

01

Пределы „физической детонации“ при течении предварительно колебательно-возбужденного водорода в ударной трубе

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

Институт проблем химической физики РАН,
142432 Черноголовка, Россия
e-mail: kuls@icp.ac.ru

Поступило в Редакцию 13 мая 2018 г.

В окончательной редакции 4 ноября 2019 г.

Принято к публикации 30 января 2020 г.

„Физическая детонация“ — это явление, когда детонацию вызывает не химическая, а физическая энергия, сосредоточенная на внутренних степенях свободы, в данном случае на колебательных степенях свободы молекул водорода. Методом Монте–Карло нестационарного статистического моделирования изучена возможность возникновения этого явления для предварительно колебательно-возбужденного до определенной температуры водорода в ударной трубе. Определена граница данной температуры, выше которой в численном эксперименте имеет место „физическая детонация“.

Ключевые слова: ударная волна, нестационарное статистическое моделирование, колебательная релаксация, вращательная релаксация, увеличение скорости фронта волны.

DOI: 10.21883/JTF.2020.07.49435.187-18

Введение

Детонация газовых смесей представляет собой интересное и сложное явление, систематическим изучением которого занимаются уже более века. Возникает вопрос: может ли при определенных условиях вызывать детонацию не химическая, а физическая энергия, сосредоточенная на внутренних степенях свободы, например, в колебательно-возбужденных молекулах? Если это возможно, то такую детонацию можно назвать „физической детонацией“. Колебательно-возбужденный H_2 является одним из наиболее подходящих газов для ее реализации [1]. В [2] была численно показана возможность возникновения „физической детонации“. При этом использовался метод Монте–Карло нестационарного статистического моделирования (ММКНСМ) (или direct simulation Monte Carlo (DSMC) в англоязычной литературе) и довольно реалистичская, хотя и одномерная модель моделирования течения предварительно колебательно-возбужденного водорода в ударной трубе (УТ). Оказалось, что „физическая детонация“ имеет место при полном начальном возбуждении колебательных степеней свободы H_2 до колебательной температуры (T_{vi}) 3000 К. В [3,4] эти исследования были продолжены, и было показано, что данный эффект сохраняется при возбуждении 85% H_2 до $T_{vi} = 3000$ К. При степени возбуждения водорода (α) 0.75 и менее при $T_{vi} = 3000$ К „физическая детонация“ отсутствует. В [3,4] было также обнаружено, что „физическая детонация“ имеет место при $\alpha = 0.85$ для $T_{vi} = 2800$ К и выше. В настоящей работе приведены результаты дальнейшего поиска нижнего предела существования данного эффекта по T_{vi} .

Постановка задачи

В начальный момент канал низкого давления (КНД) УТ заполнялся двумя частями H_2 . Одной частью является колебательно-возбужденный водород, у которого вращательная и поступательная температуры были равны комнатной $T_1 = 292$ К. Второй частью является полностью равновесный H_2 с T_1 . При этом камера высокого давления (КВД) заполняется H_2 при гораздо более высоком давлении. После виртуального удаления диафрагмы между КНД и КВД начинается численное моделирование процесса в УТ. В КВД для удобства моделирования начальная температура H_2 (T_k) задавалась выше комнатной (см. [2]).

Методика моделирования

Как и в [2], моделирование было выполнено в одномерном пространстве координат и трехмерном пространстве скоростей. Применялся ММКНСМ, основоположником которого является Берд [5]. Основные детали моделирования ударной волны (УВ) в УТ приведены в [6] и частично в [2]. Но для большей определенности изложения и удобства читателей алгоритм приведен ниже.

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.

Для того чтобы размер пространственной ячейки Δx не превышал среднюю длину свободного пробега молекул в газе λ , область моделирования в КВД первоначально разбивалась на ячейки размера в 20 раз меньшего, чем в КНД. Во время счета в той части КНД, куда поступил газ из КВД, размер Δx уменьшался также в 20 раз.

Использовались весовые множители. Весовой множитель показывает число реальных молекул, представляемых данной модельной частицей. С целью использования разумного числа модельных частиц весовые множители всех частиц H_2 в КВД были равны 5, а в КНД — 1.

Было проведено моделирование с простейшим учетом вращательных и колебательных степеней свободы молекул. Использовалась модель со стоком энергии (см. [5]). Процедура данного учета довольно проста. Следует подчеркнуть, что при статистическом моделировании оперируют с кинетической температурой, как со средней энергией приходящей на соответствующие степени свободы молекулы. При равновесии по данным степеням свободы эта температура равна соответствующей термодинамической. Каждый раз при переходе к этапу столкновений определялась полная (по всем поступательным степеням свободы) кинетическая поступательная температура (T) рассматриваемого сорта молекул в ячейке. Затем при каждом принятом после розыгрыша столкновении определялась разница (Δ_i) между T и температурой рассматриваемой внутренней степени свободы. Задавался параметр R_{ij} , (i — номер компонента, j равно 1 для вращательных степеней свободы и 2 — для колебательных). Затем данная внутренняя температура (и соответствующая внутренняя энергия) менялась на произведение $R_{ij} \cdot \Delta_i$ в сторону приближения к T . При определении равновесной внутренней энергии считалось, что для вращательной и колебательной энергий теплоемкость молекулы равнялась k (k — постоянная Больцмана, в используемых при моделировании единицах $k = 0.5$) и $R_{i1} = 0.01$. Но значение R_{i2} зависело от относительной скорости сталкивающихся частиц g . При $g < 3726$ м/с $R_{i2} = 0$, при 3726 м/с $\leq g < 9749$ м/с $R_{i2} = 0.00005$, при $g \geq 9749$ м/с $R_{i2} = 0.01$. Эта зависимость подобрана так, чтобы время колебательной релаксации (τ_v) водорода соответствовало реальности в необходимом диапазоне температур. При определении скоростей пары частиц после столкновения полагалось, что изменение энергии поступательного движения рассматриваемой пары равно по абсолютной величине и противоположно по знаку изменению внутренней энергии данных частиц. Относительная скорость частиц после столкновения вычислялась с учетом закона сохранения энергии.

Полагалось, что $\Delta t = 0.04$. Здесь и далее время эволюции модельной системы (t) нормировано на λ_1/u , где λ_1 — λ в КНД в начальный момент времени, а u — наиболее вероятная тепловая скорость частиц в газовой смеси перед УВ ($u = (2kT/m)^{0.5}$). Здесь m — масса молекулы водорода. Расстояние нормировано на λ_1 . Первоначально в КНД $\Delta x = 0.15$. Размер КВД составлял 10873.2, а КНД — 4795.2. Диафрагма располагалась в точке $x = 0$. Число модельных частиц в ячейке задавалось равным 90.

Использовалось 274 процессора ЭВМ МВС15000М Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН. Применялась блочная декомпозиция области моделирования [6,7]. При этом область моделирования разбивалась на ряд доменов, эволюция подсистемы в каждом из которых моделировалась только одним процессором. Каждый раз после проведения этапа перемещений информация о частицах, покидающих домены, в которых они находились в начале данного этапа, и переходящих в соседние, пересылалась туда с помощью процедур SEND и RECV библиотеки MPI [8]. Это дает возможность, увеличивая в принципе число процессоров вплоть до нескольких тысяч, увеличивать размер области моделирования, не увеличивая время счета при фиксированном времени эволюции системы, в силу обмена информацией только между соседними доменами. Время передачи этой информации практически не зависит от числа процессоров. Как показал предыдущий опыт [6,7], такая организация параллельных вычислений является, вероятно, наиболее разумной.

Результаты моделирования

Были проведены расчеты при $\alpha = 0.85$.

На рис. 1 представлены результаты расчетов для $T_{vi} = 2700$ К при T_k , равных 675 (кривая 1) и 584 К (кривая 2). Здесь скорость волны (D) нормирована на u . Следует отметить, что выборка параметров потока проводилась здесь и ниже через пространственные интервалы 25.483. Точность определения D составляла ± 0.05 .

Видно, что при росте t по мере увеличения времени пребывания газа в пробке скорости волн существенно увеличиваются и выходят на стационарные значения, которые примерно одинаковы для $T_k = 675$ и 584 К несмотря на различные начальные скорости. Это свидетельствует о значительной перестройке волн и возникновении „физической детонации“, которая если возникла, то имеет скорость, независящую от начальных условий, как и в случае классической детонации.

Кроме того, было выполнено моделирование для T_{vi} , равных 2600, 2400, 2200 и 2000 К.

Результаты, полученные для $T_{vi} = 2600$ К, аналогичны представленным выше.

На рис. 2 представлены результаты моделирования при $T_{vi} = 2400$ К для T_k , равных 569 (кривая 1), 555 (кривая 2) и 525 К (кривая 3). Во всех трех случаях

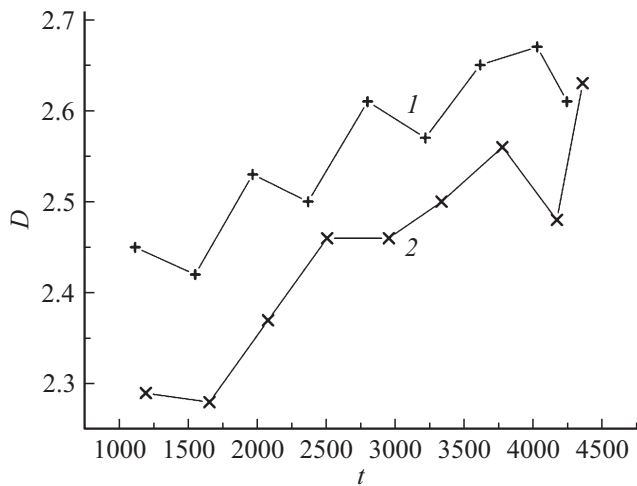


Рис. 1. Зависимость скорости волны D от времени моделирования t для $T_{vi} = 2700$ К.

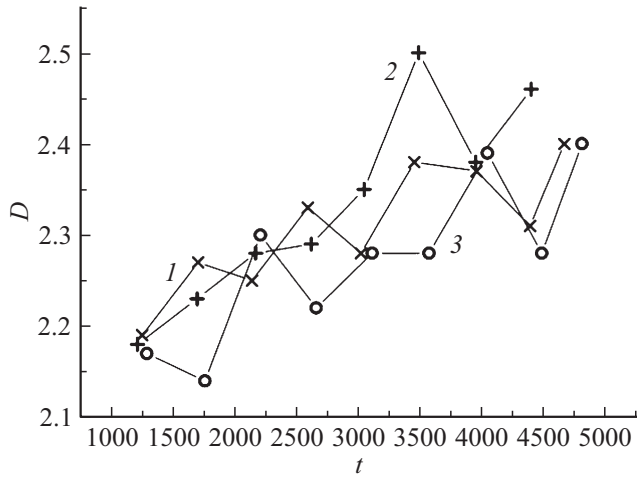


Рис. 2. Зависимость скорости волны D от времени моделирования t для $T_{vi} = 2400$ К.

были взяты близкие температуры подогрева водорода в КВД, и получены почти одинаковые величины начальных D . Это обусловлено тем, что более существенное увеличение значений T_k легко может привести к тому, что начальная скорость волны будет близка, а то и превысит скорость детонационной волны, а понижение значений температуры подогрева может не создать условия для возникновения „физической детонации“. Однако во всех рассмотренных случаях наблюдается отчетливый рост D с последующим выходом на стационарное значение. Это свидетельствует о возникновении „физической детонации“ и при $T_{vi} = 2400$ К.

На рис. 3 и 4 показаны профили параметров потока для $T_k = 525$ К в момент времени, когда фронт волны подошел к левой границе области моделирования, и уже сформировалась детонационная волна.

На рис. 3 приведены профили концентрации n (кривая 1), продольной скорости v (кривая 2), полной ки-

нетической температуры T (кривая 3), и колебательной энергии E_v (кривая 4). Здесь и ниже n нормирована на начальную концентрацию колебательно-возбужденного в КНВ H_2 , T — на T_1 , v — на u и E_v при этом определяется выражением $E_v = k(T_v/T_1)$, где T_v — текущая колебательная температура. При принятой нормировке $k = 0.5$ и начальная E_v для H_2 в КНД равнялась 4.11. В данный момент времени практически весь первоначально колебательно-возбужденный водород находится в „пробке“, иными словами является ударно-нагретым. Значения параметров потока в правой части „пробки“ выходят на стационар с точностью до статистического разброса. При этом величина E_v уменьшилась приблизительно в 2.3 раза. В рассматриваемом случае такого перехода колебательной энергии в поступательную достаточно для поддержания „физической детонации“.

Рис. 4 представляет профили параметров первоначально равновесного H_2 . Обозначения такие же, как и на рис. 3. Давление нормировано на начальное давление в КНД. В „пробке“ находится практически весь первоначально колебательно-невозбужденный водород из КНД, а вне ее — газ-толкатель из КВД. Как и на рис. 3, значения параметров потока в правой части „пробки“ выходят

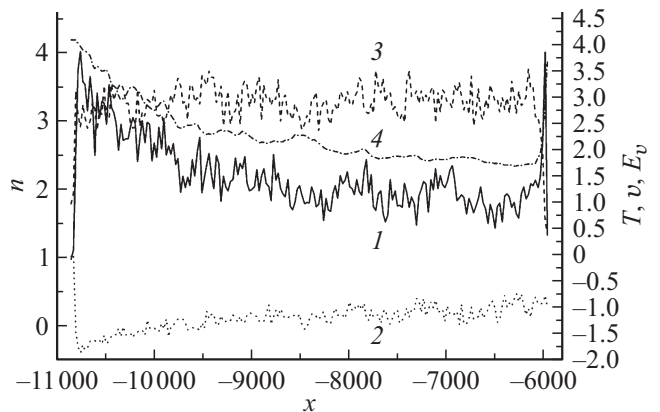


Рис. 3. Профили параметров колебательно-возбужденного в КНД H_2 для $T_{vi} = 2400$ К в момент времени $t = 4804.35$.

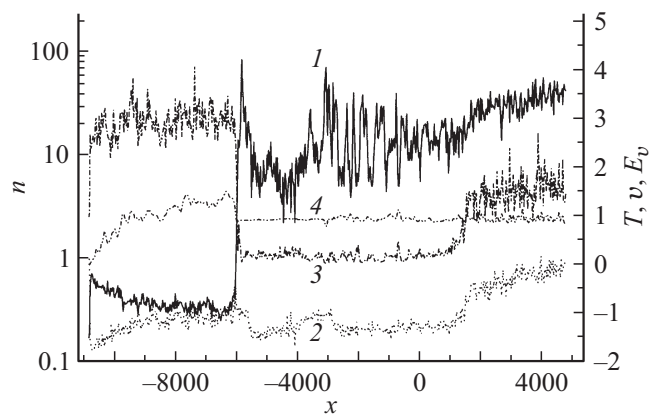


Рис. 4. Профили параметров первоначально равновесного H_2 для случая $T_{vi} = 2400$ К в момент времени $t = 4804.35$.

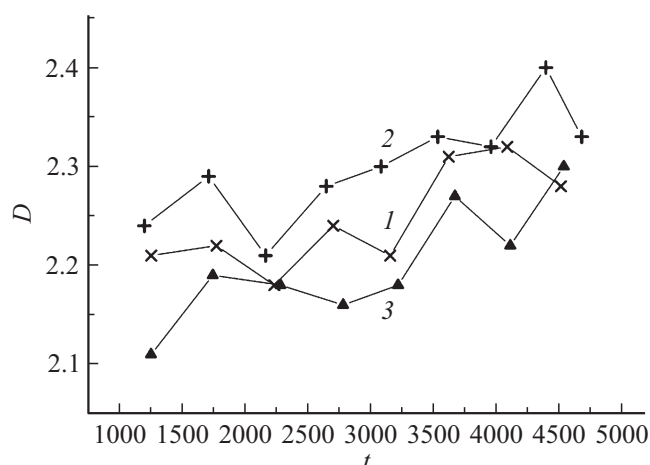


Рис. 5. Зависимость скорости волны D от t для $T_{vi} = 2000$ и 2200 К.

на стационар с точностью до статистического разброса. Следует отметить, что первоначально холодный равновесный H_2 из КНД приобретает в „пробке“ значительное количество как колебательной, так и вращательной энергии, отбирая ее у поступательной энергии. Данный фактор противодействует формированию „физической детонации“. С этим связано исчезновение „физической детонации“ при относительно небольшом уменьшении первоначальной доли колебательно-возбужденного H_2 в КНД с 0.85 до 0.75, отмеченное в [3,4].

Было выполнено моделирование при $T_{vi} = 2200$ и 2000 К. Полученные результаты приведены на рис. 5. Первоначальному колебательному возбуждению водорода до 2200 К соответствуют кривые 1 ($T_k = 540$ К) и 2 ($T_k = 569$ К). Случаю $T_{vi} = 2000$ К соответствует кривая 3 ($T_k = 540$ К). Данное моделирование показало, что и в этих случаях наблюдается рост D со временем. Но увеличение D мало и сравнимо с ошибкой определения скорости фронта. Имеет смысл напомнить, что величина данной ошибки составляет ± 0.05 , поэтому нельзя достоверно утверждать, что в этих случаях имеет место „физическая детонация“.

Заключение

Представленные результаты численного моделирования показывают, что при первоначальном возбуждении 85% H_2 до колебательной температуры 2400 К и выше имеет место „физическая детонация“.

Следовательно, „физическая детонация“ в предварительно колебательно-возбужденном водороде может возникать при более мягких условиях, чем при сообщенных в [2] параметрах моделирования.

Полученные результаты могут быть полезны для исследователей, которые попытаются получить в экспериментах „физическую детонацию“.

Благодарности

Авторы благодарны Межведомственному суперкомпьютерному центру РАН за предоставление вычислительных ресурсов.

Финансирование работы

Работа выполнена по теме Государственного задания, № государственной Регистрации: 0089-2014-0018.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Евтюхин Н.В., Марголин А.Д., Шмелев В.М. // Хим. физика. 1985. Т. 4. № 9. С. 1276–1280.
- [2] Куликов С.В., Червонная Н.А., Терновая О.Н. // ЖТФ. 2016. Т. 86. Вып. 8. С. 42–47. [Kulikov S.V., Chervonnaya N.A., Ternovaya O.N. // Tech. Phys. 2016. Vol. 61. N 8. P. 1162–1167. DOI: 10.1134/S106378421608017X]
- [3] Kulikov S.V., Chervonnaya N.A., Ternovaya O.N. Суперкомпьютерные дни в России. Тр. Междунар. конф. М.: Изд-во МГУ, 2017. С. 275–284.
- [4] Kulikov S.V., Chervonnaya N.A., Ternovaya O.N. // V. Voevodin, S. Sobolev (Eds.): RuSCDays. 2017. CCIS 793. P. 313–324. https://doi.org/10.1007/978-3-319-71255-0_25
- [5] Берд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981. 319 с. [Bird G.A. Molecular gas dynamics. Clarendon Press, Oxford, 1976.]
- [6] Куликов С.В. // Хим. физика. 2008. Т. 27. № 12. С. 40–45. [Kulikov S.V. // Russ. J. Phys. Chem. B. 2008. Vol. 2. N 6. P. 894–899.]
- [7] Куликов С.В., Терновая О.Н. // Вычислит. методы и програм. 2004. Т. 5. № 2. С. 5–9.
- [8] Snir M., Otto S., Huss-Lederman S., Walker D., Dongarra J. MPI: The Complete Reference. V. 1. The MPI Core. Boston: MIT Press, 1998.