



بررسی تاثیرات طول میدان محاسباتی در شبیه سازی عددی تراک گازی

سعید پروار¹، کیومرث مظاهری^{2*}

1- کارشناسی ارشد مهندسی هوافضا، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

2- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

* صندوق پستی 14115-111، kiumars@modares.ac.ir، تهران

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل
دریافت: 31 شهریور 1393
پذیرش: 08 آبان 1393
ارائه در سایت: 18 آذر 1393

کلید واژگان:

تراک گازی

نقطه CJ

شرایط مرزی غیرانعکاسی

روش مشخصه

برش میدان محاسباتی

چکیده

شبیه سازی عددی تراک گازی از جمله مسائل پیچیده در زمینه شبیه سازی عددی است. با توجه به وجود نقطه صوتی (نقطه CJ) در انتهای ناحیه واکنش تراک و ایزوله شدن ناحیه واکنش و شوک پیشرو از اغتشاشات جریان دوردست، در اکثر شبیه سازی های عددی، میدان محاسباتی با استفاده از شرایط مرزی مصنوعی در دوردست برش داده می شود. استفاده از این نوع شرایط مرزی موجب به وجود آمدن یک سری امواج مجازی و در نتیجه ورود خطا در محاسبات می شود. بنابراین، برای کاهش دادن این اثرات منفی، میدان محاسباتی به اندازه کافی بزرگ فرض می شود. هدف از مطالعه حاضر بررسی اثرات طول و عرض میدان در شبیه سازی عددی این پدیده و همچنین بررسی نقش انرژی فعال سازی بر طول میدان محاسباتی است. برای کاهش اثرات منفی برش میدان، از شرط مرزی غیرانعکاسی در دوردست استفاده می شود. در کار حاضر، از روش مشخصه ها برای اعمال شرط مرزی غیرانعکاسی استفاده شد. با استفاده از مفاهیم اشاره شده، یک طول محدود به عنوان طول میدان محاسباتی تعریف می شود. مقدار مناسب این طول برای چند انرژی فعال سازی برای دو حالت یک و دوبعدی به دست آمد. افزایش انرژی فعال سازی منجر به افزایش طول ناحیه واکنش می شود. بنابراین، طول متناسب میدان محاسباتی برای انرژی فعال سازی بالاتر افزایش می یابد. مقایسه زمان مورد نیاز برای حل کامل میدان با میدان برش خورده حاکی از کاهش قابل توجه این زمان بود.

A Systematic study of the domain length for simulation of gaseous detonation

Saeed Parvar¹, Kiumars Mazaheri^{1*}

1- Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran

* P.O.B. 14115-111 Tehran, Iran, kiumars@modares.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 22 September 2014
Accepted 30 October 2014
Available Online 09 December 2014

Keywords:

Gaseous Detonation
CJ point
Non-reflecting Boundary Condition
Characteristic Method
Truncating domain

ABSTRACT

Numerical simulation of gaseous detonation is one of the most challenging problems in computational fluid dynamics (i.e., CFD). The presence of sonic locus at the end of the reaction zone isolates the reaction zone and the leading shock from the far-field flow perturbations, so, computational domain may be truncated by artificial boundary conditions. However, some artificial boundary conditions generate spurious waves that introduce some errors into the results. The computational domain is usually considered very large for protecting the domain from spurious waves. A systematic study of boundary conditions' role in simulation of self-sustained detonation has not been performed yet. In the present study an attempt is made to investigate the influence of the width and length of the computational domain on numerical simulation and the effect of activation energy on the length and width of the domain. Instead of considering a very large domain, the so-called non-reflecting boundary condition is implemented in the present investigation. Characteristics method was employed to define the non-reflecting boundary conditions. Finite length of domain was computed for 1D and 2D simulations. Suitable length of the domain was determined for different activation energies. The results indicate that the suitable length and width of the domain for high activation energy mixtures are larger with respect to the corresponding length and width for low activation energy mixtures. Results also show that, using non-reflecting boundary condition, the computational time decreases considerably for both one and two-dimensional simulations.

1- مقدمه

نظریه در مورد تراک توسط چاپمن¹ و جوگت² 1905 ارائه شد و به تئوری CJ³ مشهور شد [1]. این تئوری موج تراک را یک بعدی، پایا و با

تراک گازی یک موج احتراقی است که با استفاده از انرژی آزاد شده از احتراق تقویت شده و به حرکت خود با سرعت مافوق صوت ادامه می دهد. اولین

1- Chapman
2- Jouguet
3- Chapman-Jouguet

$Ea/RT_0=28$ طول میدان را 20 برابر طول نیمه واکنش و برای انرژی فعال‌سازی $Ea/RT_0=35$ این طول را برابر با 60 در نظر گرفت. در کار نامبرده، بررسی سیستماتیک بر روی اثر طول میدان بر نتایج انجام نشد.

در کار حاضر، با توجه به آنکه تاکنون اثر پارامتر طول میدان برش خورده بر نتایج و همچنین اثر انرژی فعال‌سازی بر پارامتر طول به‌طور سیستماتیک برای تراک خوداتکا مورد بررسی قرار نگرفته است، به بررسی سیستماتیک این دو پارامتر و پیدا کردن طول بهینه با توجه به انرژی فعال‌سازی مربوط به آن برای شبیه‌سازی یک و دوبعدی پرداخته می‌شود. همچنین، اثر برش دادن میدان بر کاهش زمان محاسبات نیز مورد بررسی قرار می‌گیرد.

2- معادلات حاکم

معادلات دینامیک گاز و سینتیک شیمیایی حاکم بر جریان اصلی با در نظر گرفتن چهار فرض اساسی استخراج شده‌اند. این فرضیات عبارت‌اند از: یک‌بعدی و یا دوبعدی بودن تحلیل، صرف‌نظر کردن از پدیده‌های انتقال مولکولی، استفاده از یک مدل ساده سینتیک شیمیایی برای واکنش‌های شیمیایی و استفاده از معادله حالت گاز کامل برای مواد اولیه و محصولات. بنابراین، از معادلات اولر واکنشی در کار حاضر استفاده شد که شکل برداری و بقایی و دوبعدی این معادلات در مختصات دکارتی به‌صورت معادله (1) و (2) است:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} = S \quad (1)$$

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \\ \rho \beta \end{bmatrix} \quad F = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (\rho E + p)u \\ \rho u \beta \end{bmatrix} \quad G = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (\rho E + p)v \\ \rho v \beta \end{bmatrix} \quad S = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \rho \dot{\omega} \end{bmatrix} \quad (2)$$

در معادلات (1) و (2)، S ترم چشمه ناشی از احتراق⁴ ناشی از احتراق و U و V مولفه سرعت ذره نسبت به یک دستگاه ساکن، ρ چگالی، P فشار سیال، β و $\dot{\omega}$ به‌ترتیب کسر جرمی و نرخ تولید محصولات طی فرآیند احتراق، و E انرژی داخلی کل بر واحد جرم است که از رابطه (3) محاسبه می‌شود. γ نیز نسبت گرمای ویژه و Q گرمای آزاد شده از واکنش شیمیایی هستند. E و $\dot{\omega}$ از روابط (3) و (4) به‌دست می‌آیند:

$$E = \frac{p}{\rho(\gamma - 1)} + \frac{u^2 + v^2}{2} + \beta Q \quad (3)$$

$$W = -k\beta \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) \quad (4)$$

Ea انرژی فعال‌سازی، T دما، R ثابت گازها و k پیش فاکتور (ثابت) آرنیوس است. در معادلات (1) تا (4)، فشار با $p_0\gamma$ چگالی با ρ_0 سرعت با سرعت صوت مخلوط نسوخته C_0 بی‌بعد شده‌اند. برای بی‌بعد کردن متغیرهای مکانی، از طول مشخصه مشهور به طول نیمه واکنش استفاده شده است. این

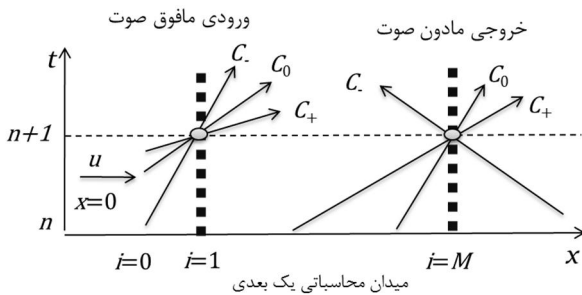
ضخامت ناچیز فرض می‌نماید. تئوری C_0 فقط به محاسبه پارامترهای ترمودینامیکی و در حال تعادل تراک می‌پردازد. طبق این تئوری جریان در پایین‌دست موج نسبت به موج ضربه‌ای صوتی بوده و موج تراک با سرعت ثابت C_0 حرکت می‌کند.

شبیه‌سازی عددی تراک گازی با توجه به شبیه‌سازی جریان مافوق صوت و واکنشی آن نیازمند یک شبکه محاسباتی ریز است. این امر سبب می‌شود که محققین، برای شبیه‌سازی، همواره با حجم بسیار زیاد محاسبات روبه‌رو شوند. بنابراین، محققین همواره سعی داشته‌اند که با ارائه راهکارهای گوناگون هزینه محاسباتی را کاهش دهند. یکی از روش‌های پیشنهادی استفاده از روش تعقیب شوک¹ است. در این روش، محل شوک تراک در هر لحظه مشخص می‌شود و برای حل میدان کافی است، در هر پله زمانی از نقطه شروع آغازش تا محل شوک پیشرو، معادلات حاکم حل شوند. این مزیت منجر به کاهش زمان و حجم محاسبات می‌شود. از طرف دیگر، وجود نقطه صوتی (نقطه C_0) در انتهای ناحیه واکنش تراک موجب ایزوله شدن ناحیه واکنش و شوک پیشرو از اغتشاشات جریان دوردست می‌شود. با استفاده از این خاصیت روش دیگری برای کاهش دادن حجم محاسبات پیشنهاد شده است. این روش برش دادن میدان با کمک شرایط مرزی مصنوعی² در دوردست است.

در شبیه‌سازی‌های متعدد تراک گازی از شرایط مرزی مصنوعی (خصوصاً شرایط مرزی گرادیان صفر) برای برش میدان استفاده شده است که از جمله این مطالعات می‌توان به تحقیقات گمزو در سال‌های 1998 و 1999 [3,7]، شارپ در سال 2000 [4]، لیانگ در سال 2005 و 2007 [5,6] و هنریک و همکاران در سال 2006 [7] اشاره کرد. استفاده از این روش موجب ثابت ماندن طول میدان در تمام مدت محاسبات و کاهش قابل توجه هزینه محاسباتی می‌شود. در این نوع مطالعات، برای کاهش اثرات نامطلوب مرز مصنوعی (امواج مجازی تولید شده)، میدان محاسباتی به‌اندازه کافی بزرگ در نظر گرفته می‌شود. هوانگ و همکاران [8] در سال 2000 به بررسی سیستماتیک تأثیر پارامتر طول بر نتایج، برای تراک بیش‌رانده³ یک‌بعدی مخلوطی با مشخصات ترمو-شیمیایی $Q/RT_0=50$ و $\gamma=1/2$ و انرژی فعال-سازی $Ea/RT_0=50$ با ضرایب بیش‌رانده متفاوت، پرداختند. مطالعات آن‌ها نشان داد که در نظر گرفتن میدانی با طول کم منجر به بروز خطا و در نتیجه تغییر محسوس فشار بیشینه محاسبه شده می‌شود. آن‌ها برای حل این مشکل یک رابطه وابسته به زمان برای محاسبه طول میدان برای ضریب بیش‌رانده $1/6$ و $1/5$ پیشنهاد کردند. برای کاهش اثرات منفی مرز مصنوعی می‌توان از شرایط مرزی غیرانعکاسی در دوردست نیز استفاده کرد. هان (2003) [9] با استفاده از شرایط مرزی غیرانعکاسی به شبیه‌سازی دوبعدی تراک گازی بیش‌رانده با ضریب بیش‌رانده $1/2$ و مخلوطی با مشخصات ترمو-شیمیایی $Q/RT_0=50$ و $Ea/RT_0=10$ و $\gamma=1/2$ پرداخت و طول مناسب میدان را 30 برابر طول نیمه واکنش به‌دست آورد. همچنین، وی نشان داد که استفاده از شرایط مرزی گرادیان صفر به‌جای شرط مرزی غیرانعکاسی (با فرض طول میدان برابر) منجر به خطای 50% در اندازه سلول‌های تراک می‌شود. کسیموف (2004) [10] از شرایط مرزی غیرانعکاسی برای شبیه‌سازی یک‌بعدی تراک گازی خوداتکا استفاده کرد. وی برای مخلوطی با مشخصات ترمو-شیمیایی $Q/RT_0=50$ و $\gamma=1/2$ و انرژی فعال‌سازی 25 تا

1- Shock Tracking
 2- Artificial boundary condition
 3- Over driven

4- Source term



شکل 2 طرحواره امواج ورودی و خروجی به میدان از مرزها و دامنه متناظر هریک از آنها [15]

$$\left(\frac{\partial v}{\partial t}\right) + (u)\left(\frac{\partial v}{\partial x}\right) = 0 \quad (7)$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial t} - c^2 \frac{\partial \rho}{\partial t}\right) + (u)\left(\frac{\partial p}{\partial x} - c^2 \frac{\partial \rho}{\partial x}\right) = 0 \quad (8)$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial t} + \rho c \frac{\partial u}{\partial t}\right) + (u + c)\left(\frac{\partial p}{\partial x} + \rho c \frac{\partial u}{\partial x}\right) = 0 \quad (9)$$

در معادلات سازگاری سرعت امواج مشخصه با λ_i (معادلات (10)) تا (12) [19-17]:

$$\lambda_1 = u - c \quad (10)$$

$$\lambda_2 = \lambda_3 = u \quad (11)$$

$$\lambda_4 = u + c \quad (12)$$

و دامنه هریک از امواج مشخصه با L_i (معادلات (13) تا (16)) نشان داده می‌شوند. در حقیقت دامنه امواج به کمک جمله‌های دوم معادلات سازگاری محاسبه می‌شوند.

$$L_1 = \lambda_1 \left(\frac{\partial p}{\partial x} - \rho c \frac{\partial u}{\partial x}\right) \quad (13)$$

$$L_2 = \lambda_2 \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right) \quad (14)$$

$$L_3 = \lambda_3 \left(\frac{\partial p}{\partial x} - c^2 \frac{\partial \rho}{\partial x}\right) \quad (15)$$

$$L_4 = \lambda_4 \left(\frac{\partial p}{\partial x} + \rho c \frac{\partial u}{\partial x}\right) \quad (16)$$

با استفاده از معادلات (13 تا 16)، روابطی برای محاسبه متغیرهای اولیه به دست می‌آید. با کمک روابط (17) تا (20) می‌توان مقادیر متغیرهای اولیه‌ای همچون فشار، سرعت در راستای x و y و چگالی را به کمک امواج ورودی و یا خروجی در مرزها تعیین کرد [19-17]. برای حالت یک‌بعدی نیز می‌توان، با حذف معادله (18) از معادلات، مقادیر شرایط مرزی را محاسبه کرد.

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\left(\frac{L_1 + L_4}{2}\right) \quad (17)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = L_2 \quad (18)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{\rho c} \left(\frac{L_1 - L_4}{2}\right) \quad (19)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{c^2} \left(-\frac{1}{2}(L_1 + L_4) + L_3\right) \quad (20)$$

4-1- تعریف شرایط مرزی غیرانعکاسی به کمک روش مشخصه

از شرایط مرزی غیرانعکاسی برای کاهش اثرات مرز مصنوعی در

طول مشخصه مسافتی است که در ساختار مدل ZND^1 متغیر پیشرفت واکنش به 0/5 می‌رسد. با توجه به فرضیات ذکر شده معادله حالت بی‌بعد به صورت رابطه (5) است.

$$p = \rho T \quad (5)$$

در شبیه‌سازی یک‌بعدی به علت عملکرد خوب روش PPM^2 از این روش به عنوان روش حل عددی استفاده شد [11,12]. برای شبیه‌سازی دوبعدی نیز یک روش پیوسته³ و بالادستی⁴ در فضای دوبعدی مورد استفاده قرار گرفته است [13,14].

3- شرایط مرزی و اولیه

برای شبیه‌سازی انتشار تراک یک کانال با ارتفاع بی‌بعد مشخص در نظر گرفته شد (شکل 1). جهت انتشار تراک از سمت چپ کانال به سمت راست است. برای مرزهای بالا و پایین از شرط مرزی دیوار انعکاسی (در حالت دوبعدی) استفاده شده است. در این حالت، مولفه بردار سرعت جریان عمود بر دیوار صفر است. با استفاده از شرایط مرزی غیرانعکاسی نیز میدان محاسباتی در هر لحظه و در فاصله مشخص از موج پیشرو (سمت چپ میدان) برش داده می‌شود.

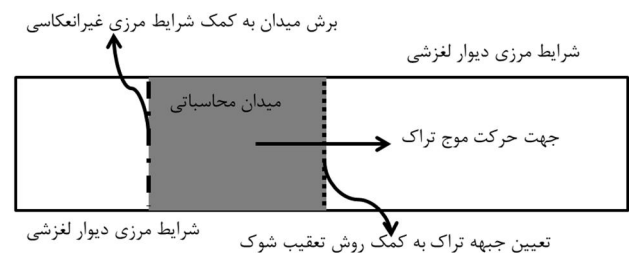
برای آغازش تراک از روش‌های گوناگون استفاده می‌شود که در کار حاضر برای شبیه‌سازی از روش پروفیل بلست استفاده شد.

4- استفاده از روش مشخصه برای تعریف شرایط مرزی

به طور کلی سیستم معادلات هایدرولیک شامل یک دسته از امواج هستند. شناسایی اندازه دامنه و مسیر حرکت امواج، با توجه به آنکه مقدار و مسیر تغییرات (و یا اغتشاشات) در محیط را مشخص می‌کنند، می‌تواند کمک شایانی به نحوه تعریف شرایط مرزی بنماید. شکل 2 طرحواره‌ای از امواج ورودی و خروجی به یک میدان جریان سیال یک‌بعدی از طریق مرزها را نشان می‌دهد. در این شکل، می‌توان مسیر مشخصه‌ها در دو حالت خروجی مادون صوت (شکل سمت راست) و ورودی مافوق صوت (شکل سمت چپ) را مشاهده کرد. روش مشخصه روشی است که براساس دو مفهوم فیزیکی امواج و ریاضی مشخصه‌ها توسعه یافته است. در این روش، معادلات مرزی را می‌توان به فرم مشخصه‌ها نوشت و با اختصاص دادن مقادیری برای مشخصه‌ها به جای امواج ورودی و یا خروجی به تعریف شرایط مرزی پرداخت.

معادلات (6) تا (9) معادلات سازگاری برای جریان دوبعدی در سطح مقطع ثابت و در جهت x هستند [16].

$$\left(\frac{\partial p}{\partial t} - \rho c \frac{\partial u}{\partial t}\right) + (u - c)\left(\frac{\partial p}{\partial x} - \rho c \frac{\partial u}{\partial x}\right) = 0 \quad (6)$$



شکل 1 طرحواره مدل هندسی کانال

1- Zel'dovich, Von Neumann, Döring
2- Piecewise Parabolic Method
3- Unsplit
4- Upwind

متوالی، طول موج نوسان و اختلاف مابین دو نقطه کمینه و بیشینه متوالی دامنه موج نوسان در نظر گرفته می‌شود (شکل 3).

برای شبیه‌سازی دوبعدی از میانگین طول سلول‌ها و میانگین عرض سلول‌ها و همچنین بیشینه فشار آن‌ها برای بررسی خطا استفاده می‌شود (شکل 4). به‌علت تغییرات کم اندازه سلول‌ها از متوسط طول و عرض چند سلول برای تخمین خطا استفاده شد. در نهایت فشار بیشینه متوسط، با متوسط گیری از مقادیر فشار بیشینه به‌دست آمده در هر سلول (در فاصله‌ای به‌اندازه کافی دور از نقطه آغازش که تأثیرات شرایط اولیه از بین رفته است)، به‌دست می‌آید.

خطای مطلق با استفاده از رابطه (25) و خطای نسبی با رابطه (26) تعریف می‌شوند.

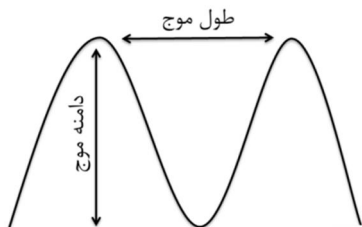
در این روابط، D_{num} سرعت تراک محاسبه شده از مطالعه حاضر و D_{ref} سرعت تراک به‌دست آمده از حل تحلیلی هستند. با استفاده از تئوری CJ ، سرعت امواج تراک گازی خوداتکا از رابطه (27) به‌دست می‌آید [۲۰۹]. برای مخلوط و شرایط اولیه مورد نظر سرعت تراک گازی $D_{CJ} = 6/80947463$ به‌دست می‌آید.

برای رسیدن به نتایج مستقل از شرایط اولیه، می‌بایست مسافت نسبتاً زیادی از نقطه آغازش در نظر گرفته شود تا اطمینان حاصل شود که اثرات شرایط اولیه از بین رفته است.

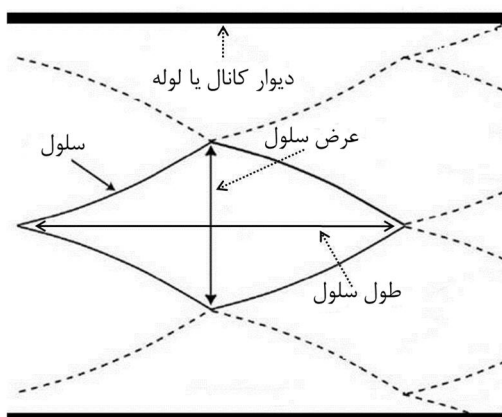
$$Er_a = \frac{D - D_{ref}}{D} \quad (25)$$

$$Er_a = \left| \frac{D - D_{ref}}{D} \right| \quad (26)$$

$$D_{CJ} = \sqrt{\gamma} \left(\sqrt{\frac{Q}{\gamma} \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma}} + \sqrt{\frac{Q}{\gamma} \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma}} \right) \quad (27)$$



شکل 3 تعریف طول و دامنه موج نوسان



شکل 4 عرض و طول سلول تراک [20]

شبیه‌سازی‌های عددی جریان‌های تراکم‌پذیر استفاده می‌شود. در میان روش‌های موجود، روش مشخصه‌ها، به‌دلیل حجم محاسبات پایین و دقت قابل قبول، از جمله روش‌های پرکاربرد است. نخستین بار هداسترم در سال 1979 شرایط مرزی غیرانعکاسی را برای معادلات غیرخطی و یک‌بعدی اولر به این صورت تعریف کرد: "دامنه امواج در مرزها در طول زمان ثابت می‌ماند و یا به‌عبارت دیگر هیچ انعکاسی به‌علت برخورد امواج با مرزها به‌وجود نمی‌آید" [16]. بعد از آن، در سال‌های 1986 و 1990، تامپسون این روش را برای حالت‌های چندبعدی در دستگاه مختصات کارتزین و کروی بسط داد [17, 18]. در سال 1992، پوینست و لاله به ارائه نحوه تعریف این نوع از شرایط مرزی برای معادلات ناویر-استوکس پرداختند [19].

برای تعریف شرایط مرزی غیرانعکاسی از رابطه (21) استفاده می‌شود؛ بدین صورت که دامنه امواج خروجی با استفاده از جمله دوم معادلات سازگاری محاسبه و دامنه امواج ورودی صفر می‌شوند [16-19].

$$L_i \begin{cases} \text{برای امواج خروجی} & \text{جمله دوم معادلات سازگاری} \\ \text{برای امواج ورودی} & \end{cases} \quad (21)$$

به‌عنوان مثال، در خروجی جریان سیال مادون صوت، موجی با دامنه L_1 وارد و امواج L_3 و L_4 از میدان خارج می‌شوند (شکل 2). بنابراین، با صفر کردن اندازه دامنه موج ورودی (یعنی $L_1=0/0$) از انعکاس این موج به داخل میدان جلوگیری می‌شود و دامنه باقی امواج نیز از روابط ذکر شده (13) تا (16) به‌دست می‌آیند. در نهایت از روابط (22) تا (24) می‌توان برای محاسبه مقادیر متغیرهای اولیه در مرز استفاده کرد:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\left(\frac{L_4}{2}\right) \quad (22)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{\rho c} \left(-\frac{L_4}{2}\right) \quad (23)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{c^2} \left(-\frac{1}{2}(L_4) + L_3\right) \quad (24)$$

5- نتایج

طول میدان محاسباتی از جمله مسائل مهم در شبیه‌سازی تراک گازی است. به‌علت تأثیرات زیاد شرایط مرزی در میدان‌های محاسباتی کوچک، نتایج بسیار به اندازه میدان هستند و برای حذف این تأثیرات میدان محاسباتی معمولاً بسیار بزرگ در نظر گرفته می‌شود. با توجه به اهمیت این پارامتر، در کار حاضر به بررسی تأثیرات طول و عرض میدان بر دقت و هزینه محاسبات به‌طور سیستماتیک پرداخته می‌شود. از آنجایی که افزایش انرژی فعال‌سازی موجب افزایش طول ناحیه واکنش می‌شود، در نتیجه به بررسی تأثیرات این پارامتر بر طول و عرض میدان نیز پرداخته می‌شود.

مشخصات ترمو-شیمیایی مخلوط شبیه‌سازی شده برابر با $Q/RT_0=50$ (مقدار گرمای آزاد شده بدون بعد از واکنش شیمیایی) و با نسبت گرمای ویژه $\gamma=1/2$ و فشار اولیه و چگالی اولیه‌ای برابر با $P_0=1$ و $\rho_0=1$ است.

5-1- تحلیل خطا

در حالت یک‌بعدی، برای تخمین خطای تراک پایدار (منظور تراکی است که نوساناتی در سرعت و فشار آن مشاهده نشود [2])، از میانگین سرعت تراک استفاده می‌شود. اما، برای تراک ناپایدار در انرژی‌های فعال‌سازی بالاتر از 25/265، از دامنه و طول موج نوسانات جبهه تراک به‌عنوان معیاری برای تخمین خطا استفاده می‌شود. فاصله طولی میان دو نقطه بیشینه یا کمینه

2-5- استقلال نتایج از شبکه محاسباتی

در جدول 1 مقدار خطای مطلق و نسبی سرعت تراک گازی محاسبه شده در مطالعه حاضر را می‌توان مشاهده نمود. بررسی نتایج نشان داد که استفاده از بیش از 100 سلول محاسباتی در طول نیمه واکنش موجب می‌شود که خطای مطلق سرعت تراک کمتر از 0/01677 و خطای نسبی نیز کمتر از 0/246% شود.

اختلاف بین خطای مطلق سرعت تراک برای شبکه‌های با اندازه 200 و 150 و 100 در طول هر نیمه واکنش (جدول 1) حدود 0/01% و خطای نسبی نیز در حدود 0/13% است. بنابراین، در نظر گرفتن شبکه با بیش از 100 سلول محاسباتی در طول هر نیمه واکنش موجب افزایش قابل توجه دقت نتایج نمی‌شود و این در حالی است که زمان محاسبات افزایش محسوسی می‌یابد. بنابراین، در تمامی محاسبات یک‌بعدی برای به دست آوردن نتایج مستقل، از شبکه‌ای به ابعاد 100 سلول محاسباتی در طول هر نیمه واکنش استفاده می‌شود.

3-5- تأثیر طول میدان محاسباتی بر شبیه‌سازی یک‌بعدی تراک گازی

در کار حاضر، برای یافتن طول مناسب میدان، ابتدا میدان محاسباتی با یک شبکه یکنواخت به ابعاد 100 سلول محاسباتی در طول هر نیمه واکنش به طور کامل حل شد و سپس با برش دادن میدان و افزایش طول آن به بررسی نقش طول میدان بر سرعت تراک پرداخته شد. بررسی‌ها نشان داد که اختلاف خطای نسبی میانگین سرعت تراک گازی پایدار در مخلوط با انرژی فعال‌سازی $Ea=25$ با فرض طول میدانی برابر با 10 کمتر از 2×10^{-4} % است (جدول 2). همان‌گونه که مشاهده می‌شود، افزایش انرژی فعال‌سازی موجب افزایش طول ناحیه واکنش می‌شود (شکل 5). بنابراین، انتظار می‌رود که با در نظر گرفتن انرژی فعال‌سازی بالاتر طول مناسب میدان نیز افزایش یابد.

با محاسبات و تحلیل مشابه طول میدان برای $Ea=26$ و $Ea=27/4$ به ترتیب برابر 15 و 25 به دست آمد. برای $Ea=26$ فرض طول میدان برابر با 15 موجب می‌شود که خطای نسبی دامنه موج نوسانی کمتر از 0/04% و خطای نسبی طول موج نوسان کمتر از 0/001% شود. برای $Ea=27/4$ نیز فرض طول میدان برابر با 25 موجب می‌شود که خطای نسبی دامنه موج نوسانی کمتر از 0/01% و خطای نسبی طول موج نوسان کمتر از 0/03% شود.

4-5- استفاده از شرایط مرزی غیرانعکاسی در شبیه‌سازی دوبعدی تراک گازی

نتایج تجربی نشان داده‌اند که انتشار تراک در یک مخلوط گازی تراک‌پذیر باعث تشکیل ساختار سلولی روی یک فویل دوده‌اندود می‌شود. توجه به درجه منظمی ساختار سلولی تشکیل شده روی فویل دوده‌اندود، تراک گازی را به دو نوع تراک منظم¹ و تراک نامنظم² تقسیم‌بندی کرده است [21]. اگر تعداد امواج عرضی (و یا تعداد نقاط سه‌گانه) تشکیل شده در عرض کانال، در مقاطع مختلف از مسیر انتشار تراک در طول کانال ثابت بماند، تراک کاملاً منظم و در غیر این صورت نامنظم است.

با توجه به اینکه شارپ [4] حداقل ابعاد سلول‌های محاسباتی شبکه را 20 سلول در طول نیمه واکنش دانست، در کار حاضر برای شبیه‌سازی دوبعدی از 30 سلول محاسباتی در طول نیمه واکنش استفاده شده است.

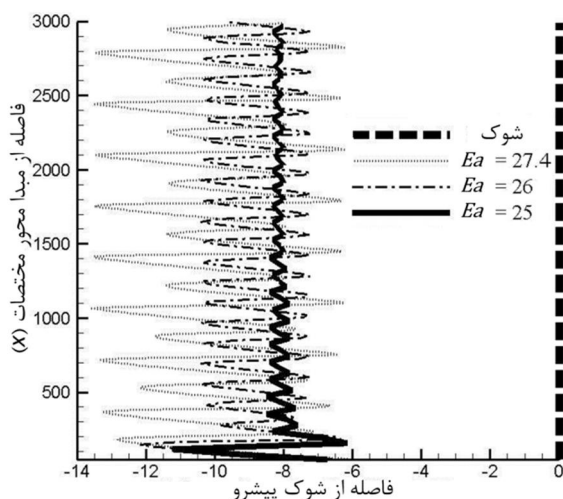
1- Regular
2- Irregular

جدول 1 تخمین خطای مطلق و نسبی میانگین سرعت تراک گازی مطالعه حاضر
 $Ea=25$

تعداد سلول محاسباتی (در طول نیمه واکنش)	سرعت تراک	خطای مطلق	خطای نسبی %
50	6/77593	$3/353 \times 10^{-2}$	0/492
100	6/79269	$1/677 \times 10^{-2}$	0/246
150	6/79825	$1/121 \times 10^{-2}$	0/165
200	6/80101	$0/845 \times 10^{-2}$	0/124

جدول 2 تخمین خطای نسبی میانگین سرعت تراک گازی $Ea=25$ و فاصله شوک پیشرو از مبدا برابر با 3000

طول میدان محاسباتی	میانگین سرعت ترک	خطای نسبی %
8	6/796073	$4/95 \times 10^{-2}$
10	6/792696	$1/766 \times 10^{-4}$
20	6/792698	$1/472 \times 10^{-4}$
30	6/792696	$1/766 \times 10^{-4}$
40	6/792697	$1/619 \times 10^{-4}$
کل میدان	6/792708	-

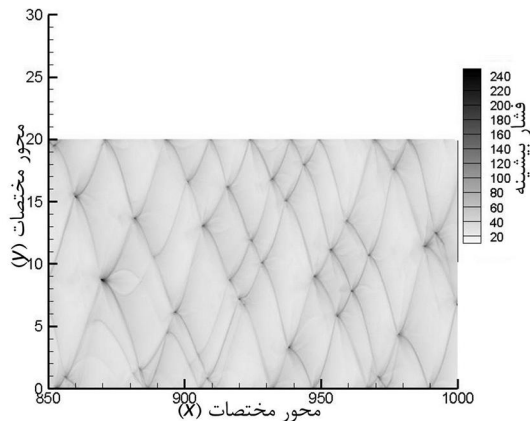


شکل 5 فاصله انتهای ناحیه واکنش از شوک پیشرو در چند انرژی فعال‌سازی مختلف

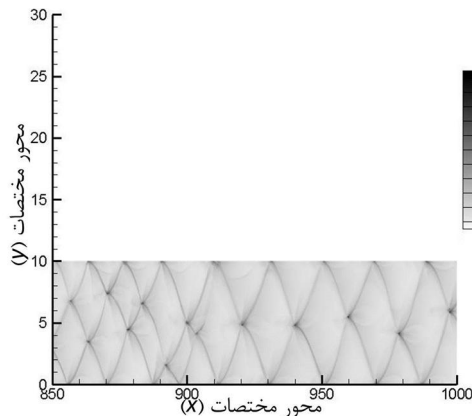
5-5- تأثیر شرایط مرزی بر ساختار سلولی

در کارهای عددی می‌توان با در نظر گرفتن یک قطر نسبتاً بزرگ برای لوله از عدم تأثیرگذاری شرایط مرزی بر اندازه سلول‌ها مطمئن شد. گمزو [۲۳] پیشنهاد کرد، برای حذف تأثیر شرایط مرزی بر اندازه سلول‌ها، قطر لوله تراک به اندازه‌ای باشد که حداقل 2 تا 3 سلول در عرض لوله جا بگیرند. بررسی‌ها نشان می‌دهد که استفاده از کانالی با پهنای کم برای شبیه‌سازی تراک تأثیرات محسوسی بر اندازه سلول‌های تشکیل شده می‌گذارد. در این حالت اندازه سلول‌ها وابسته به عرض کانال است (شکل 6).

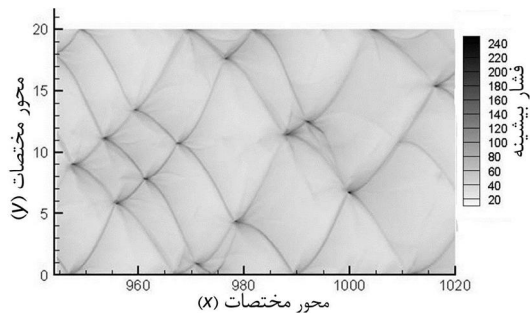
به عنوان مثال، برای تراکی با انرژی فعال‌سازی $Ea=15$ در نظر گرفتن کانالی با پهنای 2 سبب می‌شود که اندازه عرض سلول 2 و طول آن 5 برابر طول نیمه واکنش شود. اما اگر پهنای کانال بزرگ‌تر از 4 برابر طول نیمه واکنش فرض شود، اندازه عرض سلول 4 برابر و طول آن 8/333 برابر طول نیمه واکنش می‌شود. در نتیجه، در نظر گرفتن کانالی با پهنای مناسب باعث



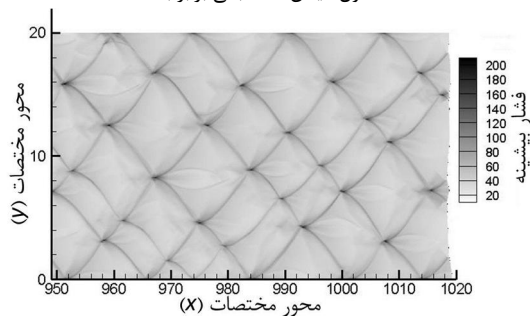
عرض کانال برابر با 20



عرض کانال برابر با 10

 شکل 7 تأثیر شرایط مرزی (عرض کانال) بر ساختار سلولی نامنظم تراک $Ea = 20$ و در میدان محاسباتی به طول 50


طول میدان محاسباتی برابر با 30



طول میدان محاسباتی 5

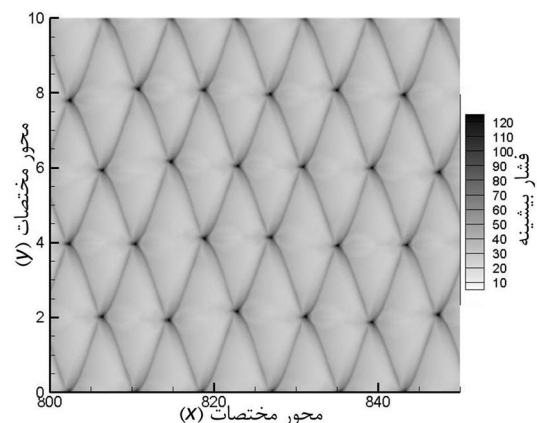
 شکل 8 تأثیر شرایط مرزی (طول میدان) بر ساختار سلولی نامنظم تراک $Ea = 20$ در کانالی به عرض 20

از بین رفتن تأثیرات شرایط مرزی می‌شود. پیامد این انتخاب مناسب، ثابت ماندن عرض سلول‌ها و وابسته نبودن آن‌ها به عرض کانال است.

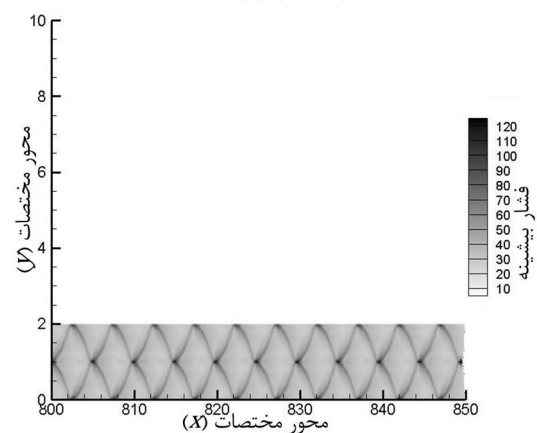
در تراک با انرژی فعال‌سازی $Ea = 20$ ، که دارای ساختار نامنظم است [21]، در نظر گرفتن کانالی با پهنای کم و برابر با 10، به علت تأثیرات زیاد شرایط مرزی، موجب ثابت ماندن تعداد سلول در پهنای کانال (یک سلول در عرض کانال) و منظم شدن ساختار تراک می‌شود. این در حالی است که با افزایش دادن پهنای کانال به 20 این اثرات کاهش یافته و ساختار تراک کاملاً نامنظم می‌شود (شکل 7).

تأثیرات طول میدان بر ساختار سلولی تراک نامنظم با انرژی فعال‌سازی $Ea = 20$ در شکل 8 نشان داده شده است. در حالتی که طول میدان برابر با 5 است، در نظر گرفتن طول میدان کوچک منجر به کاهش یافتن اندازه سلول‌ها و منظم شدن ساختار تراک می‌شود. در این حالت تعداد سلول‌ها در پهنای کانال ثابت می‌ماند (3 سلول در کانالی با پهنای 20)، ولی با افزایش طول میدان به 30 اثرات شرایط مرزی کاهش یافته و ساختار تراک کاملاً نامنظم می‌شود و تعداد سلول‌ها و اندازه سلول‌ها در پهنای کانال مرتباً تغییر می‌کند.

بنابراین، برای به دست آوردن نتایج مستقل از شرایط مرزی می‌بایست طول میدان و پهنای کانال به اندازه کافی بزرگ در نظر گرفته شود تا از عدم تأثیرات شرایط مرزی بر اندازه و تعداد سلول‌ها مطمئن شد. افزایش انرژی فعال‌سازی منجر به افزایش ناحیه واکنش می‌شود؛ در نتیجه عرض مناسب



عرض کانال برابر با 10



عرض کانال برابر با 2

 شکل 6 تأثیر شرایط مرزی (عرض کانال) بر ساختار سلولی منظم تراک $Ea = 15$ در میدانی به طول 50

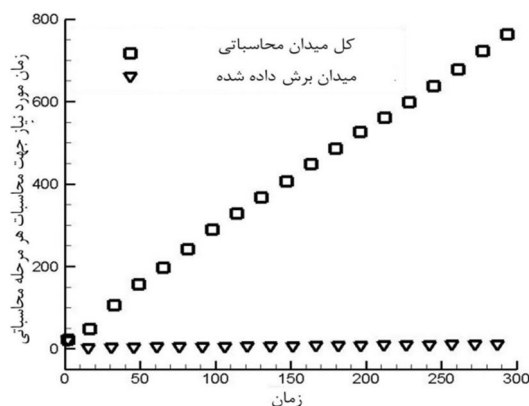
جدول 4 تأثیر طول میدان بر منحنی مکان-زمان شوک پیشرو تراک گازی
در $Ea=15$

طول میدان	زمان در مکان 411/5	خطای نسبی %	زمان در مکان 64/5	خطای نسبی %
5	64/47	0/11	411/60	0/10
10	64/42	0/04	411/92	0/029
30	64/43	0/06	411/92	0/029
50	64/41	0/02	411/96	0/020
100	64/39	-	412/04	-

یکنواخت در هر مرحله محاسباتی، کد به حل میدان از ابتدای میدان تا محل شوک می‌پردازد. بنابراین، با فاصله گرفتن شوک از ابتدای میدان، می‌بایست یک افزایش در زمان محاسبات هر پله زمانی مشاهده شود. با برش دادن میدان و استفاده از تعداد محدود و ثابت سلول محاسباتی، زمان حل در هر پله زمانی تقریباً ثابت می‌ماند و تابع طول میدان نخواهد بود. به دلیل کاهش قابل ملاحظه طول میدان و ثابت ماندن آن در طول محاسبات، زمان محاسبات در هر پله زمانی و در نهایت زمان کلی محاسبات به شدت کاهش می‌یابد (شکل 10).

مقایسه نتایج جدول 5 نشان می‌دهد با استفاده از روش برش در شبیه‌سازی یک‌بعدی تراک گازی با $Ea=25$ و با در نظر گرفتن 100 سلول محاسباتی در طول هر نیمه واکنش زمان محاسبات 512 برابر نسبت به حل کامل میدان با شبکه یکنواخت کاهش می‌یابد. در این محاسبات فاصله طی شده به وسیله تراک برابر با 3000 بود. مسلماً اگر تراک فاصله بیشتری را طی کند، زمان محاسبات کاهش بیشتری می‌یابد شایان ذکر است که برای انجام این محاسبات از رایانه‌ای با ریزپردازنده اینتل 3 گیگاهرتز استفاده شده است). برای تراک ناپایدار با انرژی فعال‌سازی $Ea=26$ و $Ea=27/4$ کاهش زمان محاسبات نسبت به حل کامل میدان با شبکه یکنواخت به ترتیب برابر 317/8 و 204/2 به دست آمد.

به دلیل محدودیت‌های سخت‌افزاری، برای مقایسه کاهش زمان نسبت به حل کامل میدان در شبیه‌سازی دوبعدی، پهنای کانال برابر با 2 در نظر گرفته شد. استفاده از روش برش برای شبیه‌سازی دوبعدی تراک گازی با $Ea=15$



شکل 10 مقایسه زمان مورد نیاز برای محاسبه هر پله (برحسب ثانیه) با زمان برای دو روش حل کامل میدان با شبکه یکنواخت و برش برای تراک گازی با $Ea=25$

کانال و طول میدان محاسباتی برای مخلوطی با انرژی فعال‌سازی بالا، بزرگ‌تر از عرض کانال و طول میدان محاسباتی برای مخلوطی با انرژی فعال‌سازی کم است.

5-6- تأثیر طول میدان محاسباتی بر شبیه‌سازی دو بعدی تراک گازی

به دلیل محدودیت‌های سخت‌افزاری برای یافتن طول مناسب در حالت دوبعدی، ابتدا میدانی با طولی برابر با 100 حل شد و سپس، با کاهش طول میدان، تأثیرات این کاهش طول بر نتایج به طور سیستماتیک مورد بررسی قرار گرفت. بررسی‌ها نشان می‌دهد که برای تراک گازی با $Ea=15$ ، در نظر گرفتن طول میدانی برابر و یا بزرگ‌تر از 10 موجب می‌شود که خطای نسبی میانگین طول و میانگین عرض سلول‌ها و همچنین میانگین فشار بیشینه کمتر از 1% شود (جدول 3).

بررسی شکل 9 نشان می‌دهد که با افزایش طول میدان محاسباتی، منحنی‌های مکان-زمان شوک به سمت میدانی با طول 100 میل می‌کنند. بررسی کمی نتایج نیز نشان می‌دهد که در نظر گرفتن طول میدان برابر و یا بزرگ‌تر از 10 موجب می‌شود که خطای نسبی کمتر از 0/1% شود (جدول 4).

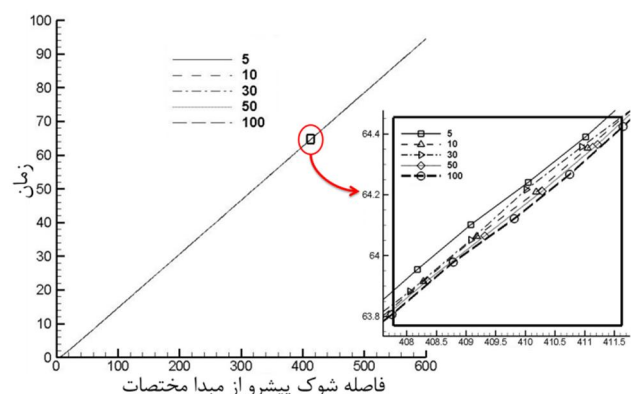
مقایسه نتایج حاصل از محاسبات یک و دوبعدی نشان داد که طول بهینه میدان محاسباتی برای حالت دوبعدی بزرگ‌تر از حالت یک‌بعدی است. این افزایش طول بهینه به علت تأثیرات امواج عرضی و سایر منابع اغتشاش است.

5-7- مقایسه کاهش زمان محاسبات در حالت یک و دوبعدی

در هنگام استفاده از روش تعقیب شوک برای حل کامل میدان با شبکه

جدول 3 تأثیر طول میدان بر ساختار سلولی تراک گازی با مشخصات $Ea=15$ و پهنای کانالی برابر با 10

طول میدان	خطای نسبی %	خطای نسبی %	خطای نسبی %	خطای نسبی %	خطای نسبی %	خطای نسبی %
5	122/2	1/18	8/100	1/12	3/933	1/66
10	124/2	0/44	8/208	0/20	4/008	0/20
30	123/6	0/01	8/249	0/71	4/025	0/62
50	122/8	0/66	8/258	0/81	4/025	0/62
100	123/6	-	8/191	-	3/999	-



شکل 9 تأثیر طول میدان محاسباتی بر منحنی مکان - زمان شوک پیشرو تراک گازی $Ea=15$

7- مراجع

- [1] W. Fickett, W. C. Davis, Detonation Theory and Experiment, Dover publication, INC: Newyork, 1979.
- [2] V. N. Gamezo, D. Desbordes, E. S. Oran, Two-dimensional reactive flow dynamics in cellular detonation waves, Shock Wave, Vol. 9, pp. 11-17, 1998.
- [3] V. N. Gamezo, D. Desbordes, E. S. Oran, Formation and evolution of two-dimensional cellular detonations, Combustion and Flame, Vol. 116, pp. 154-165, 1999.
- [4] G. J. Sharpe, S. A. E. G. Falle, Two-dimensional numerical simulations of idealized detonations, Proc. R. Soc. Lond., Vol. 456(A), pp. 2081-2100, 2000.
- [5] Z. Liang, L. Bauwens, Detonation structure with pressure-dependent chain-branching kinetics, Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 30, pp. 1879-1887, 2005.
- [6] Z. Liang, S. Browne, R. Deiterding, J. E. Shepherd, Detonation front structure and the competition for radicals, Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 31, pp. 2445-2453, 2007.
- [7] A. K. Henrick, T. D. Aslam, J. M. Powers, Simulations of pulsating one-dimensional detonations with true fifth order accuracy, Journal of Computational Physics, Vol. 213, pp. 311-329, 2006.
- [8] P. Hwang, R. P. Fedkiw, B. Merriman, T. D. Aslam, A. R. Karagozian, S. J. Osher, Numerical resolution of pulsating detonation waves, Combustion Theory and Modelling, Vol. 4, pp. 217-240, 2000.
- [9] Y. Han, Non-reflecting boundary condition in detonation simulation, Master Thesis, in Department of mechanical and manufacturing engineering, University of Calgary, Alberta, Canada, 2003.
- [10] A. R. Kasimov, D. S. Stewart, On the dynamics of self-sustained one-dimensional detonations: A numerical study in the shock-attached frame, Physics of Fluids, Vol. 16, No. 10, pp. 3566-3578, 2004.
- [11] K. Mazaheri, Mechanism of the onset of detonation in blast initiation, PhD Thesis, in Department of mechanical engineering, McGill University, Montreal, Quebec, Canada, 1997.
- [12] K. Mazaheri, S. A. Hashemi, The effect of chain initiation reaction on the stability of gaseous detonations, Combustion Science and Technology, Vol. 179, pp. 1701-1736, 2007.
- [13] M. Sabzpooshani, K. Mazaheri, Formation of Unburnt Pockets in Gaseous Detonations, Combustion, Explosion, and Shock waves, Vol. 45, No. 2, pp. 182-189, 2009.
- [14] Y. Mahmoudi, K. Mazaheri, operator splitting in simulation of detonation structure, 22nd ICDERS, Minsk, Balarus, 2009.
- [15] C. Hirsh, Numerical computation of internal and external flows, Wiley Press: Newyork, 2007.
- [16] G. W. Hedstrom, Nonreflecting boundary condition for nonlinear hyperbolic systems, Journal of computational Physics, Vol. 30, pp. 222-237, 1979.
- [17] K. W. Thompson, Time dependent boundary conditions for hyperbolic systems I, Journal of Computational Physics, Vol. 68, pp. 1-24, 1987.
- [18] K. W. Thompson, Time dependent boundary condition for hyperbolic systems II, Journal of Computational Physics, Vol. 89, pp. 439-461, 1990.
- [19] T. J. Poinso, S. K. Lele, Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows, Journal of Computational Physics, Vol. 101, pp. 104-129, 1992.
- [20] M. Sabzpooshani, Two-dimensional numerical simulation of gaseous detonation for investigating effect of transverse waves on its propagation, PhD Thesis, in Department of mechanical and engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran, 2008 (in persian).
- [21] J. H. S. Lee, The Detonation Phenomenon, Cambridge: Cambridge University Press, 2008.

و با در نظر گرفتن 30 سلول محاسباتی در طول هر نیمه واکنش و میدانی به طول 10 و فاصله طی شده به وسیله تراک برابر با 900، زمان حل را $126/33$ برابر نسبت به حل کامل میدان با شبکه یکنواخت کاهش می‌دهد (جدول 6). برای تراک گازی با انرژی فعال‌سازی $Ea=20$ نیز زمان محاسبات $41/314$ برابر نسبت به حل کامل میدان با شبکه یکنواخت کاهش می‌یابد.

6- نتیجه‌گیری

وجود نقطه صوتی یا Cj در انتهای ناحیه واکنش موجب ایزوله شدن ناحیه واکنش و شوک پیشرو از جریان دوردست می‌شود. همچنین استفاده از شرایط مرزی غیرانعکاسی موجب کاهش امواج مجازی می‌شود. در کار حاضر، با توجه به این دو مفهوم، یک طول محدود به عنوان طول میدان محاسباتی با توجه به انرژی فعال‌سازی مخلوط تعریف شد.

برای شبیه‌سازی یک‌بعدی طول مناسب میدان در هنگام استفاده از برش میدان، برای انرژی فعال‌سازی $Ea=25$ ، برابر با 10، برای $Ea=26$ ، برابر 15 و برای $Ea=27/4$ برابر 25 به دست آمد. کاهش زمان محاسبه شده نسبت به حل کامل میدان یکنواخت برای تراکی با $Ea=25$ ، 512 برابر و برای انرژی فعال‌سازی $Ea=26$ و $Ea=27/4$ به ترتیب 317/8 برابر و 204/2 برابر محاسبه شد.

برای شبیه‌سازی دوبعدی تراک گازی با $Ea=15$ طول مناسب میدان محاسباتی برابر با 10 و برای انرژی فعال‌سازی $Ea=20$ برابر با 30 به دست آمد. کاهش زمان صورت گرفته نیز به ترتیب $126/33$ و $41/314$ نسبت به حل کامل میدان با شبکه یکنواخت محاسبه شد.

در نظر گرفتن میدان محاسباتی کوچک و یا کانالی با پهنای کم باعث پدیدار شدن تأثیرات شرایط مرزی بر ساختار سلولی می‌شود. این تأثیرات عبارت‌اند از تغییرات اندازه سلول‌ها و همچنین منظم شدن ساختار نامنظم تراک در انرژی‌های فعال‌سازی بالا. بنابراین، برای از بین بردن این اثرات منفی و همچنین به دست آوردن نتایج قابل قبول و مستقل از شرایط مرزی می‌بایست طول میدان و پهنای کانال به اندازه کافی بزرگ در نظر گرفته شود. افزایش انرژی فعال‌سازی موجب افزایش طول ناحیه واکنش می‌شود، بنابراین برای شبیه‌سازی مخلوطی با انرژی فعال‌سازی بالاتر طول مناسب میدان نیز افزایش می‌یابد. طول مناسب میدان محاسباتی در حالت دوبعدی بزرگ‌تر از طول مناسب میدان در حالت یک‌بعدی است. علت آن هم تأثیرات امواج عرضی و سایر منابع اغتشاشی است.

جدول 5 زمان صرف شده برای اجرای برنامه در شبیه‌سازی یک‌بعدی و

$Ea=25$ و فاصله طی شده به وسیله تراک برابر با 3000

شبکه مورد استفاده	زمان حل
حل کامل میدان با شبکه یکنواخت	109/9 (ساعت)
حل میدان برش خوره با شبکه یکنواخت به طول 10	12/83 (دقیقه)

جدول 6 زمان صرف شده برای اجرای برنامه در شبیه‌سازی دو بعدی

$Ea=15$ و فاصله طی شده به وسیله تراک برابر با 900

شبکه مورد استفاده	زمان حل
حل کامل میدان با شبکه یکنواخت	11 روز
حل میدان برش خوره با شبکه یکنواخت 10	2/084 ساعت