

**Схема КАБАРЕ с одностадийной необратимой химической кинетикой для
моделирования детонационных процессов**

А.В. Данилин¹

¹Институт Проблем Безопасного Развития Атомной Энергетики РАН

В настоящей работе предложен алгоритм на основе балансно-характеристического подхода КАБАРЕ [1-3] для моделирования движения реагирующих газовых смесей с необратимой одностадийной химической кинетикой. Движение горючей смеси описывается уравнениями движения [4]:

$$\frac{\partial Z\rho}{\partial t} + \frac{\partial Z\rho u}{\partial x} = -AZ\rho^2 \exp(-T_a/T), \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + p}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial u(\rho E + p)}{\partial x} = 0, \quad (2)$$

где Z – массовая доля топлива в смеси, ρ – плотность горючей смеси, u – скорость, $p = (\gamma - 1)\rho C_V T$ – давление, γ – показатель адиабаты, C_V – теплоемкость при постоянном объеме, $E = u^2 / 2 + C_V T + ZQ$ – сумма полной и скрытой тепловой энергии смеси, Q – тепловой эффект реакции, A – константа реакции, T_a – температура активации, $\exp(-T_a/T)$ – множитель Аррениуса.

Левые части уравнений движения аппроксимированы при помощи подхода КАБАРЕ, обладающего консервативностью и вторым порядком аппроксимации на гладких решениях. В алгоритме используются два типа переменных – консервативные и потоковые, обозначаемые полуцелыми $i+1/2$ и целыми i индексами соответственно. Правые части уравнений движения (1), (2) аппроксимированы с использованием параметра, позволяющего изменять порядок точности между значениями 1 и 2. В схеме используются три временных слоя – начальный, полуцелый и новый, обозначаемые как n , $n+1/2$ и $n+1$. Алгоритм выполнен без разделения по физическим процессам: плотности и скорости на новом временном слое разрешаются явно, доля горючей смеси и температуры – неявно. Результирующая дискретизация уравнений движения имеет следующий вид (3):

$$\frac{U_{i+1/2}^{n+1} - U_{i+1/2}^n}{\tau_n} + \frac{F_{i+1}^n - F_i^n}{2\Delta x_{i+1/2}} + \frac{F_{i+1}^{n+1} - F_i^{n+1}}{2\Delta x_{i+1/2}} = \frac{1}{2}((1-\sigma)f_{i+1/2}^n + f_{i+1/2}^{n+1/2} + \sigma f_{i+1/2}^{n+1}), \quad (3)$$

где τ_n – временной шаг, $\Delta x_{i+1/2}$ – пространственный шаг, $U^T = (Z\rho, \rho, \rho u, \rho E)$ – вектор консервативных переменных, $F^T = (Z\rho u, \rho u, \rho u^2 + p, u(\rho E + p))$ – вектор потоковых переменных, $f = (-AZ\rho^2 \exp(-T_a/T), 0, 0, 0)$ – вектор правых частей, $\sigma \in (0, 1]$ – параметр аппроксимации

правой части. Значение $\sigma = 1/2$ обеспечивает второй порядок аппроксимации правой части алгоритма, остальные значения - первый.

Для тестирования алгоритма использовалась закрытая с обеих сторон одномерная расчетная область длиной 0.8 м, разбитая на 160000 расчетных ячеек. В качестве среды взята условная ацетилено-воздушная смесь при нормальных условиях со свойствами газа и параметрами химической кинетики, взятыми из работы [4]. Инициализация детонации производится заданием высокой температуры и давления в области длиной 0.5 см у левого конца расчетной области.

В ходе расчетов показано, что скорость полученной детонации с высокой точностью соответствует режиму Чепмена-Жуге. Профиль полученного течения, за исключением характерного повышения величин на химическом пике, соответствует аналитическому решению для течения с тепловыделением на разрыве [5]. Область химических реакций разрешается десятью пространственными ячейками. Также показано, что варьирование порядка аппроксимации правых частей уравнений движения не оказывает существенного влияния на характер течения.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-31-00401.

Литература

1. Головизнин В.М., Самарский А.А. Разностная аппроксимация конвективного переноса с пространственным расщеплением временной производной. // Математическое моделирование. – 1998. – Т.10, №1. – С. 86-100.
2. Головизнин В.М., Самарский А.А. Некоторые свойства разностной схемы Кабаре // Математическое моделирование. – 1998. – Т. 10, №1. – С. 101-116.
3. Головизнин В.М., Карабасов С.А. Нелинейная коррекция схемы Кабаре // Математическое моделирование. – 1998. – Т.10, №12. – С. 107-123.
4. Лопато А.И., Уткин П.С. Математическое моделирование пульсирующей волны детонации с использованием ENO-схем различных // Компьютерные исследования и моделирование. – 2014 – Т. 6, № 5 – С. 643–653.
5. Райзер Ю.П. Введение в гидрогазодинамику и теорию ударных волн для физиков – Долгопрудный: Интеллект, 2011. 431 с.