

Возможность «физической детонации» в потоке предварительно колебательно- возбуждённого водорода в ударной трубе

С.В. Куликов, Червонная Н.А., Терновая О.Н.

Институт проблем химической физики РАН

Представляемая работа инициирована проблемой “физической детонации”, т.е. возможностью при определенных условиях вызывать детонацию за счёт выделения не химической, а физической энергии, заранее сосредоточенной на внутренних степенях свободы, например, в колебательно-возбужденных молекулах. Колебательно-возбуждённый H_2 является наиболее подходящим газом для реализации “физической детонации” (Евтюхин Н.В., Марголин А.Д., Шмелёв В.М. // Хим. Физика. 1985. Т. 4. № 9.) Недавно удалось в численном эксперименте реализовать “физическую детонацию” в ударной трубе (УТ) для предварительно полностью возбужденного до колебательной температуры 3000К H_2 (Куликов С.В., Червонная Н.А., Терновая О.Н.// Журнал технической физики, 2016. Т. 86. Вып. 8. С. 42-47.). В докладываемой работе предпринята попытка численно получить для H_2 “физическую детонацию” в более мягких условиях.

Постановка задачи

В начальный момент канал низкого давления (КНД) ударной трубы заполнялся частично колебательно-возбуждённым H_2 (например, электрическим разрядом). Задавалась определённая колебательная температура возбуждённой части H_2 . При этом вращательная и поступательная температуры полагались равны комнатной T_1 , которая конкретно задавалась равной 292К. И второй частью является полностью равновесный H_2 с T_1 . Камера высокого давления (КВД) заполняется H_2 при более высоком давлении и температуре. После «удаления» диафрагмы начинается численное моделирование процесса в УТ.



Методика моделирования

Моделирование было выполнено в одномерном пространстве координат и трехмерном пространстве скоростей. Применялся метод Монте-Карло нестационарного статистического моделирования (ММКНСМ) (или direct simulation Monte Carlo (DSMC) в англоязычной литературе), основоположником которого является Бёрд. Моделируемая среда заменялась системой модельных частиц. В первый момент времени в соответствии с начальными условиями данные частицы имели заданные скорости и были распределены по ячейкам, на которые разбито исследуемое пространство координат. Полагалось, что столкновения парные и могут происходить с определенной вероятностью только между частицами, находящимися в одной ячейке.

Процесс эволюции рассматриваемой системы за интервал времени Δt расщепляется на два этапа: 1) только перемещение частиц с неизменными скоростями (этап A); 2) только изменение скоростей частиц в результате их столкновений (этап B).

Молекулы при столкновениях представлялись в виде жестких сфер.

Используемая схема моделирования подробно описана в (Генич А.П., Куликов С.В., Манелис Г.Б., Сериков В.В., Яницкий В.Е.// Ж. вычисл. матем. и матем.физ. 1986. Т.26. № 12. С.1839-1854; Куликов С.В., Соловьева М.Е. // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1988. Т.28. №12. С.1867-1873.)

ММКНСМ автоматически полностью учитывает детали процесса тепломассопереноса включая теплопроводность и все виды диффузии. Модельная система при этом эволюционирует соответственно уравнению Больцмана.

Моделирование этапа столкновений

Обозначенная как $A_l^{(i)}$, i -я модельная частица сорта l характеризовалась массой m_l , скоростью $c_l^{(i)}$, расположением в потоке $x_l^{(i)}$ и весовым множителем $\eta_l^{(i)}$, который показывает число реальных молекул, представляемых данной модельной частицей. Концентрация реальных молекул в ячейке j , имеющей объём V_j , даётся следующим выражением:

$$n_l^{(j)} = \sum \eta_l^{(i)} / V_j$$

Используемым параметром столкновений являлось интегральное сечение упругого столкновения σ_{lm}^{ik} между частицами и $A_l^{(i)}$ и $A_m^{(k)}$.

Следующие обозначения были использованы ниже:

$$\Theta_{lm} = \max\{\eta_l, \eta_m\}, \quad \theta_{lm} = \min\{\eta_l, \eta_m\}.$$

Здесь далее индексы номеров частиц и ячеек для простоты опускаются.

На этапе B эволюция системы моделировалась в несколько (k) шагов. На каждом из этих шагов взаимодействие пар частиц в рассматриваемой ячейке происходило в течении момента времени $\Delta t^* = \Delta t / k$. Моделирование каждого такого шага проводилось по урновой схеме испытаний. Для этого все пары частиц в ячейке разбивались на совокупности, характеризующиеся сортами частиц образующих пары; например, пары из частиц сорта 1, пары из частиц сортов 1 и 2, и т.д.. Из каждой совокупности равновероятно выбирается только одна пара частиц, например A_l и A_m . Эволюция состояния этой пары частиц моделировалась по схеме, представленной ниже.

Шаг 1. Взаимодействие частиц A_l и A_m разыгрывалось с вероятностью

$$Q_{lm} = K_{lm} \Theta_{lm} \sigma_{lm} g_{lm} \Delta t^* / V$$

Здесь K_{lm} число пар частиц в рассматриваемой совокупности. Число k выбиралось так, чтобы Q_{lm} было немного меньше единицы. Если результат испытания отрицательный, то следующий шаг для данной пары частиц не выполняются.

Шаг 2. Скорости частиц A_l и A_m заменялись на c_l^* и c_m^* с вероятностями θ_{lm} / η_l и θ_{lm} / η_m соответственно.

Было проведено моделирование с простейшим учетом релаксации вращательных и колебательных степеней свободы молекул. Использовалась модель со стоком энергии. Суть этой модели в том, что при реализации акта столкновения внутренние энергии молекул изменялись на небольшие величины так, чтобы эти энергии приближались к равновесным значениям, соответствующим поступательной энергии молекул в данный момент.

Использовалось 274 процессора ЭВМ MVS100K Межведомственного суперкомпьютерного центра. Применялась блочная декомпозиция области моделирования. Последняя разбивалась на домены, каждый из которых обслуживался отдельным процессором. Информация о частицах, перешедших из одного домена в другой, передавалась с помощью стандартных программ библиотеки MPI.

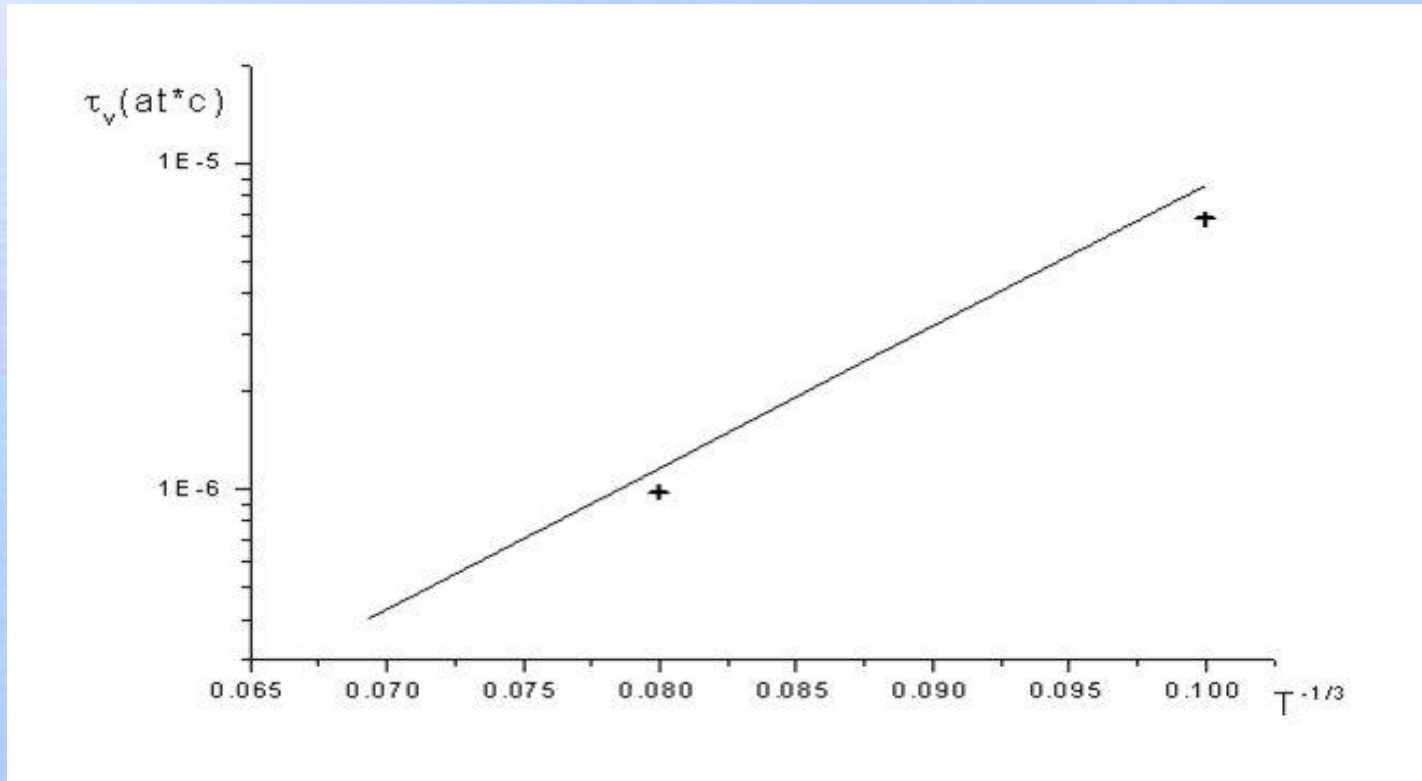
Т.к. давление в КВД гораздо больше, чем КНД, то для того, чтобы $\Delta x < \lambda$, область моделирования в КВД первоначально разбивалась на ячейки в 20 раз меньшего размера Δx , чем в КНД. Во время счета в той части КНД, куда поступил газ из КВД, размер Δx уменьшался также в 20 раз.

С целью использования разумного числа модельных частиц, в начале моделирования весовые множители частиц H_2 в КВД были больше, чем для частиц в КНД. Но первоначально внутри каждой из этих областей весовые множители частиц одного сорта равнялись друг другу.

Проверка заложенной модели колебательной релаксации

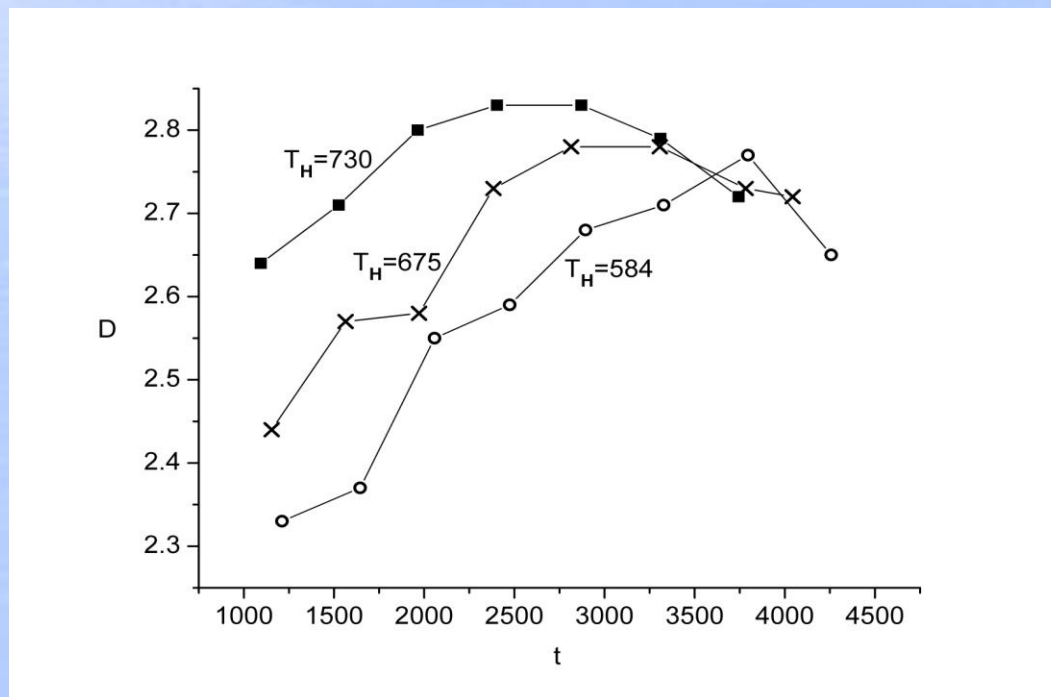
Были подобраны параметры модели колебательной релаксации со стоком энергии, которые обеспечивали реальные τ_v для H_2 при различных температурах. Использовалась определяющая формула для τ_v :

$$dT_v / dt = (T_v - T_{v1}) / \tau_v$$



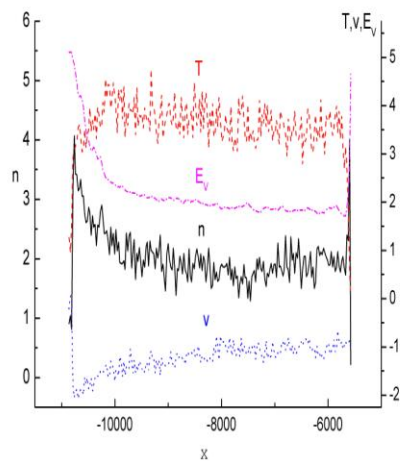
Результаты моделирования

Первоначально было проведено моделирование для случаев возбуждения 85 и 75% H_2 до 3000К. Для увеличения скорости волны D в начале использовался подогрев газа в КВД до температуры T_H , что приводило к увеличению перепада давлений между КВД и КНД. Приведены зависимости D от времени моделирования для различных температур в КВД при степени возбуждения H_2 $\alpha=0,85$. Видно, что скорости волн со временем увеличиваются и с точностью до статистического разброса выходят на одно значение. Это свидетельствует о том, что волна переходит в детонационную, когда её скорость не зависит от условий инициирования.

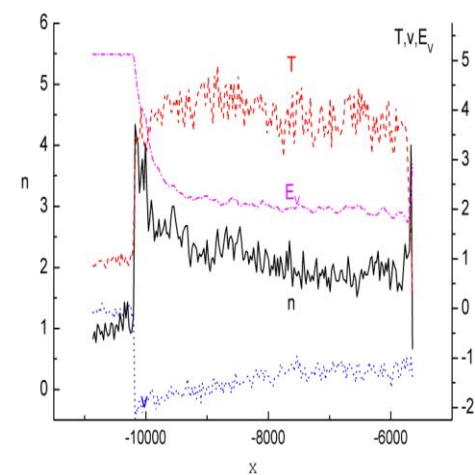
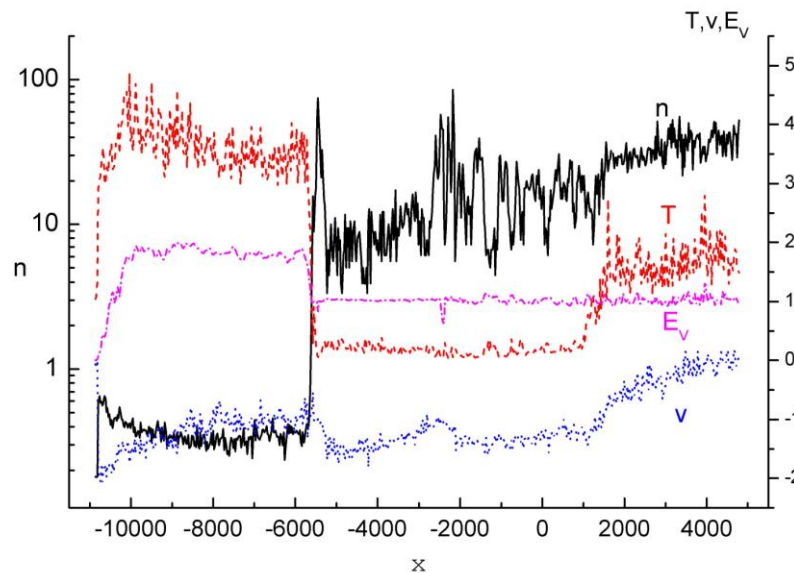


Здесь приведены в момент времени 4257,775, когда уже сформировалась детонационная волна, профили параметров потока для случая $T_H=584\text{K}$: слева – T , E_v , n , v в для колебательно-возбуждённого H_2 ; в центре – эти же профили для невозбуждённого H_2 . Следует отметить возмущение n и v в районе $x = -2000$, которое связано с изменением D по ходу моделирования и служит необходимым признаком перехода ударной волны в детонационную. После того, как сформировалась детонационная волна, профили параметров потока для предварительно колебательно-возбуждённого H_2 в области, где он ударно-нагрет, практически совпадают для всех трёх случаев, как и должно быть. Следует отметить, что это верно для времён, когда эти области близки по размеру друг другу.

При $\alpha=0,75$ детонация не была обнаружена.

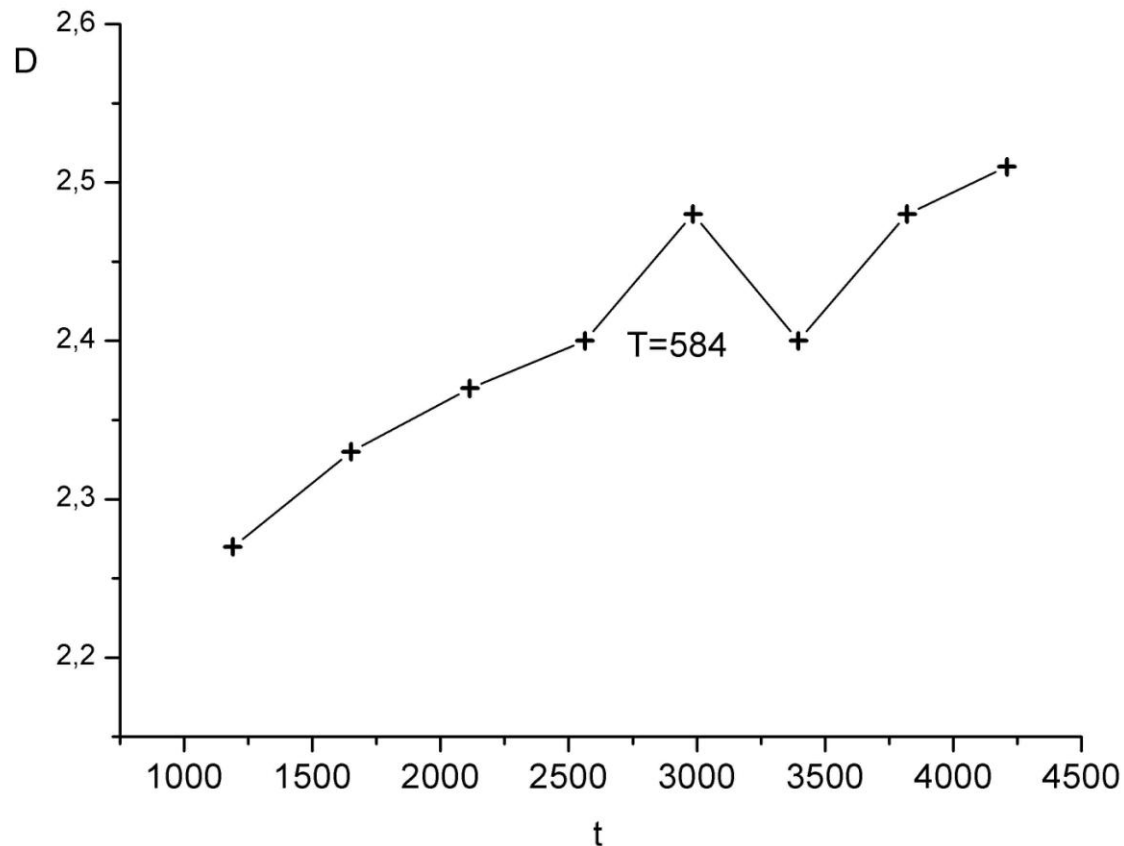


$T_H=584\text{K}$



$T_H=730\text{K}$

Далее была проведена серия расчётов с $\alpha=0,85$ при меньших колебательных температурах первоначально возбуждённой части H_2 . Моделирование показало, что даже при $T_{v1}=2600\text{K}$ возникает детонация. Об этом свидетельствует приведённая ниже зависимость D от времени моделирования для $T_H=584\text{K}$.



Заключение

Была создана мощная вычислительная программа для многопроцессорной ЭВМ, которая была применена для численного моделирования течения предварительно возбуждённого частично H_2 в ударной трубе. Полученные результаты показывают, что для степени колебательного возбуждения H_2 85% и более и при значениях колебательной температуры 2600К и более имеет место “физическая детонация”. Данные результаты будут полезны для экспериментаторов, желающих на практике получить “физическую детонация”.

Авторы благодарят МСЦ за предоставленные вычислительные ресурсы.

Спасибо за внимание