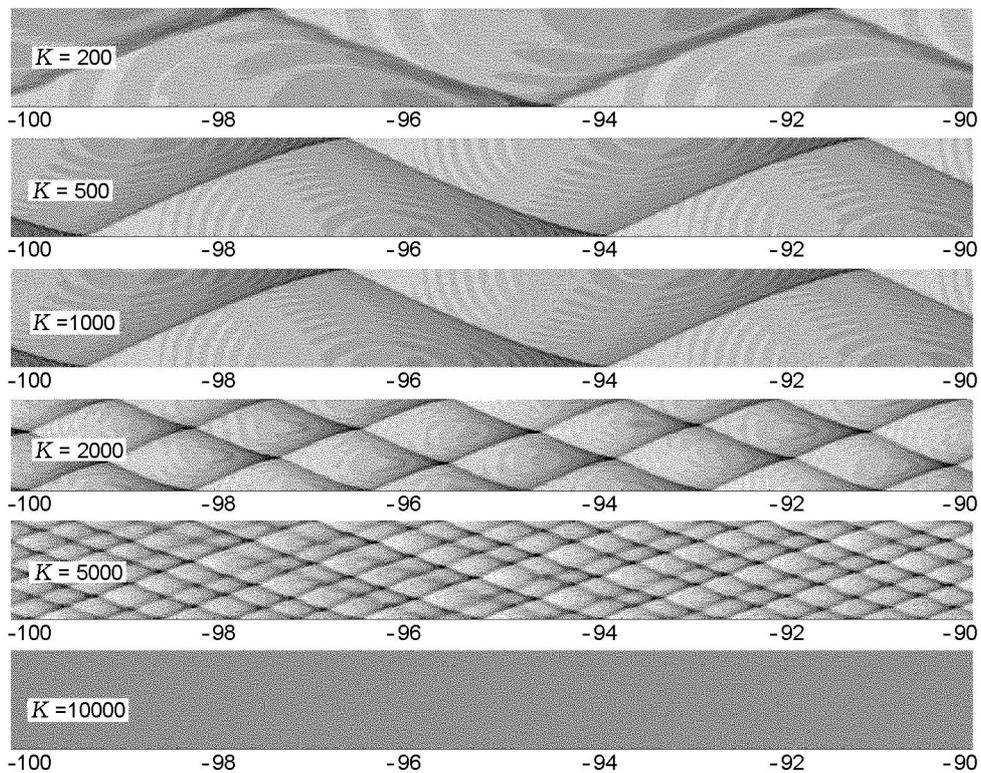


Рис. 10. Численные следовые отпечатки для случая слабонеустойчивой детонационной волны (сетка 301×101 , $\Delta x = 0.01$)

фронт как стационарную одномерную детонационную волну.

На рис. 10 представлены численные следовые отпечатки для $K = 200 \div 10\,000$. Наблюдаются достаточно регулярные ячеистые структуры, за исключением случая $K = 10\,000$, для которого имеющейся разрешающей способности ($\Delta x = 0.01$) оказалось недостаточно. В общем число ячеек увеличивается с ростом предэкспоненциального множителя. При $K = 200, 500$ и $1\,000$ ширина канала охватывает только половину ячейки. При $K = 2\,000$ и $5\,000$ число ячеек увеличивается до 1.5 и 4.5 соответственно. Можно ожидать, что чем больше ячеек укладывается на ширине канала, тем больше степень пропорциональности между числом ячеек и предэкспоненциальным множителем K . Такое соотношение между количеством ячеек и предэкспоненциальным множителем хорошо соответствует соотношению между ширинами канала и ячейки, исследованному в работе [9]. Эти результаты также согласуются с экспериментальными наблюдениями, которые свидетельствуют, что ширина детонационной ячейки подстраивается под ширину канала в случае узких каналов, но теряет связь с шириной в широких каналах [1].

Условие, соблюдение которого позволяет разрешить детонационные ячейки, может быть получено путем перевода полученных результатов на язык размерных параметров. Размерный шаг сетки связан с фиксированным безразмерным значением ($\Delta x = 0.01$) следующим образом:

$$\tilde{\Delta x} \equiv \Delta x \cdot L^* \equiv \Delta x \cdot K u^* / \tilde{K}. \quad (24)$$

Если размерный предэкспоненциальный множитель \tilde{K} и характерная скорость u^* зафиксированы, то $\tilde{\Delta x}$ пропорционален безразмерному множителю K . Тогда вышеупомянутое утверждение о том, что детонационные ячейки удастся разрешить при $K \leq 5\,000$, сводится к утверждению, что для задачи этого типа с $\theta = 5.2$ и любыми \tilde{K} и u^* размерный шаг сетки должен быть $\tilde{\Delta x} \leq \Delta x \cdot K u^* / \tilde{K} = 50 u^* / \tilde{K}$.

На рис. 11 показано изменение во времени положения фронта ведущей ударной волны вдоль осевой линии расчетной области для $K = 100 \div 10\,000$. Как было указано ранее, при $K = 100$ детонационная волна не уместается в пределах расчетной области. При $K = 10\,000$ положение ударной волны не меняется, что соответствует стационарному решению. В дру-

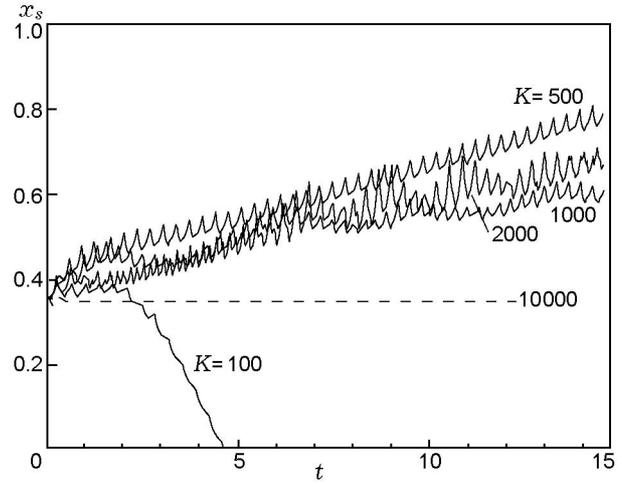


Рис. 11. Изменение во времени положения фронта ударной волны вдоль осевой линии расчетной области для слабонеустойчивой детонации (сетка 301×101 , $\Delta x = 0.01$)

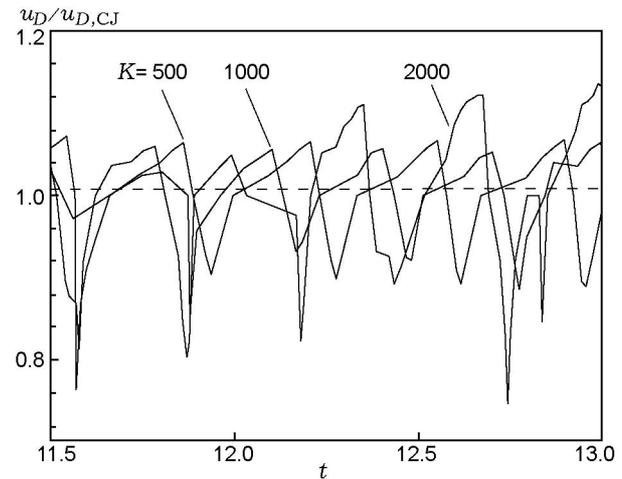


Рис. 12. Изменение во времени скорости детонации (сетка 301×101 , $\Delta x = 0.01$)

гих случаях координата ударной волны совершает периодические колебания в области равномерной сетки $0 \leq x \leq 2$ и медленно смещается вниз по потоку. Средняя скорость ударной волны немного ниже, чем скорость детонации ЧЖ (на $1 \div 3\%$).

На рис. 12 показано изменение во времени скорости ударной волны. Отношение скорости ударной волны к скорости детонации ЧЖ изменяется от 0.8 до 1.1, попадая тем самым в диапазон, характерный для обычной детонации [1]. Скорость ударной волны достигает своего максимального значения сразу после столкно-

вения двух тройных точек, соответствующих пересжатой детонации. После этого волна постепенно ослабляется, и приблизительно в середине ячейки отношение скоростей становится равным 1.0. Далее отношение скоростей постепенно уменьшается до минимального значения, которое наблюдается непосредственно перед другим столкновением двух тройных точек.

4.3. Длина расчетной области и граничные условия на выходе

В идеале расчетная область должна быть достаточно длинной, чтобы состояние ЧЖ достигалось в пределах расчетной области. На практике, однако, длину расчетной области ограничивают, чтобы уменьшить вычислительные затраты. Поэтому выбор подходящей расчетной области и граничных условий на выходе становится важным вопросом при моделировании. Если используется очень короткая расчетная область, то неустойчивая детонационная волна может выйти из расчетной области независимо от разрешающей способности сетки, потому что условие ЧЖ невозможно удовлетворить на выходе, и неподходящая дозвуковая граница нарушает баланс сил, необходимый для стабилизации детонационной волны в пределах расчетной области.

Для случая $\theta = 5.2$, $K = 1000$ проведено параметрическое исследование, в котором длина расчетной области (x_{exit}) изменялась от 1.0 до 28.2. Шаг сетки в однородной области имел фиксированное значение, равное 0.01. Использовалось характеристическое граничное условие на выходе. На рис. 13 показано изменение во времени положения фронта ударной волны вдоль осевой линии расчетной области. Детонационная волна не стабилизируется в пределах расчетной области при $x_{exit} < 1.5$, тогда как в случае более длинных расчетных областей наблюдаются периодические колебания детонационной волны. При $x_{exit} \geq 2.0$ положения фронта ударной волны практически идентичны, что указывает на то, что длина расчетной области слабо влияет на структуру волнового фронта после того, как она превысила критическое значение (например, 2.0 в данном случае), при котором волна может стабилизироваться внутри расчетной области. На рис. 14 показано изменение числа Маха на выходе, осредненного в поперечном направлении.

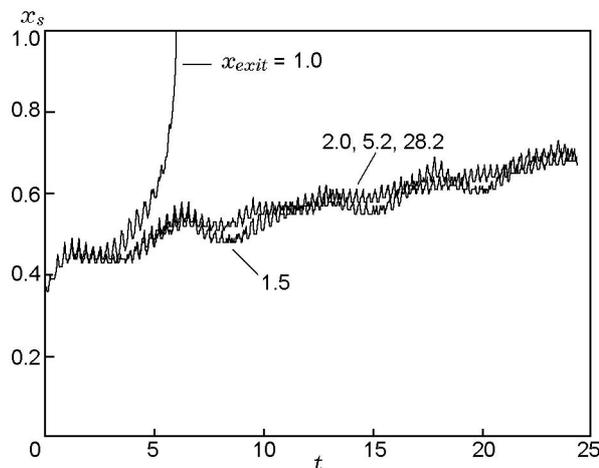


Рис. 13. Изменение во времени положения фронта ударной волны вдоль осевой линии расчетной области для слабонеустойчивой детонации при различных длинах расчетной области ($K = 1000$)

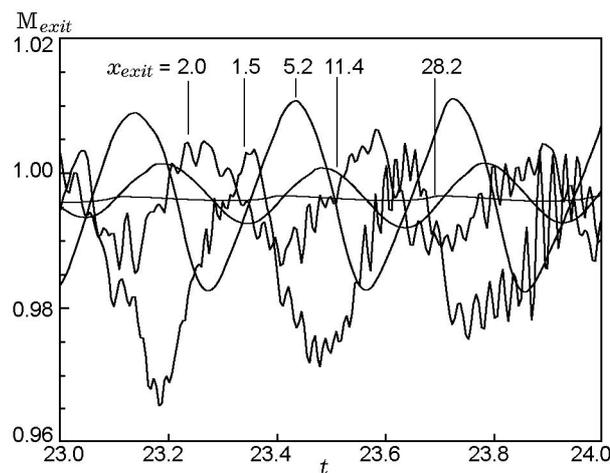


Рис. 14. Изменение числа Маха, осредненного в поперечном направлении, на выходе из расчетной области для слабонеустойчивой детонации при различных длинах расчетной области ($K = 1000$)

При увеличении длины расчетной области число Маха на выходе изменяется меньше и колебания сглаживаются. В случае $x_{exit} = 28.2$ число Маха на выходе практически постоянно: $M_{exit} = 0.996$.

Влияние граничного условия на выходе исследовалось для двух расчетных областей длиной 1.5 и 5.2. На рис. 15 показано изменение давления за фронтом ударной волны при трех различных граничных условиях на выходе (в соответствии с обсуждением в § 2.1). При длине

расчетной области $x_{exit} = 1.5$ динамика давления слабо меняется при изменении типа граничного условия. Однако при длине $x_{exit} = 5.2$ результаты практически неотличимы (с точностью до 6-й значащей цифры в значениях давления). То есть граничное условие на выходе оказывает пренебрежимо малое влияние на результат расчета волнового фронта при условии, что длина расчетной области превышает критическое значение. На рис. 16 показано изменение числа Маха, осредненного в по-

перечном направлении в плоскости выходного сечения. Принудительное задание граничного условия в форме ЧЖ приводит к нефизическим значениям числа Маха на выходе, превышающим единицу. Простая экстраполяция дает разумные результаты в более длинной расчетной области, но в короткой приводит к постепенному уменьшению числа Маха на выходе. Характеристическое граничное условие приводит к небольшим осцилляциям значения числа Маха около единицы, и поэтому оно более желательно. Влияние граничного условия, конечно, становится пренебрежимо малым, если используется достаточно длинная расчетная область.

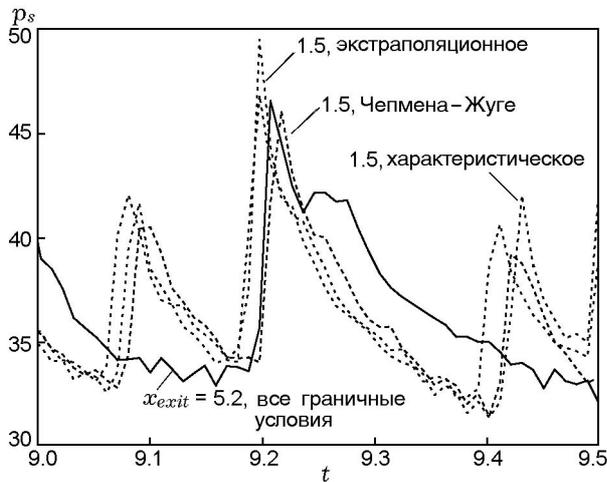


Рис. 15. Изменение давления в пике Неймана вдоль осевой линии расчетной области для слабонеустойчивой детонации при различных граничных условиях на выходе ($K = 1000$)

4.4. Временной шаг

При заданной сетке временной шаг может повлиять на устойчивость решения для поля течения и численной диффузии. В настоящей работе влияние временного шага исследуется путем варьирования числа Куранта — Фридрихса — Леви в диапазоне $0.1 \div 0.5$ при $K = 2000$ и сетке 301×101 . Хотя максимальный теоретический предел данной схемы позволяет использовать еще большие числа Куранта — Фридрихса — Леви, однако на практике значение, равное 0.5, является максимальным из-за жесткости, обусловленной источником членом, связанным с химической реакцией. С другой стороны, по соображениям вычислительной эффективности выбрано ниже

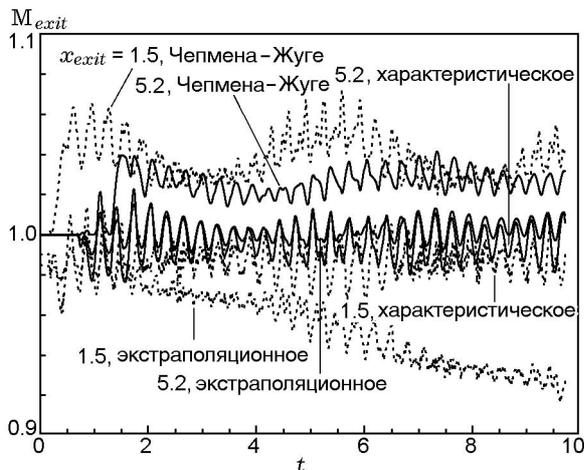


Рис. 16. Изменение числа Маха, осредненного в поперечном направлении, на выходе из расчетной области для слабонеустойчивой детонации при различных граничных условиях на выходе ($K = 1000$)

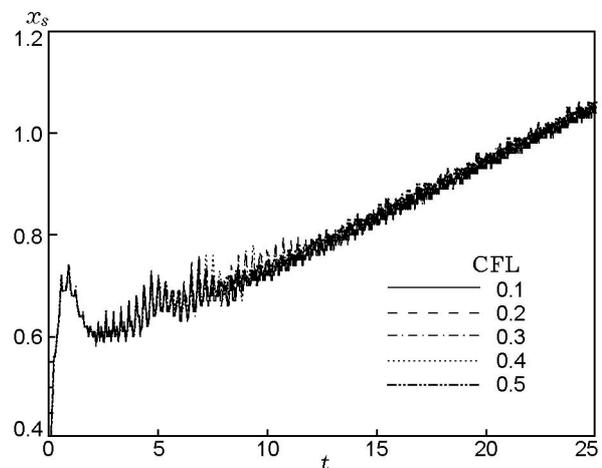


Рис. 17. Изменение во времени положения фронта ударной волны вдоль осевой линии расчетной области при различных значениях числа Куранта — Фридрихса — Леви ($K = 2000$)

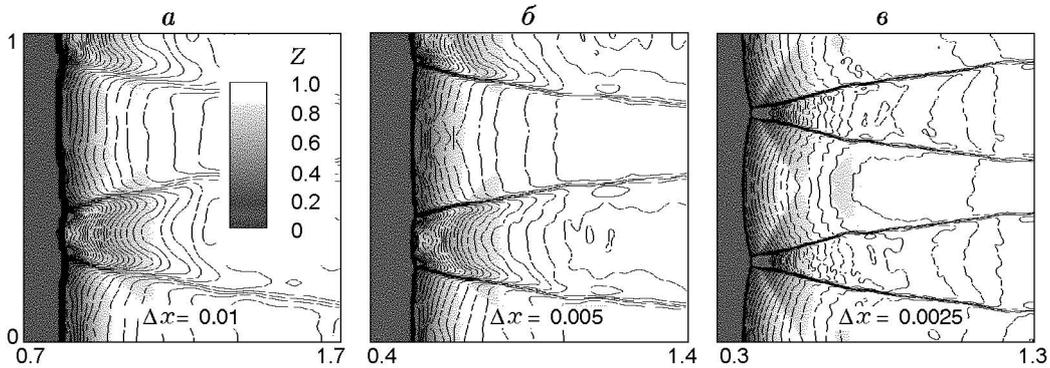


Рис. 18. Эпюры давления (линии) и распределения реакционной переменной Z при различных значениях предэкспоненциального множителя, иллюстрирующие структуру волнового фронта в случае слабонеустойчивой детонации при использовании сеток 301×101 (а), 501×201 (б) и 901×401 (в) ($\theta = 5.2$, $K = 2000$)

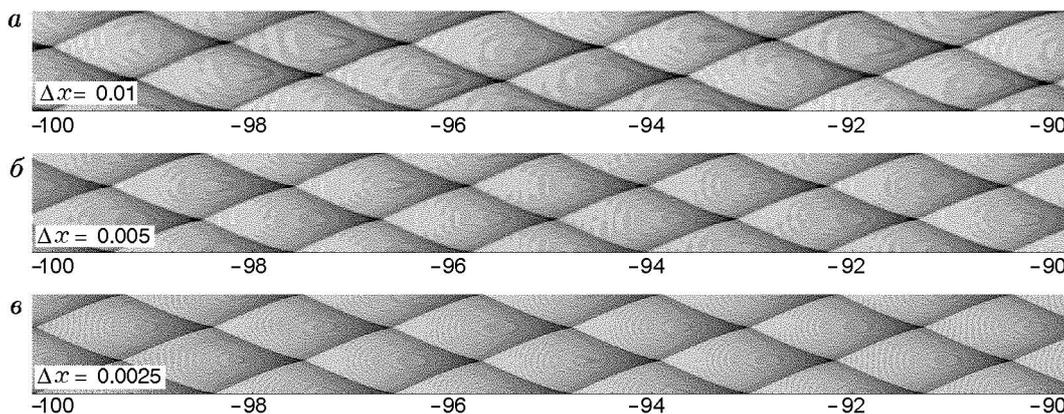


Рис. 19. Численные следовые отпечатки для слабонеустойчивой детонационной волны, полученные с использованием сеток 301×101 (а), 501×201 (б) и 901×401 (в) ($\theta = 5.2$, $K = 2000$)

предельное значение, равное 0.1.

На рис. 17 показано изменение во времени положения фронта ударной волны. При различных значениях числа Куранта — Фридрихса — Леви (CFL) получаются очень близкие результаты. Ударная волна медленно движется вниз по потоку приблизительно с одной и той же скоростью и одинаковой частотой колебаний. Численные следовые отпечатки (не показаны) практически идентичны. Таким образом, как ячеистая структура, так и размер ячеек не чувствительны к используемому временному шагу.

4.5. Разрешающая способность сетки

Для расчетов всегда предпочтительнее иметь мелкую сетку, однако на практике разрешающая способность сетки ограничена строгими пределами, обусловленными имеющимися

вычислительными ресурсами. В настоящей работе вопрос о разрешающей способности сетки был частично решен путем исследования влияния предэкспоненциального множителя K при фиксированной сетке. Для полноты картины далее этот вопрос исследуется путем изменения разрешающей способности сетки в реальных расчетах. При $K = 2000$ используются три сетки (301×101 , 501×201 , 901×401) с шагом 0.01, 0.005 и 0.0025 (см. табл. 2). Для сведения, длины зон полупревращения и тепловыделения в этом случае составляют 0.061 и 0.114 соответственно.

На рис. 18 представлены структуры фронта детонационной волны, полученные при использовании различных сеток. С увеличением разрешения сетки скачки уплотнения становятся тоньше, а искривление ведущего скачка уплотнения возрастает. Другие характерные

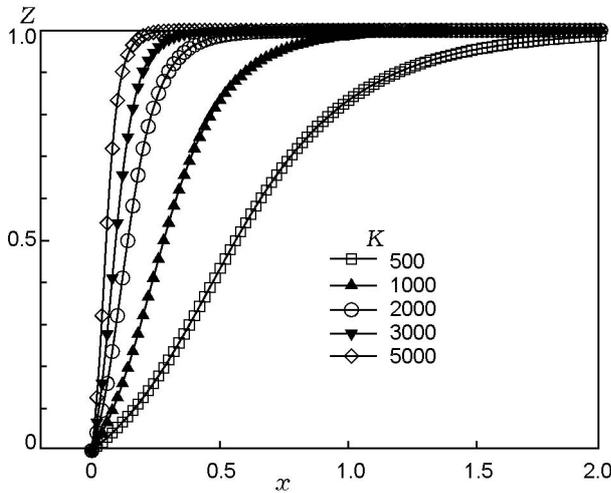


Рис. 20. Распределение реакционной переменной для детонационных волн ЗНД при различных значениях предэкспоненциального множителя (умеренно-неустойчивая детонация, $\theta = 6.9$, $\Delta x = 0.01$)

особенности изменяются слабо. На рис. 19 приведены численные следовые отпечатки. Число ячеек, приходящихся на ширину канала, остается равным 1.5 для всех трех сеток, что указывает на достижение размера ячейки, не зависящего от типа сетки.

5. УМЕРЕННО-НЕУСТОЙЧИВАЯ ДЕТОНАЦИЯ

Рассматривается умеренно-неустойчивая детонация с приведенной температурой активации $\theta = 6.9$. На рис. 20 показано распределение реакционной переменной Z для детонационных волн ЗНД, полученных при использовании в начальных одномерных расчетах значений $K = 500 \div 5\,000$. Длина расчетной области равнялась 2.0, шаг сетки $\Delta x = 0.01$. Реакция горения быстро протекает за пиком Неймана с реализацией узкой индукционной зоны. При $K > 20\,000$ шаг сетки 0.01 становится слишком

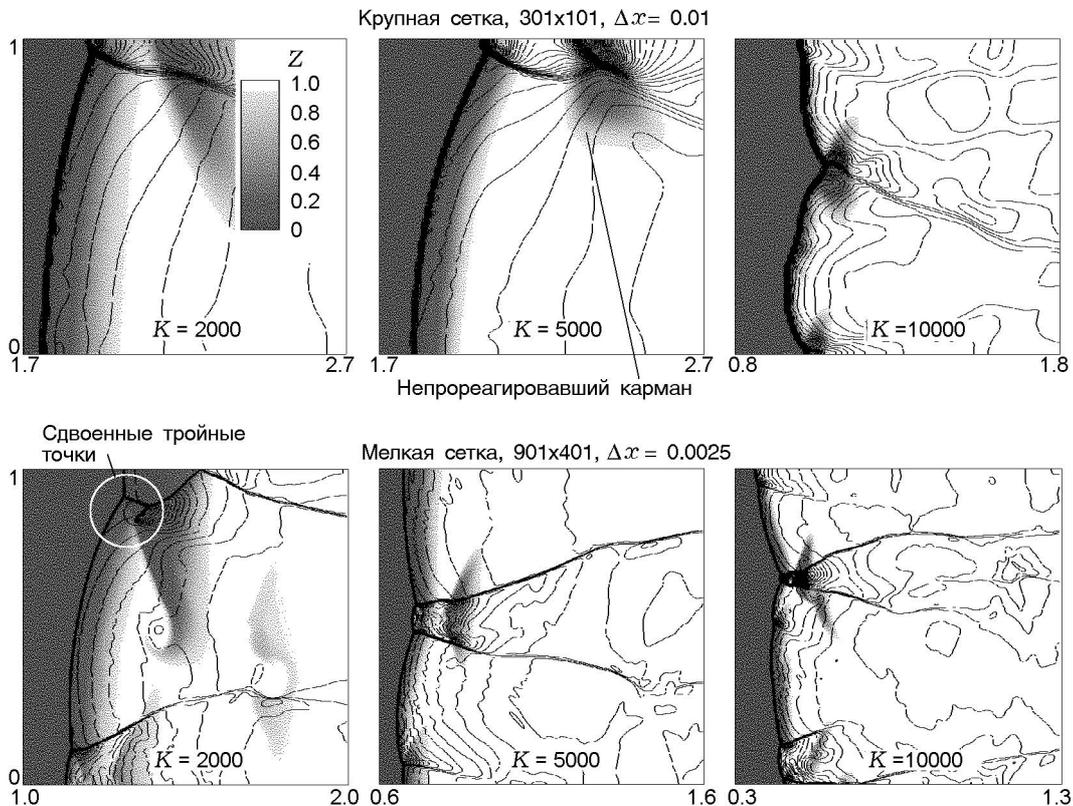


Рис. 21. Эпюры давления (линии) и распределения реакционной переменной Z , иллюстрирующие структуру волнового фронта в случае умеренно-неустойчивой детонации при использовании сеток 301×101 и 901×401

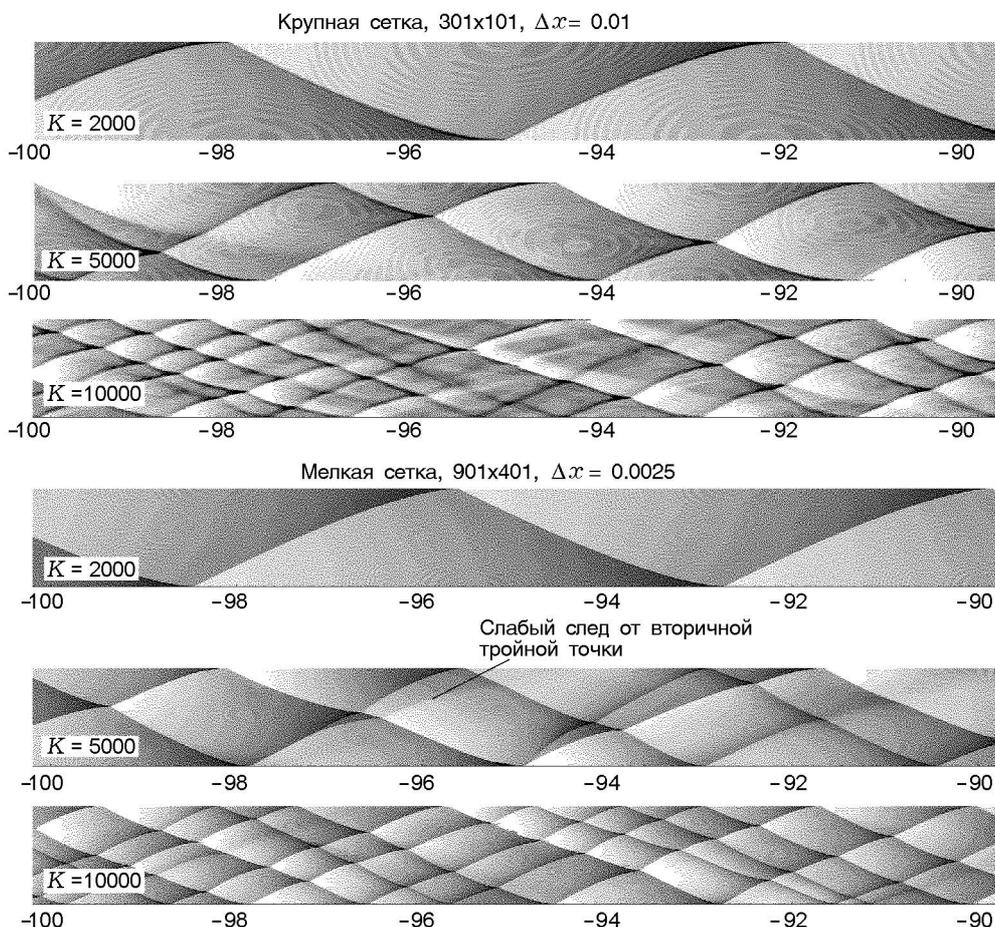


Рис. 22. Численные следовые отпечатки в случае умеренно-неустойчивой детонационной волны при использовании сеток 301×101 и 901×401

большим, чтобы разрешить структуру детонационной волны.

На рис. 21 представлена структура фронта детонационной волны для различных значений предэкспоненциального множителя, полученная на основе двумерных расчетов с использованием сеток 301×101 и 901×401 . В отличие от слабонеустойчивой детонации, структура волнового фронта становится более сложной и нерегулярной. Появление непрореагировавших карманов достаточно заметно, на что указывают изолированные темные области позади фронта ведущей ударной волны. Аналогичное явление наблюдалось экспериментально в работе [18]. Использование двух сеток различного разрешения позволяет обнаружить отличия в структуре волнового фронта. При более мелкой сетке удается разрешить больше деталей структуры, например сдвоенные тройные точки, описанные в работах [11, 12].

На рис. 22 показаны соответствующие численные следовые отпечатки. Из-за увеличения энергии активации ячеистая структура становится менее регулярной по сравнению со случаем слабонеустойчивой детонации. При этом ячейки распределены неравномерно, а отношение максимального размера ячейки к минимальному почти достигает 2.0. Кроме того, как видно на численных следовых отпечатках, в случае более мелкой сетки вторичная тройная точка, которую не удается разрешить с более крупной сеткой, оставляет дополнительный относительно слабый след.

6. СИЛЬНОНЕУСТОЙЧИВАЯ ДЕТОНАЦИЯ

Рассматривается сильнонеустойчивая детонация с приведенной температурой активации $\theta = 12.7$. На рис. 23 представлены распределения реакционной переменной Z для детонационных волн ЗНД, полученные при использо-

вании в начальных одномерных расчетах сетки с шагом $\Delta x = 0.01$ при $K = 10^5 \div 10^6$. Длина индукционной зоны в несколько раз больше зоны тепловыделения, поэтому за пиком Неймана на кривой $Z(x)$ реализуется плоский участок, как это видно на кривой при $K = 10^5$.

Со всеми тремя сетками были проведены двумерные расчеты. Обнаружено, что в широком диапазоне значений K ячеистые структуры не могут быть разрешены при использовании сеток 301×101 и 501×201 из-за большой нерегулярности сильнонеустойчивой детонации. Поэтому результаты представлены только для сетки 901×401 . На рис. 24 показана структура волнового фронта при различных значениях предэкспоненциального множителя. Сильнонеустойчивая детонация имеет значительно более выраженную нерегулярную структуру волнового фронта по сравнению со слабо- и умеренно-неустойчивой детонацией. Ведущий скачок уплотнения становится сильно «морщинистым». Этот эффект также наблюдался экспериментально в работе [18]. Высокое значение энергии активации делает реакцию более чувствительной к температуре потока. Поэтому длины реакционных зон за падающей ударной волной и маховской ножкой существенно отличаются, что приводит к широкому спектру характерных масштабов длины внутри структуры волнового фронта. Кроме того, за фронтальной реакционной зоной наблюдается много непрореагировавших карманов.

Вследствие сильнонеустойчивой структуры волнового фронта, численные следовые отпечатки, представленные на рис. 25, имеют выраженную нерегулярную структуру. Максимальный размер ячейки приблизительно в 20

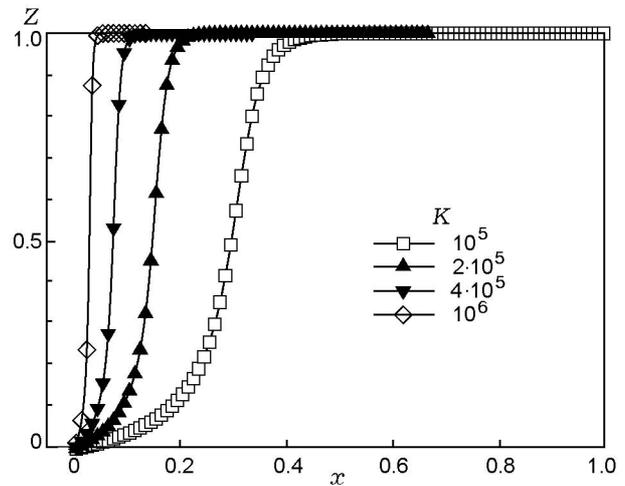


Рис. 23. Распределение реакционной переменной для детонационной волны ЗНД при различных значениях предэкспоненциального множителя (сильнонеустойчивая детонация, $\theta = 12.7$, $\Delta x = 0.01$)

раз больше, чем минимальный размер ячейки, что сопоставимо с экспериментально наблюдавшимися отношениями максимального размера к минимальному, равными $30 \div 40$ [18].

7. ТРЕБОВАНИЕ К РАЗРЕШАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ СЕТКИ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ЯЧЕИСТОЙ СТРУКТУРЫ

В табл. 4 для каждой сетки приведены максимальные возможные значения предэкспоненциального множителя K , при которых структура детонационных ячеек может быть разрешена. В рамках подхода к вопросу масштабирования, обсуждавшемуся в § 1.3, вы-

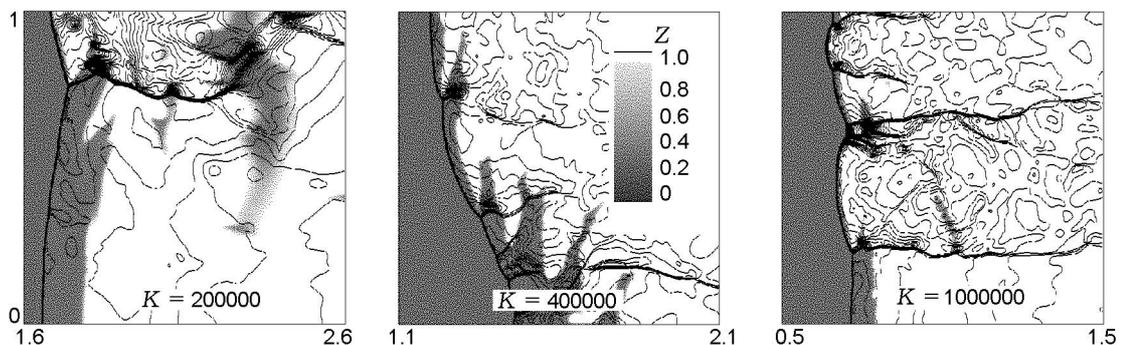


Рис. 24. Эпюры давления (линии) и распределения реакционной переменной Z , иллюстрирующие структуру волнового фронта в случае сильнонеустойчивой детонации (сетка 901×401 , $\Delta x = 0.0025$)

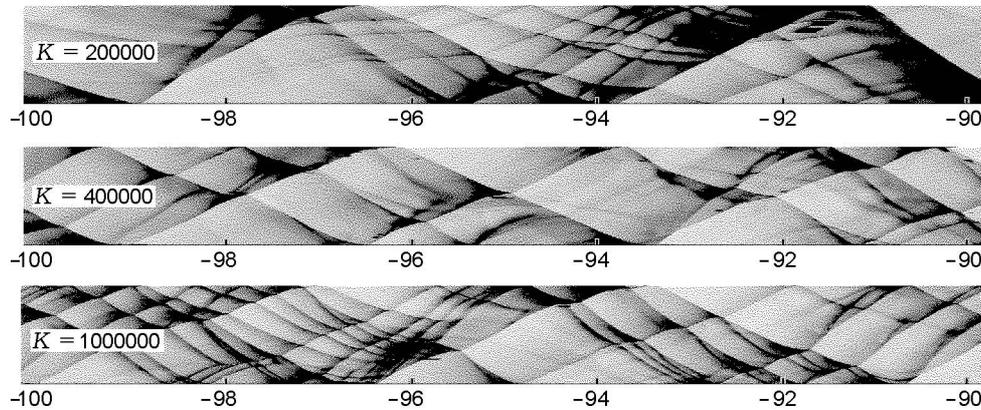


Рис. 25. Численные следовые отпечатки в случае сильнонеустойчивой детонационной волны (сетка 901×401 , $\Delta x = 0.0025$)

Таблица 4

Максимальные возможные значения предэкспоненциального множителя K , при которых структура детонационных ячеек может быть разрешена, и число точек сетки, приходящихся на длину зон полупревращения и тепловыделения стационарной детонационной волны ЗНД

Сетка	Вариант	$L_{1/2}/\Delta x_{\min}$	$L_{hr}/\Delta x_{\min}$
Слабонеустойчивая детонация ($\theta = 5.2$)			
301×101 ($\Delta x_{\min} = \Delta y = 0.01$)	$K = 5\,000$ ($L_{1/2} = 0.024$, $L_{hr} = 0.046$)	2.4	4.6
501×201 ($\Delta x_{\min} = \Delta y = 0.005$)	$K = 10\,000$ ($L_{1/2} = 0.012$, $L_{hr} = 0.023$)	2.4	4.6
901×401 ($\Delta x_{\min} = \Delta y = 0.0025$)	$K = 20\,000$ ($L_{1/2} = 0.006$, $L_{hr} = 0.012$)	2.5	4.8
Умеренно-неустойчивая детонация ($\theta = 6.9$)			
301×101 ($\Delta x_{\min} = \Delta y = 0.01$)	$K = 10\,000$ ($L_{1/2} = 0.028$, $L_{hr} = 0.044$)	2.8	4.5
501×201 ($\Delta x_{\min} = \Delta y = 0.005$)	$K = 20\,000$ ($L_{1/2} = 0.014$, $L_{hr} = 0.022$)	2.8	4.5
901×401 ($\Delta x_{\min} = \Delta y = 0.0025$)	$K = 40\,000$ ($L_{1/2} = 0.007$, $L_{hr} = 0.011$)	2.8	4.5
Сильнонеустойчивая детонация ($\theta = 12.7$)			
301×101 ($\Delta x_{\min} = \Delta y = 0.01$)	Ячейчатая структура не получена		
501×201 ($\Delta x_{\min} = \Delta y = 0.005$)	$K = 400\,000$ ($L_{1/2} = 0.074$, $L_{hr} = 0.030$)	14.8	6.0
901×401 ($\Delta x_{\min} = \Delta y = 0.0025$)	$K = 1\,000\,000$ ($L_{1/2} = 0.030$, $L_{hr} = 0.013$)	11.8	5.2

бранная при таком значении K сетка является самой редкой сеткой, при которой можно разрешить ячейчатую структуру. В таблице также приведено число точек сетки, приходящихся на длину зон полупревращения и тепловыделения соответствующей стационарной детонаци-

онной волны ЗНД. В случае слабо- и умеренно-неустойчивой детонации на длину зоны полупревращения приходится около 3 точек сетки, тогда как в случае сильнонеустойчивой детонации число точек возрастает до $12 \div 15$. С другой стороны, число точек сетки в зоне тепловы-

деления не зависит от степени неустойчивости и составляет примерно 5. Становится ясно, что при формулировании требования к разрешающей способности сетки ориентиром может служить скорее число ее точек в зоне тепловыделения, чем в зоне полупревращения, как часто использовалось ранее. Основываясь на полученных результатах, можно сформулировать общее правило: для корректного моделирования структуры детонационных ячеек необходимо, чтобы на зону тепловыделения соответствующей стационарной детонационной волны ЗНД приходилось минимум 5 точек сетки.

ВЫВОДЫ

Исследованы различные численные аспекты моделирования ячеистой структуры для слабо-, умеренно- и сильнонеустойчивой детонации. Используемый подход основан на рассмотрении двумерных уравнений сохранения для течения невязкой жидкости с одностадийной химической реакцией. Ячеистые структуры были получены с помощью численных следовых отпечатков. Детально изучены структура волнового фронта и динамика его изменения. Проведено систематическое исследование влияния предэкспоненциального множителя, шага сетки, временного шага, длины расчетной области и граничного условия на выходе на ячеистую структуру и размер ячеек. Впервые предложено общее правило для выбора разрешающей способности сетки: для корректного моделирования структуры детонационных ячеек необходимо, чтобы минимум 5 точек сетки приходилось на зону тепловыделения соответствующей стационарной детонационной волны ЗНД. Результаты работы указывают на то, что получаемые в расчетах размеры ячеек нечувствительны ни к временному шагу, ни к шагу сетки. Длина расчетной области и граничное условие на выходе также оказывают незначительное влияние, если детонационная волна может стабилизироваться внутри расчетной области.

Работа выполнена при поддержке Управления военно-морских исследований (Office of Naval Research, грант № N00014-05-1-0159). Первый автор был также поддержан Корейским исследовательским фондом (финансируемым корейским правительством MOEHRD) (грант KRF-2006-521-D00061).

ЛИТЕРАТУРА

1. **Fickett W., Davis W. C.** Detonation Theory and Experiment. New York: Dover Publications, 2000.
2. **Oran E. S., Boris J. P., Young T., Flanagan M., Burks T., Picone M.** Numerical simulations of detonations in hydrogen-air and methane-air mixtures // Eighteenth Intern. Symp. on Combustion. 1981. P. 1641–1649.
3. **Taki S., Fujiwara T.** Numerical Simulation of Triple Shock Behavior of Gaseous Detonation // Ibid. P. 1671–1681.
4. **Kailasanath K., Oran E. S., Boris J. P., Young T. R.** Determination of detonation cell-size and the role of transverse-waves in two-dimensional detonations // Combust. Flame. 1985. V. 61, N 3. P. 199–209.
5. **Bourlioux A., Majda A. J.** Theoretical and numerical structure for unstable two-dimensional detonations // Combust. Flame. 1992. V. 90, N 3–4. P. 211–229.
6. **Oran E. S., Weber J. W., Stefaniw E. I., Lefebvre M. H., Anderson J. D.** A numerical study of a two-dimensional H_2-O_2-Ar detonation using a detailed chemical reaction model // Combust. Flame. 1998. V. 113, N 1–2. P. 147–163.
7. **Gamezo V. N., Desbordes D.** Formation and evolution of two-dimensional cellular detonations // Combust. Flame. 1999. V. 116, N 1–2. P. 154–165.
8. **Singh S., Powers J. M., Paolucci S.** Detonation solutions from reactive navier-stokes equations // AIAA Paper N 1999-0966. 1999.
9. **Nikolic M., Williams D. N., Bauwens L.** Detonation cell sizes — A numerical study // AIAA Paper N 1999-0967. 1999.
10. **Gavrikov A. I., Efimenko A. A., Dorofeev S. B.** A model for detonation cell size prediction from chemical kinetics // Combust. Flame. 2000. V. 120, N 1–2. P. 19–33.
11. **Sharpe G. J.** Transverse waves in numerical simulations of cellular detonations // J. Fluid Mech. 2001. V. 447. P. 31–51.
12. **Hu X. Y., Khoo B. C., Zhang D. L., Jiang Z. L.** The cellular structure of a two-dimensional $H_2/O_2/Ar$ detonation wave // Combust. Theory and Modelling. 2004. V. 8, N 2. P. 339–359.
13. **Liang Z., Bauwens L.** Cell structure and stability of detonations with a pressure-dependent chain-branching reaction rate model // Combust. Theory and Modelling. 2005. V. 9, N 1. P. 93–112.
14. **Pintgen F., Eckett C. A., Austin J. M., Shepherd J. E.** Direct observations of reaction zone structure in propagating detonations // Combust. Flame. 2003. V. 133, N 3. P. 221–229.
15. **Choi J. Y., Kim D. W., Jeung I. S., Ma F. H., Yang V.** Cell-like structure of unstable oblique detonation wave from high-resolution

- numerical simulation // Proc. of the Combust. Inst. 2007. V. 31, N 2. P. 2473–2480.
16. **Choi J. Y., Jeung I. S., Yoon Y.** Computational fluid dynamics algorithms for unsteady shock-induced combustion. Pt 1: Validation // AIAA Journal. 2000. V. 38, N 7. P. 1179–1187.
17. **Choi J. Y., Jeung I. S., Yoon Y.** Computational fluid dynamics algorithms for unsteady shock-induced combustion. Pt 2: Comparison // Ibid. P. 1188–1195.
18. **Austin J. M., Pintgen F., Shepherd J. E.** Reaction zones in highly unstable detonations // Proc. of the Combust. Inst. 2005. V. 30, N 2. P. 1849–1858.

Поступила в редакцию 3/VII 2007 г.
