

УДК 536.46

КИНЕТИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ НЕСТАЦИОНАРНОЙ ДЕТОНАЦИИ С УЧЕТОМ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ НЕРАВНОВЕСНОСТИ

C. Lin¹, K. H. Luo²¹Университет Сунь Ятсена, Чжухай 519082, Китай, linchd3@mail.sysu.edu.cn²Университетский колледж Лондона, Лондон WC1E 7JE, Великобритания, K.Luo@ucl.ac.uk

Благодаря своей мезоскопической природе, дискретный метод Больцмана может применяться для исследования нестационарной детонации с существенной гидродинамической и термодинамической неравновесностью. В работе применяется эффективный и точный метод для анализа влияния амплитуды и длины волны начального возмущения, а также теплоты сгорания на развитие нестационарной детонации в условиях неравновесности. Показано, что начальная амплитуда возмущения влияет только на начальную стадию нестационарной детонации, которая становится автомодельной, с небольшими фазовыми отличиями на более поздних стадиях. При малых длинах волны возмущения давление растет быстрее в начальный период времени, но вскоре уменьшается до малых значений. При увеличении химического тепловыделения давление и его осцилляции возрастают, неравновесные эффекты усиливаются, а период осцилляций уменьшается. При малых длине волны или химическом тепловыделении поперечные волны и ячейки не образуются, а двумерная нестационарная детонация трансформируется в одномерную.

Ключевые слова: нестационарная детонация, термодинамическая неравновесность.

DOI 10.15372/FGV20200407

ВВЕДЕНИЕ

Детонация представляет собой сжимаемое реагирующее течение, вызванное головной ударной волной, за которой происходит бурное выделение тепла в зоне химических реакций [1, 2]. Ударная волна, связанная с этой зоной, формирует детонационную, распространяющуюся со сверхзвуковой скоростью. Детонация занимает важное место в некоторых отраслях промышленности и в вопросах безопасности, например в горной промышленности, в производствах, связанных с возможностью развития газовых взрывов, в детонационных двигателях и т. д. Поэтому уже более века ее подробно изучают экспериментальными [3–5], аналитическими [6, 7] и численными методами [8–10]. Последние, в силу быстрого развития вычислительных технологий, становятся все более важным инструментом исследования. В то же время точное и надежное воспроизведение детонации по-прежнему весьма затруднительно,

поскольку детонация включает в себя широкий круг физико-химических явлений, взаимодействует с существенно разными временными и пространственными масштабами, содержит изменяющиеся фронтальные зоны, в которых как гидродинамические, так и термодинамические неравновесные эффекты часто играют значительную роль [11–13].

Уравнение Больцмана, будучи ключевым в кинетической теории газов, описывает сложные течения с большой степенью неравновесности. Однако уравнение Больцмана трудно поддается численному решению в случае неравновесности из-за своей сложности как в интегральной, так и в дифференциальной форме. Существуют два основных подхода к решению. Первый представлен стохастическими методами, включая хорошо известный метод Монте-Карло [14]. К недостаткам такого подхода относятся медленная сходимость и наличие осцилляций в решении. Второй подход является детерминированным и включает в себя дискретную газокинетическую схему [15], решеточный метод Больцмана [16, 17], дискретный метод Больцмана (DBM) [18–28] и др.

В последние годы применение метода DBM привело к значительному успеху в расче-

© Lin C.¹, Luo K. H.², 2020.

¹Sino-French Institute of Nuclear Engineering and Technology, Sun Yat-sen University, Zhuhai 519082, China. ²Department of Mechanical Engineering, University College London, Torrington Place, London WC1E 7JE, United Kingdom.

тах теплового разделения фаз [18, 19], гидродинамической неустойчивости [20–22], горения и детонации [23–28] и других задач. При первом применении DBM для детонации, выполненном в [18], использовалась гибридная конечно-разностная схема. Движение сплошной среды описывалось дискретным уравнением Больцмана, в то время как химические реакции — моделью Ли — Тарвера [29]. В [25] для расчета горения и детонации нами был предложен метод DBM с двойной функцией распределения, в котором одно множество дискретных функций распределения используется для реагентов, а второе — для продуктов. В [27] для расчета детонации был разработан метод DBM с множественными временами релаксации, в котором как химические реакции, так и течение газа описываются дискретными уравнениями Больцмана.

В статье [28], недавно опубликованной в трудах 9-го Международного семинара по опасностям пожаров и взрывов, метод DBM был подвержен первичной адаптации для расчета гидродинамической и термодинамической неравновесности. В данной работе мы развиваем этот подход для более детального исследования нестационарной детонации. Дается введение в метод DBM для реагирующей среды, и приводится описание трех методов аппроксимации реакционных членов. Затем метод DBM применяется для изучения влияния амплитуды возмущений, длины волны и химического тепловыделения на нестационарную детонацию с учетом неравновесных эффектов.

1. ДИСКРЕТНЫЙ МЕТОД БОЛЬЦМАНА ДЛЯ РЕАГИРУЮЩИХ ПОТОКОВ

Дискретный метод Больцмана основан на дискретизации уравнения Больцмана в пространстве скоростей. Все физические параметры, включая плотность, импульс и энергию, описываются одними и теми же дискретными функциями распределения f_i . При этом химическая реакция описывается специальным слагаемым R_i в правой части дискретного уравнения Больцмана:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla f_i = \frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{eq}) + R_i, \quad (1)$$

где t — время реагирования, τ — время релаксации, f_i^{eq} — дискретная функция распределения, \mathbf{v}_i — дискретная скорость.

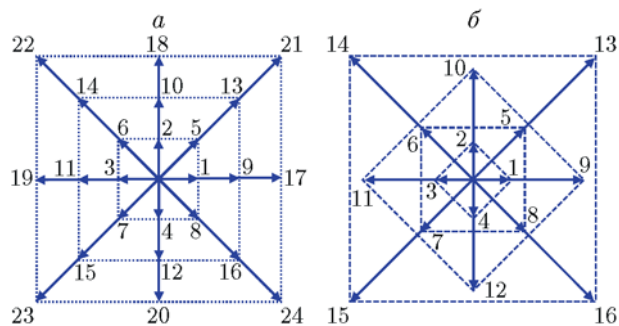


Рис. 1. Шаблоны (a — D2V24, b — D2V16) дискретных скоростей

На рис. 1 показаны два двумерных шаблона дискретных скоростей — с двадцатью (D2V24 [24]) и шестнадцатью (D2V16 [25, 26]) скоростями. Формула для D2V24 имеет вид [24]

$$\mathbf{v}_i = \begin{cases} v_a \bar{\mathbf{v}}_i, & 1 \leq i \leq 8, \\ v_b \bar{\mathbf{v}}_{i-8}, & 9 \leq i \leq 16, \\ v_c \bar{\mathbf{v}}_{i-16}, & 17 \leq i \leq 24, \end{cases} \quad (2)$$

где

$$\bar{\mathbf{v}}_i = \begin{cases} \text{сус: } (\pm 1, 0), & 1 \leq i \leq 4, \\ \text{сус: } (\pm 1, \pm 1), & 5 \leq i \leq 8. \end{cases} \quad (3)$$

Формула для D2V16 имеет вид [25, 26]

$$\mathbf{v}_i = \begin{cases} \text{сус: } (\pm v_a, 0), & i = 1 \div 4, \\ \text{сус: } (\pm v_b, \pm v_b), & i = 5 \div 8, \\ \text{сус: } (\pm v_c, 0), & i = 9 \div 12, \\ \text{сус: } (\pm v_d, \pm v_d), & i = 13 \div 16, \end{cases} \quad (4)$$

где сус обозначает циклическую перестановку, v_a, v_b, v_c, v_d — калибровочные параметры.

Для обеспечения согласованности с уравнениями Навье — Стокса в гидродинамическом пределе требуется выполнение следующих соотношений для моментов:

$$\iint f_i^{eq} \Psi d\mathbf{v} d\eta = \sum_i f_i^{eq} \Psi_i, \quad (5)$$

$$\iint R \Phi d\mathbf{v} d\eta = \sum_i R_i \Phi_i, \quad (6)$$

в которых в соответствии с [24]

$$f_i^{eq} = \frac{\rho}{2\pi T} \left(\frac{1}{2\pi IT} \right)^{1/2} \times$$

$$\times \exp \left[-\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{u})}{2T} - \frac{\eta^2}{2IT} \right], \quad (7)$$

$$R = \frac{-(1+D)IT + I(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 + \eta^2}{2IT^2} f^{eq} T', \quad (8)$$

для $\Psi = 1, \mathbf{v}, (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \eta^2), \mathbf{v}\mathbf{v}, (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \eta^2)\mathbf{v}, \mathbf{v}\mathbf{v}\mathbf{v}, (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \eta^2)\mathbf{v}\mathbf{v}; \Psi_i = 1, \mathbf{v}_i, (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i + \eta_i^2), \mathbf{v}_i\mathbf{v}_i, (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i + \eta_i^2)\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_i\mathbf{v}_i\mathbf{v}_i, (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i + \eta_i^2)\mathbf{v}_i\mathbf{v}_i; \Phi = 1, \mathbf{v}, (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \eta^2), \mathbf{v}\mathbf{v}; \Phi_i = 1, \mathbf{v}_i, (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i + \eta_i^2), \mathbf{v}_i\mathbf{v}_i$. Здесь ρ — плотность, \mathbf{u} — скорость, T — температура, $T' = 2Q\lambda'/(D+I)$ — скорость изменения температуры, обусловленного химическими реакциями, Q — теплота сгорания единицы массы горючего, λ — массовая доля продуктов, $D = 2$ — количество трансляционных степеней свободы, I — дополнительные вибрационные и вращательные степени свободы, η и η_i — вибрационная и вращательная энергия. Для шаблона D2V16 имеют место равенства $\eta_i = \eta_a, \eta_b, \eta_c, \eta_d$ при $1 \leq i \leq 4, 5 \leq i \leq 8, 9 \leq i \leq 12$ и $13 \leq i \leq 16$ соответственно [25, 26]. Для шаблона D2V24 выполняются равенства $\eta_i = \eta_a, \eta_b, \eta_c$ при $1 \leq i \leq 8, 9 \leq i \leq 16$ и $17 \leq i \leq 24$ соответственно [24].

Напомним, что методом DBM можно описывать как гидродинамическую, так и термодинамическую неустойчивость [18–28]. Введем в рассмотрение степень неравновесности в виде $\Delta = \sqrt{\sum_i \Delta_i^2}$, где $\Delta_1 = \sum_i f_i^{neq}$, $\Delta_2 = \sum_i f_i^{neq} v_{ix}$, $\Delta_3 = \sum_i f_i^{neq} v_{iy}$, $\Delta_4 = \sum_i f_i^{neq} (v_i^2 + \eta_i^2)$, $\Delta_5 = \sum_i f_i^{neq} v_{ix}^2$, $\Delta_6 = \sum_i f_i^{neq} v_{ix} v_{iy}$, $\Delta_7 = \sum_i f_i^{neq} v_{iy}^2$, $\Delta_8 = \sum_i f_i^{neq} (v_i^2 + \eta_i^2) v_{ix}$, $\Delta_9 = \sum_i f_i^{neq} (v_i^2 + \eta_i^2) v_{iy}$, $\Delta_{10} = \sum_i f_i^{neq} v_{ix}^3$, $\Delta_{11} = \sum_i f_i^{neq} v_{ix}^2 v_{iy}$, $\Delta_{12} = \sum_i f_i^{neq} v_{ix} v_{iy}^2$, $\Delta_{13} = \sum_i f_i^{neq} v_{iy}^3$, $\Delta_{14} = \sum_i f_i^{neq} (v_i^2 + \eta_i^2) v_{ix}^2$, $\Delta_{15} = \sum_i (v_i^2 + \eta_i^2) v_{ix} v_{iy}$, $\Delta_{16} = \sum_i f_i^{neq} (v_i^2 + \eta_i^2) v_{iy}^2$ и $f_i^{neq} = (f_i - f_i^{eq})$. Отметим, что $\Delta_1 = 0$ для сохранения массы, $\Delta_2 = \Delta_3 = 0$ для сохранения импульса и $\Delta_4 = 0$ для сохранения энергии. При этом Δ_i может быть не равно нулю для $i > 4$ в неравновесном состоянии.

В упрощенном описании химической реакции используют следующие допущения: химическая реакция необратима и экзотермична; электронное возбуждение, ионизация и излучение не рассматриваются; химическая реакция протекает намного медленнее, чем проис-

ходит релаксация к равновесию, но значительно быстрее, чем изменяется поток [12]. В данной работе используется двухступенчатая реакционная схема:

$$\xi' = H k_I \exp[E_I(T_s^{-1} - T^{-1})], \quad (9)$$

$$\lambda' = (1 - H) k_R (1 - \lambda) \exp(-E_R T^{-1}), \quad (10)$$

которая имитирует особенности реакций ветвления цепи [30]. Здесь ξ — глубина превращения, T_s — начальная температура позади скачка, E_I — эффективная энергия активации реакции, управляющей периодом индукции и воспламенением, k_I — предэкспоненциальный множитель реакции воспламенения (тепловой эффект равен нулю), $H = H(\xi)$ — ступенчатая функция ($H = 1$ при $\xi < 1$ и $H = 0$ при $\xi \geq 1$), E_R и k_R — энергия активации и предэкспоненциальный множитель реакции, в которой происходит тепловыделение.

Вычисление реакционных слагаемых является важным этапом реализации метода DBM для реагирующих потоков. Рассмотрим три способа записи соответствующих выражений.

I. Наиболее простой способ заключается в дискретизации реакционных слагаемых в пространстве скоростей посредством замены в уравнении (8) скорости \mathbf{v} , параметра η и равновесной функции тепловыделения f^{eq} их дискретными аналогами $\mathbf{v}_i, \eta_i, f_i^{eq}$. В результате получается следующее дискретное выражение для реакционного слагаемого:

$$R_i = \frac{-(1+D)IT + I|\mathbf{v}_i - \mathbf{u}|^2 + \eta_i^2}{2IT^2} f_i^{eq} T'. \quad (11)$$

Чтобы выражение (11) удовлетворяло моментным соотношениям (6), дискретные равновесные функции распределения f_i^{eq} должны удовлетворять равенствам (5) с $\Psi = 1, \mathbf{v}, (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \eta^2), \mathbf{v}\mathbf{v}, (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \eta^2)\mathbf{v}, \mathbf{v}\mathbf{v}\mathbf{v}, (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \eta^2)\mathbf{v}\mathbf{v}, \eta^2\mathbf{v}\mathbf{v}, (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \eta^2)\eta^2, (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \eta^2)\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}\mathbf{v}, (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \eta^2)\eta^2\mathbf{v}$ и, соответственно, с $\Psi_i = 1, \mathbf{v}_i, (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i + \eta_i^2), \mathbf{v}_i\mathbf{v}_i, (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i + \eta_i^2)\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_i\mathbf{v}_i\mathbf{v}_i, (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i + \eta_i^2)\mathbf{v}_i\mathbf{v}_i, \eta_i^2\mathbf{v}_i\mathbf{v}_i, (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i + \eta_i^2)\eta_i^2, (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i + \eta_i^2)\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i\mathbf{v}_i, (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i + \eta_i^2)\eta_i^2\mathbf{v}_i$. Приведенные соотношения также выполняются на шаблоне D2V24 [24].

II. Этот способ заключается в вычислении реакционных слагаемых на основе их физического определения [25, 26]. При этом реак-

ционное слагаемое интерпретируется как скорость вызванного химической реакцией изменения функции распределения:

$$R_i = \frac{1}{\tau} (f_i^{*eq} - f_i^{eq}), \quad (12)$$

где $f_i^{eq} = (\rho, \mathbf{u}, T)$ и $f_i^{*eq} = (\rho, \mathbf{u}, T^*)$ — дискретные равновесные функции распределения соответственно до и после химической реакции. Поскольку химическая реакция протекает значительно быстрее, чем меняется поток [12], ни плотность, ни скорость потока не меняются за относительно малое время протекания реакции, в то время как температура меняется за счет тепловыделения: $T^* = T + \tau T'$.

III. Прямой путь расчета реакционных слагаемых требует обращения матрицы [27, 28]. Запишем равенство (6) в виде

$$\mathbf{M}_R = \mathbf{C}\mathbf{R}, \quad (13)$$

где $\mathbf{R} = (R_1, R_2, \dots, R_{16})^T$ — множество дискретных реакционных слагаемых, $\mathbf{M}_R = (M_{R1}, M_{R2}, \dots, M_{R16})^T$ — множество кинетических моментов, \mathbf{C} — квадратная матрица, связывающая пространство скоростей с пространством импульсов. Множество \mathbf{M}_R содержит следующие компоненты: $M_{R1} = 0$, $M_{R2} = 0$, $M_{R3} = 0$, $M_{R4} = \rho(D+I)T'$, $M_{R5} = \rho T'$, $M_{R6} = 0$, $M_{R7} = \rho T'$, $M_{R8} = (D+I+2)\rho u_x T'$, $M_{R9} = (D+I+2)\rho u_y T'$, $M_{R10} = 3\rho u_x T'$, $M_{R11} = \rho u_y T'$, $M_{R12} = \rho u_x T'$, $M_{R13} = 3\rho u_y T'$, $M_{R14} = \rho[2T(D+I+2) + (D+I+5)u_x^2 + u_y^2]T'$, $M_{R15} = \rho u_x u_y (D+I+4)T'$, $M_{R16} = \rho[2T(D+I+2) + u_x^2 + (D+I+5)u_y^2]T'$. Компоненты матрицы \mathbf{C} имеют вид: $C_{1i} = 1$, $C_{2i} = v_{ix}$, $C_{3i} = v_{iy}$, $C_{4i} = v_i^2 + \eta_i^2$, $C_{5i} = v_{ix}^2$, $C_{6i} = v_{ix}v_{iy}$, $C_{7i} = v_{iy}^2$, $C_{8i} = (v_i^2 + \eta_i^2)v_{ix}$, $C_{9i} = (v_i^2 + \eta_i^2)v_{iy}$, $C_{10i} = v_{ix}^3$, $C_{11i} = v_{ix}^2 v_{iy}$, $C_{12i} = v_{ix}v_{iy}^2$, $C_{13i} = v_{iy}^3$, $C_{14i} = (v_i^2 + \eta_i^2)v_{ix}^2$, $C_{15i} = (v_i^2 + \eta_i^2)v_{ix}v_{iy}$, $C_{16i} = (v_i^2 + \eta_i^2)v_{iy}^2$. Следовательно, дискретные реакционные слагаемые определяются равенством [27, 28]

$$\mathbf{R} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{M}_R. \quad (14)$$

Отметим, что способ I включает в себя 9 моментных соотношений, которым удовлетворяют реакционные слагаемые, и 24 моментных соотношения, которым удовлетворяют дискретные равновесные функции распределения.

При этом применяется шаблон D2V24 [24]. Способы II и III используют 16 моментных соотношений, которым удовлетворяют как реакционное слагаемое, так и дискретная равновесная функция распределения. Соотношения выполняются на шаблоне D2V16. Отметим также, что способ II имеет первый порядок точности по времени [25, 26]. Следовательно, способ III [27, 28] физически и численно является более точным, чем способы I и II. В данной работе в численных расчетах используется способ III.

2. РАСЧЕТ НЕСТАЦИОНАРНОЙ ДЕТОНАЦИИ

В данном параграфе метод DBM применяется для расчета и анализа нестационарной детонации при наличии гидродинамической и термодинамической неравновесности. Расчетная область размерами $L_x \times L_y$ делится на две части. Продукты сгорания располагаются в левой части L , исходные реагенты — в правой части R . Исходная смесь поступает в расчетную область через правую границу, а продукты сгорания вытекают через левую границу. Соответственно, входное и выходное граничные условия поставлены на левой и правой границах. На вертикальных границах поставлено условие периодичности. Начальные состояния полей принимаются в виде

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{\rho_L + \rho_R}{2} - \frac{\rho_L - \rho_R}{2} \tanh\left(\frac{x - x_0}{W}\right), \\ T &= \frac{T_L + T_R}{2} - \frac{T_L - T_R}{2} \tanh\left(\frac{x - x_0}{W}\right), \\ \mathbf{u} &= \frac{\mathbf{u}_L + \mathbf{u}_R}{2} - \frac{\mathbf{u}_L - \mathbf{u}_R}{2} \tanh\left(\frac{x - x_0}{W}\right), \end{aligned} \quad (15)$$

где $(\rho_L, T_L, \mathbf{u}_L) = (1.48043, 2.06314, -1.69953\mathbf{e}_x)$ и $(\rho_R, T_R, \mathbf{u}_R) = (1, 1, 0)$.

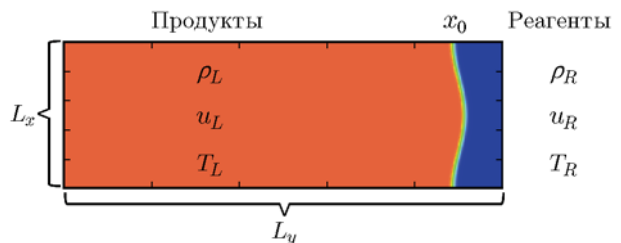


Рис. 2. Начальная конфигурация области расчета нестационарной детонации

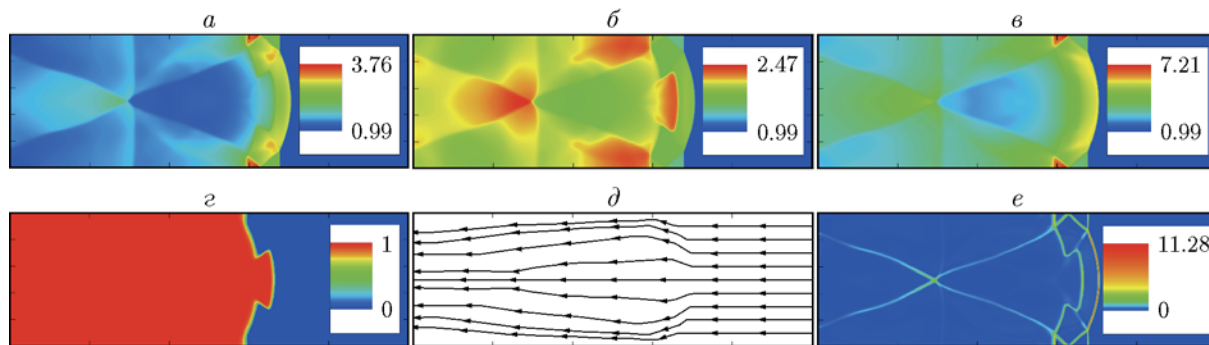


Рис. 3. Мгновенные поля плотности (а), температуры (б), давления (в), глубины превращения (з), линий тока (д) и степени неравновесности (е) в момент времени $t = 0.1$

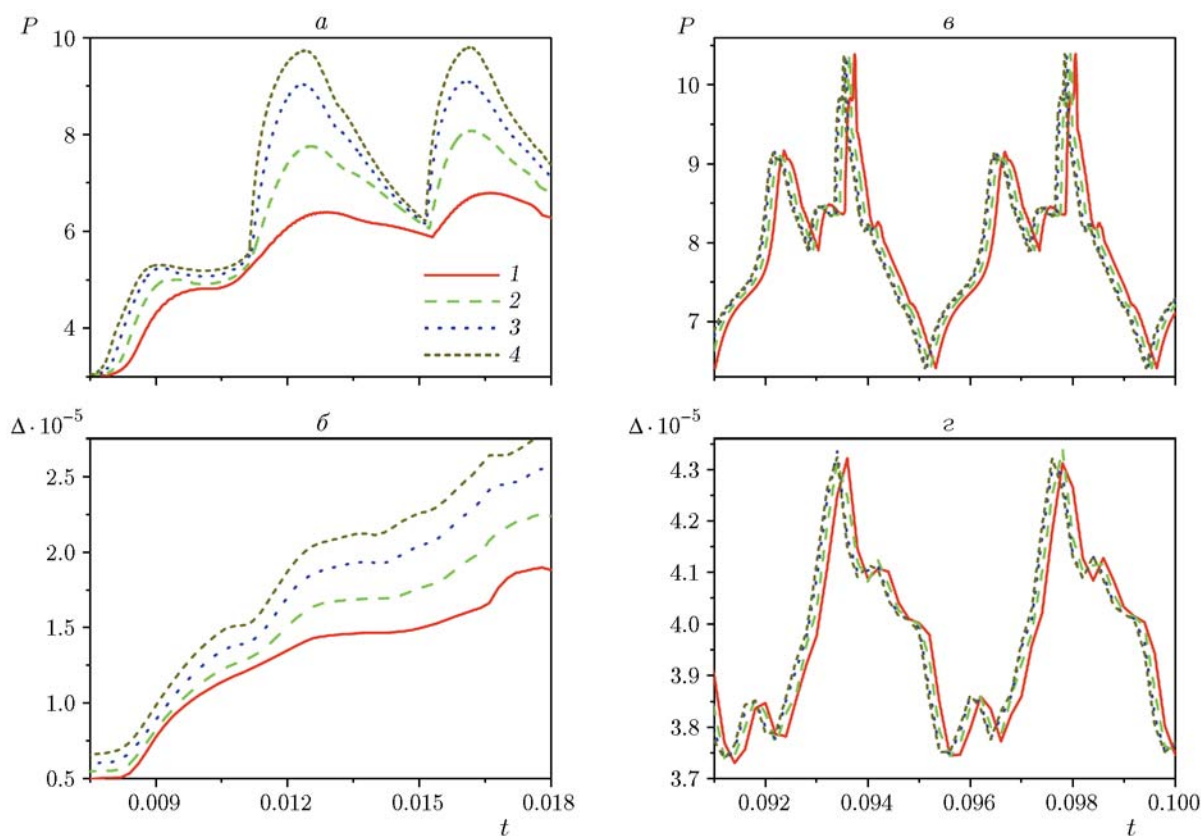


Рис. 4. Максимальное давление (а, в) и интегральная степень неравновесности (б, з) в различные периоды времени развития детонации при разных амплитудах возмущений:

линии 1-4 соответствуют начальным амплитудам $A = L_y/100, L_y/50, L_y/25$ и $L_y/12.5$

$-2.51603e_x$). Гиперболический тангенс используется для сглаживания интерфейса между двумя частями расчетной области, ширина переходного слоя принята равной $W = L_x/150$. Чтобы инициировать нестационарное течение, синусоидальное возмущение $x_0 = L_x/10 - A \cos(ky)$ накладывается на интерфейс, где A — амплитуда, $k = 2\pi/L_y$ —

волновое число, причем длина волны принимается равной L_y . Начальная конфигурация области для последующего расчета нестационарной детонации показана на рис. 2.

Поля мгновенных физических величин (плотность, температура, давление, глубина превращения, линии тока, степень неравновесности) в момент времени, характерный для

нестационарной детонации, представлены на рис. 3. На рис. 3,а–в хорошо видно, что плотность, температура и давление возрастают очень резко в ударном фронте, сжимающем газ. Затем, как видно на рис. 3,г, развивается химическая реакция и химическая энергия быстро выделяется в зоне реакции. Рис. 3,д показывает, что направление течения и амплитуда скорости находятся под сильным влиянием ударного фронта и поперечных волн, которые усиливают неустойчивость детонации. Оказывается, что поперечные волны периодически сталкиваются позади ударного фронта и генерируют скачки давления и температуры в зоне продуктов. Сравнение рис. 3,а–д и рис. 3,е показывает, что эффект неравновесности особенно выражен вблизи ударного фронта, поперечной волны и ножки Маха, где градиенты наиболее велики. Следовательно, проявление неравновесности может быть использовано для диагностики тонких структур нестационарной детонации. В самом деле, ударный фронт, поперечная волна, зона реакции, тройная точка и ячеистая структура легко определяются именно на рис. 3,е. Тройная точка располагается на пересечении ударного фронта, ножки Маха и поперечной волны, а ее пространственно-временная траектория определяет форму ячейки.

Ниже рассматривается влияние амплитуды возмущений, длины волны и химического тепловыделения на развитие нестационарной детонации.

2.1. Влияние амплитуды флуктуаций

Изменение максимального давления и интегральной степени неравновесности в ходе распространения нестационарной детонации при разных амплитудах начального возмущения показано на рис. 4 в интервалах времени $0.0075 \leq t \leq 0.018$ и $0.091 \leq t \leq 0.1$. Интегральная степень неравновесности определяется как $\iint \Delta dx dy$, где интегрирование выполняется по всей расчетной области $L_x \times L_y$.

В начальный период развития детонации как максимальное давление, так и интегральная степень неравновесности тем больше, чем больше амплитуда возмущений (рис. 4,а,б). При этом обе величины осциллируют во времени. На больших временах периодические колебания практически одинаковы, с небольшим сдвигом фаз (рис. 4,в,г). Таким образом,

начальная амплитуда возмущений оказывает влияние только в течение начального периода формирования самоподдерживающейся детонации. Впоследствии начальная амплитуда возмущений забывается. Все, что остается позади звукового фронта, также забывается. Это отличает детонационную волну от дозвукового пламени, формирование и распространение которого испытывает влияние начальных возмущений в течение всего процесса.

2.2. Влияние длины волны

Для того чтобы проанализировать влияние длины волны начальных возмущений на развитие детонации, рассмотрим четыре случая с длинами волн $L_{y1} = 2.5 \cdot 10^{-3}$, $L_{y2} = 5 \cdot 10^{-3}$, $L_{y3} = 10^{-2}$, $L_{y4} = 2 \cdot 10^{-2}$. Соответствующие поля степени неравновесности в момент времени $t = 0.1$ показаны на рис. 5. Можно заключить, что максимальная степень неравновесности увеличивается с ростом длины волны, поскольку максимальный простран-

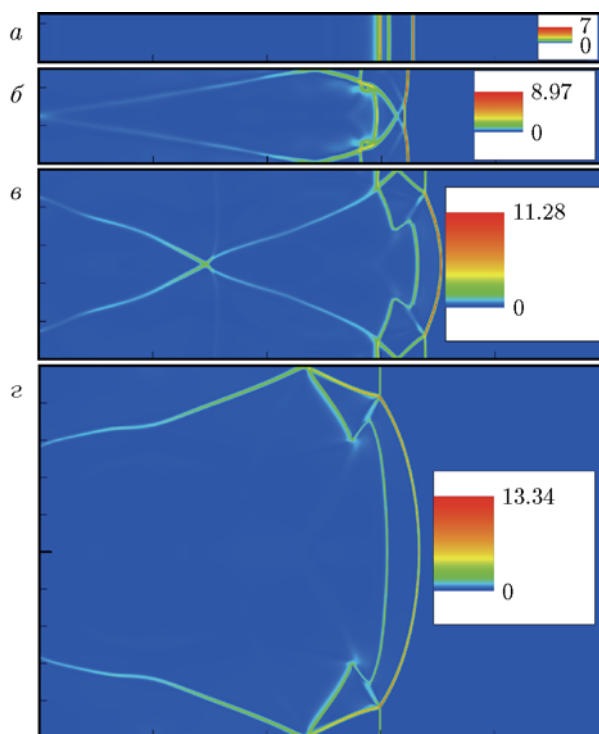


Рис. 5. Поля степени неравновесности в момент времени $t = 0.1$ в ходе развития детонации при разных длинах волны начального возмущения:

а — $L_{y1} = 2.5 \cdot 10^{-3}$, б — $L_{y2} = 5 \cdot 10^{-3}$, в — $L_{y3} = 10^{-2}$, г — $L_{y4} = 2 \cdot 10^{-2}$

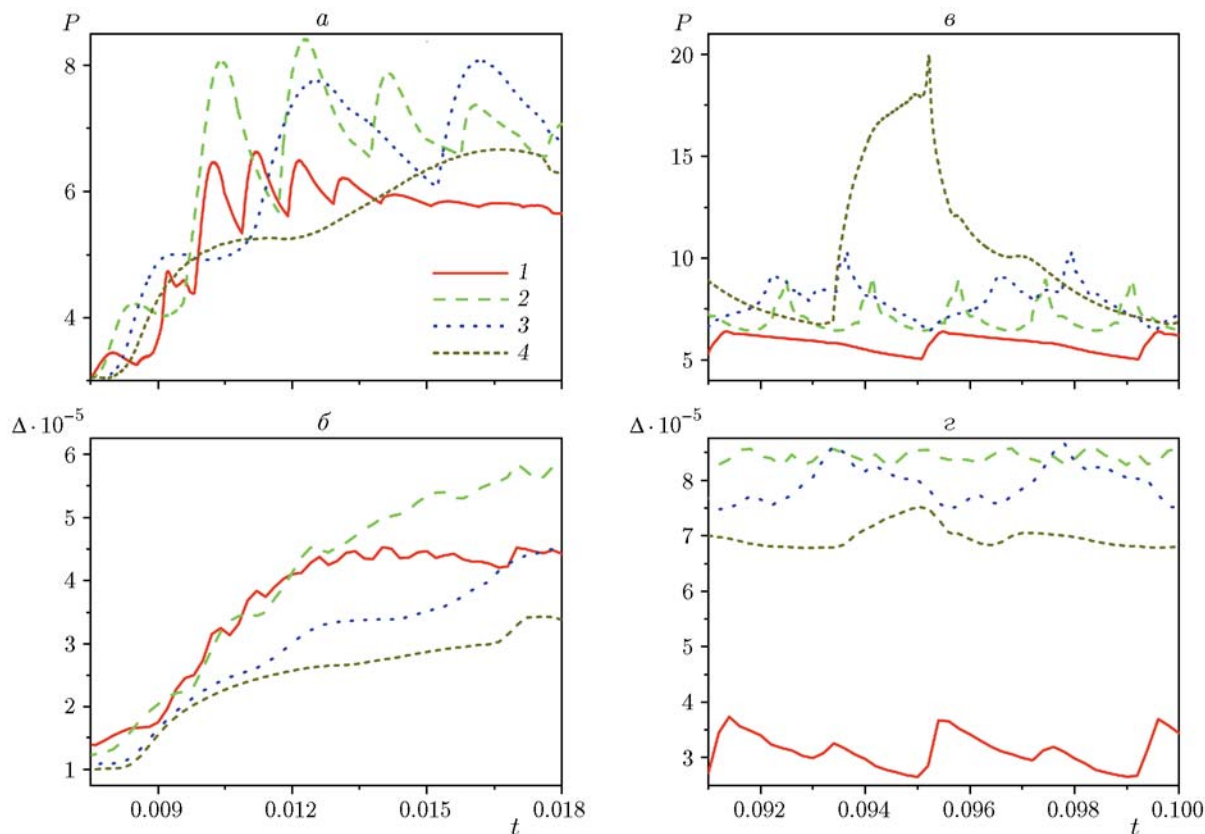


Рис. 6. Изменение максимального давления (*а, в*) и интегральной степени неравновесности (*б, г*) в различные интервалы времени в детонационной волне при разных длинах волны начального возмущения:

1 — $L_{y1} = 2.5 \cdot 10^{-3}$, 2 — $L_{y2} = 5 \cdot 10^{-3}$, 3 — $L_{y3} = 10^{-2}$, 4 — $L_{y4} = 2 \cdot 10^{-2}$

ственный градиент также увеличивается. Размер ячеек уменьшается при уменьшении длины волны. Более того, на рис. 5, *а* видно, что поперечная волна и ячеистая структура исчезают, если длина волны достаточно мала.

Чтобы получить количественную оценку роли длины волны в развитии детонации, рассмотрим изменение максимального давления и степени неравновесности при разных значениях длины волны возмущений. На рис. 6 представлено изменение степени неравновесности $\omega \iint \Delta dx dy$, где $\omega = 8, 4, 2, 1$ для длин волн $L_{y1} = 2.5 \cdot 10^{-3}$, $L_{y2} = 5 \cdot 10^{-3}$, $L_{y3} = 10^{-2}$, $L_{y4} = 2 \cdot 10^{-2}$ соответственно. Параметр ω используется с целью масштабирования. Рис. 6, *а, в* показывают, что в случае малых длин волн давление растет быстрее и осциллирует с большей частотой в начальный период времени. Затем давление сни-

жается. В частности, при достаточно малой длине волны двумерная детонация вырождается в одномерную. Максимальное давление испытывает небольшие осцилляции, имеет низкое среднее значение и долгий период осцилляций. Кроме того, как показывают рис. 6, *б, г*, интегральная степень неравновесности увеличивается при уменьшении длины волны, хотя и оказывается малой при достаточно малой длине волны. Интегральная степень неравновесности зависит от локальных значений и области локализации. Уменьшение длины волны приводит к уменьшению пространственных градиентов, что снижает степень неравновесности. В то же время при уменьшении длины волны область локализации неравновесности увеличивается. В условиях одновременного снижения пространственных градиентов и расширения области локализации интегральная степень неравновесности увеличива-

ется, поскольку влияние расширяющейся области неравновесности доминирует. Как локальная степень неравновесности, так и область локализации неравновесности малы в случае малой длины волны.

2.3. Влияние теплоты реакции

Влияние теплоты реакции на развитие детонации рассмотрим для значений теплоты реакции $Q = 0.5, 1.0, 1.5$ и 2.0 . Соответствующие мгновенные поля степени неравновесности в момент времени $t = 0.1$ показаны на рис. 7. Видно, что случай $Q = 0.5$ значительно отличается от остальных, которые похожи между собой (периодическое возникновение поперечной волны, ячеистая структура). При достаточно малой теплоте реакции поперечная волна не возникает, а ячеистая структура не развивается (рис. 7,а). Увеличение теплоты реакции сопровождается ростом степени неравновесности. При этом детонация становится более сильной, пространственные градиенты уве-

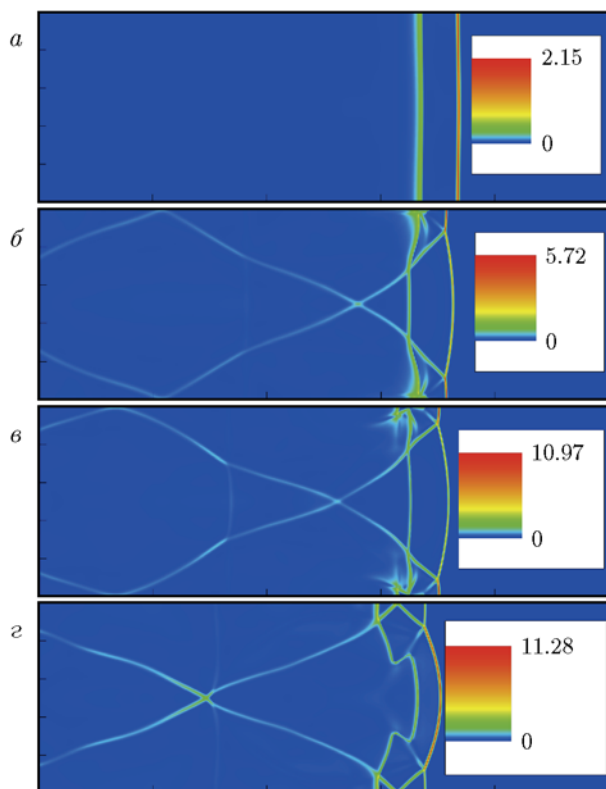


Рис. 7. Мгновенные поля степени неравновесности в момент времени $t = 0.1$ при разных значениях теплоты реакции:

а — $Q = 0.5$, б — $Q = 1.0$, в — $Q = 1.5$, г — $Q = 2.0$

личиваются, что также приводит к росту степени неравновесности [25].

Изменение максимального давления и интегральной степени неравновесности $\iint \Delta dx dy$ (интегрирование по всей расчетной области) показано на рис. 8 при разных значениях теплоты реакции. Видно, что обе

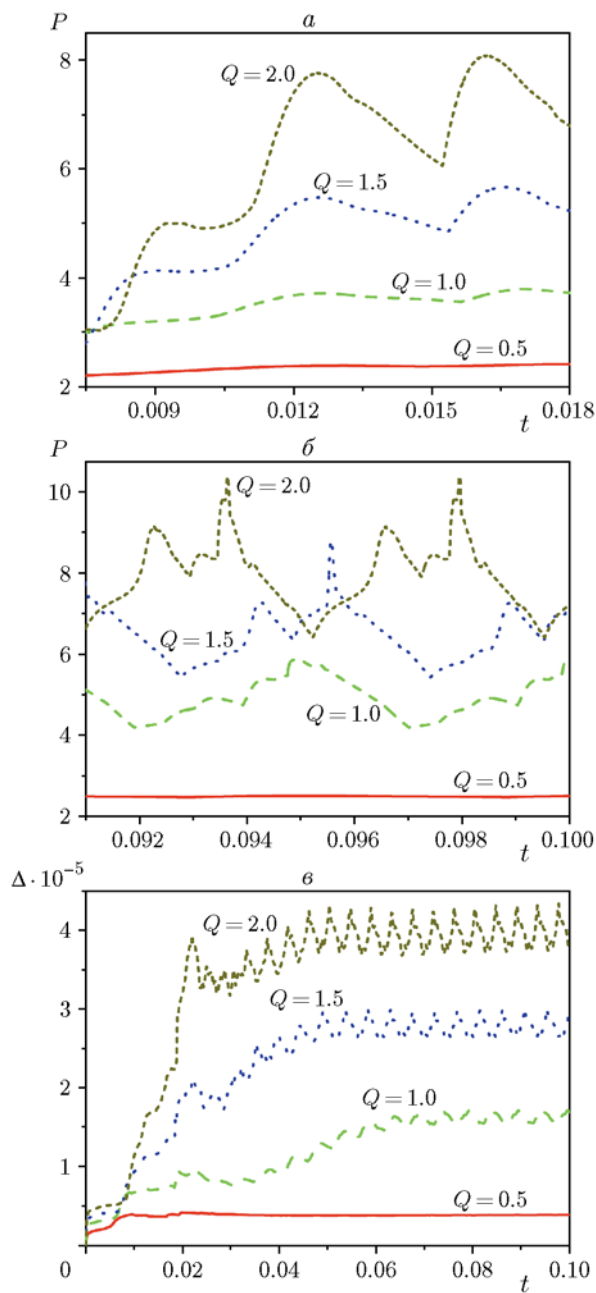


Рис. 8. Изменение максимального давления (а, б) и интегральной степени неравновесности (в) при разных значениях теплоты реакции

величины возрастают с повышением теплоты реакции. Имеют место колебания указанных величин с периодом, равным 0.0059, 0.0051, 0.0046 и 0.0043 при $Q = 0.5, 1.0, 1.5$ и 2.0 соответственно. Таким образом, период колебаний уменьшается при росте теплоты реакции, а амплитуда осцилляций увеличивается.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Будучи мезоскопическим кинетическим методом, дискретный метод Больцмана открывает возможность выполнять расчеты нестационарной детонации с учетом как гидродинамической, так и термодинамической неравновесности, что остается за пределами возможностей традиционного макроскопического описания течений газа. Течение газа и химические реакции оказываются связанными через реакционное слагаемое в правой части дискретного уравнения Больцмана. Рассмотрены три способа расчета реакционного слагаемого: 1) дискретизация исходного реакционного слагаемого в пространстве скоростей; 2) вычисление на основе физического определения; 3) вычисление методом обращения матрицы. Последний способ, являющийся более точным [27, 28], использован в данной работе для исследования эффектов неравновесности в нестационарной детонации.

Получены следующие результаты.

1. Амплитуда начальных возмущений влияет на развитие нестационарной детонации только на начальном этапе развития детонации.

2. В случае малой длины волны начального возмущения давление растет быстрее и осциллирует с большей частотой в течение начального периода, после которого давление снижается. Интегральная степень неравновесности увеличивается при уменьшении длины волны, но оказывается весьма малой, если длина волны достаточно мала. При этом максимальное давление испытывает небольшие колебания, характеризуется малым средним значением и большим периодом колебаний.

3. При повышении теплоты реакции давление, его колебания, а также степень неравновесности увеличиваются, в то время как период колебаний уменьшается.

4. Если длина волны начального возмущения достаточно мала, то поперечные волны и ячеистая структура не формируются, а дву-

мерная нестационарная детонация вырождается в одномерную.

Работа выполнена при поддержке Natural Science Foundation of China (NSFC) (гранты 91441120 и 51806116), а также UK Engineering and Physical Sciences Research Council в рамках проекта «UK Consortium on Mesoscale Engineering Sciences (UKCOMES)» (грант EP/R029598/1).

ЛИТЕРАТУРА

1. **Law C. K.** Combustion Physics. — Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2006.
2. **Handley C. A., Lambourn B. D., Whitworth N. J., et al.** Understanding the shock and detonation response of high explosives at the continuum and meso scales // Appl. Phys. Rev. — 2018. — V. 5, N 1. — 011303.
3. **Maxwell B. M. N., Bhattacharjee R. R., Lau-Chapdelaine S. S. M., et al.** Influence of turbulent fluctuations on detonation propagation // J. Fluid Mech. — 2017. — V. 818. — P. 646–696.
4. **Li J., Ren H., Wang X., et al.** Length scale effect on Mach reflection of cellular detonations // Combust. Flame. — 2018. — V. 189. — P. 378–392.
5. **Pan Z., Chen K., Qi J., et al.** The propagation characteristics of curved detonation wave: Experiments in helical channels // Proc. Combust. Inst. — 2019. — V. 37, N 3. — P. 3585–3592.
6. **Chapman D. L.** On the rate of explosion in gases // Philos. Mag. — 1899. — V. 47, N 284. — P. 90–104.
7. **Jouguet E.** On the propagation of chemical reactions in gases // J. Math. Pures Appl. — 1905. — V. 1. — P. 347–425.
8. **Mi X. C., Michael L., Ioannou E., et al.** Meso-resolved simulations of shock-to-detonation transition in nitromethane with air-filled cavities // J. Appl. Phys. — 2019. — V. 125, N 24. — 245901.
9. **Liu L., Zhang Q.** Numerical study of cellular structure in detonation of a stoichiometric mixture of vapor JP-10 in air using a quasi-detailed chemical kinetic model // Aerosp. Sci. Technol. — 2019. — V. 91. — P. 669–678.
10. **Yang P., Ng H. D., Teng H.** Numerical study of wedge-induced oblique detonations in unsteady flow // J. Fluid Mech. — 2019. — V. 876. — P. 264–287.
11. **Tarver C. M., Forbes J. W., Urtiew P. A.** Nonequilibrium Zeldovich — von Neumann — Doring theory and reactive flow modeling of detonation // Russ. J. Phys. Chem. B. — 2007. — V. 1, N 1. — P. 39–45.

12. **Nagnibeda E., Kustova E.** Non-equilibrium Reacting Gas Flows: Kinetic Theory of Transport and Relaxation Processes. — Berlin: Springer, 2009.
13. **Uy K. C. K., Shi L. S., Wen C. Y.** Prediction of half reaction length for $\text{H}_2\text{O}_2\text{Ar}$ detonation with an extended vibrational nonequilibrium Zel'dovich — von Neumann — Döring (ZND) model // Int. J. Hydrogen Energy. — 2019. — V. 44, N 14. — P. 7667–7674.
14. **Anderson J. B., Long V.** Direct Monte Carlo simulation of chemical reaction systems: Prediction of ultrafast detonations // J. Chem. Phys. — 2003. — V. 118, N 7. — P. 3102–3110.
15. **Wu C., Shi B., Chai Z., et al.** Discrete unified gas kinetic scheme with a force term for incompressible fluid flows // Comput. Math. Appl. — 2016. — V. 71, N 12. — P. 2608–2629.
16. **Meng J., Zhang Y., Hadjiconstantinou N. G., et al.** Lattice ellipsoidal statistical BGK model for thermal non-equilibrium flows // J. Fluid Mech. — 2013. — V. 718. — P. 347–370.
17. **Hosseini S. A., Darabiha N., Thévenin D.** Lattice Boltzmann advection-diffusion model for conjugate heat transfer in heterogeneous media // Int. J. Heat Mass Transfer. — 2019. — V. 132. — P. 906–919.
18. **Gan Y., Xu A., Zhang G., et al.** Discrete Boltzmann modeling of multiphase flows: hydrodynamic and thermodynamic non-equilibrium effects // Soft Matter. — 2015. — V. 11, N 26. — P. 5336–5345.
19. **Zhang Y., Xu A., Zhang G., et al.** Entropy production in thermal phase separation: a kinetic-theory approach // Soft Matter. — 2019. — V. 15, N 10. — P. 2245–2259.
20. **Lai H., Xu A., Zhang G., et al.** Nonequilibrium thermohydrodynamic effects on the Rayleigh — Taylor instability in compressible flows // Phys. Rev. E. — 2016. — V. 94, N 2. — P. 023106.
21. **Chen F., Xu A., Zhang G.** Collaboration and competition between Richtmyer — Meshkov instability and Rayleigh — Taylor instability // Phys. Fluids. — 2018. — V. 30, N 10. — P. 102105.
22. **Gan Y. B., Xu A. G., Zhang G. C., et al.** Nonequilibrium and morphological characterizations of Kelvin — Helmholtz instability in compressible flows // Front. Phys. — 2019. — V. 14, N 4. — P. 43602.
23. **Yan B., Xu A., Zhang G., et al.** Lattice Boltzmann model for combustion and detonation // Front. Phys. — 2013. — V. 8, N 1. — P. 94–110.
24. **Xu A., Lin C., Zhang G., et al.** Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann kinetic model for combustion // Phys. Rev. E. — 2015. — V. 91, N 4. — P. 043306.
25. **Lin C., Xu A., Zhang G., et al.** Double-distribution-function discrete Boltzmann model for combustion // Combust. Flame. — 2016. — V. 164. — P. 137–151.
26. **Lin C., Luo K. H., Fei L., et al.** A multi-component discrete Boltzmann model for nonequilibrium reactive flows // Sci. Rep. — 2017. — V. 7, N 1. — P. 14580.
27. **Lin C., Luo K. H.** Discrete Boltzmann modeling of unsteady reactive flows with nonequilibrium effects // Phys. Rev. E. — 2019. — V. 99, N 1. — P. 012142.
28. **Lin C., Luo K. H.** Kinetic simulation of unsteady detonation with nonequilibrium effects // Proc. of the 9th Int. Seminar on Fire and Explosion Hazards (ISFEH9). — St. Petersburg Polytech. Univ. Press, 2019. — P. 289–300.
29. **Lee T., Lin C., Chen L.** A lattice Boltzmann algorithm for calculation of the laminar jet diffusion flame // J. Comput. Phys. — 2006. — V. 215, N 1. — P. 133–152.
30. **Ng H. D., Radulescu M. I., Higgins A. J., et al.** Numerical investigation of the instability for one-dimensional Chapman — Jouguet detonations with chain-branching kinetics // Combust. Theor. Model. — 2005. — V. 9, N 3. — P. 385–401.

*Поступила в редакцию 26.12.2019.
Принята к публикации 19.02.2020.*