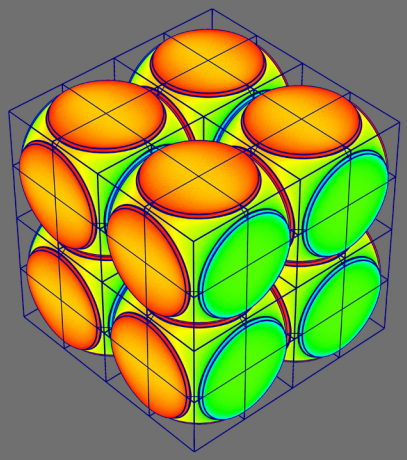
ISSN 2309-3684



Математическое моделирование и численные методы

Лопато А.И., Кравченко А.Н. Математическое моделирование инициирования детонационной волны с использованием одностадийной и детальной кинетики химических реакций. Математическое моделирование и численные методы, 2025, № 2, с. 37–49.

Источник: https://mmcm.bmstu.ru/articles/373/

Параметры загрузки:
IP: 216.73.217.22
18.11.2026 12:59:49

УДК 519.63 DOI: 10.18698/2309-3684-2025-2-3749

Математическое моделирование инициирования детонационной волны с использованием одностадийной и детальной кинетики химических реакций

© А.И. Лопато[1], А.Н. Кравченко[2]

[1]ИАП РАН, Москва, 123056, Россия
[2]МФТИ, Физтех, Москва, 117303, Россия

Работа посвящена численному исследованию инициирования детонации в плоском канале при отражении ударной волны от профилированного торца канала. Геометрия торца состоит из полуэллипса и двух участков плоской стенки. Математическая модель основана на двумерной системе уравнений Эйлера, дополненной кинетикой горения водородно-кислородной смеси при низких давлениях. Рассматривается применение, как глобальной одностадийной, так и детальной кинетик. В качестве детальной, используется кинетика Petersen-Hanson. Вычисления проводятся с применением метода конечных объемов на неструктурированных треугольных расчетных сетках. Используется численный метод второго порядка аппроксимации. Описывается процесс отражения от торца падающей ударной волны и перехода ударной волны в детонационную. Проводится сравнение результатов процесса инициирования детонации, полученных с использованием двух разных типов кинетики горения смеси.

Ключевые слова: *математическое моделирование, детонационная волна, одностадийная кинетика, кинетика Petersen-Hanson*

Введение. Проблема инициирования газовой детонации при отражении относительно слабой ударной волны (УВ) от профилированного торца канала исследуется различными научными коллективами на протяжении последних десятилетий. В экспериментальной работе [1] рассматривается канал с торцами различных форм, включая двухгранный угол, цилиндрическую и параболическую поверхности. Рассматриваются случаи слабого и сильного воспламенения, обсуждаются их качественные и количественные различия для рассматриваемых геометрий каналов. Так, продемонстрировано, что слабое воспламенение внутри полости торца канала может привести к инициированию детонации вне ее. В работе представлен случай одного «отражателя» во всю область торца. В экспериментальной работе [2] рассматривается случай нескольких отражателей, составляющих торец канала. Торцы состоят из участков цилиндрической поверхности с направляющими в форме полуэллипсов, а также участков плоской стенки. В плоском сечении канала линия торца состоит, соответственно, из полуэллипсов и отрезков прямых. В работе такие торцы называют «многофокусирующими системами». Многофокуси-

рующие системы следуют концепции минимизации энергии инициирования детонации в смеси за счет пространственных и временных факторов. Так, использование разнесенных инициаторов детонации, которые срабатывают неодновременно, может уменьшить энергию, необходимую для инициирования детонации, по сравнению с другими сценариями. В [2] показано, что использование разнесенных отражателей с плоским участком стенки между ними также может приводить к уменьшению энергии инициирования детонации по сравнению с рядом других конфигураций отражателей.

При проведении численных исследований проблемы инициирования детонации в каналах с криволинейными границами важным моментом является вопрос выбора типа расчетной сетки. Как отмечено в [3], во многих работах используются структурированные расчетные сетки. Одна из причин такого выбора заключается в том, что подробный анализ в численных исследованиях процесса детонации требует устойчивых и робасных численных методов высокой точности. Такой подход является особенно актуальным при разрешении мелкомасштабных структур детонационного горения. Разработка численных методов высокого порядка точности для случая структурированных сеток активно ведется на протяжении десятилетий. В работе [3] показано, что для одинакового разрешения одной и той же структуры детонационной волны требуется меньше ячеек в случае структрурированной сетки. С другой стороны, за счет новых степеней свободы расчетная область с криволинейными границами может быть покрыта неструктурированной сеткой с меньшей ошибкой, чем структурированной. За счет дополнительных степеней свободы процедура локального измельчения сетки также упрощается по сравнению с структурированной. Так, треугольник допускает разбиение на два или четыре треугольника, используя центры ребер. При таком разбиении возможно получить конформную сетку с локальной адаптацией.

Выбор модели химической кинетики для проведения численных исследований также играет важную роль. Так, в [4] авторами рассмотрен вопрос влияния модели химической кинетики на инициирование детонации при наличии градиента температуры в химически реагирующей смеси. Полученный температурный градиент обеспечивал формирование «горячих точек» (областей повышенного давления и температуры смеси) и приводил к появлению спонтанной волны и инициированию детонации. Было показано, что параметры волны и их изменение во времени заметно различаются в зависимости от выбранной модели кинетики. Разница в размерах скачков температуры и, соответственно, размерах горячих точек для двух типов кинетики может быть обусловлена следующими причинами. Во-первых, времена индукции для одностадийной модели, откалиброванной та-

ким образом, что модель воспроизводит скорость детонации и толщину фронта ламинарного пламени, оказывается на несколько порядков меньше времен индукции для случая детальной кинетики и значений, полученных в экспериментах. Во-вторых, модель одностадийной кинетики является экзотермической, в то время как часть реакций детальной кинетики может содержать эндотермические участки реакций. Таким образом, для одностадийных моделей кинетики размеры горячих точек оказываются меньше, а значения градиентов температур и давления выше, чем в случае детальной кинетики.

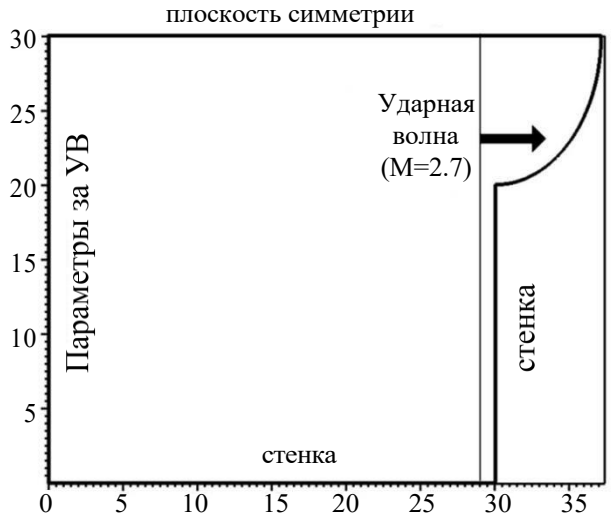


Рис. 1. Схема расчетной области. Все размеры в миллиметрах

Несмотря на различия в результатах, полученных разными типами кинетики, авторы [4] отмечают, что использование детальной кинетики может быть необязательным в тех задачах, где газодинамика играет более существенную роль, а модель химической кинетики требуется, главным образом, для выделения определенных значений энергии в численных расчетах.

Цель работы заключается в математическом моделировании инициирования детонации в плоском канале с профилированным торцом, включающим эллиптический отражатель, с использованием вычислительной технологии, основанной на использовании неструктурированных расчетных сеток, и применением двух типов кинетики – одностадийной и детальной.

Постановка задачи и математическая модель. Рассмотрим плоский канал, заполненный покоящейся стехиометрической водородно-кислородной смесью при начальном давлении 0.04 атм и температуре 298 К. Полная высота канала 60 мм, длина 37.1 мм. Криволинейный участок торца канала состоит из полуэллипса с размерами

полуосей 10 и 7.1 мм. Геометрические параметры расчетной области, начальное положение плоской падающей УВ и типы граничных условий показаны на рис.1. Для сокращения вычислительных расчетов, учитывая симметрию задачи, рассматривается нижняя половина канала при проведении вычислительных расчетов. Геометрия области отвечает геометрии из работы [2].

Математическая модель основана на двумерной системе уравнений Эйлера, записанной в лабораторной системе для случая многокомпонентной смеси и дополненной моделью кинетики химических реакций. Для случая детальной кинетики определяющая система уравнений имеет вид:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t}+\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x}+\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial x}=\mathbf{S},$$

$$\mathbf{U}=\begin{bmatrix}\rho\\ \rho u\\ \rho v\\ e\\ \rho Y_s\end{bmatrix},\ \mathbf{F}=\begin{bmatrix}\rho u\\ \rho u^2+p\\ \rho uv\\ (e+p)u\\ \rho Y_s u\end{bmatrix},\ \mathbf{S}=\begin{bmatrix}0\\ 0\\ 0\\ 0\\ \rho\omega_s\end{bmatrix},$$

$$e=\sum_{s=1}^{NS}\frac{\rho Y_s}{\mu_s}h_s(T)-p+\frac{\rho}{2}\left(u^2+v^2\right),\ p=\sum_{s=1}^{NS}\frac{\rho Y_s}{\mu_s}RT,$$

$$\omega_s=\mu_s\sum_{j=1}^{NR}\left(\sum_{l=1}^{NS}\alpha_{lj}c_l\right)^{\beta_j}\left(\gamma''_{js}-\gamma'_{js}\right)\left[K_{fj}\prod_{i=1}^{NS}c_i^{\gamma'_{js}}-K_{bj}\prod_{i=1}^{NS}c_i^{\gamma''_{js}}\right],\ c_i=\frac{\rho Y_i}{\mu_i}.$$

Здесь ρ — плотность, u,v — компоненты скорости, p — давление, e — полная энергия на единицу объема, R — универсальная газовая постоянная, Y_s — массовая доля компоненты s смеси, ω_s — скорость изменения массовой доли s, h_s — молярная энтальпия, μ_s — молярная масса, c_i — молярная концентрация, α_{ij} — коэффициент учета взаимодействия с третьим телом в ходе реакции, γ'_{js} и γ''_{js} — стехиометрические коэффициенты, K_{fj} — коэффициент прямой скорости реакции, K_{bj} — коэффициент обратной скорости реакции, NS — полное число компонент смеси, NR — полное число реакций. Молярная энтальпия рассчитывается, как

$$h_s(T)=RT\left(a_{1s}+\frac{a_{2s}}{2}T+\frac{a_{3s}}{3}T^2+\frac{a_{4s}}{4}T^3+\frac{a_{5s}}{5}T^4+\frac{a_{6s}}{T}\right),$$

где коэффициенты $a_{1s}, a_{2s}, ..., a_{6s}$ имеют значения, указанные в [5]. Показатель адиабаты многокомпонентной смеси в такой модели многокомпонентной смеси определяется, как

$$\gamma(T) = 1 + R \frac{\sum_{s=1}^{NS} Y_s / \mu_s}{\sum_{s=1}^{NS} Y_s \left(C_{ps}(T) - R \right) / \mu_s},$$

где C_{ps} — молярная теплоемкость при постоянном давлении компоненты s

$$C_{ps}(T) = R\left(a_{1s} + a_{2s} T + a_{3s} T^2 + a_{4s} T^3 + a_{5s} T^4 \right).$$

Скорость звука определяется для многокомпонентной смеси, как

$$c = \sqrt{RT \frac{\sum_{s=1}^{NS} \frac{Y_s C_{ps}(T)}{\mu_s} \sum_{s=1}^{NS} \frac{Y_s}{\mu_s}}{\sum_{s=1}^{NS} \frac{Y_s}{\mu_s} \left(C_{ps}(T) - R \right)}}.$$

В качестве детальной кинетики, описывающей горение водородно-кислородной смеси, рассматривается модель Petersen-Hanson (PH) [6]. Модель включает $NS = 9$ компонент смеси ($H_2, O_2, H, O, OH, HO_2, H_2O_2, H_2O$ и N_2) и $NR = 18$ элементарных реакций. Значения стехиометрических коэффициентов, скоростей прямых и обратных реакций, коэффициентов взаимодействий с третьими телами приведены в [6]. Адекватность и применимость данной кинетики для численного моделирования химических реакций в водородно-воздушных и водородно-кислородных смесей подтверждается рядом работ (см., например, ссылки в [3]).

Вычислительный алгоритм. Важной особенностью вычислительного алгоритма в данной работе является использование полностью неструктурированных треугольных расчетных сеток. Координаты узлов сетки определяются таким образом, чтобы удовлетворить условию триангуляции Делоне. Построение расчетных сеток реализовано с использованием свободно распространяемого программного обеспечения SALOME [7].

Вычислительный алгоритм основан на методе расщепления по физическим процессам Strang [8]. При переходе с одного временного слоя на другой сначала проводится учет конвективной части уравнений без учета химической кинетики, а затем рассчитывается вклад химической кинетики без учета движения газа.

Дискретизация пространственной части определяющей системы уравнений проводится с использованием конечно-объемного метода. численный поток рассчитывается с использованием схемы AUSM [9], расширенной для случая многокомпонентной смеси.

Интегрирование системы уравнений по времени осуществляется с использованием метода Рунге-Кутты второго порядка точности. При этом шаг по времени выбирается динамически из условия устойчивости численной схемы [10].

Эффект от химических реакций без учета конвекции принимается во внимание на втором этапе расщепления по процессам. На данном этапе в каждой ячейке расчетной сетки происходит решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), описывающих изменения значений молярных концентраций компонент и температур за счет химических превращений. Система уравнений имеет вид

$$\frac{dc_s}{dt} = \sum_{j=1}^{NR}\left(\sum_{l=1}^{NS}\alpha_{lj}c_l\right)^{\beta_j}\left(\gamma''_{js}-\gamma'_{js}\right)\left[K_{fj}\prod_{i=1}^{NS}c_i^{\gamma'_{js}} - K_{bj}\prod_{i=1}^{NS}c_i^{\gamma''_{js}}\right],\ s=1,2,...,NS,$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{RT\sum_{s=1}^{NS}\frac{dc_s}{dt} - \sum_{s=1}^{NS}\left(h_s(T)\frac{dc_s}{dt}\right)}{\sum_{s=1}^{NS}\left(c_s\left(C_{ps}(T)-R\right)\right)}.$$

Система интегрируется на промежутке времени Δt^n. В соответствии с методом расщепления, в качестве начальных условий системы ОДУ используются результаты, полученные на предыдущем газодинамическом этапе. Система решается с использованием неявного метода Эйлера и линеаризации по методу Ньютона.

Описанный вычислительный алгоритм основан на алгоритме, построенном для случая двухкомпонентной смеси (реагент и продукт) и постоянного значения показателя адиабаты [11]. Приведенная выше методика представляет обобщение, учитывающее особенности детальной кинетики. Вычислительный алгоритм для случая двухкомпонентной смеси и одностадийной кинетики распараллелен методом декомпозиции расчетной области с использованием библиотеки MPI (см, например, [12]).

Верификация и результаты вычислительных экспериментов. Практическая оценка порядка аппроксимации вычислительного алгоритма на задаче о эволиции изоэнтропического вихря [13] в инертной смеси дает величину около двух. Результаты по данному тесту, для случая двухкомпонентной смеси, могут быть найдены в работах [11,14]. Для верификации алгоритма в части использования модели Petersen-Hanson была рассмотрена задача о воспламенении

стехиометрической водородно-воздушной смеси в нульмерной постановке. На рис. 2 представлены зависимости массовых долей компонентов смеси от времени для случая, когда давление в начальный момент 1 атм, а температура 1000 К. Полученные графики близки к результатам [3]. Сравнительно небольшое различие в графиках может быть связано с тем, что коэффициенты $a_{1s}, a_{1s}, \ldots$ в [3], используемые для расчетов теплоемкостей и других термодинамических характеристик, взяты из другой базы данных. В данной работе не ставилось целью добится полного совпадения результатов. Было важно установить, что модель химической кинетики работает корректно и может быть использована для решения комплексных проблем, включающих горение и детонацию в водородно-воздушных и водородно-кислородных смесях. Данная модель кинетики была также использована в работе [15], где исследовались режимы пульсаций величин за детонационной волной и их механизмы. Показано, что режимы пульсаций, полученные с использованием данной кинетики, оказываются качественно близкими к режимам, полученным при использовании другой детальной кинетики (см. ссылки в [15]).

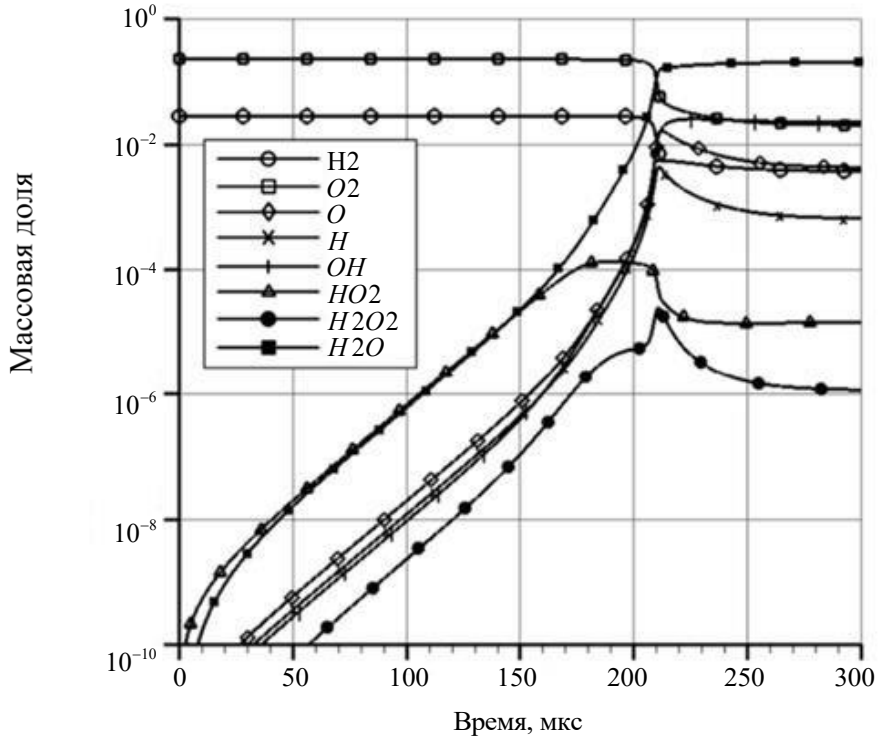


Рис. 2. Зависимость массовых долей компонент водородно-воздушной смеси от времени при начальном давлении 1 атм и температуре 1000 К

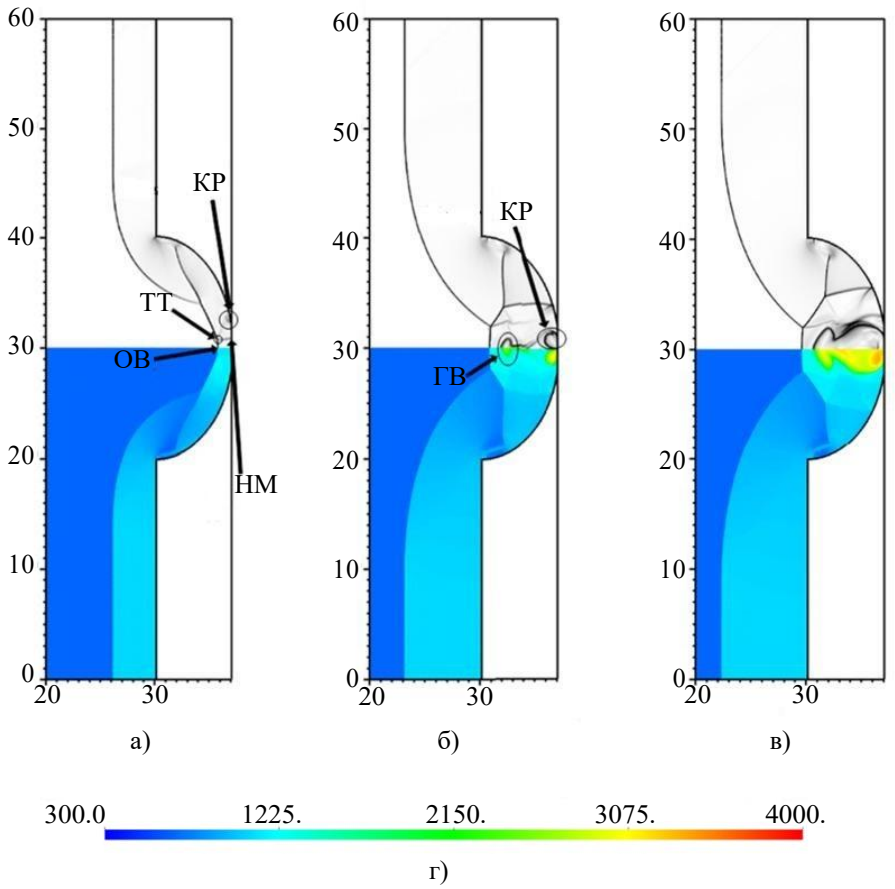


Рис. 3. Численные шлирен визуализации (сверху) и распределения температуры (снизу) в последовательные моменты времени для случая детальной кинетики и числа Маха начальной УВ 2.7: а) — 8.5 мкс, б) — 14 мкс, в) — 15.5 мкс, г) — температурная шкала в градусах Кельвина. Длины указаны в миллиметрах

Рассмотрим процесс инициирования детонации в плоском канале с профилированным торцом эллиптической формы. Расчеты проводились на треугольной сетке со средним размером ребра 35 мкм и числом треугольников 1 500 000. Некоторые стадии процессов показаны на Рис. 3, где представлены температурные распределения и численные шлирен визуализации в последовательные моменты времени. Шлирен визуализация используется для определения градиентов плотности в сжимаемой среде (см., например, [16]), и может быть использована для визуализации и локализации скачков, ударных и детонационных волн.

В начальные моменты времени УВ с числом Маха 2.7 взаимодействует со стенками эллиптической формы с образованием структур близких к структурам, возникающим при дифракции УВ на клине. Наблюдаются (см., рис. 3а) такие структуры, как тройная точка (ТТ) вблизи эллиптической поверхности, ножка Маха (НМ), отра-

женная волна (ОВ), контактный разрыв (КР). Отражение падающей волны от торца происходит в момент времени около 6.5 мкс. В момент времени около 9 мкс происходит соударение ножек маха на оси эллиптического отражателя, что приводит к повышению давления и температуры внутри полости отражателя. Повышение значений параметров приводит к воспламенению смеси в двух областях на оси (см. рис. 3б). В первой области (у торца) наблюдается распространение контактных разрывов, во второй происходит развитие пары грибовидных вихрей (ГВ), появление которых обусловлено отражением потока от торца канала. Область горения постепенно расширяется, занимая пространство между данными структурами. Фронт горения распространяется от оси симметрии (см. рис. 3в). Инициирование детонации происходит в момент времени 17 мкс внутри эллиптической полости. Распространение ДВ в последующие моменты времени происходит преимущественно в сторону от торца отражателя. Таким образом, наблюдаемая детонация происходит, главным образом, за счет взаимодействия и фокусировки волн, отраженных от криволинейного участка торца элиптической формы.

Были также проведены расчеты инициирования детонации с использованием одностадийной кинетики химических реакций с параметрами кинетики, взятыми из [17] и отвечающими рабочим давлениям и температурам в данной задаче. Полученные картины инициирования и распространения ДВ качественно соотносятся с результатами, полученными с использованием детальной кинетики. Инициирование детонации происходит в момент времени около 13 мкс по механизму, близкому описанному выше. Горение смеси происходит в областях у оси симметрии. При этом температурные градиенты имеют более высокие значения, и горение происходит более интенсивно из-за качественных различий в кинетических механизмах. Отметим также, что для сопоставления картин инициирования детонации было решено для случая одностадийной кинетики рассмотреть значение числа Маха 2.6. Данное значение ниже, чем число Маха 2.7, которое реализовано для случая детальной кинетики. Такая поправка направлена на то, чтобы компенсировать отсутствие эндотермических участков при использовании одностадийной кинетики, из-за чего горение и детонация происходят интенсивнее, чем в случае детальной кинетики. С учетом данных поправок распространение зон горения смеси после отражения УВ от торца происходят схожим образом (рис. 4а). Инициирование детонации также происходит в момент времени около 17 мкс (рис. 4б).

Анализ полученных картин течения показывает, что для числа Маха падающей волны 2.7 времена инициирования детонации отличаются на величину порядка 15 %. Принимая во внимание, что полученные картины инициирования детонации качественно схожи, мож-

но отметить, что одностадийная кинетика может приводить к результатам, которые качественно близки к результатам, полученным с использованием детальной кинетики химических реакций. Для уменьшения количественных различий может быть скорректирована постановка в случае использования одностадийной кинетики, например, путем изменения числа Маха падающей волны.

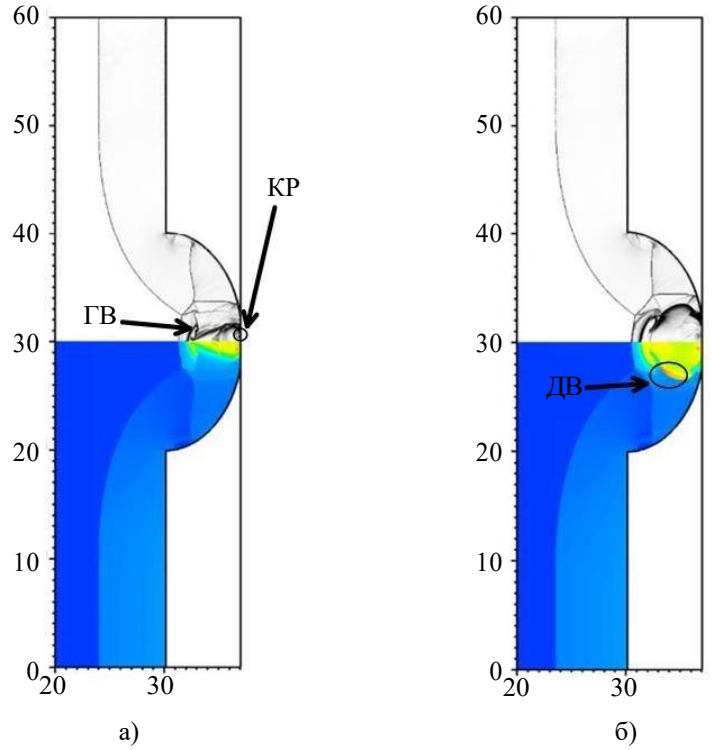


Рис. 4. Численные шлирен визуализации (сверху) и распределения температуры (снизу) в последовательные моменты времени для случая одностадийной кинетики и числа Маха начальной УВ 2.6: а) — 16 мкс, б) — 16.5 мкс. Температурная шкала совпадает со шкалой рис. 3. Длины указаны в миллиметрах

Заключение. В работе проводится математическое моделирование инициирования газовой детонации в двумерной постановке на треугольных неструктурированных расчетных сетках с использованием детальной модели кинетики химических реакций. Описан вычислительный алгоритм, основанный на использовании метода конечных объемов. Проведена верификация алгоритма в части реализации модели Petersen-Hanson на задаче о воспламенении водородно-воздушной смеси в нульмерной постановке.

Получена картина инициирования детонации в модельной водородно-кислородной смеси при отражении ударной волны с числом Маха 2.7 от профилированного торца канала, содержащего эллипти-

ческий отражатель. Описан сценарий воспламенения и инициирования детонации в смеси. Сравнение результатов в случае использования детальной и одностадийной кинетики горения смеси показывает качественно схожие сценарии инициирования. Количественные различия обусловлены недостатками одностадийной кинетики, которые могут быть частично устранены за счет скорректированных значений параметров задачи.

Работа А.И. Лопато выполнена в рамках госзадания ИАП РАН.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Gelfand B.E., Khomik S.V., Bartenev A.M., Medvedev S.P., Gronig H., Olivier H. Detonation and deflagration initiation at the focusing of shock waves in combustible gaseous mixture. *Shock Waves*, 2000, vol. 10, pp. 197–204.

[2] Vasil'ev A.A. Cellular structures of a multifront detonation wave and initiation (review). Combust. Explos. *Shock Waves*, 2005, vol. 51, no. 1, pp. 1–20.

[3] Togashi F., Lohner R., Tsuboi N. Numerical simulation of H_2/air detonation using unstructured mesh. *Shock Waves*, 2009, vol. 19, pp. 151–162.

[4] Liberman M., Wang C., Qian C., Liu J. Influence of chemical kinetics on spontaneous waves and detonation initiation in highly reactive and low reactive mixtures. *Combustion Theory and Modelling*, 2019, vol. 23, no. 3, pp. 467–495.

[5] https://burcat.technion.ac.il/. Last accessed 10 February 2025.

[6] Petersen E.L., Hanson R.K. Reduced kinetics mechanisms for RAM accelerator combustion. *Journal of Propulsion and Power*, 1999, vol. 15, no. 4, pp. 591–600.

[7] Salome. The open space integration platform for numerical simulation. https://www.salome-platform.org. Last accessed 10 February 2025.

[8] Toro E.F. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: a Practical Introduction. 3rd edition*. Berlin, Springer, 2009, 724 p.

[9] Liou M.-S., Steffen C.J.Jr. A new flux splitting scheme. *Journal of Computational Physics*, 1993, no. 107, pp. 23–39.

[10] Mavriplis D.J. Accurate multigrid solution of the Euler equations on unstructured and adaptive meshes. *AIAA J.*, 1990, vol. 28, pp. 213–221.

[11] Lopato A.I., Utkin P.S. Numerical study of detonation wave propagation in the variable cross-section channel using unstructured computational grids. *Journal of Combustion*, 2018, art. 3635797.

[12] Лопато А.И. Математическое моделирование инициирования детонации в канале с профилированным торцом с использованием параллельных вычислений. *Математическое моделирование и численные методы*, 2023, № 4, с. 15–26.

[13] Hu C., Shu C.W. Weighted essentially non-oscillatory schemes on triangular meshes. *Journal of Computational Physics*, 1999, vol. 150, no. 1, pp. 97–127.

[14] Lopato A.I., Eremenko A.G., Utkin P.S., Gavrilov D.A. Numerical simulation of detonation initiation: the quest of grid resolution. In: Jain L., Favorskaya M., Nikitin I., Reviznikov D. (eds) *Advances in Theory and Practice of Computational Mechanics. Smart Innovation, Systems and Technologies*, 2020, vol. 173, pp. 79–89.

[15] Лопато А.И. Математическое моделирование распространения пульсирующей волны газовой детонации в водородно-воздушной смеси с использо-

ванием детальной кинетики химических реакций. *Математическое моделирование и численные методы*, 2024, № 3, с. 65–80.

[16] Hadjadj A., Kudryavtsev A. Computation and flow visualization in high-speed aerodynamics. *Journal of Turbulence*, 2005, vol. 6, no. 16, pp. 1–25.

[17] Schultz E., Shepherd J. *Validation of detailed reaction mechanisms for detonation simulation*. Graduate Aeronautical Laboratories California Institute of Technology, explosion dynamics laboratory report FM99-5, 2000.

Статья поступила в редакцию 13.02.2025

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Лопато А.И., Кравченко А.Н. Математическое моделирование инициирования детонационной волны с использованием одностадийной и детальной кинетики химических реакций. *Математическое моделирование и численные методы*, 2025, № 2, с. 37–49.

Лопато Александр Игоревич — к.ф.-м.н., доцент, с.н.с., ИАП РАН. e-mail: lopato2008@mail.ru

Кравченко Анастасия Николаевна — старший преподаватель, Московский физико-технический институт. e-mail: kravchenko.an@phystech.edu

Mathematical modeling of detonation wave initiation using one-stage and detailed kinetics of chemical reactions

© A.I. Lopato[1], A.N. Kravchenko[2]

[1]ICAD RAS, Moscow, 123056, Russia
[2]MPIT, Phystech, Moscow, 117303, Russia

The work is devoted to the numerical study of detonation initiation in a flat channel during shock wave reflection from the profiled end wall of the channel. The geometry of the end wall consists of a semi-ellipse and two sections of a flat wall. The mathematical model is based on the two-dimensional system of Euler equations supplemented by the kinetics of combustion of the hydrogen-oxygen mixture at low pressures. The application of both global one-stage and detailed kinetics is considered. The Petersen-Hanson kinetics is used as a detailed kinetics. Calculations are carried out using the finite volume method. Unstructured triangular computational grids are applied. The numerical method of the second approximation order is used. The process of reflection of the incident shock wave from the end wall and transition of the shock wave into a detonation wave is described. The results of the detonation initiation process obtained using two different types of mixture combustion kinetics are compared.

***Keywords**: mathematical modeling, detonation wave, one-stage kinetics, Petersen-Hanson kinetics*

REFERENCES

[1] Gelfand B.E., Khomik S.V., Bartenev A.M., Medvedev S.P., Gronig H., Olivier H. Detonation and deflagration initiation at the focusing of shock waves in com-

bustible gaseous mixture. *Shock Waves*, 2000, vol. 10, pp. 197–204.
[2] Vasil'ev A.A. Cellular structures of a multifront detonation wave and initiation (review). Combust. Explos. *Shock Waves*, 2005, vol. 51, no. 1, pp. 1–20.
[3] Togashi F., Lohner R., Tsuboi N. Numerical simulation of H_2/air detonation using unstructured mesh. *Shock Waves*, 2009, vol. 19, pp. 151–162.
[4] Liberman M., Wang C., Qian C., Liu J. Influence of chemical kinetics on spontaneous waves and detonation initiation in highly reactive and low reactive mixtures. *Combustion Theory and Modelling*, 2019, vol. 23, no. 3, pp. 467–495.
[5] https://burcat.technion.ac.il/. Last accessed 10 February 2025.
[6] Petersen E.L., Hanson R.K. Reduced kinetics mechanisms for RAM accelerator combustion. *Journal of Propulsion and Power*, 1999, vol. 15, no. 4, pp. 591–600.
[7] Salome. The open space integration platform for numerical simulation. https://www.salome-platform.org. Last accessed 10 February 2025.
[8] Toro E.F. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: a Practical Introduction. 3rd edition*. Berlin, Springer, 2009, 724 p.
[9] Liou M.-S., Steffen C.J.Jr. A new flux splitting scheme. *Journal of Computational Physics*, 1993, no. 107, pp. 23–39.
[10] Mavriplis D.J. Accurate multigrid solution of the Euler equations on unstructured and adaptive meshes. *AIAA J.*, 1990, vol. 28, pp. 213–221.
[11] Lopato A.I., Utkin P.S. Numerical study of detonation wave propagation in the variable cross-section channel using unstructured computational grids. *Journal of Combustion*, 2018, art. 3635797.
[12] Lopato A.I. Mathematical modelling of detonation initiation in the channel with the profiled end using parallel computations. *Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2023, 4, pp. 15–26.
[13] Hu C., Shu C.W. Weighted essentially non-oscillatory schemes on triangular meshes. *Journal of Computational Physics*, 1999, vol. 150, no. 1, pp. 97–127.
[14] Lopato A.I., Eremenko A.G., Utkin P.S., Gavrilov D.A. Numerical simulation of detonation initiation: the quest of grid resolution. In: Jain L., Favorskaya M., Nikitin I., Reviznikov D. (eds) *Advances in Theory and Practice of Computational Mechanics. Smart Innovation, Systems and Technologies*, 2020, vol. 173, pp. 79–89.
[15] Lopato A.I. Mathematical modeling of the propagation of a pulsating detonation wave in a hydrogen-air mixture using detailed kinetics of chemical reactions. *Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2024, 3, pp. 65–80.
[16] Hadjadj A., Kudryavtsev A. Computation and flow visualization in high-speed aerodynamics. *Journal of Turbulence*, 2005, vol. 6, no. 16, pp. 1–25.
[17] Schultz E., Shepherd J. *Validation of detailed reaction mechanisms for detonation simulation*. Graduate Aeronautical Laboratories California Institute of Technology, explosion dynamics laboratory report FM99-5, 2000.

Lopato A.I., Cand. Sc. (Phys. — Math.), Associate Professor, Senior Researcher, ICAD RAS. e-mail: lopato2008@mail.ru

Kravchenko A.N., Senior Lecturer, MPIT, Phystech. e-mail: kravchenko.an@phystech.edu