

شبیه‌سازی عددی ساختار سلولی موج تراک با ناپایداری ضعیف با استفاده از روش PPM و حل‌کننده دقیق مسئله ریمان

علیرضا برخوردار* و محمد فرشچی**

دانشگاه صنعتی شریف، دانشکده مهندسی هوافضا

(دریافت: ۱۳۸۹/۴/۳۰، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۰/۴/۷، پذیرش: ۹۰/۴/۱۵)

در این تحقیق، با استفاده از یک روش عددی مرتبه بالا، ساختار سلولی و ناحیه موج سه‌گانه موج تراک دوبعدی با ناپایداری ضعیف بررسی شده است. معادلات اویلر دوبعدی واکنشی و سازوکار شیمیایی یک مرحله‌ای آرنیوسی با استفاده از روش مرتبه بالای PPM و حل‌کننده دقیق مسئله ریمان برای یک مخلوط گازی $H_2/O_2/Ar$ حل شده است. با معرفی جمله اختلالی با توزیع هارمونیک در متغیر چگالی جلوی موج ZND، موج تراک با ساختار سلولی منظم تولید می‌شود. میدان حل شامل باریکه حاوی موج تراک است که با موج تراک و با گذشت زمان و در طول کانال جابه‌جا می‌شود. حل باریکه حاوی موج تراک، در مقایسه با حل کل کانال، ضمن حفظ دقت نتایج منجر به کاهش زمان و هزینه محاسبات می‌شود. در اولین مرحله، مطالعه تحلیل دقت شبکه عددی انجام شده و نشان داده شده است که با استفاده از روش عددی مذکور و استفاده از مدل واکنش یک‌مرحله‌ای برای تحلیل مناسب ساختار سلولی ۲۴ نقطه بر طول نیمه واکنش کافی است. در ادامه تأثیر تغییر متغیرهای اختلال اولیه مانند ضخامت ناحیه اختلالی، فاصله اختلال از مرز پایین‌دست و ضریب تقویت اختلال بر روی روند تکامل ساختار سلولی بررسی شده است. بدین ترتیب دامنه مجاز تغییرات متغیرهای اختلالی مذکور با هدف عدم تأثیر بر دقت محاسبات و ساینز نهایی سلول تراک به دست آمده است. در پایان نیز با افزایش دقت شبکه به ۳۶ نقطه بر طول نیمه واکنش، توانایی سازوکار شیمیایی یک‌مرحله‌ای آرنیوسی در تحلیل نقطه سه‌گانه دوم و ناحیه برشی در ناحیه موج سه‌گانه نشان داده شده است.

کلیدواژه: موج تراک، ناحیه موج سه‌گانه، ساختار سلولی، شبیه‌سازی عددی، واکنش شیمیایی یک‌مرحله‌ای

مقدمه

موج تراک یک موج احتراقی مافوق صوت است که داخل مواد واکنش‌پذیر منتشر می‌شود [۱]. این موج شامل یک ناپیوستگی شوک و یک ناحیه احتراقی است که شوک را تعقیب می‌کند. موج شوک، فشار و دمای لازم برای شروع واکنش را ایجاد کرده و از طرفی، با انجام واکنش و آزاد شدن حرارت، انرژی لازم برای حفظ توان موج شوک تولید می‌شود. ساده‌ترین مدل تراک (Detonation)، مدل چاپمن-ژوگت است که به اختصار مدل CJ نامیده می‌شود. در این مدل، تراک تنها به عنوان یک ناپیوستگی بین جریان بالادست مخلوط نسوخته و جریان پایین‌دست با حالت تعادل ترموشیمیایی گازهای سوخته مطرح می‌شود. حل معادلات حاکم در جریان غیر لزج، یک‌بعدی و دایم در دو طرف ناپیوستگی موج تراک منجر به محاسبه کمترین سرعت انتشار تراک می‌شود که به سرعت CJ موسوم است [۱]. ضعف مدل CJ در این است که به واسطه فرض بی‌نهایت بودن نرخ واکنش شیمیایی عملاً ضخامتی برای موج تراک محاسبه نمی‌کند.

* دانشجوی دکترا - نویسنده مخاطب (ایمیل: ar.barkhordari@gmail.com)

** استاد (ایمیل: farshchi@sharif.edu)

در مرحله بعدی تکامل مدل‌های موج تراک، مدلی قرار دارد که با در نظر گرفتن نرخ محدود برای واکنش شیمیایی قادر است موج تراک را با ضخامت مشخصی محاسبه کند. این مدل به نام مدل "زدویچ-ون نیومن-دورینگ" و یا به اختصار مدل ZND معروف است [۱]. در مدل ZND، با استفاده از معادلات جریان یک‌بعدی و دایم، موج تراک شامل یک ناپیوستگی شوک تعقیب‌شونده توسط یک ناحیه واکنش با ضخامت محدود و شرط تعادل CJ در انتهای آن محاسبه می‌شود. بر خلاف مدل ساده و یک‌بعدی ZND، مشاهدات تجربی نشان داده‌اند که امواج تراک چندبعدی بوده و رفتاری غیردایم دارند [۲]. مهم‌ترین ویژگی موج تراک گازی، که بیانگر رفتار چندبعدی و غیردایم است، وجود نواحی امواج سه‌گانه (Triple-wave) بر روی پیشانی موج است [۱]. ساختار موج سه‌گانه از تداخل موج شوک پیش‌رونده تراک و موج عرضی پدید آمده و شامل موج شوک برخوردی (Incident shock)، ساقه ماخ (Mach stem) و موج عرضی است. نقطه تداخل این سه موج، نقطه سه‌گانه نامیده می‌شود. آزمایش‌های تجربی نشان داده‌اند که با پیشروی موج تراک داخل کانال پوشیده‌شده با لایه‌ای از دوده مسیر حرکت متناوب این نقاط سه‌گانه، که نواحی حاوی چرخش (Vorticity) قوی هستند، باعث تشکیل ساختارهای لوزی شکل می‌شود. این ساختارهای لوزی شکل به سلول‌های تراک موسوم‌اند. نتایج تجربی و شبیه‌سازی‌های عددی نشان می‌دهند این ساختارهای سلولی را می‌توان به دو نوع منظم و نامنظم دسته‌بندی کرد [۳]. مشخص شده است که درجه بی‌نظمی ساختار سلولی توسط متغیر انرژی فعال‌سازی (Activation) واکنش کلی کنترل می‌شود [۴]. در صورتی که انرژی فعال‌سازی واکنش کلی پایین باشد، ساختار سلولی منظم بوده و با افزایش آن درجه بی‌نظمی ساختار سلولی افزایش می‌یابد.

به واسطه محدودیت روش‌های آزمایشگاهی در بررسی ساختار پیچیده پیشانی موج تراک و ساختار سلولی آن، استفاده از روش‌های شبیه‌سازی عددی به صورت گسترده‌ای مرسوم شده است. بسیاری از شبیه‌سازی‌های عددی برای مخلوط هیدروژن/اکسیژن و رقیق‌کننده آرگن انجام شده است [۴-۹]. ویژگی این مخلوط، پایین بودن انرژی فعال‌سازی و در نتیجه تولید ساختار سلولی منظم است. در این حالت، به دلیل پایین بودن انرژی فعال‌سازی، از تشکیل بسته‌های نسوخته پشت ناحیه احتراق جلوگیری می‌شود [۴]. همچنین، طبق تعریف، از آنجایی که موج تراک یک موج احتراقی است، که با سرعت مافوق صوت حرکت می‌کند، سایر پدیده‌های نفوذ مانند لزجت فرصت فعال شدن نداشته و قابل صرف نظر خواهند بود. بنابراین، میتوان موج تراک با ناپایداری ضعیف را به کمک معادلات اوایلر واکنشی شبیه‌سازی کرد.

شبیه‌سازی‌های عددی انجام‌شده طیف وسیعی از پدیده‌های فیزیکی مرتبط با موج تراک همانند اثر نوع مخلوط واکنش‌دهنده‌ها، مدل واکنش شیمیایی، شرایط اولیه و هندسه میدان حل بر روی دینامیک ناحیه موج سه‌گانه و اندازه نهایی سلول تراک را مورد بررسی قرار داده‌اند. تفاوت عمده روش‌های شبیه‌سازی عددی مذکور، تفاوت در الگوریتم عددی، روش تولید شبکه، دامنه ناحیه محاسباتی، تعداد نقاط شبکه در طول نیمه واکنش و نوع سازوکار شیمیایی است [۳-۱۱]. کارهای اولیه انجام‌شده در زمینه شبیه‌سازی ساختار سلول تراک، به دلیل محدودیت‌های رایانه‌ای، از روش‌های نسبتاً ساده‌ای استفاده کرده‌اند. اورن و همکاران [۱۲]، با استفاده از مدل شیمیایی یک‌مرحله‌ای برای طول ناحیه القاء، نحوه تولید و رشد اختلالات عرضی از یک شوک مایل قرار داده شده در کانال را بررسی کردند. تاکی و فوجی وارا [۸] رفتار شوک سه‌گانه را برای تراک در مخلوط $H_2 / O_2 / Ar$ در یک کانال باریک بررسی کردند. آن‌ها، با استفاده از تعداد مشخصی نقاط تولیدکننده حرارت، موج تراک مدل CJ را مختل کردند. در نتایج به دست آمده مشخص شد تعداد نهایی موج‌های شوک عرضی حساسیتی به تعداد نقاط اولیه تولیدکننده حرارت ندارد. کاپلاسانات و همکاران [۹] اندازه سلول تراک در مخلوط هیدروژن/اکسیژن/آرگن را به ازای تغییرات عرض کانال بررسی کردند. آن‌ها از دقت شبکه عددی بین ۴۰ تا ۸۰ نقطه بر عرض سلول تراک (و نه طول نیمه واکنش و یا طول واکنش) استفاده کردند.

با پیشرفت‌های صورت گرفته در توان محاسباتی رایانه‌ها، دقت‌های شبکه عددی بسیار ریزتر و الگوهای سینتیک شیمیایی کامل‌تری مورد پذیرش قرار گرفته است. بوریو و مجد [۵] با استفاده از دقت شبکه عددی بین ۱۲ تا ۲۴ نقطه در طول نیمه واکنش ساختار سلولی تراک را در کانالی باریک به عرض ۱۰ تا ۲۰ برابر طول نیمه واکنش برای انرژی‌های فعال‌سازی و

حرارت‌های آزاد شده متفاوت بررسی کردند. آن‌ها از روش شبیه‌سازی PPM^۱ و روش تولید شبکه تطبیقی همراه با تکنیک تعقیب شوک استفاده کردند. بوریو و مجدا بیان کردند که بیشتر شبیه‌سازی‌های آن‌ها با دقت شبکه عددی ۲۴ نقطه بر طول نیمه واکنش همگرا شده و مستقل از دقت شبکه می‌شود [۵]. طی این مطالعات، بوریو و مجدا ارتباط بین طول موج‌های به‌دست‌آمده از تئوری ناپایداری خطی با اندازه نهایی سلول تراک با ناپایداری ضعیف به‌دست‌آمده در شبیه‌سازی عددی را بررسی کردند. آن‌ها نتیجه گرفتند که طول موجی که بیشترین اندازه نرخ رشد ناپایداری را دارد در میدان باقی مانده و نماینده اندازه سلول تراک است [۵]. اورن و همکاران [۱۳] با استفاده از سازوکار واکنش شیمیایی تفصیلی، موج تراک را در یک مخلوط کم‌فشار $H_2/O_2/Ar$ شبیه‌سازی کردند. طی شبیه‌سازی آن‌ها، اطلاعات بسیار زیادی درباره ساختار سلولی شامل تشکیل بسته‌های نسوخته، برخورد نقاط سه‌گانه و تکامل امواج عرضی به‌دست آمد. آن‌ها همچنین، با تغییر دقت شبکه عددی بین ۱۰۰ تا ۸۰۰ نقطه بر عرض سلول تراک (معادل نصف عرض کانال)، حساسیت شبکه را مطالعه کردند. آن‌ها دریافتند که تمامی شبکه‌ها منجر به تولید سلول با اندازه تقریباً یکسان می‌شوند، به جز درشت‌ترین شبکه که منجر به تولید دو نقطه سه‌گانه ضعیف اضافی می‌شود. آن‌ها به این نتیجه رسیدند که برای تولید سلول‌های تراک با دقت کافی، در حالت‌های مختلف مورد مطالعه، دقت شبکه عددی را می‌توان معادل ۱۳۰ نقطه بر عرض سلول (دومین شبکه درشت) در نظر گرفت. گامزو و دسبورس [۴] تأثیر انرژی فعال‌سازی روی نظم ساختار سلولی را بررسی کردند. در شبیه‌سازی آن‌ها، به نظر مقدار خطای عددی و خطای ماشین به اندازه کافی بزرگ بودند که منجر به تشکیل امواج عرضی شود. آن‌ها، در شبیه‌سازی خود، تراک را در کانالی به عرض ۴۸ تا ۸۶ برابر $l_{1/2}$ ، $l_{1/2}$ طول ناحیه نیمه واکنش) و دقت شبکه ۸۰ نقطه بر عرض سلول در نظر گرفتند. سین و همکاران [۱۴] شبیه‌سازی عددی را برای هر دو جریان لزوج و غیرلزوج، با استفاده از دقت شبکه عددی بین ۲ تا ۲۴ نقطه بر $l_{1/2}$ انجام دادند. با استفاده از درشت‌ترین شبکه، جمله پخش عددی بر جمله فیزیکی پخش (لزجت) مستولی شده و منجر به نتایج یکسانی برای هر دو جریان لزوج و غیرلزوج شد. با این حال برای شبکه‌های ریز وضعیت متفاوت خواهد بود. بدین صورت که برای جریان غیرلزوج جمله پخش عددی و دقت شبکه عددی نقشی مهم در تعیین ساختار سلولی ایفا خواهند کرد. نیکولیک و همکاران [۱۵] تأثیر عرض کانال در محدوده بین ۰/۵ تا ۱۰۰ برابر طول نیمه واکنش را بر روی اندازه سلول تراک بررسی کردند. آن‌ها مشاهده کردند که برای کانال‌هایی با عرض کوچک‌تر از $2.95l_{1/2}$ هیچ سلولی تولید نمی‌شود. با افزایش تدریجی عرض کانال به اندازه $5l_{1/2}$ ، ابتدا نصف سلول و سپس یک سلول کامل ظاهر شد. برای عرض‌های کانال بزرگ‌تر از $40l_{1/2}$ ، مشاهده شد که اندازه سلول به مقدار ثابتی در حدود $13l_{1/2}$ می‌رسد.

اخیراً موضوع دقت شبکه عددی در شبیه‌سازی ساختار سلولی تراک بیشتر مورد مطالعه قرار گرفته است. گاوریکف و همکاران [۱۶] ارتباطی بین اندازه‌های سلول تراک با طول‌های مشخصه ناحیه واکنش پیدا کردند. آن‌ها گزارش کردند که بیش از ۳۰ نقطه شبکه به ازای عرض سلول تراک لازم است تا ساختار سلولی با دقت مناسب حاصل شود. لفور و همکاران [۱۷]، با استفاده از مدل واکنش یک‌مرحله‌ای، ساختار موج سه‌گانه را برای مخلوط $H_2/O_2/Ar$ شبیه‌سازی کردند. آن‌ها، با استفاده از دقت شبکه عددی ۱۲ نقطه بر طول ناحیه واکنش، تغییرات ساختار ناحیه موج سه‌گانه را در طول یک سلول تراک بررسی کردند. آن‌ها توضیح می‌دهند، بعد از برخورد دو ناحیه سه‌گانه و در ابتدای تولید سلول جدید، ناحیه موج سه‌گانه شامل یک نقطه سه‌گانه (Single Mach) بوده و سپس در ادامه تولید سلول تراک، حین دورشدن دو ناحیه سه‌گانه از هم، ناحیه موج سه‌گانه به ساختاری شامل دو نقطه سه‌گانه (Double Mach) تبدیل خواهد شد. شارپ و همکاران [۱۰] تراک را در کانالی به عرض ۳۰ برابر طول نیمه واکنش و دقت شبکه تا ۶۰ نقطه بر $l_{1/2}$ بررسی کردند. آن‌ها بیان کردند که حداقل ۲۵ نقطه بر $l_{1/2}$ لازم است تا بتوان رفتار تراک را به صورت درست بررسی کرد. شارپ [۱۸] با استفاده از مدل واکنش یک‌مرحله‌ای جزئیات ساختار ناحیه موج سه‌گانه یک موج تراک دارای موج عرضی قوی را بررسی کرد. او بیان کرد که دقت ۳۲ نقطه بر

طول نیمه واکنش جزئیات ساختار موج سه‌گانه را به خوبی محاسبه می‌کند. شارپ با اشاره به نتایج شرت و کوئیرک [۱۹] اذعان می‌دارد که برای مدل‌های شیمیایی پیچیده‌تر، جهت حصول به حل دقیق و صحیح، به دقت شبکه عددی به مراتب بیشتری نسبت به مدل واکنش تک‌مرحله‌ای نیاز است. دیتردینگ [۲] نیز برای مخلوط $H_2/O_2/Ar$ ، با استفاده از مدل شیمیایی تفصیلی و دقت شبکه عددی بین $22/4$ تا $44/8$ نقطه بر طول ناحیه القاء، ساختار ناحیه موج سه‌گانه را شبیه‌سازی کرد. او ایجاد نقطه سه‌گانه دوم حین تکامل ناحیه سه‌گانه در طول ساختار سلول تراک را بررسی کرد.

هیو و همکاران [۷]، با استفاده از یک مدل واکنش ۱۹ پله‌ای شامل ۹ جزء شیمیایی، ساختار سلولی و نحوه تکامل آن را در یک مخلوط فشارپایین $H_2/O_2/Ar$ بررسی کردند. آن‌ها با استفاده از روش عددی مرتبه سوم ENO-LLF^۱ و در نظر گرفتن باریکه حاوی موج تراک آن را شبیه‌سازی کردند. در مدل آن‌ها دقت شبکه از ۸ تا ۶۴ نقطه شبکه بر طول ناحیه القاء (۵۵ تا ۴۴۰ نقطه بر طول ناحیه واکنش) تغییر داده شد. در نتایج آن‌ها، ساختارهای محاسبه‌شده سطوح مختلفی از جزئیات را نسبت به تغییرات دقت شبکه نشان می‌دهند، در حالی که اندازه‌های سلول تراک کماکان بدون تغییر باقی مانده‌اند. آن‌ها توانستند ساختار نقاط شبه‌ماخ دوتایی (Double-Mach-like) را در ناحیه موج سه‌گانه شبیه‌سازی کنند. نتایج هیو و همکاران نشان می‌دهد که نقطه سه‌گانه دومی پشت نقطه سه‌گانه اصلی وجود دارد. آن‌ها بیان می‌دارند که استفاده از مدل شیمیایی ساده احتمالاً باعث از دست رفتن بعضی از ریزساختارها (در ناحیه احتراق) شود. ریزساختارهایی که معمولاً به دلیل وجود واکنش انشعاب زنجیره‌ای ایجاد می‌شوند. بنابراین، یک روش عددی با دقت شبکه به اندازه کافی بالا و مدل واکنش شیمیایی تفصیلی هر دو مورد نیازند تا ساختار و رفتار تکاملی تراک آشکار شود. لیانگ و باونز [۱۱]، با استفاده از دقت شبکه عددی تا ۱۲۸ نقطه شبکه بر طول نیمه واکنش و مدل واکنش چهارمرحله‌ای با انشعاب زنجیره‌ای، ساختار موج تراک را بررسی کردند. آن‌ها در نتایج خود الگوی سنگ‌طاقی (Keystone) مشاهده‌شده در نتایج تجربی [۲۰] اثر متغیرهای عددی مختلف و از جمله دقت شبکه عددی بر روی نتایج موج تراک را مطالعه کرده‌اند. آن‌ها با استفاده از معادلات اویلر دوبعدی و مدل واکنش یک‌مرحله‌ای آرنیوسی متغیرهای مختلف موثر بر شبیه‌سازی موج تراک را مطالعه کردند. روش مورد استفاده آن‌ها روش ماسل (MUSCL) با دقت مرتبه سوم مکانی و حل‌کننده تقریبی ریمان موسوم به روش رو (Roe) است. آن‌ها در شبیه‌سازی، برای اجتناب از ناحیه محاسباتی بزرگ، تنها باریکه حاوی موج تراک را در دیدگاه لاگرانژی بررسی کردند. آن‌ها بیان می‌کنند که حداقل ۵ نقطه شبکه بایستی در طول ناحیه واکنش مدل ZND موج تراک در نظر گرفت تا بتوان ساختارهای سلولی تراک را به دقت شبیه‌سازی کرد.

شارپ و همکاران [۳] در کار جدیدی با قراردادن طول موج‌های به‌دست‌آمده از نتایج تحلیل خطی ناپایداری تراک با انرژی فعال‌سازی پایین، به عنوان اختلال اولیه در شبیه‌سازی، ارتباط آن را با اندازه سلول نهایی تراک بررسی کردند. آن‌ها از محیط محاسباتی آمریتا (Amrita) [۲۱] و حل‌کننده ریمان خطی‌شده رو، مدل شیمیایی یک‌مرحله‌ای آرنیوسی و استراتژی پالایش شبکه تطبیقی و تکنیک پردازش موازی استفاده کردند. آن‌ها از دقت شبکه بین ۲ تا ۳۲ نقطه بر طول نیمه واکنش به ترتیب برای شبکه درشت و شبکه ریز استفاده کردند. آن‌ها بیان می‌کنند که دقت ۳۲ نقطه بر طول نیمه واکنش جهت شبیه‌سازی دقیق دینامیک و اندازه سلول تراک با ناپایداری ضعیف (ساختار سلولی منظم) کافی است. آن‌ها، جهت اطمینان از نتایج تکنیک پالایش تطبیقی، یکبار نیز کل میدان پشت موج تراک را با دقت ثابت ۸ نقطه بر $l_{1/2}$ شبیه‌سازی کردند. نتیجه‌ای که به‌دست آوردند این بود که دینامیک و ساختار سلولی بدون تغییر باقی ماند. در یک کار جدید، هاشمی و همکاران با استفاده از معادلات اویلر یک‌بعدی و مدل واکنش سه‌مرحله‌ای، با تغییر انرژی فعال‌سازی و زمان مشخصه واکنش آغازی، تاثیر این متغیرها را بر روی شروع مستقیم موج تراک بررسی کردند [۲۸]. آن‌ها در شبیه‌سازی عددی تعداد ۱۰۰ نقطه بر طول ناحیه واکنش پایانی در نظر گرفتند.

با بررسی تحقیقات بسیار گسترده و متنوع ذکر شده، یک جمع‌بندی کلی درباره کارهای انجام‌شده در این مرحله انجام می‌شود. متغیرهایی که در زمینه ساختار سلولی تراک مطالعه شده‌اند شامل نحوه تکامل و اندازه نهایی سلول، ارتباط اندازه سلول با طول موج‌های به‌دست‌آمده از تحلیل خطی ناپایداری، بررسی ساختار موج سه‌گانه، تأثیر عرض کانال، تأثیر نوع مدل واکنش شیمیایی، تأثیر انرژی فعال‌سازی، دقت روش محاسباتی، نوع هندسه میدان محاسباتی و دقت شبکه عددی‌اند. بعضی از این موارد همانند دقت روش محاسباتی، دقت شبکه عددی، عرض کانال، و نوع مدل شیمیایی مستقیماً با شبیه‌سازی صحیح نحوه تکامل و اندازه سلول تراک و بررسی ناحیه موج سه‌گانه مرتبط‌اند. بنابراین برای تصمیم‌گیری در مورد انتخاب این متغیرها بایستی از معیارهای درستی استفاده شود.

در مورد دقت شبکه عددی، بررسی آماری مراجع بالا نشان می‌دهد که گروهی از آن‌ها بین ۲۰ تا ۳۰ نقطه شبکه بر طول نیمه واکنش را برای شبیه‌سازی دقیق ساختار سلولی کافی می‌دانند [۱۴،۱۰،۵،۳،۱۸]. گروه دیگری از این مراجع دقت شبکه لازم را بین ۳۰ تا ۱۳۰ نقطه شبکه بر عرض سلول در نظر گرفته‌اند [۱۶،۱۳،۹،۴]. همان‌طور که پیشتر ذکر شد، نیکولیک و همکاران [۱۵] مشاهده کردند که اندازه نهایی سلول تراک در حدود ۱۳ برابر طول نیمه واکنش است. همچنین شارپ و همکاران [۳] نیز دریافتند که اندازه نهایی سلول بین ۱۰ تا ۱۳ برابر طول نیمه واکنش است. بنابراین با در نظر گرفتن حدود $10l_{1/2}$ برای اندازه سلول، دقت ۳۰ تا ۱۳۰ نقطه بر عرض سلول (معیار اندازه سلول)، به معنی دقت شبکه عددی بین ۳ تا ۱۳ برابر طول نیمه واکنش خواهد بود.

با توجه به نتایج آماری دو گروه مذکور، بقیه مراجع دقت‌های شبکه بسیار پایین و یا بسیار بالا را برای شبیه‌سازی سلول تراک لازم دانسته‌اند. چوی و همکاران [۶] دقت شبکه ۵ نقطه بر طول ناحیه واکنش (و نه طول نیمه واکنش) را کافی دانسته‌اند. آن‌ها بیان می‌کنند که ۲ نقطه بر طول نیمه واکنش برای تراک با ساختار سلولی منظم کافی است. با توجه به نرخ‌های واکنش و مقایسه با نتایج دو گروه فوق، این تعداد نقاط کافی به نظر نمی‌رسد. از طرفی هیو و همکاران [۷]، با استفاد از مدل واکنش تفصیلی، دقت شبکه ۸ تا ۶۴ نقطه شبکه بر طول ناحیه القاء (۵۵ تا ۴۴۰ نقطه بر طول ناحیه واکنش) را مورد استفاده قرار دادند. لیانگ و باونز [۱۱] نیز با استفاده از مدل واکنش چهارمرحله‌ای، از دقت شبکه عددی تا ۱۲۸ نقطه شبکه بر طول نیمه واکنش استفاده کردند. هاشمی و همکاران نیز با استفاده از مدل واکنش سه‌مرحله‌ای از دقت شبکه ۱۰۰ نقطه بر طول ناحیه واکنش پایانی استفاده کردند [۲۸]. این سه نتیجه اخیر بسیار بالاتر از متوسط دو گروه قبلی است. نکته مشترک این سه مرجع استفاده از سازوکار شیمیایی پیچیده و چندمرحله‌ای است. این موضوع، با توجه به اینکه شرت و کوئیرک [۱۹] بیان می‌دارند که برای مدل‌های شیمیایی پیچیده‌تر به دقت شبکه عددی به مراتب بیشتری نسبت به مدل واکنش تک‌مرحله‌ای نیاز است، قابل توجه است. بنابراین، در صورت استفاده از مدل‌های چندمرحله‌ای، به دلیل وجود پیچیدگی‌ها و گرادیان‌های موجود در لایه واکنش شیمیایی و ضرورت تحلیل دقیق تمامی مراحل واکنش، نیاز به استفاده از دقت شبکه در حدود ۶۰ نقطه بر طول ناحیه القاء است. از طرفی همان‌گونه که پیشتر ذکر شد نتایج مراجع زیادی [۱۸،۱۴،۱۰،۵،۳] نشان می‌دهند که در صورت استفاده از مدل واکنش یک‌مرحله‌ای دقت شبکه بین ۲۰ تا ۳۰ نقطه بر طول نیمه واکنش برای شبیه‌سازی ساختار سلولی منظم تراک با ناپایداری ضعیف کافی است.

مسئله بعدی انتخاب هندسه میدان محاسباتی است. با بررسی مراجع مذکور مشخص شده است که اکثر تحقیقات انجام‌شده جدید، با هدف کاهش زمان و هزینه محاسباتی، به جای شبیه‌سازی موج تراک در کل طول کانال، استفاده از شبیه‌سازی باریکه حاوی موج تراک بر اساس دیدگاه لاگرانژی یا اوپلری را ترجیح می‌دهند [۱۰،۷،۶،۴،۳]. در این راستا نکات لازم برای محاسبه ابعاد باریکه و فاصله موج تراک از مرز چپ و راست از جمله مسائلی است که نیاز به بررسی دارد.

همان‌گونه که پیشتر ذکر شد، یکی دیگر از مسائل مورد بررسی در شبیه‌سازی ساختار سلولی تراک، و به‌ویژه ساختار ناحیه موج سه‌گانه، تأثیر نوع مدل واکنش شیمیایی روی نتایج است. بیشتر مراجع از مدل واکنشی یک‌مرحله‌ای استفاده کرده‌اند [۳-۶،۱۲،۱۸]. همان‌گونه که قبلاً ذکر شد، هیو و همکاران [۷] با استفاده از مدل واکنش تفصیلی نشان دادند که در

ساختار شوک سه‌گانه نقطه سه‌گانه دومی پشت نقطه سه‌گانه اصلی وجود دارد. آن‌ها بیان می‌کنند یک روش عددی، با دقت شبکه به اندازه کافی بالا و مدل واکنش شیمیایی تفصیلی، هر دو مورد نیازند تا ساختار و رفتار تکاملی تراک آشکار شود. در اینجا این سوال مطرح می‌شود که آیا مدل واکنش یک‌مرحله‌ای می‌تواند نقطه سه‌گانه دوم را برآورد کند؟

با این مقدمه، این تحقیق به دنبال آن است که با استفاده از روش عددی گودنفی مرتبه بالای PPM که قابلیت تحلیل دقیق ناپیوستگی‌های جریان به‌خصوص خط لغزش را دارد [۲۳، ۲۲] و با استفاده از حل‌کننده دقیق مسئله ریمان، با هدف شبیه‌سازی ساختار سلولی و ناحیه سه‌گانه موج تراک، موارد زیر را بررسی کند:

- (۱) بررسی دقت مورد نیاز در شبکه عددی جهت شبیه‌سازی دقیق ساختار سلولی موج تراک با ناپایداری ضعیف.
- (۲) بررسی متغیرهای شرایط اولیه اختلالی شامل: تغییر ضخامت، دامنه و فاصله اختلال از مرز پایین‌دست جهت اطمینان از عدم تأثیر بر روی دقت نتایج ساختار سلولی.
- (۳) مطالعه توانایی سازوکار شیمیایی یک‌مرحله‌ای آرنیوسی در بررسی ناحیه برشی و نقطه سه‌گانه دوم.

مدل ریاضی حاکم و مدل واکنش شیمیایی

فرض می‌شود موج تراک در یک کانال دوبعدی در میان گازهای ایدئال احتراق‌پذیر پیش‌مخلوط منتشر می‌شود. به‌واسطه سرعت مافوق صوت موج تراک، پدیده‌های اتلاف و پخش همانند لزجت زمان کافی برای فعال شدن نداشته و می‌توان از آن‌ها صرف‌نظر کرد. همچنین، فرض می‌شود واکنش شیمیایی از نوع برگشت‌ناپذیر یک‌مرحله‌ای با نرخ واکنش آرنیوسی باشد که در آن محصولات احتراق با کسر مولی و نسبت گرمای ویژه ثابت تولید می‌شود. بدین ترتیب معادلات بقای میدان جریان و معادله انتقال متغیر پیشرفت واکنش، توسط روابط اویلر دوبعدی واکنشی، بیان می‌شوند:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho e_t \\ \rho \beta \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (\rho e_t + p)u \\ \rho u \beta \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial y} \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (\rho e_t + p)v \\ \rho v \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \rho r \end{bmatrix} \quad (1)$$

در معادلات بالا، ρ ، u ، v ، p ، e_t ، β به ترتیب چگالی، مولفه‌های سرعت، فشار، انرژی داخلی کل و متغیر پیشرفت واکنش‌اند. مقدار متغیر پیشرفت واکنش از مقدار صفر در گازهای نسوخته تا مقدار یک در گازهای سوخته تغییر می‌کند. انرژی داخلی کل شامل انرژی داخلی و انرژی جنبشی است و توسط معادله حالت پلی‌تروپیک زیر به فشار مرتبط می‌شود:

$$p = (\gamma - 1)\rho \left\{ e_t - (u^2 + v^2) / 2 + \beta Q_r \right\} \quad (2)$$

در رابطه بالا، Q_r حرارت واکنش شیمیایی بر جرم واحد و γ توان پلی‌تروپیک است. نرخ واکنش یک‌مرحله‌ای توسط قانون آرنیوسی زیر تعریف می‌شود:

$$r = A(1 - \beta) \exp(-E_a \rho / p) \quad (3)$$

در رابطه بالا، A و E_a به ترتیب ضریب پیش‌توانی و مقدار انرژی فعال‌سازی است. رابطه چگالی و فشار با دما نیز توسط رابطه حالت گاز ایدئال ارائه می‌شود:

$$p / \rho = RT / M \quad (4)$$

در این رابطه، R و M ثابت گاز و وزن ملکولی آن هستند. اثرات لزجت، انتقال حرارتی و انتشار جرم در این مدل در نظر گرفته نمی‌شوند. محیط واکنشی توسط شرایط اولیه آن M ، T_0 ، p_0 و متغیرهای Q_r ، E_a ، A تعریف می‌شود.

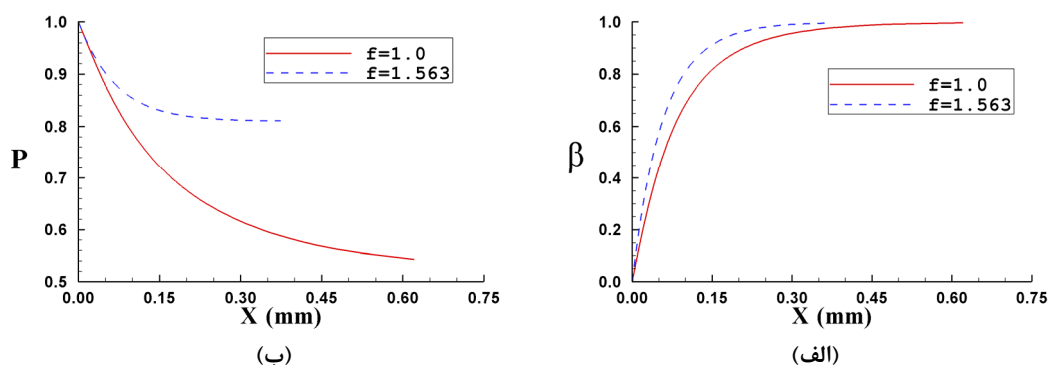
با فرض جریان دایم یک‌بعدی، معادلات بالا منجر به حل ZND می‌شود [۱]. ساختار ZND توسط تحلیل رنگین-هگونیوت و استفاده از معادله واکنش (۳) محاسبه می‌شود. ساختار این مدل برای موج تراک یک‌بعدی شامل یک موج شوک حرکت‌کننده با سرعت چاپمن-ژوگت، D_{CJ} ، است که توسط یک ناحیه احتراق تعقیب می‌شود. در انتهای ناحیه احتراق، گازهای سوخته با سرعت معادل سرعت صوت محلی حرکت می‌کنند. سرعت D_{CJ} حداقل سرعت موج تراک خوداتکا (Self-sustain) است که با فرض سرعت جریان مساوی سرعت صوت در انتهای ناحیه واکنش ($\beta = 1$) به دست می‌آید. برای یک مخلوط مشخص، شکل مقطع ZND (Profile) تابعی از متغیرهای γ ، Q_r ، E_a و ضریب بیش‌رانش (Overdriven) $f = (D / D_{CJ})^2$ است [۲۴، ۱]. متغیر پیش‌نمایی A یک ضریب مقیاس بوده که طول نیمه واکنش در مدل ZND را تعیین می‌کند. طول نیمه واکنش، $\ell_{1/2}$ ، به‌عنوان ضخامت ناحیه $0 < \beta < 0.5$ تعریف می‌شود.

این تحقیق به دنبال بررسی ساختار سلولی منظم موج تراک با ناپایداری ضعیف است. بنابراین، با پیروی از گامرو و همکاران [۴]، مخلوط گازی استوکیومتریک هیدروژن/اکسیژن رقیق شده با ۷۰ درصد آرگن در دمای اولیه ۲۹۳ K و فشار اولیه یک بار در نظر گرفته می‌شود. جدول ۱ شرایط اولیه، متغیرهای شیمیایی و خواص موج تراک CJ را برای مخلوط گازی اشاره شده نشان می‌دهد.

جدول ۱- خواص شیمیایی و تراک مخلوط $2H_2 + O_2 + 70\%Ar$ در شرایط اولیه مشخص

| متغیر | تعریف | متغیر | تعریف |
|----------------------------------|------------------|-----------------------------|--------------------------|
| $P_0 = 1 \text{ bar}$ | فشار اولیه مخلوط | $P_{CJ} = 17.5 \text{ bar}$ | فشار CJ |
| $T_0 = 293 \text{ K}$ | دمای اولیه مخلوط | $T_{CJ} = 3007 \text{ K}$ | دمای CJ |
| $M = 0.012 \text{ kg mol}^{-1}$ | وزن ملکولی مخلوط | $E = E_a / RT_0 = 12$ | انرژی فعال‌سازی بدون بعد |
| $D_{CJ} = 2845 \text{ m s}^{-1}$ | سرعت تراک CJ | $\gamma = 1.333$ | نسبت گرمای ویژه |
| $P_S = 34 \text{ bar}$ | فشار ZND | $Q = Q_r / RT_0 = 24$ | گرمای واکنش بدون بعد |
| $T_S = 1709 \text{ K}$ | دمای ZND | | |

شکل ۱ شکل مقطع ZND فشار و ضریب پیشرفت واکنش بدون بعد را بر حسب فاصله پشت موج شوک برای تراک CJ و تراک در یک حالت بیش‌رانده $f = 1.563$ نشان می‌دهد. متغیر فشار با استفاده از مقدار فشار ZND در پشت موج شوک و نرخ پیشرفت واکنش نیز با استفاده از سرعت جریان پشت موج بدون بعد شده‌اند. شکل ۱- (الف) نشان می‌دهد که طول ناحیه واکنش، ℓ_{hr} ، که توسط محدوده $0.1 < \beta < 0.95$ تعریف می‌شود، برای موج تراک CJ معادل 0.29 mm و برای تراک بیش‌رانده $f = 1.563$ معادل 0.19 mm است. در ضمن با توجه به شکل ۱- (الف)، طول نیمه واکنش، $\ell_{1/2}$ ، که توسط محدوده $0.0 < \beta < 0.5$ تعریف می‌شود، برای تراک CJ معادل 0.06 mm خواهد بود.



شکل ۱- شکل مقطع ZND، (الف) فشار، (ب) پیشرفت واکنش

روش شبیه‌سازی عددی

شبیه‌سازی عددی میدان‌های تراکم‌پذیر، نیاز به روش‌هایی دارد که توانایی حل محدوده وسیعی از مقیاس‌ها را داشته باشد. استفاده از مدل شیمیایی یک‌مرحله‌ای بازگشت‌ناپذیر مسئله صلبیت (Stiffness) جمله‌های چشمه شیمیایی را حذف می‌کند. از طرفی، در بسیاری از حالت‌ها (تراک با ناپایداری ضعیف)، مدل سینتیک شیمیایی یک‌مرحله‌ای و مدل‌های سینتیک پیچیده‌تر، به طور کیفی، نتایج یکسانی را نشان می‌دهند [۳]. با افزایش ناپایداری، به نظر می‌رسد مدل سینتیک یک‌مرحله‌ای برای مدلسازی ناحیه احتراق کافی نباشد [۳]. مهم‌ترین ویژگی دینامیک گازی نهفته در میدان‌های جریان تراکم‌پذیر شبیه‌سازی سطوح لغزش یا تماس است. معمولاً روش‌های عددی در گرفتن ناپیوستگی شوک مشکل‌چندانی ندارند، اما بیشتر آن‌ها در شبیه‌سازی دقیق ناپیوستگی تماس یا خط لغزش با مشکل مواجه‌اند. به عنوان نمونه، این پدیده در منحنی تغییرات چگالی در مسئله استاندارد لوله شوک دیده می‌شود. بنابراین، پدیده فیزیکی تعیین‌کننده در روش عددی، دینامیک خط لغزش است. بدین ترتیب ملاک انتخاب روش عددی توانایی آن در تخمین هرچه دقیق‌تر سطح تماس یا خط لغزش خواهد بود [۲۵]. این تحقیق به دنبال روش عددی دقیقی بوده است که به حداقل تراکم نقاط شبکه عددی بر طول مشخصه نیاز داشته باشد. روش مورد استفاده برای شبیه‌سازی میدان تراکم‌پذیر یک روش حجم محدود برای حل معادلات اولر و اکنشی است. روش حل مذکور یک روش گودنفی صریح دوبعدی با دقت مرتبه دوم زمانی و مکانی است [۲۲]. محاسبه شارها (Flux) در روش‌های گودنفی منجر به تشکیل مسئله ریمان با شرایط مرزی معلوم در سمت چپ و راست سطوح سلول‌های شبکه عددی می‌شود. شرایط مرزی چپ و راست مسئله ریمان، بر اساس بسط مرتبه بالای روش گودنفر، روش تکه‌ای سهموی (PPM)، محاسبه می‌شوند که توسط کوللا و وود وارد معرفی شده است. روش PPM یکی از دقیق‌ترین روش‌ها برای ساخت شرایط مرزی ریمان است [۲۲]. با تشکیل شرایط مرزی ریمان می‌توان مسئله ریمان را حل کرده و شارها را محاسبه کرد. برای حل مسئله ریمان، یک راه استفاده از روش‌های تقریبی است که معروف‌ترین آن‌ها روش تقریبی رو است. روش دقیق‌تر استفاده از حل دقیق مسئله ریمان است که به واسطه ضمنی‌بودن معادلات منجر به یک فرایند سعی و خطا در یافتن پاسخ مسئله ریمان خواهد شد.

کوللا [۲۳] بیان می‌کند استفاده از حل دقیق مسئله ریمان و الگوریتم PPM از چند جهت برتری قابل ملاحظه‌ای نسبت به روش ماسل دارد. نکته اول اینکه استفاده از یک تقریب سهموی به عنوان تابع میان‌یابی در هر طرف سطح سلول عددی منجر به تقریب دقیق‌تر و هموارتر گرادینان‌های مکانی شده و در ضمن ناپیوستگی‌ها، به‌ویژه ناپیوستگی‌های تماس، با شیب تندتری برآورد می‌شوند. دوم اینکه روش محاسبه تداخل غیرخطی امواج به‌کار رفته برای محاسبه شارها بسیار ساده‌تر از روش به‌کار رفته در روش ماسل است [۲۶]. این نکته منجر به ایجاد یک الگوریتم قوی‌تر با پیچیدگی کمتر می‌شود [۲۲]. در نهایت کوللا و وود وارد [۲۵، ۲۳] لزجت عددی مورد نیاز را بهینه‌سازی کرده و راه‌هایی برای معرفی آن، بدون اینکه کیفیت حل عددی تحت تاثیر قرار بگیرد، یافته‌اند.

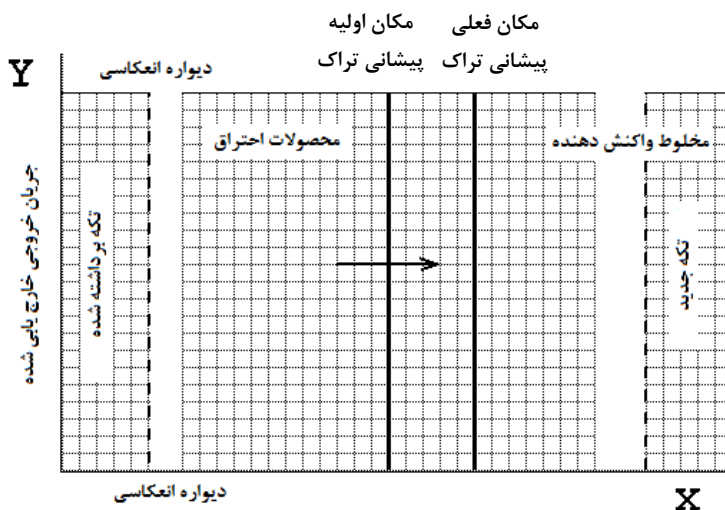
مدل فیزیکی

جهت بررسی دینامیک تکامل ساختار سلولی، بایستی انتشار موج تراک را داخل کانالی در نظر گرفت که به اندازه کافی طولانی باشد. شبیه‌سازی کل طول کانال در هر پله زمانی منجر به افزایش شدید زمان اجرا و هزینه محاسباتی می‌شود. از طرفی، در یک پله زمانی مشخص، موج تراک تنها بخش کوچکی از طول کانال را اشغال می‌کند. با توجه به این حقیقت، راه‌کارهای مختلفی برای کاهش زمان و هزینه محاسباتی انجام شده است. به عنوان مثال، بوریو و مجدا با در نظر گرفتن کانال طولانی، با استفاده از روش تعقیب پیشانی تراک به همراه تکنیک پالایش تطبیقی شبکه، سعی کردند هزینه و زمان محاسباتی را کاهش دهند [۵]. شارپ و همکاران [۳] نیز برای کانال طولانی با استفاده از استراتژی پالایش تطبیقی شبکه و تکنیک پردازش موازی

سعی در کاهش زمان محاسباتی کردند. در روش تعقیب پیشانی تراک، رفته‌رفته ناحیه محاسباتی بزرگ‌تر و در نتیجه زمان اجرا افزایش می‌یابد. همچنین، استفاده از تکنیک پالایش تطبیقی شبکه نیز منجر به پیچیدگی روش تولید شبکه و در نتیجه افزایش خطای میان‌بایی بین شبکه ریز و درشت و افزایش زمان محاسبات می‌شود.

روش دیگری که پیچیدگی کمتری دارد ایده حذف بخش‌های غیرلازم کانال و در نظر گرفتن ناحیه حاوی موج تراک در هر بازه زمانی است. این حقیقت منجر به کاهش شدید در زمان و حافظه مورد نیاز محاسباتی خواهد شد. همان‌گونه که در انتهای مقدمه نیز ذکر شد، بیشتر تحقیقات انجام‌شده جدید به جای شبیه‌سازی موج تراک در کل طول کانال، استفاده از شبیه‌سازی باریکه حاوی موج تراک بر اساس دیدگاه لاگرانژی یا اویلری را ترجیح می‌دهند [۳، ۴، ۶، ۷، ۱۰]. در این راستا، گامز و همکاران [۴] از تکنیک شبکه‌متحرک در دیدگاه لاگرانژی استفاده کردند. در این روش، به جای حل تمام کانال در هر پله زمانی، ناحیه حاوی موج تراک با ضخامت مشخصی در نظر گرفته می‌شود. جریان از یک طرف وارد باریکه حاوی موج تراک شده و از طرف دیگر خارج می‌شود. بدین ترتیب، موج تراک تقریباً در مکان ثابت باقی مانده و دامنه محاسباتی محدود به باریکه‌ای از کانال است که با موج تراک حرکت می‌کند. طول این ناحیه محاسباتی بایستی چند برابر بزرگ‌تر از طول ناحیه واکنش پشت شوک پیش‌رونده باشد، به گونه‌ای که ساختار جبهه تراک تحت تأثیر شرط مرزی خروجی قرار نگیرد. در صورتی که طول این ناحیه کوچک باشد، طبق اظهار گامز و همکاران [۴]، این تأثیر به صورت کاهش سرعت موج تراک ظاهر می‌شود. چوی و همکاران [۶] نیز از تکنیک بسیار مشابهی را استفاده کردند. آن‌ها بیان می‌کنند که طول لازم برای ناحیه محاسباتی، برای اینکه موج تراک تحت تأثیر شرط مرزی پایین‌دست قرار نگیرد، بایستی حدود یک تا دو برابر اندازه سلول تراک باشد. هیو و همکاران نیز باریکه حاوی موج تراک را در دیدگاه اویلری با فرض شبکه در حال حرکت با سرعت تراک مدل ZND حل کردند [۷].

در این تحقیق از یک تکنیک وصله‌گذاری (Grid patching technique) استفاده می‌شود که بسیار شبیه تکنیک به‌کار رفته توسط هیو و همکاران است [۷]. یک دامنه دکارتی دوبعدی در صفحه XY در نظر گرفته می‌شود که در آن موج تراک از چپ به راست حرکت می‌کند. یک شبکه عددی یکنواخت برای باریکه محاسباتی مورد استفاده قرار خواهد گرفت. شکل ۲ فرایند تکنیک وصله‌گذاری شبکه را نشان می‌دهد.



شکل ۲- هندسه ناحیه محاسباتی و تکنیک اضافه و کم کردن تکه (وصله‌گذاری)

برای انتخاب عرض کانال ابتدا دو نکته یادآوری می‌شود. در بخش مقدمه مشخص شد که اندازه متوسط سلول تراک در حدود ۱۰ تا ۱۳ برابر طول نیمه واکنش است [۳، ۱۵]. همچنین، در بخش مقدمه، طبق یافته‌های نیکولیک و همکاران [۱۵] که

تأثیر عرض کانال بر روی اندازه سلول تراک را بررسی کردند، مشخص شد برای عرض‌های کانال بزرگ‌تر از $40\ell_{1/2}$ اندازه سلول به مقدار ثابتی در حدود $13\ell_{1/2}$ می‌رسد و عرض کانال روی اندازه سلول تأثیری ندارد. بنابراین، در این تحقیق عرض کانال حدود ۵۰ برابر طول ناحیه نیمه واکنش در نظر گرفته خواهد شد. بدین ترتیب حداقل ۴ سلول تراک در عرض کانال به وجود خواهد آمد.

در مورد انتخاب طول باریکه نیز دو نکته مجدداً یادآوری می‌شود. طبق یافته‌های گامزو و همکاران [۴] مشخص شد طول ناحیه محاسباتی بایستی چند برابر بزرگ‌تر از طول ناحیه واکنش (و نه اندازه سلول) پشت شوک پیش‌رونده باشد، به گونه‌ای که ساختار جبهه تراک تحت تأثیر شرط مرزی خروجی قرار نگیرد. همچنین، طبق یافته‌های چوی و همکاران [۶] مشخص شد که طول لازم برای ناحیه محاسباتی بایستی حدود یک تا دو برابر اندازه سلول تراک باشد و در ضمن فاصله موج تراک از شرط مرزی پایین‌دست باید به اندازه‌ای باشد که شرایط CJ انتهای ناحیه واکنش داخل ناحیه محاسباتی قرار بگیرد. شرایط CJ بیان می‌کند که سرعت جریان در انتهای ناحیه واکنش در مدل ZND نسبت به دستگاه قرار گرفته روی شوک پیش‌رونده مساوی سرعت صوت محلی است. بنابراین، اختلالاتی که پایین‌دست شرایط CJ قرار دارند قادر نخواهند بود روی موج تراک تأثیر بگذارند. با این توضیحات، در این تحقیق، طول باریکه حاوی موج تراک در حدود ۳۵ برابر طول نیمه واکنش (حدود ۳ برابر اندازه سلول تراک) در نظر گرفته خواهد شد. موج شوک اولیه (مدل ZND) نیز حدود ۲۳ برابر طول نیمه واکنش (حدود ۲ برابر اندازه سلول) از مرز سمت چپ فاصله داشته و می‌تواند به سمت راست به داخل مخلوط تازه حرکت کند.

در ادامه روش محاسبه طول وصله (Patch) و زمان قراردادن آن در سمت راست و برداشتن وصله‌ای با همان طول از سمت چپ توضیح داده می‌شود. با توجه به طول در نظر گرفته شده برای باریکه و فاصله موج اولیه با مرز سمت چپ، فاصله باقی‌مانده برای حرکت موج به سمت راست در حدود $12\ell_{1/2}$ خواهد بود. بنابراین، با دانستن سرعت موج تراک ZND و مشخص‌بودن فاصله آن ($12\ell_{1/2}$) از مرز سمت راست، می‌توان متوسط زمان رسیدن موج به مرز سمت راست را تعیین کرد. از آنجایی که با حرکت موج به سمت راست دیگر به صورت موج ZND باقی نمانده و می‌تواند سرعتی بیشتر از سرعت موج ZND داشته باشد، یک حاشیه اطمینان برای فاصله پیموده شده موج در نظر گرفته می‌شود. بنابراین، با توجه به فاصله متوسط موج از مرز راست، بعد از محاسبه زمان پیمودن فاصله $9\ell_{1/2}$ توسط موج ZND، یک وصله شبکه با طول معادل از سمت چپ برداشته و به همان اندازه به سمت راست اضافه می‌شود.

شرایط اولیه و مرزی

شرایط اولیه جلوی موج شوک حرکت‌کننده به سمت راست شرایط مخلوط پیش از واکنش $\beta=0$ ، $u=v=0$ ، p_0 ، ρ_0 است. متغیر $\beta=0$ بیانگر مخلوط واکنش دهنده‌هاست. شرط مرزی سمت راست نیز شرایط مخلوط واکنش‌دهنده‌ها قرار داده می‌شود. شرایط اولیه پشت شوک (سمت چپ شوک) با استفاده از شکل مقطع ZND به دست می‌آید. شرط مرزی سمت چپ، طبق آنچه در مرجع [۴] توضیح داده شده است، برون‌یابی جریان خروجی پایین‌دست است. این شرط مرزی به گونه‌ای تعریف می‌شود که هر یک از متغیرهای جریان در مرز سمت چپ $Y_b = (\rho, p, u, v, \beta)$ ، از طریق رابطه زیر، به مقدار این متغیرها در اولین سلول مجاور مرز مرتبط می‌شوند:

$$Y_b = Y_1 \cdot (1 - \varphi) + Y_e \cdot \varphi \quad (5)$$

در رابطه بالا، φ ضریب تخفیف و Y_1 مقدار کنونی متغیر در سلول مجاور مرز است. در اینجا $\varphi = 0.05$ و Y_e مساوی مقادیر محیطی متغیرها قرار داده می‌شوند (به جز $\beta=1$). همان‌گونه که در بخش مدل فیزیکی به طور کامل توضیح داده شد، در صورتی که موج اولیه تراک (مدل ZND) به اندازه کافی دور از مرز سمت چپ قرار داده شود، این شرط مرزی هیچ تأثیری بر روی روند تکامل سلول تراک نخواهد داشت.

شرط مرزی اعمال شده در مرزهای بالا و پایین شرط دیواره انعکاسی قرار داده می‌شود. در شبیه‌سازی‌ها، شکل مقطع ZND اولیه با قرار گرفتن اختلال هارمونیک در جمله چگالی درست جلوی آن به شکل زیر مختل می‌شود:

$$\rho = \rho_0 + \rho_0(3 + \cos(2\pi y / W + \pi)) * \sin(5000\pi x + \pi / 2) \quad (6)$$

$$0 \leq y \leq 3mm, \quad 2 \leq x \leq 2.1mm$$

در رابطه بالا، W طول موج اختلال هارمونیک است. با عبور موج ZND از شکل مقطع اختلالی، بعد از مدت زمان کمی، ساختار سلولی تراک شروع به شکل‌گیری کرده و با پیشروی بیشتر روند تکامل ساختار سلولی کامل می‌شود.

نتایج شبیه‌سازی

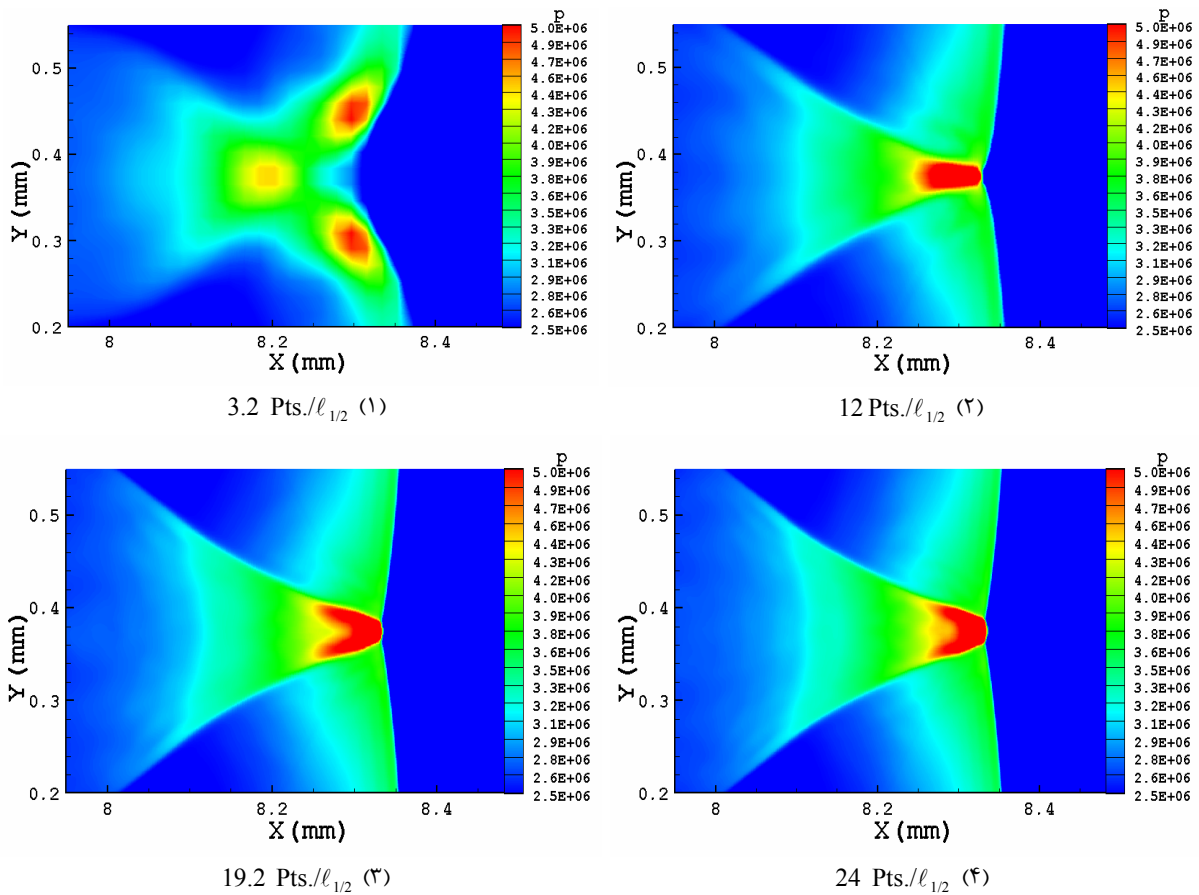
بررسی اثر دقت شبکه روی ساختار سلولی موج تراک

همان‌گونه که پیشتر در بخش مقدمه ذکر شد، بررسی نتایج به‌دست آمده توسط مراجع مختلف نشان می‌دهد، در صورت استفاده از مدل واکنش یک‌مرحله‌ای، دقت شبکه بین ۲۰ تا ۳۰ نقطه بر طول نیمه واکنش احتمالاً برای شبیه‌سازی ساختار سلولی منظم تراک با ناپایداری ضعیف کافی باشد [۱۸، ۱۴، ۱۰، ۵، ۳]. نتایج دو مرجع [۱۳، ۳] نیز نشان داد، در صورتی که دقت شبکه عددی حداقل حدود ۱۰ نقطه بر طول نیمه واکنش در نظر گرفته شود، اندازه سلول تراک مستقل از دقت شبکه می‌شود. در اینجا باید به این نکته اشاره کرد که استقلال اندازه سلول از دقت شبکه عددی شرط لازم برای دقت ساختار سلولی بوده، اما به هیچ وجه شرط کافی برای آن نخواهد بود. بنابراین به جای در نظر گرفتن استقلال اندازه سلول تراک از دقت شبکه باید معیار مناسب‌تری در نظر گرفته شود تا از دقت ساختار سلولی تراک مطمئن شد.

این معیار در شبیه‌سازی دقیق ساختار پیشانی موج تراک نهفته است. در صورتی که بتوان نشان داد تغییرات متغیرها در ناحیه پیشانی موج تراک مستقل از دقت شبکه شده‌اند، آنگاه می‌توان مطمئن شد که ساختار سلولی تراک مستقل از دقت شبکه بوده و در ضمن دقیق نیز هست؛ به عبارتی معیار استقلال ساختار پیشانی موج تراک از دقت شبکه عددی شرط لازم و کافی برای تضمین استقلال اندازه و ساختار سلولی تراک خواهد بود. در ادامه با استفاده از نتایج شبیه‌سازی این مسئله بررسی می‌شود.

بدین منظور، برای مخلوط اشاره‌شده در جدول ۱ و برای اختلال اولیه با طول موج $W=0.75$ mm برای تراکم $3/2$ تا 24 نقطه شبکه بر طول نیمه واکنش، موج تراک شبیه‌سازی شد. از آنجایی که هدف این قسمت صرفاً بررسی دقت پیشانی موج تراک است، عرض کانال محدود به $12.5\ell_{1/2}$ می‌شود. بدین ترتیب، با توجه به طول نیمه واکنش ($\ell_{1/2} = 0.06mm$) و به ازای دامنه اختلالی $W=0.75$ mm، یک سلول تراک و یا به عبارتی دو نقطه سه‌گانه تشکیل خواهد شد که حین حرکت پیشانی موج تراک به سمت راست در عرض کانال به سمت بالا و پایین حرکت خواهند کرد. شبیه‌سازی‌های مربوط به مطالعه دقت شبکه عددی برای طول کانالی بیش از $200\ell_{1/2}$ انجام شد. در ادامه نتایج به‌دست آمده بررسی می‌شود.

شکل ۳ پیشانی موج تراک پیش‌رونده به سمت راست را بر حسب کانتورهای فشار و به ازای تغییرات دقت شبکه عددی مورد مقایسه قرار می‌دهد. این شکل لحظه برخورد دو نقطه سه‌گانه را نشان می‌دهد. کمترین دقت به کار رفته شبکه عددی معادل $3/2$ نقطه بر طول نیمه واکنش است که در شکل ۳-۱ نشان داده شده است. ملاحظه می‌شود که نقاط سه‌گانه و میدان فشار پشت موج تراک وضوح خوبی ندارد. با افزایش بیشتر دقت شبکه عددی به $12pts./\ell_{1/2}$ ، موقعیت مکانی نقاط سه‌گانه تثبیت شده، ولی ساختار شکل‌گرفته از برخورد دو نقطه سه‌گانه، در مقایسه با نتایج مربوط به دقت‌های $19/2$ و 24 نقطه بر طول نیمه واکنش، به کلی تفاوت دارد. در مقایسه دو شکل مربوط به دقت‌های $19.2pts./\ell_{1/2}$ و $24pts./\ell_{1/2}$ ، مشاهده می‌شود، با افزایش دقت شبکه، وابستگی نتایج به شبکه کاهش یافته است. با توجه به شکل ۳، از آنجایی که کانتورهای مربوط به دقت $3.2pts./\ell_{1/2}$ تفاوت زیادی با دقت‌های دیگر دارد، کنار گذارده می‌شود.



شکل ۳- پیشانی موج تراک بر حسب کانتورهای فشار به ازای تغییرات دقت شبکه عددی

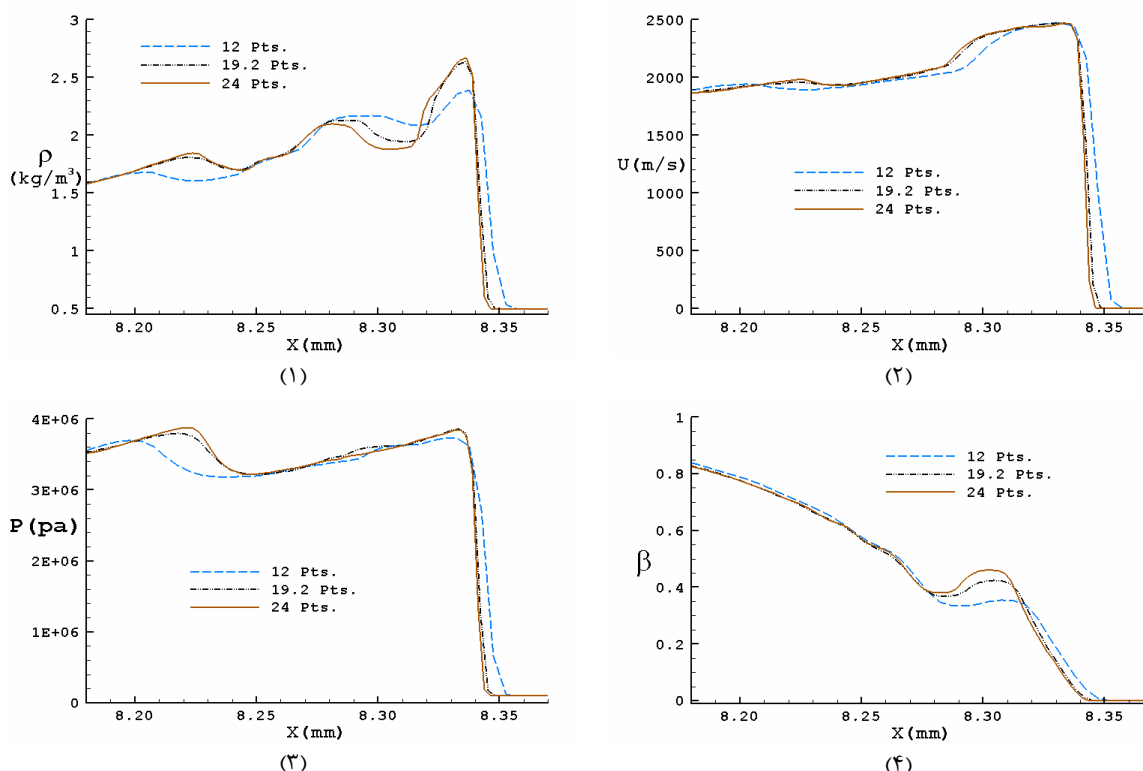
همان‌طور که پیشتر ذکر شد، استقلال اندازه سلول تراک از دقت شبکه نمی‌تواند به عنوان معیار دقت نتایج در نظر گرفته شود. به جای آن مشخص شد که بایستی عدم وابستگی ساختار پیشانی موج تراک و نقاط سه‌گانه از دقت شبکه را بررسی کرد. در اینجا این نکته اضافه می‌شود که با مقایسه کیفی کانتورها در پیشانی موج تراک و نقاط سه‌گانه نیز کاملاً نمی‌توان از استقلال نتایج از دقت شبکه مطمئن شد. بنابراین، علاوه بر مطالعه کیفی که به طور نسبی محدوده دقت شبکه مورد نیاز جهت استقلال نتایج از شبکه را نشان می‌دهد، دقت نتایج بایستی، در قالب رسم منحنی تغییرات متغیرهای میدان در عرض پیشانی موج تراک، به صورت کمی نیز بررسی شود.

شکل ۴ مقایسه کمی متغیرهای میدان جریان مربوط به شکل ۳ را نشان می‌دهد. با رسم شکل مقطع‌های (Profile) چگالی، سرعت، فشار و ضریب پیشرفت واکنش در عرض پیشانی موج تراک در فاصله $7.95 < X < 8.37 \text{ mm}$ و در مقطع عرضی $Y = 0.33 \text{ mm}$ (کمی پایین‌تر از محل برخورد دو نقطه سه‌گانه)، برای دقت‌های مختلف شبکه عددی، نمودارهای شکل ۴ به دست خواهد آمد. این نمودارها نشان می‌دهند که چگونه با افزایش دقت شبکه وابستگی نتایج به شبکه کم می‌شود. با توجه به این شکل، مشاهده می‌شود که روند تغییرات نتایج مربوط به دقت $12 \text{ pts./} \ell_{1/2}$ ، به غیر از برآورد نسبی شوک اصلی در منحنی‌های فشار و سرعت، تفاوت زیادی نسبت به نتایج مربوط به دقت‌های بالاتر دارد. بنابراین، نتایج دقت $12 \text{ pts./} \ell_{1/2}$ برای محاسبه دقیق کل ناحیه پیشانی موج تراک قابل قبول نخواهد بود.

در ادامه نتایج مربوط به شبکه‌های $19.2 \text{ pts./} \ell_{1/2}$ و $24 \text{ pts./} \ell_{1/2}$ با جزئیات بیشتری مقایسه می‌شوند. در رابطه با گرفتن شوک اصلی، نتایج دقت‌های $19.2 \text{ pts./} \ell_{1/2}$ و $24 \text{ pts./} \ell_{1/2}$ بسیار به هم نزدیک بوده و تقریباً بر هم منطبق‌اند. با توجه به

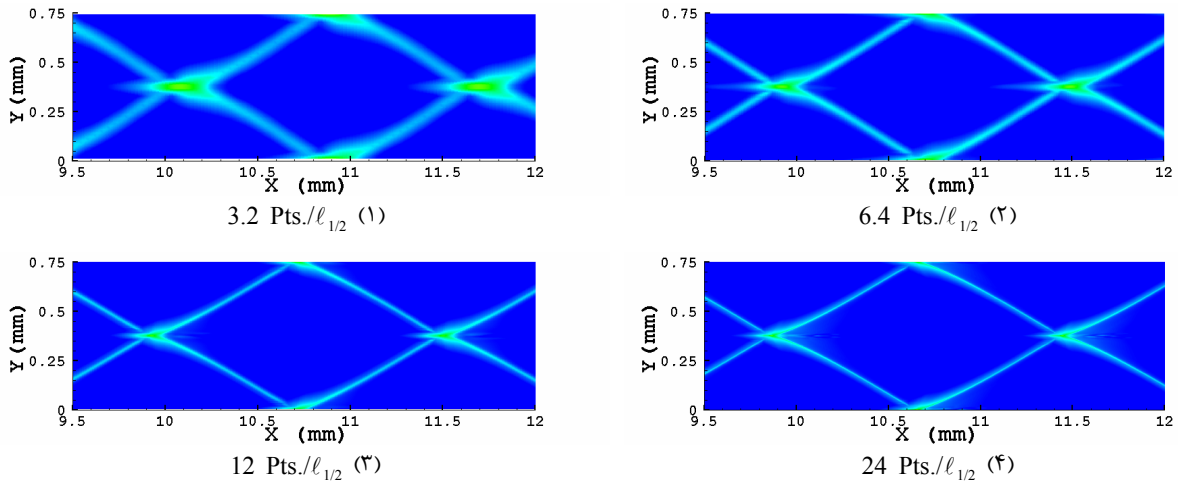
نمودار چگالی، در فاصله $8.29 < X < 8.31 \text{mm}$ پشت شوک، وابستگی نتایج به شبکه هنوز تا حدودی وجود دارد. این رفتار در منحنی ضریب پیشرفت واکنش نیز به خوبی دیده می‌شود. در این ناحیه، شکستگی در تغییرات چگالی مشاهده می‌شود که می‌تواند ناشی از وجود خط لغزش باشد. جهت اطمینان، به تغییرات منحنی سرعت در همین ناحیه مراجعه می‌شود. مشاهده می‌شود که تغییرات ناگهانی سرعت نیز در این ناحیه وجود دارد. بنابراین تغییرات ناگهانی چگالی و سرعت در دو لبه این نوار ($8.29 < X < 8.31 \text{mm}$) نشان‌دهنده وجود خطوط لغزش است.

همان‌گونه که قبلاً در بخش "روش شبیه‌سازی عددی" بیان شد، الگوریتم‌های شبیه‌سازی عددی معمولاً، با همان دقت شبکه‌ای که ناپیوستگی شوک را به خوبی برآورد می‌کنند، قادر نیستند ناپیوستگی سطح تماس یا خط لغزش را برآورد کنند. بنابراین، ملاک استقلال نتایج از شبکه افزایش دقت شبکه تاحدی است که تغییرات ناپیوستگی خط لغزش مستقل از دقت شبکه عددی شود. نکته دیگر اینکه با توجه به نمودار فشار در مقطع حدود $X = 8.22 \text{mm}$ پرش ثانویه فشار دیده می‌شود که بیانگر محل شوک عرضی است.



شکل ۴- تغییرات: (۱) چگالی، (۲) سرعت، (۳) فشار، (۴) ضریب پیشرفت واکنش، در عرض پیشانی موج تراک و در مقطع $Y=0.33 \text{mm}$

در انتها، در ارتباط با نتایج شکل ۳ و شکل ۴، مقایسه ساختار سلول تراک انجام می‌شود. شکل ۵ نتایج مقایسه وضوح ساختار سلولی را به ازای تغییرات دقت شبکه نشان می‌دهد. با توجه به منحنی فشار شکل ۴، همان‌گونه که قبلاً نیز توضیح داده شد، دقت شبکه عددی $12 \text{pts.} / \ell_{1/2}$ ، علی‌رغم خطای کلی، شرایط پرش شوک اصلی را نزدیک به نتیجه دقت‌های شبکه عددی $19.2 \text{pts.} / \ell_{1/2}$ و $24 \text{pts.} / \ell_{1/2}$ محاسبه می‌کند. از طرفی نقطه سه‌گانه اصلی که حاوی فشار بیشینه است و به نوعی شرط پرش محسوب می‌شود نیز روی شوک اصلی قرار داشته و مسیر حرکت متناوب آن منجر به رسم سلول تراک می‌شود. بنابراین، برای رسم سلول تراک و نه تحلیل کل ناحیه پیشانی تراک، دقت $12 \text{pts.} / \ell_{1/2}$ دارای دقت حداقلی است. این موضوع در مقایسه شکل ۵- (۳) و شکل ۵- (۴) مشهود است.



شکل ۵- تغییرات دقت ساختار سلول تراک به ازای تغییرات دقت شبکه عددی

با جمع‌بندی توضیحات بالا، نتایج زیر به دست می‌آید:

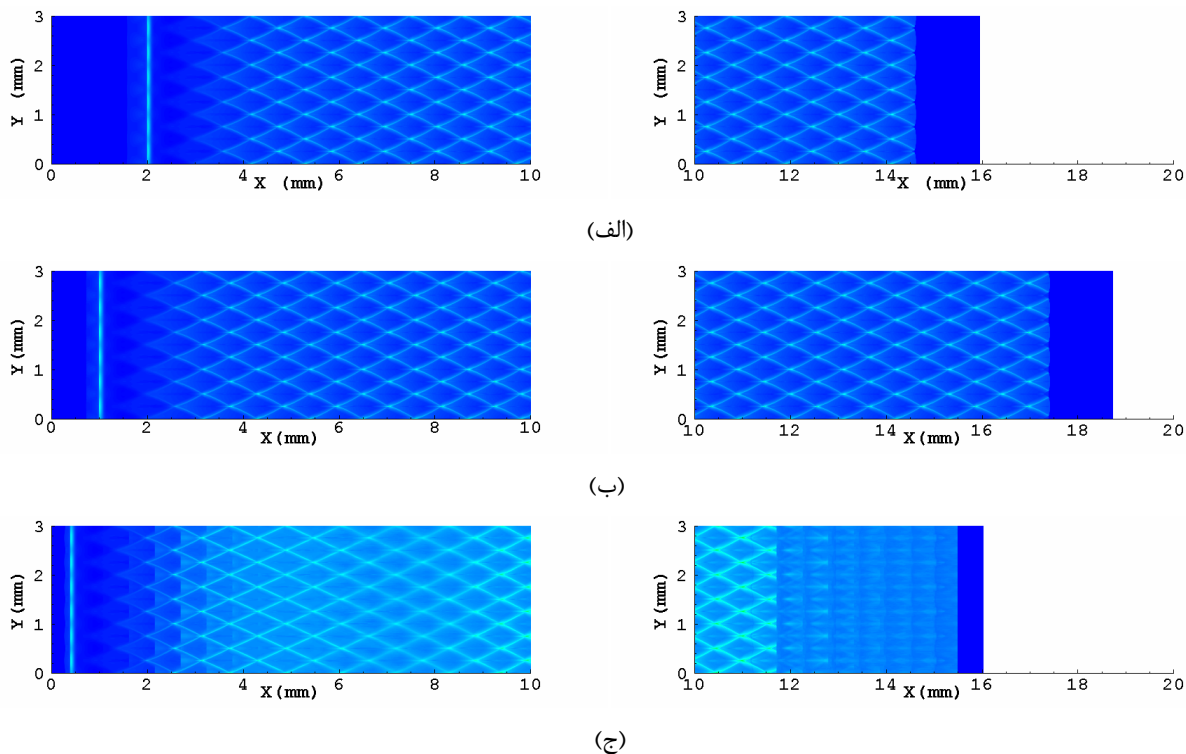
- (۱) دقت شبکه عددی $12 \text{ pts./} \ell_{1/2}$ ، به غیر از برآورد نسبی بیشینه منحنی‌های فشار و سرعت شوک اصلی، دقت خوبی در محاسبه پیشانی موج تراک ندارد.
- (۲) نتایج مربوط به دقت‌های $19.2 \text{ pts./} \ell_{1/2}$ و $24 \text{ pts./} \ell_{1/2}$ ، به جز ناحیه محصور بین خطوط لغزش، بسیار به هم نزدیک بوده و عدم وابستگی به شبکه را نشان می‌دهند.
- (۳) ساختارهای سلولی به واسطه حرکت متناوب نقاط سه‌گانه اصلی موجود در پیشانی موج تراک تولید می‌شوند. از طرفی دقت‌های $19.2 \text{ pts./} \ell_{1/2}$ و $24 \text{ pts./} \ell_{1/2}$ شرایط پرش و از جمله فشار بیشینه نقاط سه‌گانه اصلی را به صورت مستقل از دقت شبکه محاسبه می‌کنند. بنابراین، دقت‌های بین $19.2 \text{ pts./} \ell_{1/2}$ و $24 \text{ pts./} \ell_{1/2}$ جهت بررسی اندازه ساختار سلولی تراک (و نه پیشانی موج تراک) کافی و دقیق خواهند بود. این مسئله با توجه به بیشینه فشاری شوک اصلی در نتایج مربوط به دقت $12 \text{ pts./} \ell_{1/2}$ نیز تا حدودی درست است.
- (۴) با استفاده از مدل واکنش یک‌مرحله‌ای، دقت شبکه عددی به دست آمده ($19.2 \text{ pts./} \ell_{1/2}$ تا $24 \text{ pts./} \ell_{1/2}$) برای بررسی دقیق اندازه و ساختار سلول تراک توسط نتایج مراجع [۳، ۵، ۱۰، ۱۴، ۱۸] تایید می‌شود.
- (۵) دقت‌های شبکه عددی بین $19.2 \text{ pts./} \ell_{1/2}$ و $24 \text{ pts./} \ell_{1/2}$ برای محاسبه دقیق و مستقل از شبکه ناحیه برشی محصور به خطوط لغزش و همچنین محاسبه نقطه سه‌گانه دوم (در صورت وجود) به هیچ وجه کافی نیستند.

اثر فاصله لایه اختلالی هارمونیک و پروفیل ZND چسبیده به آن از مرز سمت چپ

همان‌گونه که در بخش "مدل فیزیکی" بیان شد، فاصله موج تراک در حال حرکت به سمت راست از پایین دست جریان و مرز سمت چپ باید به اندازه‌ای باشد که شرایط CJ داخل ناحیه محاسباتی قرار بگیرد [۴، ۶]. در این حالت، از آنجایی که سرعت جریان در انتهای ناحیه احتراق (شرایط CJ) نسبت به دستگاه سوار بر شوک اصلی برابر با سرعت صوت محلی است، اختلالات وارده از مرز چپ نمی‌توانند موج تراک را تحت تاثیر قرار دهند. با این توضیحات، در این قسمت تاثیر فاصله لایه اختلالی و شرایط اولیه ZND پشت آن از مرز سمت چپ روی نحوه تکامل و اندازه سلول تراک بررسی می‌شود.

با هدف بررسی این نکته و با استفاده از داده‌های جدول ۱، شکل مقطع ZND اولیه در فواصل ۲ و ۱ و 0.4 میلی‌متری از مرز سمت چپ قرار داده می‌شود. موج ZND با قراردادن لایه اختلالی (معادله ۶) با طول موج اولیه $W=0.5 \text{ mm}$ مختل

می‌شود. با در نظر گرفتن عرض کانال معادل ۳ mm، تعداد ۶ سلول تراک در عرض کانال تشکیل خواهد شد. شکل ۶ تأثیر فاصله اولیه اختلالی از مرز سمت چپ را بر روی نحوه تکامل و اندازه سلول تراک به ازای دقت شبکه $12\text{ pts.}/\ell_{1/2}$ نشان می‌دهد.



شکل ۶- ساختار سلولی تراک، فاصله اختلال از مرز چپ: الف) $X = 2\text{mm}$ ، ب) $X = 1\text{mm}$ ، ج) $X = 0.4\text{mm}$

با مراجعه به شکل ۱، طول ناحیه احتراق برای موج تراک CJ معادل $\ell_{hr} = 0.29\text{mm}$ است. بنابراین، طبق شکل ۶-الف و شکل ۶-ب، در صورتی که موج ZND در فواصل $X = 2\text{mm}$ و $X = 1\text{mm}$ قرار داده شود، انتهای ناحیه احتراق نیز داخل ناحیه محاسباتی قرار خواهد گرفت. بنابراین، اختلالات وارده از مرز سمت چپ هیچ تأثیری روی نحوه تکامل و اندازه سلول تراک نخواهد داشت. این موضوع در مقایسه شکل ۶-الف و شکل ۶-ب مشهود است. با توجه به شکل ۶-ج، در صورتی که اختلال اولیه در فاصله $X = 0.4\text{mm}$ از مرز سمت چپ قرار داده شود، با توجه به نزدیک بودن بیش از حد انتهای ناحیه واکنش به آن ($\ell_{hr} = 0.29\text{mm}$) و از طرفی به واسطه برداشته شدن تکه قبل از دور شدن مناسب موج از مرز سمت چپ، ناحیه CJ خارج از مرز چپ قرار گرفته و بنابراین اختلالات وارده از مرز چپ روی شکل‌گیری ساختار سلولی تأثیر خواهند گذارد.

شایان ذکر است که ارتباط اندازه نهایی سلول منظم در تراک با ناپایداری ضعیف با طول موج‌های ناپایدار تعیین شده توسط روش تحلیل خطی ناپایداری توسط بورلیو و همکاران [۵] و همچنین شارپ و همکاران [۳] بررسی شده است. مؤلفان این مقاله نیز نشان داده‌اند که اندازه نهایی سلول منظم در موج تراک با ناپایداری ضعیف منحصر به فرد نبوده و شامل محدوده‌ای از طول موج‌های ناپایدار است که توسط روش تحلیل خطی ناپایداری تراک تعیین می‌شود [۲۷]. نشان داده شده است در صورتی که طول موج اختلالی اولیه قرار داده شده در کانال خارج از محدوده مشخص طول موج‌های ناپایدار انتخاب شود، سلول اولیه متناظر با این طول موج از بین رفته و در یک روند تکاملی، سلولی با اندازه‌ای مساوی یکی از طول موج‌های موجود در ناحیه طول موج‌های ناپایدار تولید خواهد شد [۲۷]. همچنین، در صورتی که طول موج اختلالی اولیه انتخاب شده داخل ناحیه طول موج‌های ناپایدار قرار داشته باشد، این طول موج منجر به تولید سلول تراک با اندازه نهایی مساوی همین طول موج

خواهد شد [۲۷]. با توجه به نتایج تحلیل خطی ناپایداری، مشخص شده است که برای مخلوط تعریف شده در جدول ۱ طول موج اختلالی اولیه $W=0.5 \text{ mm}$ داخل ناحیه طول موج‌های ناپایدار قرار داشته و بنابراین منجر به تولید سلول تراک با اندازه نهایی مساوی این طول موج می‌شود. بنابراین، با قراردادن آن به عنوان طول موج اختلالی، سلول تراک با همان اندازه به سرعت تشکیل شده و هیچ‌گونه تغییر اندازه سلول طی روند تکامل سلولی مشاهده نخواهد شد. این موضوع با توجه به شکل ۶ و مقایسه طول موج اختلالی و عرض کانال و تولید ۶ سلول در عرض کانال قابل مشاهده است.

در پایان این بخش، شایان ذکر است که دلیل استفاده از پروفیل ZND و لایه اختلالی هارمونیک جهت تولید موج تراک به واسطه محدودیت‌های معادلات اولیور و در نظر نگرفتن جمله‌های اتلاف و تمرکز بر مطالعه خود موج تراک است. بنابراین، جهت بررسی فرایند شکل‌گیری اولیه موج تراک، لازم است پدیده انتقال از شعله به موج تراک (DDT) به صورت عددی و یا به صورت تجربی مورد مطالعه قرار گیرد که هر دوی این موارد از محدوده این مقاله خارج است. جهت اطلاعات بیشتر، به عنوان نمونه می‌توان به نتایج تجربی به دست آمده توسط عطارزاده و همکاران مراجعه کرد [۲۹].

تأثیر دامنه و ضخامت لایه اختلالی روی ساختار سلولی

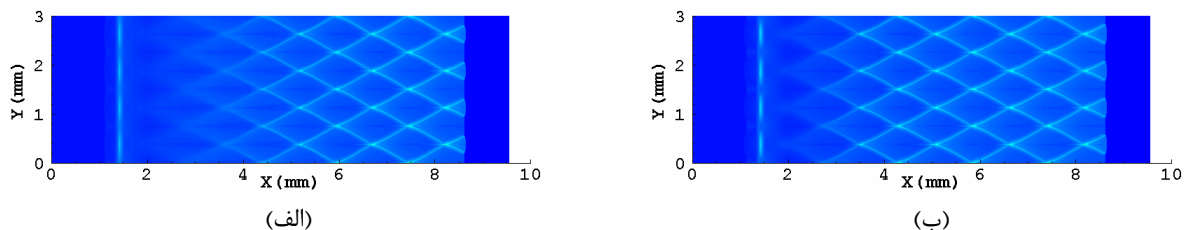
همان‌گونه که در بخش قبل ذکر شد، در مطالعه روند ایجاد و تکامل ساختار سلولی تراک با ناپایداری ضعیف مشاهده شده است که اندازه ساختار نهایی سلول به طول موج اختلالی اولیه وابستگی دارد [۲۷، ۳]. مشخص شده است که برای موج تراک در یک مخلوط گازی مشخص با انرژی فعال‌سازی پایین (ساختار سلولی منظم)، اندازه سلول نهایی موج تراک انتخاب‌های زیادی داشته و به یک اندازه مشخص محدود نمی‌شود [۲۷، ۳]. بنابراین، طبیعی است که با تغییر متغیر طول موج اختلالی W ، اندازه نهایی سلول تراک نیز در محدوده مجاز، که توسط فیزیک جریان تعیین می‌شود، تغییر کند. از طرفی با مراجعه به معادله (۶) به نظر می‌رسد، علاوه بر متغیر طول موج اختلال W ، متغیرهای ضخامت ناحیه اختلالی، Δx ، و دامنه نوسان اختلال نیز توانایی تأثیر بر تشکیل و تکامل سلول‌های تراک را داشته باشند. بنابراین، در این قسمت اثرات ویژگی‌های اختلال اولیه شامل دامنه نوسان و پهناى ناحیه متغیر اختلالی روی دینامیک سلولی بررسی می‌شود.

ابتدا اثرات تغییر دامنه نوسان متغیر اختلالی بر روی ساختار سلولی بررسی می‌شود. بدین جهت رابطه متغیر اختلالی به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$\rho = \rho_0 + \rho_0(1 + \alpha \cos(2\pi y/W)) * \sin(5000\pi x) \quad (7)$$

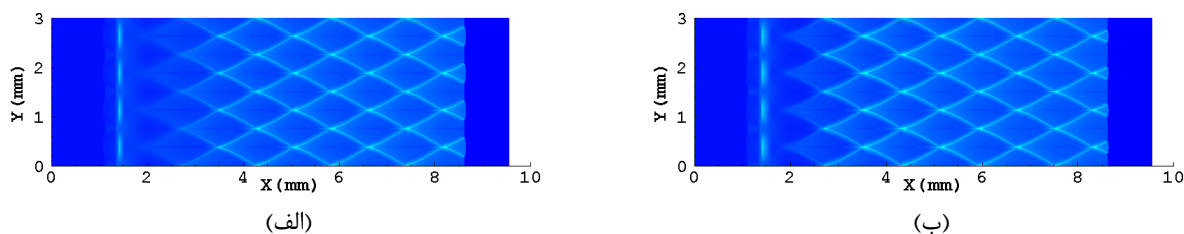
$$0 \leq y \leq 3\text{mm}, \quad \Delta x = 0.1\text{mm}$$

در رابطه بالا، α ضریب تقویت دامنه نوسان است. با در نظر گرفتن $W=0.75 \text{ mm}$ و به ازای دقت شبکه $12 \text{ pts.} / \ell_{1/2}$ برای $\alpha = 0.5, 1.0$ شبیه‌سازی انجام شده است. شکل ۷-الف روند تکامل ساختار سلولی به ازای $\alpha = 0.5$ و شکل ۷-ب ساختار سلولی به ازای $\alpha = 1.0$ را نشان می‌دهد.



شکل ۷- ساختار سلولی تراک: الف) $\alpha = 0.5$ ، ب) $\alpha = 1.0$

همان‌گونه که مشاهده می‌شود، با افزایش دامنه نوسان متغیر اختلالی، ساختار سلولی با توان بیشتر و سریع‌تر شکل می‌گیرد، اما به سرعت و پس از تشکیل نقاط سه‌گانه، تاریخچه ساختار سلولی کاملاً یکسان است. این بار برای بررسی تأثیر پهنای ناحیه اختلالی بر روی ساختار سلولی تراک، به ازای $\alpha = 1.0$ ، مقدار ضخامت لایه اختلالی به $\Delta x = 0.2 \text{ mm}$ افزایش خواهد یافت. نتایج حاصل در شکل ۸ نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، با افزایش پهنای ناحیه اختلالی، شکل‌گیری سلول تراک سریع‌تر اتفاق می‌افتد، اما در ادامه اندازه ساختار سلولی یکسان باقی مانده است. شایان ذکر است که برای مخلوط تعریف‌شده در جدول ۱، با استفاده از تحلیل خطی ناپایداری، مشخص شده است که طول موج $W = 0.75 \text{ mm}$ نیز در داخل ناحیه طول موج‌های ناپایدار قرار داشته و بنابراین منجر به تولید سلول تراک با اندازه نهایی مساوی همین طول موج خواهد شد [۲۷]. بنابراین، با قراردادن آن به عنوان طول موج اختلالی اولیه جلوی شکل مقطع ZND، منجر به تولید سلول تراک با اندازه مساوی 0.75 mm خواهد شد و اندازه سلول، در امتداد مسیر حرکت موج تراک در کانال، بدون تغییر باقی خواهد ماند.



شکل ۸- ساختار سلولی: الف) $\Delta x = 0.1 \text{ mm}$ ، ب) $\Delta x = 0.2 \text{ mm}$

با توجه به شکل ۸، ملاحظه می‌شود تأثیر تغییرات ضخامت لایه اختلالی بعد از مراحل اولیه بسیار ناچیز بوده و ساختار نهایی ثابت باقی می‌ماند. در جمع‌بندی این بخش نتایج زیر به دست می‌آید:

(۱) افزایش ضریب تقویت متغیر اختلالی منجر به شکل‌گیری سریع‌تر ساختار سلولی می‌شود، اما تأثیری روی روند تکامل و اندازه سلول ندارد.

(۲) در مورد ضخامت بهینه متغیر اختلالی نیز با توجه به اینکه طول ناحیه واکنش در مدل ZND برای متغیرهای جدول ۱ معادل $\ell_{hr} \approx 0.29 \text{ mm}$ است، می‌توان نتیجه گرفت در صورتی که ضخامت لایه اختلالی در حدود طول ناحیه واکنش مدل ZND باشد، ساختار سلولی سریع‌تر تشکیل می‌شود، اما این حقیقت هیچ تأثیری بر اندازه نهایی سلول تراک ندارد. این موضوع توسط نتایج هیو و همکاران تایید می‌شود. هیو و همکاران [۷] نیز، با اضافه کردن جمله اختلالی در متغیر انرژی داخلی، اثر دامنه نوسان جمله اختلالی بر روی روند تکامل و اندازه نهایی ساختار سلولی در تراک با ناپایداری ضعیف را بررسی کردند. آن‌ها نشان دادند، با افزایش دامنه تقویت جمله اختلالی، تنها، زمان لازم برای شکل‌گیری ساختار موج سه‌گانه و فرایند تکامل ساختار سلولی تراک کوتاه شده، اما اندازه نهایی ساختار سلولی مستقل از تغییرات دامنه تقویت اختلال اولیه خواهد بود.

بررسی ساختار موج سه‌گانه

بررسی ساختار موج سه‌گانه به واسطه وجود مقیاس‌های طولی متفاوت، شوک‌های سه‌گانه، خطوط لغزش و ناحیه احتراقی متغیر از دیدگاه فیزیکی و محاسباتی اهمیت زیادی دارد. این پدیده به صورت وسیعی در شبیه‌سازی‌های عددی موج تراک بررسی شده است [۱۸، ۱۷، ۷، ۲]. همان‌گونه که در بخش مقدمه بیان شد، لفبوره و همکاران [۱۷]، با استفاده از مدل واکنش یک‌مرحله‌ای و استفاده از دقت شبکه عددی ۱۲ نقطه بر طول ناحیه واکنش، توانستند تکامل ساختار ناحیه موج سه‌گانه، از

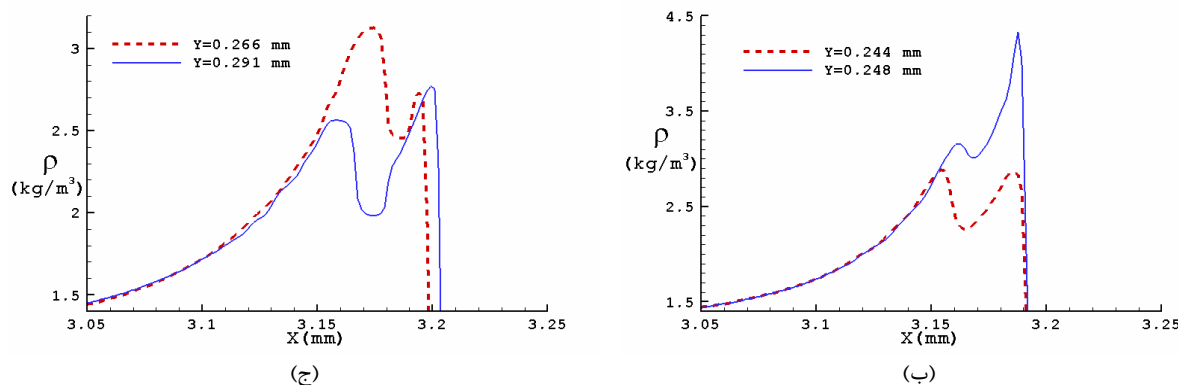
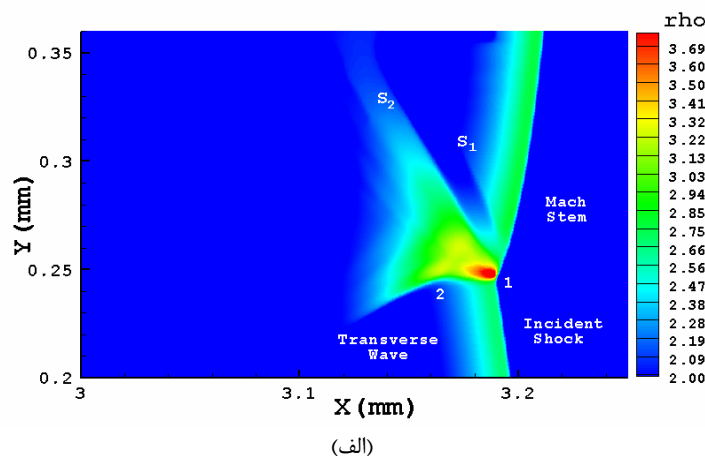
ساختاری با یک نقطه سه‌گانه به ساختاری شامل دو نقطه سه‌گانه، را نشان دهند. شارپ [۱۸] نیز، با استفاده از مدل واکنش یک‌مرحله‌ای و با استفاده از دقت شبکه ۳۲ نقطه بر طول ناحیه واکنش، ساختار ناحیه موج سه‌گانه و ایجاد نقطه سه‌گانه دوم را بررسی کرد. شارپ با اشاره به نتایج شرت و کوئیرک [۱۹] بیان کرد، برای مدل‌های شیمیایی پیچیده‌تر، دقت‌های شبکه عددی به مراتب بالاتری نسبت به مدل واکنش تک‌مرحله‌ای نیاز است. همچنین هیو و همکاران [۷]، با استفاده از مدل شیمیایی تفصیلی برای مخلوط کم‌فشار $H_2 / O_2 / Ar$ و دقت شبکه ۶۴ نقطه بر طول ناحیه القاء (۴۴۰ نقطه بر طول ناحیه واکنش)، ساختار نقاط سه‌گانه دوتایی را در ناحیه موج سه‌گانه شبیه‌سازی کردند. دیتردینگ [۲] نیز، با استفاده از مدل شیمیایی تفصیلی و دقت شبکه عددی بین ۲۲/۴ تا ۴۴/۸ نقطه بر طول ناحیه القاء، ساختار ناحیه موج سه‌گانه را شبیه‌سازی کرد. در ادامه یک جمع‌بندی در مورد نتایج مراجع بالا انجام می‌شود. نتایج مذکور نشان می‌دهند که مدل شیمیایی یک‌مرحله‌ای در شبیه‌سازی ناحیه موج سه‌گانه، علاوه بر نقطه سه‌گانه اول، قادر به برآورد نقطه سه‌گانه دوم نیز است. نتایج بالا همچنین نشان می‌دهند استفاده از سازوکار شیمیایی تفصیلی به دقت شبکه عددی به مراتب بالاتری در مقایسه با مدل شیمیایی یک مرحله‌ای نیاز خواهد داشت. با توجه به نتایج بالا، در صورت استفاده از سازوکار شیمیایی تفصیلی به دقت شبکه عددی در حدود ۵۰ تا ۶۰ نقطه بر طول ناحیه القاء (و نه طول ناحیه نیمه واکنش) نیاز خواهد بود. همچنین، طبق نتیجه شارپ [۱۸]، در صورت استفاده از مدل شیمیایی یک‌مرحله‌ای، دقت شبکه حداقل ۳۲ نقطه بر طول ناحیه نیمه واکنش جهت محاسبه نقطه سه‌گانه دوم کافی است.

با توجه به نتایج بالا، این بخش بر آن است تا ناحیه موج سه‌گانه و تشکیل نقطه سه‌گانه دوم را بررسی کند. در بخش "بررسی اثر دقت شبکه روی ساختار سلولی موج تراک" این مقاله نشان داده شد که استفاده از دقت شبکه بین ۲۰ تا ۲۴ نقطه بر طول ناحیه واکنش، علی‌رغم محاسبه دقیق ساختار سلول تراک، در برآورد ناحیه برشی محصور بین خطوط لغزش (شکل ۴-۱) دقت کافی نداشته و تا حدودی وابستگی به شبکه در این ناحیه مشاهده می‌شود. بدین منظور، با افزایش دقت شبکه از ۲۴ نقطه به ۳۶ نقطه بر طول ناحیه واکنش، شبیه‌سازی موج تراک برای مخلوط جدول ۱، با هدف بررسی ناحیه موج سه‌گانه، انجام شد. مشابه فرایند انجام‌شده در شکل ۴، دقت شبکه از ۲۴ نقطه تا ۳۶ نقطه بر طول ناحیه واکنش افزایش یافت و نهایتاً در دقت شبکه حدود ۳۶ نقطه بر طول ناحیه واکنش عدم وابستگی متغیرهای جریان در ناحیه بین خطوط لغزش (پشت ساقه ماخ) نیز مشاهده شد.

کانتورهای چگالی شکل ۹-الف)، ساختار دقیق ناحیه سه‌گانه در پیشانی موج تراک را به ازای دقت شبکه عددی ۳۶ نقطه بر طول ناحیه واکنش نشان می‌دهد. ساقه ماخ، موج شوک اصلی و موج عرضی به‌خوبی در شکل نشان داده شده‌اند. موقعیت تقریبی خطوط لغزش نیز در پشت ساقه ماخ مشخص شده است. در ادامه، با استفاده از کانتورهای سرعت، از وجود و موقعیت خطوط لغزش اطمینان حاصل خواهد شد. نقطه سه‌گانه اصلی (نقطه ۱) محل برخورد سه موج شوک یعنی ساقه ماخ، شوک اصلی و شوک عرضی است. نقطه ۲ نقطه سه‌گانه دوم است که شوک عرضی را به دو قسمت تقسیم می‌کند. بخشی از شوک عرضی، که بین نقطه ۱ و ۲ قرار دارد، موج عرضی اصلی نامیده می‌شود. بخش دوم نیز موج عرضی امتداد یافته (Extended wave) نامیده می‌شود.

با رسم تغییرات چگالی در چند مقطع عرضی حول ناحیه سه‌گانه، می‌توان تغییرات شوک‌ها و خطوط لغزش را بهتر بررسی کرد. بدین ترتیب بینش دقیق‌تری نسبت به ناحیه موج سه‌گانه به‌دست خواهد آمد. شکل ۹-ب) و ج) تغییرات چگالی در چند مقطع عرضی حول ناحیه سه‌گانه را نشان می‌دهد. شکل ۹-ب) مربوط به دو مقطع زیر نقاط سه‌گانه است. در این مقاطع، متغیر چگالی با عبور از شوک اصلی و شوک عرضی دو پرش را تجربه کرده و در ادامه به آهستگی کاهش می‌یابد. شکل ۹-ج) تغییرات چگالی را در دو مقطع بالاتر از نقاط سه‌گانه نشان می‌دهد. به عنوان نمونه، در مقطع $Y = 0.29mm$ (منحنی پیوسته شکل ۹-ج)، متغیر چگالی در عبور از ساقه ماخ و پرش اول تا فواصل مشخصی به صورت یکنواخت کاهش یافته سپس افت شدیدی را تجربه می‌کند. این افت شدید بیانگر وجود خط لغزش (S_1) است که در دو طرف آن تغییرات چگالی به صورت

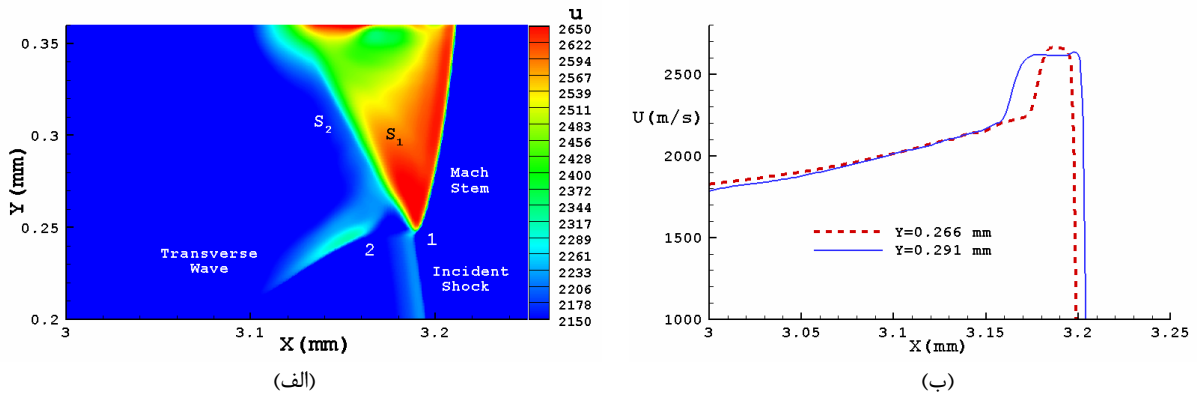
ناپیوسته است. در ادامه متغیر چگالی تقریباً ثابت باقی مانده و سپس با خط لغزش دوم (S_2) مواجه خواهد شد. با توجه به منحنی مربوط به مقطع $Y = 0.29\text{mm}$ ، ناحیه محصور بین خطوط لغزش در فاصله $3.16 < X < 3.18\text{mm}$ قرار دارد. در ادامه، با استفاده از کانتورهای سرعت، نسبت به وجود و موقعیت خطوط لغزش مذکور اطمینان حاصل خواهد شد.



شکل ۹- الف) کانتورهای چگالی در ناحیه موج سه‌گانه، (ب) و (ج) تغییرات چگالی در چند مقطع عرضی، دقت $36\text{pts.}/\ell_{1/2}$

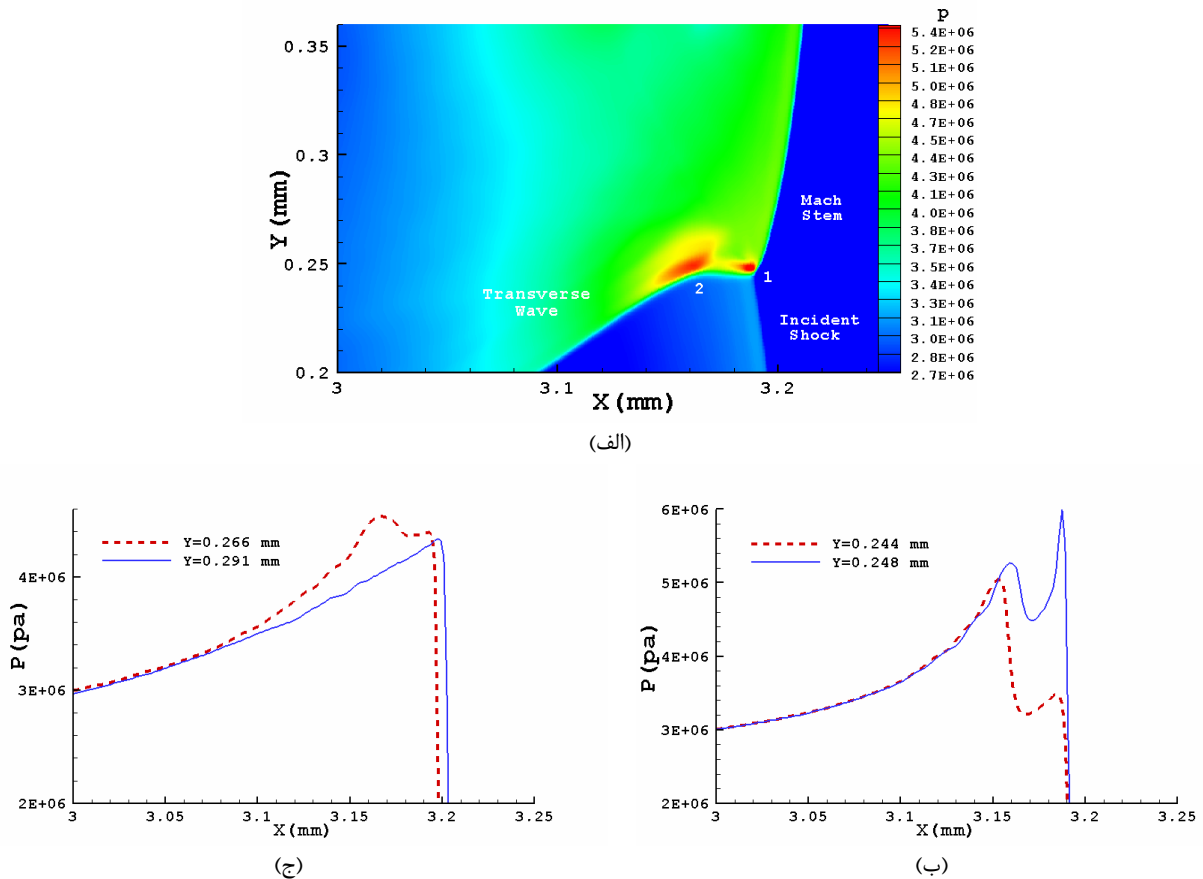
شکل ۱۰- الف) کانتورهای سرعت را در ناحیه سه‌گانه موج تراک نشان می‌دهد. با توجه به کانتورهای چگالی که پیشتر بررسی شد، تغییرات شدید در سرعت در فاصله مشخصی پشت ساقه ماخ نشان‌دهنده خطوط لغزش است. همان‌گونه که در شکل مشخص است، برای این موج تراک هر دو خط لغزش از نقطه سه‌گانه اصلی خارج شده‌اند. در واقع این دو خط لغزش هر دو مرزهای یک ناحیه برشی حاوی چرخش‌های قوی‌اند که منشا آن نقطه سه‌گانه اول است. جهت بررسی دقیق‌تر ناحیه برشی، منحنی تغییرات سرعت برای دو مقطعی که این ناحیه را قطع می‌کنند در شکل ۱۰- (ب) نشان داده شده است. با مقایسه با شکل ۹- (ج)، مشاهده می‌شود که تغییرات شدید سرعت در همان ناحیه تغییرات شدید چگالی واقع شده است. به عنوان نمونه، برای منحنی پیوسته شکل ۱۰- (ب) که مربوط به مقطع $Y = 0.29\text{mm}$ است، این تغییرات، همانند منحنی مربوطه در نمودار چگالی شکل ۹- (ج)، در فاصله $3.16 < X < 3.18\text{mm}$ قرار دارد.

در ادامه مطالعه ناحیه موج سه‌گانه، تغییرات فشار نیز بررسی می‌شود. شکل ۱۱- الف) کانتورهای فشار در ناحیه موج سه‌گانه را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که بعد از نقطه سه‌گانه اصلی، در امتداد مسیر شوک عرضی، در نقطه متمایز ۲، موج شوکی به سمت ساقه ماخ خارج شده و جهت موج عرضی تغییر می‌کند. این نقطه همان نقطه سه‌گانه دوم است. بنابراین این شکل به خوبی توانایی سازوکار واکنش یک‌مرحله‌ای آرنیوسی در برآورد نقطه سه‌گانه دوم را نشان می‌دهد.



شکل ۱۰- الف) کانتورهای سرعت، ب) تغییرات سرعت در چند مقطع عرضی، دقت $36 \text{ pts.} / \ell_{1/2}$

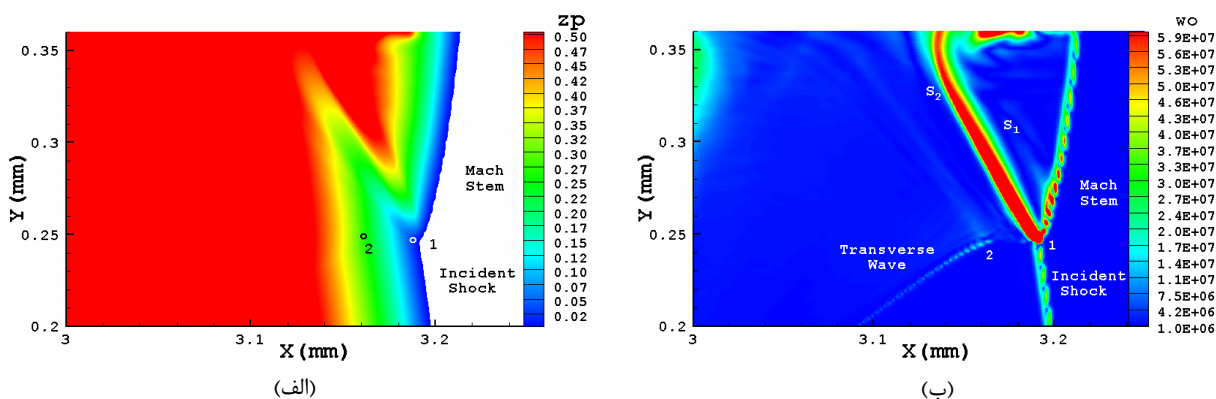
با مراجعه به شکل ۱۰-الف)، مشاهده می‌شود که لبه پایین کانتور سرعت، پشت شوک عرضی، از نقطه ۲ گذشته و به مرز پایین ناحیه برشی ختم می‌شود. با توجه به این شکل و کانتور فشار همان ناحیه در شکل ۱۱-الف)، مشخص می‌شود که شوک خارج‌شده از نقطه سه‌گانه دوم در امتداد این لبه به مرز پایین ناحیه برشی (خط لغزش دوم) برخورد کرده و تا حدودی باعث تغییر مسیر آن می‌شود. بدین ترتیب جریانی که در مجاورت شوک اصلی و نقطه ۱ وارد پیشانی تراک می‌شود به ترتیب از شوک اصلی، شوک عرضی اصلی (بین نقطه ۱ و ۲) و شوک محدود بین نقطه ۲ و خط لغزش ۲ عبور خواهد کرد.



شکل ۱۱- الف) کانتورهای فشار در ناحیه موج سه‌گانه، ب) و ج) تغییرات فشار در چند مقطع عرضی، دقت $36 \text{ pts.} / \ell_{1/2}$

با رسم تغییرات فشار در چند مقطع عرضی متناظر با شکل ۹- (ب) و (ج)، می‌توان تغییرات فشار در ناحیه سه‌گانه را بهتر بررسی کرد. شکل ۱۱- (ب) و (ج) نمودار فشار مربوطه را در مقطعی از پیشانی موج تراک در ناحیه موج سه‌گانه نشان می‌دهد. متناظر با نمودارهای چگالی، شکل ۱۱- (ب) متناسب با یک مقطع قبل از نقاط سه‌گانه و مقطع مربوط به نقطه سه‌گانه اول است. نمودار مربوط به مقطع قبل از نقاط سه‌گانه ($Y = 0.244\text{mm}$) نشان می‌دهد میدان جریان با عبور از شوک اصلی با شوک به مراتب قوی‌تری (پایین نقطه ۲) مواجه می‌شود. شکل ۱۱- (ج) تغییرات فشار در مقاطع عرضی بالاتر از نقاط سه‌گانه را نشان می‌دهد. در این شکل، منحنی خط‌چین متناظر با مقطع عرضی $Y = 0.266\text{mm}$ بوده که کمی بالاتر از نقطه سه‌گانه اول قرار داشته و ساقه ماخ و شوک خارج‌شده از نقطه ۲ را قطع می‌کند. میدان جریان در امتداد این مقطع با عبور از ساقه ماخ شرایط پرش را تجربه کرده و در ادامه با شوک محدود بین نقطه ۲ و خط لغزش ۲ مواجه شده و پرش دوم را تجربه خواهد کرد. منحنی پیوسته شکل ۱۱- (ج) مربوط به مقطع عرضی $Y = 0.29\text{mm}$ بوده که با توجه به کانتورهای سرعت شکل ۱۰- (الف)، بسیار بالاتر از محل برخورد شوک خارج‌شده از نقطه ۲ با لایه برشی است. همان‌طور که این منحنی نشان می‌دهد، میدان جریان در امتداد این مقطع، بعد از افزایش فشار ناشی از عبور از ساقه ماخ، با قطع لایه برشی بدون هیچ‌گونه پرش فشاری، به سمت ناحیه سوخته با شیب یکنواختی کاهش می‌یابد.

جهت تکمیل مطالعه ساختار ناحیه موج سه‌گانه، کانتورهای ضریب پیشرفت واکنش و کانتورهای چرخش به ترتیب در شکل ۱۲- (الف) و (ب) ارائه شده‌اند. کانتورهای ضریب پیشرفت واکنش برای محدوده $0.01 < \beta < 0.5$ رسم شده‌اند. جهت درک بهتر طول ناحیه نیمه واکنش، کانتورهای با مقدار $\beta < 0.01$ حذف شده‌اند تا مرز شروع واکنش مشخص شود. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، پشت شوک اصلی، طول ناحیه نیمه واکنش در حدود 0.06mm است که به مقدار تئوری ZND نزدیک است. به دلیل قوی‌تر بودن ساقه ماخ نسبت به شوک اصلی، طول ناحیه نیمه واکنش در پشت آن تا 0.03mm کاهش می‌یابد. همچنین، با توجه به کانتور فشار شکل ۱۱- (الف) و افزایش ثانویه فشار در منحنی خط‌چین شکل ۱۱- (ب)، مشاهده می‌شود که شوک خارج‌شده از نقطه سه‌گانه دوم باعث می‌شود که طول ناحیه نیمه واکنش در مقایسه با طول آن پشت شوک اصلی به مقدار کمی کوتاه‌تر شده و به سمت نقطه ۲ کشیده شود. همچنین، مشاهده می‌شود که در امتداد ناحیه برشی طول ناحیه نیمه واکنش افزایش یافته است. در این ناحیه، به دلیل وجود چرخش شدید در امتداد خطوط لغزش، مخلوط جریان نسوخته به داخل کشیده می‌شود. نهایتاً این ناحیه نیز به کمک شوک عرضی اصلی (بین نقاط ۱ و ۲) و شوک محدود بین نقطه ۲ و خط لغزش ۲ با تأخیر به شرایط واکنش می‌رسد. همچنین، این شکل نشان می‌دهد که امتداد موج عرضی (کمی پایین‌تر از نقطه ۲)، از آنجایی که پشت مرز نیمه واکنش قرار گرفته، هیچ تأثیری در واکنش ندارد. شکل ۱۲- (ب) نیز کانتورهای چرخش را نشان می‌دهد. این شکل به خوبی خطوط لغزش و ناحیه برشی محصور بین این خطوط را که حاوی چرخش بسیار بالایی است نشان می‌دهد. کانتورهای چرخش موقعیت نقطه سه‌گانه دوم را نیز نشان می‌دهند.



شکل ۱۲- کانتورهای: (الف) ضریب پیشرفت واکنش، (ب) چرخش در ناحیه موج سه‌گانه، دقت $36\text{pts}/\ell_{1/2}$

بدین ترتیب در این بخش، با استفاده از دقت شبکه ۳۶ نقطه بر طول نیمه واکنش، توانایی مدل واکنش یک مرحله‌ای در شبیه‌سازی ناحیه موج سه‌گانه، محاسبه نقطه سه‌گانه دوم و ناحیه برشی نشان داده شد. این نتیجه با نتایج به‌دست آمده توسط مراجع [۱۸، ۱۷] سازگار است. در مقایسه با نتایج [۱۸، ۱۷، ۲]، مشاهده شد که آن‌ها در مطالعه ساختار ناحیه موج سه‌گانه تنها به بررسی کیفی نتایج به‌دست آمده در قالب کانتورهای میدان جریان اکتفا کرده‌اند. در این تحقیق، علاوه بر بررسی کیفی نتایج، منحنی تغییرات متغیرها در ناحیه سه‌گانه رسم شد. بدین ترتیب به عنوان مثال، با استفاده از نمودارهای چگالی و سرعت، موقعیت دقیق خطوط لغزش و ناحیه برشی قابل تشخیص خواهد بود.

بحث و نتیجه‌گیری

در این مقاله، شبیه‌سازی دوبعدی ساختار سلولی و ناحیه موج سه‌گانه موج تراک برای مخلوط گازی $H_2/O_2/Ar$ ، با استفاده از روش گوندنی مرتبه بالای PPM و حل دقیق مسئله ریمان و استفاده از مدل شیمیایی یک مرحله‌ای آرنیوسی، انجام شد. مطابق با اکثر تحقیقات انجام‌شده جدید [۱۰، ۷، ۶، ۴، ۳] و با هدف کاهش زمان و هزینه محاسباتی، در این تحقیق از شبکه عددی یکنواخت محدود به باریکه حاوی موج تراک و تکنیک وصله‌گذاری شبکه جهت پیشروی موج استفاده شد.

در بررسی دقت شبکه عددی، جهت شبیه‌سازی دقیق ساختار سلولی موج تراک با ناپایداری ضعیف، با مراجعه به شکل ۴ مشخص شد، با استفاده از ۲۰ تا ۲۴ نقطه بر طول نیمه واکنش، اندازه ساختار سلولی منظم و جزئیات نقطه سه‌گانه اصلی در تراک با ناپایداری ضعیف مستقل از دقت شبکه عددی می‌شود. از طرفی، با توجه به شکل ۴، مشخص شد که دقت شبکه عددی ۲۴ نقطه بر طول نیمه واکنش، در ناحیه پشت نقطه سه‌گانه اصلی، در برآورد ناحیه برشی محصور بین خطوط لغزش و نقطه سه‌گانه دوم دقت کافی نداشته و تا حدودی وابستگی به دقت شبکه در این ناحیه مشاهده می‌شود. نتیجه به‌دست آمده عدم وابستگی ساختار سلولی در دقت شبکه ۲۴ نقطه بر طول نیمه واکنش برای مدل واکنش یک مرحله‌ای، توسط نتایج مراجع [۱۸، ۱۰، ۵، ۳]، تایید می‌شود. مراجع توضیح می‌دهند که دقت شبکه به مدل سینتیک شیمیایی وابسته بوده و برای مدل‌های شیمیایی پیچیده‌تر دقت‌های شبکه عددی به مراتب بالاتری نسبت به مدل واکنش یک مرحله‌ای نیاز است [۱۹، ۱۸، ۷، ۲].

در ادامه این تحقیق، اثر متغیرهای شرایط اولیه اختلالی بر روی دقت نتایج ساختار سلولی بررسی شد. ابتدا اثر فاصله موج تراک از مرز پایین‌دست بررسی شد. در تایید نتایج مراجع [۶، ۴]، نشان داده شد در صورتی که فاصله موج تراک از پایین‌دست جریان به اندازه‌ای باشد که شرایط CJ داخل ناحیه محاسباتی قرار بگیرد، مرز پایین‌دست هیچ تأثیری روی روند تکامل و ساختار سلول تراک نخواهد داشت. سپس تأثیر دامنه ضریب تقویت و ضخامت متغیر اختلالی بر روی روند تکامل ساختار سلولی بررسی شد. مشخص شد که افزایش ضریب تقویت متغیر اختلالی منجر به شکل‌گیری سریع‌تر ساختار سلولی می‌شود، اما تأثیری روی روند تکامل و اندازه سلول ندارد. در مورد ضخامت بهینه متغیر اختلالی نیز نتیجه گرفته شد در صورتی که ضخامت لایه اختلالی در حدود طول ناحیه واکنش مدل ZND باشد، ساختار سلولی سریع‌تر تشکیل می‌شود، اما هیچ تأثیری بر اندازه نهایی سلول تراک ندارد. این موضوع توسط نتایج مرجع [۷] تایید می‌شود.

در انتهای این تحقیق، توانایی سازوکار شیمیایی یک مرحله‌ای آرنیوسی در شبیه‌سازی دقیق ناحیه سه‌گانه، ناحیه برشی و برآورد نقطه سه‌گانه دوم بررسی شد. با بررسی مراجع [۱۸، ۱۷]، مشخص شد که مدل شیمیایی یک مرحله‌ای در شبیه‌سازی ناحیه موج سه‌گانه، علاوه بر نقطه سه‌گانه اول، قادر به برآورد نقطه سه‌گانه دوم نیز است. همچنین، یکی از مراجع [۱۸] نشان داد که، با استفاده از مدل واکنش یک مرحله‌ای و با استفاده از دقت شبکه حداقل ۳۲ نقطه بر طول ناحیه واکنش، می‌توان ساختار دقیق ناحیه موج سه‌گانه و ایجاد نقطه سه‌گانه دوم را بررسی کرد.

با توجه به این نکات، ابتدا با افزایش دقت شبکه ۲۴ نقطه به دقت ۳۶ نقطه بر طول نیمه واکنش، وابستگی نتایج به شبکه در ناحیه برشی نیز از بین رفت. سپس، با استفاده از دقت ۳۶ نقطه بر طول نیمه واکنش، توانایی مدل واکنش یک مرحله‌ای در شبیه‌سازی ناحیه موج سه‌گانه، محاسبه نقطه سه‌گانه دوم و ناحیه برشی نشان داده شد. این نتیجه با نتایج به‌دست آمده توسط

مراجع [۱۸،۱۷] سازگار است. در مقایسه با نتایج مراجع [۱۸،۱۷،۷،۲]، مشاهده شد که آن‌ها در مطالعه ساختار ناحیه موج سه‌گانه تنها به بررسی کیفی نتایج به‌دست آمده در قالب کانتورهای میدان جریان اکتفا کرده‌اند. در این تحقیق، علاوه بر بررسی کیفی نتایج، منحنی تغییرات متغیرها در ناحیه سه‌گانه رسم شد. بدین ترتیب، به عنوان نمونه، می‌توان با استفاده از نمودارهای چگالی و سرعت (شکل ۹ و شکل ۱۰) موقعیت دقیق خطوط لغزش و ناحیه برشی را مشخص کرد. با توجه به نتایج به‌دست آمده، مشخص شد که خطوط لغزش پشت ساقه ماخ مرزهای لایه برشی منشعب از نقطه سه‌گانه اصلی بوده و حاوی چرخش شدیدند (شکل ۱۲-ب). همچنین، با توجه به شکل ۱۱-الف و شکل ۱۰-الف، مشخص شد که از نقطه سه‌گانه دوم یک شوک خارج شده و با مرز پایین ناحیه برشی برخورد کرده و مسیر آن را کمی منحرف می‌کند. با بررسی کانتورهای ضریب پیشرفت واکنش (شکل ۱۲-الف)، مشخص شد که امتداد موج عرضی در ناحیه پایین‌تر از نقطه سه‌گانه دوم، به واسطه اینکه پشت مرز نیمه واکنش قرار گرفته است، تأثیری در انجام واکنش ندارد.

منابع

1. W. Fickett and W. C. Davis, "Detonation," University of California Press, Berkeley, California, 1979.
2. R. Deiterding, "Parallel Adaptive Simulation of Multi-Dimensional Detonation Structures," PhD Thesis, Brandenburgische Technische Universität Cottbus, 2003.
3. G. J. Sharpe and J. J. Quirk, "Nonlinear Cellular Dynamics of the Idealized Detonation Model: Regular Cells," *Combust. Theory Model.* 4, No. 1, February 2008, pp. 1-21.
4. V. N. Gamezo, D. Desbordes and E. S. Oran, "Formation and Evolution of Two-Dimensional Cellular Detonations," *Combust. Flame*, 116, No. 1-2, 1999, pp. 154-165.
5. A. Bourlioux, and A. J. Majda, "Theoretical and Numerical Structure for Unstable Two-Dimensional Detonations," *Combust. Flame*, 90, No. 3-4, 1992, pp. 211-229.
6. J. Y. Choi, F. H. Ma, and V. Yang, "Some Numerical Issues on Simulation of Detonation Cell Structures," *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 44, No. 5, 2008, pp. 560-578.
7. X. Y. Hu, B. C. Khoo, D. L. Zhang, and Z. L. Jiang, "The Cellular Structure of a Two-Dimensional H₂/O₂/Ar Detonation Wave," *Combust. Theory Model.*, 8, No. 2, 2004, pp. 339-359.
8. S. Taki and T. Fujiwara, "Numerical Simulation of Triple Shock Behavior of Gaseous Detonation," Eighteenth Int. Symp. on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, 1981, pp. 1671-1681.
9. K. Kailasanath, E. S. Oran, J. P. Boris, and T. R. Young, "Determination of Detonation Cell-Size and the Roll of Transverse-Waves in Two Dimensional Detonations," *Combust. Flame*, 61, No. 3, 1985, pp. 199-209.
10. G. J. Sharpe and S. A. E. G. Falle, "Two-Dimensional Numerical Simulations of Idealized Detonations," *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, 456, 2000, pp. 2081-2100.
11. Z. Liang and L. Bauwens, "Cell Structure and Stability of Detonations with a Pressure-Dependent Chain-Branching Reaction Rate Model," *Combust. Theory Model.*, 9, No. 1, 2005, pp. 93-112.
12. E. S. Oran, J. P. Boris, and T. Young, "Numerical Simulations of Detonations in Hydrogen-Air and Methane-Air Mixtures," Eighteenth Int. Symp. on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, 1981, pp. 1641-1649.
13. E. S. Oran, J. W. Weber and E. I. Stefanow, "A Numerical Study of a Two-Dimensional H₂-O₂-Ar Detonation using a Detailed Chemical Reaction Model," *Combust. Flame*, 113, No. 1-2, 1998, pp. 147-163.
14. S. Singh, J. M. Powers, and S. Paolucci, "Detonation Solutions from Reactive Navier-Stokes Equations," *AIAA Paper No. 1999-0966*, 1999.
15. M. Nikolic, D. N. Williams and L. Bauwens, "Detonation Cell Sizes-A Numerical Study," *AIAA Paper No. 1999-0967*, 1999.
16. A. I. Gavrikov, A. A. Efimenko and S. B. Dorofeev, "A Model for Detonation Cell Size Prediction from Chemical Kinetics," *Combust. Flame*, 120, No. 1-2, 2000, pp. 19-33.
17. M. H. Lefebvre and E. S. Oran, "Analysis of Shock Structures in Regular Detonation," *Shock Waves*, 4, 1995, pp. 277-283.
18. G. J. Sharpe, "Transverse Waves in Numerical Simulations of Cellular Detonations," *J. Fluid Mech.*, 447, 2001, pp. 31-51.
19. M. Short and J. J. Quirk, "On the Nonlinear Stability and Detonability Limit of a Detonation Wave for a Model Three-Step Chain-Branching Reaction," *J. Fluid Mech.*, 339, 1997, pp. 89-119.
20. F. Pintgen, C. A. Eckert, J. M. Austin and J. E. Shepherd, "Direct Observations of Reaction Zone Structure in Propagating Detonations," *Combust. Flame*, 133, No. 3, 2003, pp. 221-229.
21. J. J. Quirk, "Amrita-A Computational Facility for CFD Modelling," In: H. Deconinck (Ed.) 29th Computational Fluid Dynamics VKI Lecture Series, von Karmen Institute, 1998, ISSN0377-8312.
22. P. Colella and P. R. Woodward, "The Piecewise Parabolic Method (PPM) for Gas-Dynamical Simulations," *J. Comput.*

- Phys.* 54, 1984, pp. 115-173.
23. P. Colella, "Multidimensional Upwind Methods for Hyperbolic Conservation Laws," *J. Comput. Phys.* 87, 1990, pp. 171-200.
 24. M. Short and D. S. Stewart, "Cellular Detonation Stability, Part 1. A Normal- Mode Linear Analysis," *J. Fluid Mechanics*, 368, 1998, pp. 229-262.
 25. P. R. Woodward and P. Colella, "The Numerical Simulation of Two-Dimensional Fluid Flow with Strong Shocks," *J. Comput. Phys.* 54, 1984, pp. 115-173.
 26. P. Colella, "A Direct Eulerian MUSCL Scheme for Gas Dynamics," *SIAM J. Sci. Comput.*, 6, No. 1, 1985, pp. 104-117.
 27. A. R. Barkhordari and M. Farshchi, "Numerical Simulation of Initial Perturbation Effects on the Detonation Cell Size," *12th Int. Conf. on Numerical Combustion*, Monterey, California, USA, March 31-April 2, 2008.
 28. S. A. Hashemi and M. Afrand, "Investigation of the Effect of Chain Initiation on Direct Initiation of Detonation," *Journal of Fuel and Combustion*, Iranian Combustion Institute, 1, No. 2, 2008, pp. 1-12, (in Farsi).
 29. M. E. Attarzade, M. Farshchi and K. Ghorbanian, "An Experimental Study of Spiral Effect on Deflagration to Detonation Transition," *Journal of Fuel and Combustion*, Iranian Combustion Institute, 3, No. 1, 2010, pp. 9-20, (in Farsi).

English Abstract

Numerical Simulation of the Cellular Structure of a Weakly Unstable Detonation Wave using PPM Method and Riemann Exact Solver

A. R. Barkhordari and M. Farshchi

Department of Aerospace Engineering, Sharif University of Technology

(Received: 2010.7.20, Received in revised form: 2011.6.27, Accepted: 2011.7.5)

In this paper, the requirements of accurate simulation of the cellular structure and triple wave configuration of a weakly unstable detonation wave have been studied. Two-dimensional reactive Euler equations and a one-step Arrhenius form chemical mechanism have been solved using the well-known PPM scheme and the exact Riemann solver for a gas mixture of $H_2/O_2/Ar$. Introducing harmonic density perturbation ahead of ZND profile, detonation wave with regular structure would be produced. The flow field is restricted to a narrow patch containing detonation wave and moves with it during time and along the channel. Using the narrow patch, instead of the entire channel, leads to enormous computational cost and time saving, without losing the accuracy. At the first step, grid resolution study was conducted. Using the mentioned scheme and one-step chemical mechanism, it was shown that for capturing the cellular structure properly, a grid resolution of about 24 points per half reaction length is required. At the next step, the effects of initial perturbation parameters including perturbation amplitude factor, distance from perturbation to downstream boundary condition and perturbation thickness on the evolution and final cellular structure was examined. This way, permitted domain of variation for the parameters mentioned with the aim of precise simulation of cellular structure would be achieved. Finally, increasing the grid resolutions up to 36 points per half reaction length, capability of one-step Arrhenius chemical mechanism for capturing the second triple-point and the shear layer in triple-wave configuration has been investigated.

Keywords: Detonation wave, Triple-wave configuration, Cellular structure, Numerical simulation, One-step chemical mechanism.