## Задание №2 по курсу Численное моделирование реагирующих потоков

Чернов Алексей, 335

Структура детонационной волны Зельдовича-Неймана-Деринга

## Описание численного метода

В качестве численного метода интегрирования предложенной системы используется метод Гира второго порядка аппроксимации. Вводятся следующие обозначения:

$$\begin{cases} f_{1}(x,\rho,u,p,Z) = -\frac{\rho}{u} f_{2}(x,\rho,u,p,Z), \\ f_{2}(x,\rho,u,p,Z) = -\frac{Qu(\gamma-1)}{c^{2}(1-u^{2}/c^{2})} f_{4}(x,\rho,u,p,Z), \\ f_{3}(x,\rho,u,p,Z) = -\rho u \cdot f_{2}(x,\rho,u,p,Z), \\ f_{4}(x,\rho,u,p,Z) = -\frac{A\rho Z}{u} e^{-\frac{\rho E_{a}}{\rho \mu}}. \end{cases}$$

Конечно-разностные уравнения записываются в виде

$$\frac{3\overline{\varphi}^{i+1} - 4\overline{\varphi}^{i} + \overline{\varphi}^{i-1}}{\delta x} = (\overline{f})^{i+1}$$

Получившаяся система нелинейных алгебраических уравнений относительно неизвестных на следующем (i + 1)-м слое:

$$\begin{cases} \varphi_{1}\left(\rho^{i+1},u^{i+1},p^{i+1},Z^{i+1}\right)=0,\\ \varphi_{2}\left(\rho^{i+1},u^{i+1},p^{i+1},Z^{i+1}\right)=0,\\ \varphi_{3}\left(\rho^{i+1},u^{i+1},p^{i+1},Z^{i+1}\right)=0,\\ \varphi_{4}\left(\rho^{i+1},u^{i+1},p^{i+1},Z^{i+1}\right)=0,\\ \end{cases}$$

где 
$$\overline{\phi} = (\overline{f})^{i+1} - \overline{f}$$

Итерационный процесс осуществляется с помощью метода Ньютона.

$$\begin{cases} \rho^{i+1,k+1} = \rho^{i+1,k} + \delta \rho^{i+1,k}, \\ u^{i+1,k+1} = u^{i+1,k} + \delta u^{i+1,k}, \\ p^{i+1,k+1} = p^{i+1,k} + \delta p^{i+1,k}, \\ Z^{i+1,k+1} = Z^{i+1,k} + \delta Z^{i+1,k}, \end{cases}$$

Невязки определяются как решения системы уравнений

$$\overline{\delta \varphi} = -J^{-1} \overline{\varphi}$$

Якобиан рассчитывается следующим образом:

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \frac{1.5}{\delta x} + \alpha_1 \left( \frac{E_a}{p\mu} - \frac{2}{\rho} \right) & \alpha_1 \left( \frac{1}{u} - \frac{2u/c^2}{1 - u^2/c^2} \right) & -\alpha_1 \frac{\rho E_a}{p^2 \mu} & -\frac{\alpha_1}{Z} \\ \alpha_2 \left( \frac{E_a}{p\mu} - \frac{1}{\rho} \right) & \frac{1.5}{\delta x} - \alpha_2 \frac{2u}{c^2} & -\alpha_2 \frac{\rho E_a}{p^2 \mu} & -\frac{\alpha_2}{Z} \\ \alpha_3 \left( \frac{E_a}{p\mu} - \frac{2}{\rho} \right) & \alpha_3 \left( \frac{2u}{c^2} - \frac{1}{u} \right) & \frac{1.5}{\delta x} - \alpha_3 \frac{\rho E_a}{p^2 \mu} & -\frac{\alpha_3}{Z} \\ \alpha_4 \left( \frac{E_a}{p\mu} - \frac{1}{\rho} \right) & -\frac{\alpha_4}{u} & -\alpha_4 \frac{\rho E_a}{p^2 \mu} & \frac{1.5}{\delta x} - \frac{\alpha_4}{Z} \end{pmatrix}$$

$$\alpha_1 = -\frac{\rho}{u} \alpha_2, \ \alpha_2 = -\frac{Qu(\gamma - 1)}{c^2 \left( 1 - u^2/c^2 \right)} \alpha_4, \ \alpha_3 = -\rho u \alpha_2, \ \alpha_4 = -\frac{A\rho Z}{u} e^{\frac{\rho E_a}{p\mu}}.$$

Итерации производятся до выполнения условия

$$\sqrt{\left(\frac{\delta \rho^{i+1,k}}{\rho^{i+1,k+1}}\right)^2 + \left(\frac{\delta u^{i+1,k}}{u^{i+1,k+1}}\right)^2 + \left(\frac{\delta p^{i+1,k}}{p^{i+1,k+1}}\right)^2 + \left(\frac{\delta Z^{i+1,k}}{Z^{i+1,k+1}}\right)^2} < 10^{-6}$$

В качестве начальных условий задаются параметры фон Неймана

$$\begin{cases} p(0) = \frac{2\rho_0}{\gamma + 1} D_{CJ}^2 - \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} p_0, \\ u(0) = D_{CJ} - \frac{p(0) - p_0}{\sqrt{\rho_0 \left(\frac{\gamma + 1}{2} p(0) + \frac{\gamma - 1}{2} p_0\right)}}, \\ \rho(0) = \frac{\rho_0 D_{CJ}}{u(0)}, \\ Z(0) = 1. \end{cases}$$

где  $D_{cj}$ - скорость волны детонации Чепмена-Жуге. Индекс (0) отвечает нормальным условиям. Параметры смеси взяты из условия задачи:

№ смеси	Смесь	γ	$\mu, \frac{\kappa\Gamma}{\text{моль}}$	$Q, \frac{\mathcal{J}_{\mathcal{K}}}{\kappa \Gamma}$	$E_a$ , $\frac{Дж}{моль}$	$A, \frac{M^3}{K\Gamma \cdot C}$
1	Ацетилен – воздух	1.25	0.029	2.94·10 <sup>6</sup>	71·10 <sup>3</sup>	109

## Анализ сходимости и результатов

Расчет с помощью программы дал следующие результаты:

Плотность =  $2,1 \text{ кг/м}^3$ 

Давление = 19.4 атм

Температура = 3185 К.

Теоретические параметры Чепмена-Жуге:

Плотность =  $2,1 \text{ кг/м}^3$ 

Давление = 19,0 атм

Температура = 3175 К.

Практические результаты оказались близки к теоретическим.

Графики профилей плотности, давления, доли вещества и температуры:







