

مکانیزم‌های حاکم بر گذار از شعله به تراک در مخلوط غیرهمگن هیدروژن-هوا؛ مطالعه‌ای بر تاثیر نسبت انسداد

محمدحسین شمس‌الدین سعید^۱، جواد خادم^{۲*} و سبحان امامی کوپائی^۳

۱- دانشجوی دکتری، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه بیرجند، m.h.shamsaddinsaeid@birjand.ac.ir

۲- دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه بیرجند، jkhadem@birjand.ac.ir

۳- استادیار، گروه مهندسی مکانیک، واحد نجف آباد، دانشگاه آزاد اسلامی، نجف آباد، ایران، sobhan@pmc.iaun.ac.ir

* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۰۲/۰۸، دریافت آخرین اصلاحات: ۱۴۰۰/۰۳/۰۲، پذیرش: ۱۴۰۰/۰۳/۰۸)

چکیده: هدف از این مقاله بررسی عددی تاثیر نسبت انسداد بر مکانیزم‌های حاکم بر فرایند گذار از شعله به تراک (DDT) در مخلوط غیرهمگن هیدروژن-هواست. محفظه مورد بررسی یک کانال مستطیلی بسته مانع‌دار است که در سه نسبت انسداد ۱۰، ۳۰ و ۶۰ درصد و در فواصل موانع متفاوت مورد مطالعه قرار گرفته است. شبیه‌سازی عددی حاضر به کمک مدل اغتشاشی K- ω -SST و مدل احتراقی چین‌خوردگی سطح شعله ولر انجام گرفته و از روش HLLC برای تسخیر موج ضربه‌ای استفاده شده است. نتایج حاضر نشان می‌دهد که برای نسبت انسداد ۱۰ درصد گذار به تراک در قسمت بدون مانع کانال و برای نسبت‌های انسداد ۳۰ و ۶۰ درصد در قسمت مانع‌دار کانال رخ داده است. با تغییر نسبت انسداد و فاصله موانع مکانیزم‌های حاکم بر فرایند DDT تغییر می‌کنند. انعکاس ماخ از دیواره پایینی کانال و شکل‌گیری ساقه ماخ واکنشی، انعکاس ساقه ماخ از دیواره موانع پایینی و انعکاس موج ضربه‌ای برخوردی از دیواره موانع بالایی از مهم‌ترین مکانیزم‌های حاکم مشاهده شده‌اند. نتایج حاضر نشان داده‌اند که با افزایش نسبت انسداد، شتاب‌گیری شعله و وقوع DDT در کانال سریع‌تر اتفاق می‌افتد. سریع‌ترین حالت آغازش تراک در نسبت انسداد ۶۰ درصد و نسبت فاصله به ارتفاع $S/H=2.5$ رخ داده است.

کلیدواژگان: گذار از شعله به تراک، مخلوط غیرهمگن، ساقه ماخ واکنشی، نسبت انسداد

مقدمه

فرایند گذار از شعله به تراک^۱ (DDT) یک پدیده فیزیکی است که شامل فرایندهای پیچیده‌ای، از قبیل آشفستگی، اندرکنش شعله-موج ضربه‌ای، اندرکنش شعله-لایه مرزی، برخورد شوک و انعکاس آن از دیواره‌های محفظه و موانع، واکنش‌های شیمیایی، ظهور نقاط داغ و غیره، است. محققان، به دلیل اهمیت کاربرد این پدیده در موتورهای تراک ضربه‌ای^۲ (PDE) [۱، ۲]، محفظه‌های احتراق [۳، ۴] و ایمنی در صنایع [۵]، مطالعات گسترده‌ای بر روی این موضوع انجام داده‌اند. اولین مطالعه بر روی پدیده تراک و همچنین فرایند گذار از شعله به تراک به اواخر قرن ۱۹ میلادی و کارهای تجربی انجام‌گرفته توسط ملارد و لشاتولیه بر می‌گردد. مطالعات آن‌ها به انفجارهای کنترل‌نشده در معادن زغال‌سنگ معطوف بود. بررسی‌های بعدی توسط شلخین و همکاران صورت گرفت. آن‌ها، به منظور افزایش آشفستگی جریان در جلوی شعله، با قراردادن یک سیم مارپیچ در درون لوله به صورت مصنوعی، زبری دیوار را افزایش دادند. این کار باعث کاهش چشمگیر فاصله طی‌شده تا تراک شد [۶]. اسمیرنوف و

1. Deflagration-to-Detonation Transition
2. Pulse Detonation Engine

همکاران [۸،۷] به بررسی امواج خودپایدار در سیستم‌های کم‌ثبات پرداختند. نتایج آن‌ها نشان داد که نقاط داغ به‌وجودآمده نتیجه جریان‌های ناهمگونی است که از اندرکنش امواج ضربه‌ای و سطوح تماس ناشی شده‌اند. همچنین، اسمیرنوف و همکاران [۱۰،۹] به بررسی تجربی و تئوری آغازش تراک در مخلوط‌های پراکنده غیریکنواخت هیدروکربن و هوا پرداختند. از آنجایی که حضور موانع در مسیر انتشار شعله باعث تقویت شتاب‌گیری شعله و تسریع فرایند DDT می‌شود، فرایند گذار از شعله به تراک در کانال‌های مانع‌دار مورد مطالعه بسیاری قرار گرفته است [۱۱-۱۳]. فرولو [۱۴] به بررسی جامع شتاب‌گیری شعله در گازها و همچنین گمزو و همکاران [۱۵] به بررسی عددی گذار از شعله به تراک در کانال‌های مانع‌دار پرداختند. با بررسی مطالعات انجام‌شده می‌توان دریافت که با قراردادن موانع درون کانال‌های نیمه‌بسته، میزان آشفستگی تولیدشده و مساحت سطح شعله افزایش یافته و موجب کاهش فاصله وقوع DDT می‌شود [۱۶،۱۷]. سیکارلی و همکاران [۱۸] به بررسی تاثیر فاصله موانع و نسبت انسداد در شتاب‌گیری شعله در مخلوط‌های همگن پرداختند. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که در صورت برابری فاصله بین موانع با طول ناحیه باز-چرخشی گازهای نسوخته در پایین‌دست موانع، اثر شتاب‌گیری شعله در بهترین حالت ممکن است. جینگ نی و همکاران [۱۹] با استفاده از نرم‌افزار اپن‌فوم به شبیه‌سازی و تحلیل فرایند تراک در مخلوط هیدروژن-هوا و تاثیر نسبت انسداد موانع انحنادار پرداختند. نتایج آن‌ها نشان داد که سرعت انتشار شعله با ازدیاد نسبت انسداد افزایش می‌یابد و موانع انحنادار موجب کاهش فاصله وقوع DDT می‌شود. مطابق این تحقیق، تاثیرگذارترین نسبت انسداد موانع انحنادار ۰٫۷ است.

به‌طور کلی، مطالعات تجربی و عددی فراوانی در انفجارهای گازی برای مخلوط‌های واکنشی همگن صورت پذیرفته و دانش به‌نسبت گسترده‌ای در این زمینه در دسترس است. اما، در انفجارهای واقعی، کاربردهای صنعتی و حوادث غیرمترقبه، به‌دلیل آزادشدن هیدروژن از یک ناحیه کوچک و چگالی کمتر آن نسبت به هوا، اثرات شناوری و مدت‌زمان محدود بین جرقه و آزادسازی سوخت، مخلوط‌های قابل‌احتراق غیرهمگن‌اند. از این رو، فرایند گذار از شعله به تراک در مخلوط‌های غیرهمگن جای بررسی و تعمق بیشتری دارد. از جمله مطالعات انجام‌شده در این زمینه می‌توان به کار ولمر و همکاران [۲۰] اشاره کرد. آن‌ها به بررسی تجربی یک کانال مانع‌دار، که در آن هیدروژن به‌صورت عمودی و غیرهمگن تزریق شده است، پرداختند. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که در مخلوط‌های غیرهمگن معیار $L > 7\lambda$ ، که توسط دروفو و همکاران [۲۱]، به‌منظور پیش‌بینی وقوع DDT ارائه شد، قابل‌قبول نیست. در این معیار، λ نشان‌دهنده اندازه سلولی تراک و L حداقل فاصله لازم برای تشکیل تراک است. همچنین، بوئک و همکاران [۲۲،۲۳] به‌صورت تجربی تاثیر وجود گرادیان غلظت در مخلوط هیدروژن-هوا بر روی شتاب‌گیری شعله و بیشینه فشار اندازه‌گیری‌شده در زمان تراک را بررسی کردند. براساس این مطالعات، مشاهده شد که در کانال‌های مانع‌دار وجود گرادیان غلظت تنها در مخلوط‌های رقیق (با غلظت هیدروژن متوسط کمتر از ۰٫۲۴) باعث تقویت شتاب‌گیری شعله و وقوع DDT می‌شود و برای مخلوط‌های غنی‌تر وجود گرادیان باعث تضعیف شتاب‌گیری شعله و تأخیر در رخداد DDT می‌شود. البته، در کانال‌های بدون موانع، شتاب‌گیری شعله در مخلوط غیرهمگن، بدون وابستگی به غلظت متوسط هیدروژن، همیشه بیشتر از مخلوط همگن است. همچنین، فشار اندازه‌گیری‌شده در مخلوط‌های غیرهمگن متفاوت از مخلوط‌های همگن است. لذا، سناریوهای حوادث مبتنی بر مخلوط همگن برای حالت‌های واقعی دقیق نیستند.

ونگ و همکاران [۲۴] برای مطالعه DDT در مخلوطی با گرادیان غلظت، با استفاده از یک حلگر جدید توسعه‌یافته در بسته نرم‌افزاری اپن‌فوم، از سینیتیک شیمیایی تک‌مرحله‌ای هیدروژن-هوا استفاده کردند. آن‌ها مشاهده کردند که در مناطق غنی از سوخت، هیدروژن به‌صورت کامل نمی‌سوزد و این هیدروژن نسوخته می‌تواند مجدداً با هوای تازه احتراق داشته باشد. این موضوع، از لحاظ ایمنی حوادث، قابل اهمیت است. کارانم و همکاران [۲۵،۲۶] به شبیه‌سازی فرایند DDT و تحلیل مقیاس زمانی و انتشار شعله در مخلوط همگن و غیرهمگن هیدروژن-هوا پرداختند. آن‌ها همچنین مدل‌های دینکلاکر و ولر را با هم مقایسه و نشان دادند که مدل دینکلاکر در مشخص کردن سرعت انتشار شعله و موقعیت شعله در مقایسه با مدل ولر از مطابقت بهتری با نتایج تجربی برخوردار است. خدادادی و همکاران [۲۷،۲۸]، با استفاده از نرم‌افزار اپن‌فوم و به‌کارگیری روش چگالی مبنای معادلات

ناویر استوکس تراکم‌پذیر را به صورت گذرا حل کرده و از روش گسسته‌سازی شار جابه‌جایی HLLC¹ استفاده کردند. آن‌ها براساس شبیه‌سازی‌های عددی دقت‌بالای خود دریافتند که در کانال‌مانع‌دار در مخلوط‌های رقیق غیرهمگن امکان وقوع DDT بیشتر است. سلیمان پور و همکاران [۲۹] گذار از شعله به تراک را در یک مخلوط غیرهمگن H₂-O₂ با گرادبان غلظت عمودی درون کانال‌هایی با هندسه‌های متفاوت با استفاده از نرم‌افزار این‌فوم بررسی کردند. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که افزایش دمای جرقه موجب کاهش سرعت نوک شعله می‌شود. همچنین، شکل هندسی دیواره‌ها بر روی مکان و زمان وقوع DDT تاثیرگذار است. در مطالعه آن‌ها، مکانیزم‌های واکنشی وارناتز، اوران، اکونایر، تفصیلی، اسکلتال و GRI2.11 با یکدیگر مقایسه شده و مشاهده شد که مکانیزم اکونایر و GRI2.11 نتایج دقیق‌تری را نسبت به دیگر مکانیزم‌ها در پیش‌بینی مکان شعله در زمان‌های گوناگون به دست می‌دهد. خدادادی و همکاران [۳۰] در مطالعه دیگری با به‌کارگیری مخلوط‌های همگن و غیرهمگن با میانگین‌های غلظت متفاوت در داخل کانالی بدون مانع و کانالی با ۷ مانع، شتاب‌گیری شعله و انتقال به تراک را توسط نرم‌افزار این‌فوم مورد بررسی قرار دادند و نتیجه گرفتند که در تمامی غلظت‌ها در کانال‌های بدون مانع مخلوط غیرهمگن موجب شتاب‌گیری سریع‌تر شعله نسبت به حالت همگن می‌شود. این نتایج تاییدی بر مشاهدات قبلی بوئک و همکاران [۲۲، ۲۳] است.

همان‌طور که اشاره شد، در زمینه شناخت مکانیزم‌های موثر بر فرایند گذار از شعله به تراک، در کانال‌های مانع‌دار حاوی مخلوط‌های همگن مطالعات زیادی انجام گرفته است. نتیجه این مطالعات را می‌توان در مقاله مروری اورن و همکاران [۳۱] مشاهده کرد. براساس این یافته‌ها، چهار مکانیزم آغازش تراک در طی فرایند DDT در مخلوط‌های همگن قابل تشخیص است که البته این مکانیزم‌ها به‌طور کامل مستقل از یکدیگر نیستند. می‌توان گفت که در فضاهای بسته و در غیاب منبع انرژی خارجی قوی این چهار مکانیزم در دو مکانیزم "آغازش از طریق نقطه داغ" و "آغازش در اثر تمرکز انرژی" خلاصه می‌شوند. در مکانیزم اول، شعله آشفته شتاب‌گیرنده باعث ایجاد امواج ضربه‌ای می‌شود. اندرکنش‌های امواج ضربه‌ای با یکدیگر و همچنین با شعله، موانع و لایه مرزی باعث ایجاد گرادبان مکانی میزان واکنش‌پذیری (نقطه داغ) در جریان شده و نهایتاً گذار به تراک از طریق مکانیزم زلدویچ اتفاق می‌افتد. در مکانیزم دوم، چندین موج ضربه‌ای به‌صورت تصادفی با یکدیگر ادغام شده و نقاط داغ شکل می‌گیرند [۳۱]. براساس مطالعات گودوین و همکاران [۳۲، ۳۳]، آغازش از طریق نقطه داغ در کانال‌هایی با نسبت انسداد بالا و آغازش در اثر تمرکز انرژی در کانال‌هایی با نسبت انسداد کم ملاحظه می‌شوند. شمس‌الدین سعید و همکاران [۳۴] به بررسی مکانیزم‌های گذار از شعله به تراک در مخلوط همگن و غیرهمگن هیدروژن-هوا در حضور موانعی با نسبت انسداد ۳۰ درصد پرداختند. نتایج آن‌ها نشان داد که در مخلوط همگن هیدروژن-هوا در غلظت ۳۰ درصد با تغییر نسبت فاصله موانع به ارتفاع دو سناریوی متفاوت مشاهده می‌شود. برای $S/H > 3$ ، در اثر برخورد موج ضربه‌ای با جبهه شعله، گذار از شعله به تراک رخ می‌دهد. برای $S/H \leq 3$ شعله به‌صورت جت از میان موانع عبور می‌کند و باعث می‌شود فشار در قسمت جلویی شعله متمرکز و یک نقطه داغ در لبه جلوی شعله تشکیل شود. درحقیقت، فرایند گذار از شعله به تراک برای $S/H \leq 3$ در اثر تمرکز انرژی اتفاق می‌افتد. در این تحقیق، در هیچ یک از مخلوط‌های همگن بررسی شده حضور ساقه ماخ مشاهده نشد.

با مطالعه مقالات مختلف نشریافته در زمینه DDT مخلوط‌های غیرهمگن، ملاحظه می‌شود که بررسی جامعی در زمینه مکانیزم‌های فیزیکی حاکم در فرایند DDT در این نوع مخلوط‌ها انجام نگرفته که مقاله حاضر به‌دنبال پرکردن این خلاء است. از این رو، در تحقیق حاضر، مطالعه عددی انتشار و شتاب‌گیری شعله به‌منظور فهم مکانیزم‌های فیزیکی حاکم در فرایند گذار از شعله به تراک در مخلوط‌های غیرهمگن مورد نظر است. با مطالعه کارهای گذشته می‌توان نتیجه گرفت که اگرچه تاثیر فاصله موانع و همچنین نسبت انسداد موانع بر شتاب‌گیری شعله و مکانیزم‌های DDT در مخلوط‌های همگن بررسی شده، اما تاثیر این پارامترهای مهم در مخلوط‌های غیرهمگن بررسی نشده است. بنابراین، در مقاله حاضر، سعی شده تا تاثیر نسبت انسداد بر رژیم‌های شتاب‌گیری شعله و DDT در مخلوط غیرهمگن هیدروژن-هوا در کانال‌هایی با فاصله موانع متفاوت مطالعه

شود. کانال مورد بررسی حاوی مخلوط هیدروژن-هوای غیرهمگن با غلظت متوسط ۳۰ درصد (نزدیک به مخلوط استوکیومتری) و نسبت انسداد موانع ۳۰،۱۰ و ۶۰ درصد است. این کانال محفظه‌ای بسته با سطح مقطع مستطیل شکل است. با تغییر فاصله بین موانع سعی شده تا مناسب‌ترین حالت به منظور کاهش فاصله طی شده تا آغازش تراک نیز مشخص شود.

مدل‌سازی عددی

مشخصات هندسه احتراقی مورد مطالعه

محفظه احتراق مورد مطالعه کانالی مانع‌دار با طول ۵٫۴ متر، ارتفاع ۰٫۶ متر و عرض ۰٫۳ متر است. همان‌طور که در شکل ۱ نشان داده شده است، موانع در دیواره‌های بالایی و پایینی به صورت متقارن نسبت به محور طولی کانال تعبیه شده‌اند. اولین مانع در فاصله ۰٫۲۵ متر از محل جرقه و آخرین مانع در فاصله ۲٫۰۵ متر از ابتدای کانال قرار دارد. ضخامت این موانع ۱۲ میلی‌متر، فاصله مجرای جریان بین موانع بالا و پایین d و فاصله بین موانع S است. همچنین، نسبت انسداد (BR) به صورت $BR=1-d/H$ تعریف می‌شود.

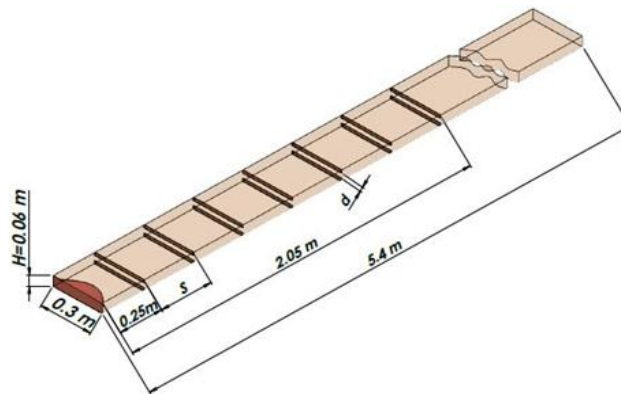


Figure 1- Schematics of the combustion chamber (all dimensions are in meters.)

شکل ۱- طرحواره کلی محفظه احتراق (تمام اندازه‌ها به متر است.)

در محفظه احتراق شکل ۱، مخلوط غیرهمگن هیدروژن-هوا در غلظت هیدروژن متوسط ۳۰ درصد و نسبت انسداد موانع ۳۰،۱۰ و ۶۰ درصد برای نسبت‌های فاصله به ارتفاع S/H ۲، ۲٫۵، ۳، ۳٫۷۵، ۵ و ۱۰ مورد مطالعه قرار گرفته است. S/H های کوچک‌تر نشان‌دهنده تعداد موانع بیشتر است. به دلیل اهمیت زیاد تعداد موانع موجود در مسیر شتاب‌گیری شعله در کاهش فاصله طی شده تا آغازش تراک، S/H های کوچک‌تر با اختلاف کمتری نسبت به یکدیگر مورد بررسی قرار گرفته‌اند. نحوه تزریق هیدروژن در راستای عرضی محفظه احتراق در شکل ۲ نشان داده شده است.

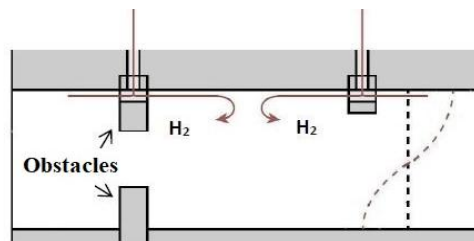


Figure 2- Hydrogen injection technique in the combustion chamber (Hydrogen is injected from the upper wall of the channel, generating a transverse H_2 concentration gradient)

شکل ۲- نحوه تزریق هیدروژن در محفظه احتراق (هیدروژن از سمت دیوار بالایی کانال تزریق شده و باعث ایجاد گرادیان غلظت در راستای عرضی می‌شود.)

در کار حاضر، به منظور شبیه‌سازی مخلوط غیرهمگن هیدروژن-هوا با غلظت هیدروژن متوسط ۳۰ درصد (نزدیک به مخلوط استوکیومتری)، از پروفیل توزیع عرضی غیرهمگن کسر جرمی هیدروژن مربوط به کار تجربی اتنر [۳۵] (شکل ۳) استفاده شده است.

معادلات حاکم

در مقاله حاضر، معادلات حاکم شامل معادلات ناویراستوکس تراکم‌پذیر، معادله انرژی و معادله انتقال برای متغیر پیشرفت واکنش به‌روش حجم محدود حل شد. از آنجایی که مقیاس‌های آشفته طولی متفاوتی در پدیده DDT مشاهده می‌شود و با توجه به محدودیت کیفیت شبکه محاسباتی حاضر، لازم است از یک رویکرد مناسب برای مدل‌سازی آشفتگی استفاده شود. محققان مختلفی در سال‌های اخیر با استفاده از رویکرد URANS^۱ به مطالعه عددی انتشار شعله ناپایا و تراک پرداخته‌اند [۳۵-۳۷]. نتایج پژوهش‌های مذکور، توانایی این مدل در بازسازی رفتار شعله در اندرکنش با موانع و همچنین پدیده‌های گذرایی که در فرایند DDT روی می‌دهند را به‌اثبات رسانده است. در رویکرد URANS از معادلات حاکم متوسط‌گیری زمانی می‌شود. با اعمال متوسط‌گیری، جمله‌های جدید نامعلومی ظاهر می‌شوند که برای حل معادلات حاکم نیاز به مدل‌سازی آن‌هاست. این مدل‌ها شامل یک مدل آشفتگی برای توصیف دینامیک سیال (تنش‌های رینولدزی)، یک مدل احتراقی برای بیان نرخ واکنش متوسط‌گیری‌شده و همچنین روابطی برای بیان شارهای گونه‌های شیمیایی و انرژی‌اند [۳۸]. به‌منظور مدل‌سازی احتراق از مدل چین‌خوردگی سطح شعله ولر [۳۹] مبتنی بر معادله انتقال برای متغیر پیشرفت واکنش استفاده شده است.

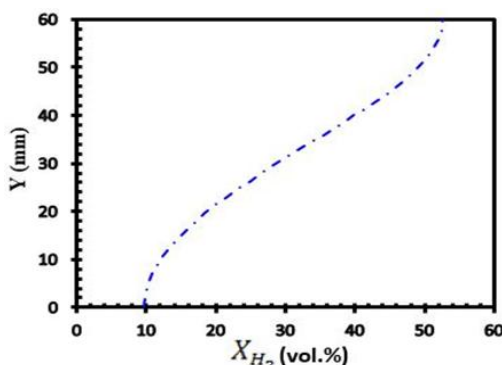


Figure 3- The inhomogeneous transverse distribution profile of hydrogen with average concentrations of 30% [35]

شکل ۳- پروفیل توزیع عرضی غیرهمگن هیدروژن با غلظت متوسط ۳۰ درصد [۳۵]

برای جریان تراکم‌پذیر احتراقی نیمه‌پیش‌آمیخته حاضر، معادلات بقای جرم، تکانه، انرژی، معادله انتقال برای متغیر پیشرفت واکنش، معادله انتقال برای کسر مخلوط و یک معادله حالت ترمودینامیکی حل می‌شوند. از آنجایی که این‌گونه جریان‌ها با تغییرات زیاد در چگالی و سرعت‌های بالا همراه‌اند، تمامی جملات در معادلات حاکم باقی می‌مانند. این معادلات به‌شکل متوسط‌گیری‌شده زمانی به‌صورت زیر نوشته می‌شوند.

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \frac{2}{3} \delta_{ij} \bar{\rho} k \right) = - \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_m} \right) \right) + \bar{\rho} g_i, \quad (2)$$

1. Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{e}_t) + \frac{\partial}{\partial x_j}((\bar{\rho}\tilde{e}_t + \bar{P})\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}a_{\text{eff}}\frac{\partial(\tilde{e}_t + \frac{\bar{P}}{\bar{\rho}})}{\partial x_j} + \mu\left(\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial\tilde{u}_m}{\partial x_m}\right)\tilde{u}_i\right), \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{c}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{c}) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}D_{\text{eff}}\frac{\partial\tilde{c}}{\partial x_j}\right) + \bar{\omega}_{\text{c.def}} + \bar{\omega}_{\text{c.ign}}, \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{f}_H) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{f}_H) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}D_{\text{eff}}\frac{\partial\tilde{f}_H}{\partial x_j}\right). \quad (5)$$

به طوری که در این معادلات، متغیر u_j مولفه سرعت در راستای z ، فشار، P چگالی، ρ انرژی داخلی کل، c متغیر پیشرفت واکنش، f_H کسر مخلوط هیدروژن، μ_{eff} لزجت موثر (مجموع لزجت مولکولی و لزجت اغتشاشی)، α_{ef} ضریب نفوذ حرارتی موثر، D_{eff} ضریب نفوذ جرمی موثر، جمله منبع احتراقی و $\omega_{\text{c.ign}}$ جمله منبع خوداشتعالی در معادله متغیر پیشرفت واکنش اند. همچنین، فشار، چگالی و دما نیز با استفاده از معادله حالت گاز ایدئال به شکل $P = \rho RT$ به یکدیگر مربوط می‌شوند. در معادلات فوق، بالانویس "-" نماد متوسط‌گیری زمانی رینولدز و بالانویس "~" بیانگر متوسط‌گیری جرمی فلور^۱ است.

به علت اهمیت مدل‌سازی فرایند خوداشتعالی و افروزش در شبیه‌سازی‌های DDT و انتشار موج تراک (مدل‌سازی $\bar{\omega}_{\text{c.ign}}$)، زمان‌های تاخیر واکنش (یا افروزش) τ_{ign} با استفاده از معادلات آرنیوسی و براساس سینتیک واکنشی آکونایر [۴۰] محاسبه و به صورت تابعی از دما، فشار و کسر مخلوط هیدروژن (f_H) در یک جدول جست‌وجو ذخیره شده است. در حین حل عددی، زمان تاخیر واکنش محلی برای هر سلول محاسباتی با جست‌وجو در جدول از پیش‌ساخته فوق به دست می‌آید. اگر برای زمانی بزرگ‌تر یا مساوی زمان تاخیر واکنش ($t \geq \tau_{\text{ign}}$) حالت ترمودینامیکی سلول در شرایط مساعد خوداشتعالی باقی بماند، افروزش تراک رخ می‌دهد [۳۵].

روش حل عددی

در این مطالعه، برای شبیه‌سازی پدیده‌های شتاب‌گیری شعله، DDT و انتشار تراک، حلگر ddtFoam که در بستر بسته نرم‌افزاری آپن‌فوم توسعه یافته، استفاده شده است. توانایی این حلگر در شبیه‌سازی فرایند شتاب‌گیری شعله و وقوع DDT بر روی شبکه‌های نسبتاً درشت در مقایسه با نتایج تجربی به اثبات رسیده است [۳۵، ۴۱]. همچنین، برای مدل‌سازی جریان آشفته، مدل آشفتگی دومعادله‌ای $k-\omega$ -SST به کار برده شده است. برای همگرایی بهتر حل معادلات ناویراستوکس ناپایا و تراکم‌پذیر الگوریتم همبسته^۲ به کار برده شده و جمله جابه‌جایی با استفاده از روش HLLC^۳ گسسته شده است [۴۲]. این روش برای جریان‌های تراکم‌پذیر با عدد ماخ بالا مناسب است و نسبت به روش پی‌زو (PISO)^۴ در الگوریتم تفکیکی توانایی بیشتری در تسخیر امواج ضربه‌ای دارد. همچنین، از یک معادله انتقال برای متغیر پیشرفت واکنش C ، که بین صفر، برای واکنشگرهای نسوخته و یک برای محصولات احتراق تغییر می‌کند، استفاده شده است و برای مدل‌سازی جمله نرخ واکنش متوسط مدل ولر به کار برده شده است [۳۹]. شرایط اولیه به صورت مخلوط ساکن با فشار یک اتمسفر و دمای ۲۹۳ کلوین است. همچنین، شرایط مرزی بی‌دررو و عدم‌لغزش برای دیوارهای عمودی، افقی و سطوح موانع اعمال شده است. جرعه نیز در کار عددی حاضر توسط یک ناحیه دایروی داغ به شعاع ۲۵/۴ میلی‌متر و متغیر پیشرفت واکنش برابر ۱ (که دمایی معادل ۲۴۴۰ کلوین ایجاد می‌کند) مدل شده است.

1. Favre averaging
2. Coupled algorithm
3. Harten Lax Van Leer Contact
4. Pressure Implicit with Splitting of Operators

نتایج و بحث

بررسی استقلال حل از شبکه و اعتبارسنجی نتایج

در این شبیه‌سازی، از یک شبکه ساختاریافته یکنواخت در یک میدان محاسباتی دوبعدی استفاده شده است. به‌منظور بررسی استقلال حل از شبکه محاسباتی، شبکه‌هایی با اندازه سلول‌های ۰/۵ تا ۴ میلی‌متر مورد بررسی قرار گرفت. برای نشان‌دادن تاثیر شبکه محاسباتی در شبیه‌سازی حاضر، نمودار زمانی مکان جبهه شعله در کانالی مانع‌دار با نسبت انسداد ۶۰ درصد و نسبت $S/H=5$ ، که حاوی مخلوط غیرهمگن هیدروژن-هوا با غلظت متوسط ۳۰ درصد است، در شکل ۴ نشان داده شده است. براساس این شکل، تفاوت قابل‌ملاحظه‌ای بین اندازه‌های ۰/۵، ۱ و ۲ میلی‌متر مشاهده نمی‌شود، اما در اندازه ۴ میلی‌متر موقعیت زمانی جبهه شعله دارای خطاست. بنابراین، مشاهده می‌شود که انتخاب شبکه محاسباتی با اندازه‌ای کمتر از ۲ میلی‌متر تاثیری در دقت حل و تعیین محل وقوع DDT نداشته و تعداد سلول به‌کاررفته در این حالت حداقل شبکه مورد نیاز برای دستیابی به استقلال حل از شبکه محاسباتی است.

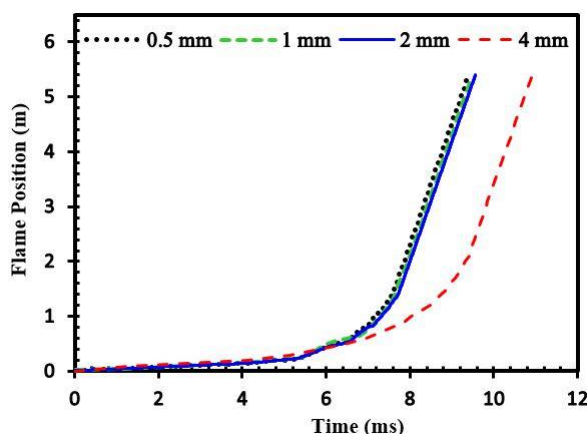


Figure 4- The flame-tip position at different times in the inhomogeneous mixture with an average hydrogen concentration of 30% and blockage ratio of 60% for computational grids of different sizes

شکل ۴- نمودار موقعیت زمانی جبهه شعله در مخلوط غیرهمگن هیدروژن-هوا با غلظت متوسط ۳۰ درصد و نسبت انسداد ۶۰ درصد برای شبکه‌های محاسباتی مختلف [۳۵]

به‌منظور اعتبارسنجی نتایج حاضر، در شکل ۵ نتایج عددی حلگر ExplosionFoam [۲۴] و نتایج تجربی اِتر و همکاران [۳۵، ۴۳] نیز ارائه شده است که از تطابق قابل‌قبولی برخوردار است. ذکر این نکته لازم است که در شبیه‌سازی حاضر مکان جبهه شعله با اندازه‌گیری دورترین نقطه لبه حمله شعله نسبت به انتهای بسته محفظه احتراق به‌دست می‌آید. این موضوع نشان می‌دهد که حلگر حاضر به‌خوبی توانسته خواصی نظیر سرعت سوزش آرام و آشفته شعله و همچنین سرعت انتشار تراک ناپایا را برای مخلوط غیرهمگن با غلظت مورد نظر به‌خوبی بازتولید کند. اندک تفاوت میان نمودارها احتمالاً به شرایط اولیه در نظر گرفته‌شده برای ناحیه جرقه باز می‌گردد. مدل‌سازی ناحیه جرقه یکی از مسائل موثر بر دقت نتایج عددی در مراحل اولیه شتاب‌گیری شعله است [۴۴]. جرقه تولیدشده در نتایج تجربی به‌صورت قابل‌ملاحظه‌ای از ناحیه جرقه استفاده‌شده در شبیه‌سازی عددی کوچک‌تر است. از این رو، موج فشاری اولیه تولیدشده در نتایج تجربی ممکن است با فشار اولیه ناشی از جرقه در شبیه‌سازی عددی کمی متفاوت باشد و این جرقه بر روی میدان جریان و در نتیجه موقعیت جبهه شعله تاثیرگذار است.

در شکل ۶، سرعت جبهه شعله در مخلوط غیرهمگن هیدروژن-هوا در کنار نتایج تجربی مرجع [۳۵] و نتایج عددی حلگر ExplosionFoam [۲۴] در غلظت ۳۰ درصد و نسبت انسداد ۶۰ درصد برای $S/H=5$ نشان داده شده است.

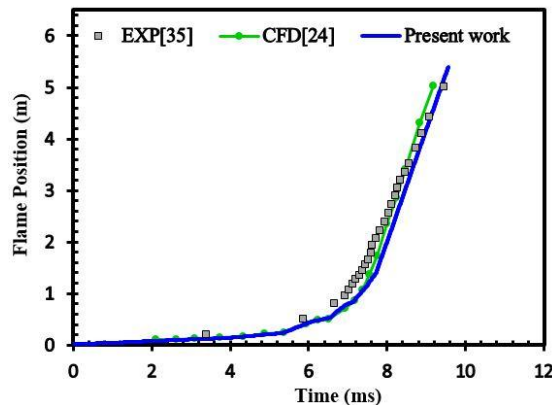


Figure 5- The flame-tip position at different times in the inhomogeneous hydrogen-air mixture along with the experimental [35] and numerical [24] results, the blockage ratio is 60% and $S/H=5$.

شکل ۵- نمودار موقعیت زمانی جبهه شعله در مخلوط غیرهمگن هیدروژن-هوا در کنار نتایج تجربی مرجع [۳۵] و نتایج عددی مرجع [۲۴] (نسبت انسداد موانع برابر ۶۰ درصد و $S/H=5$ است).

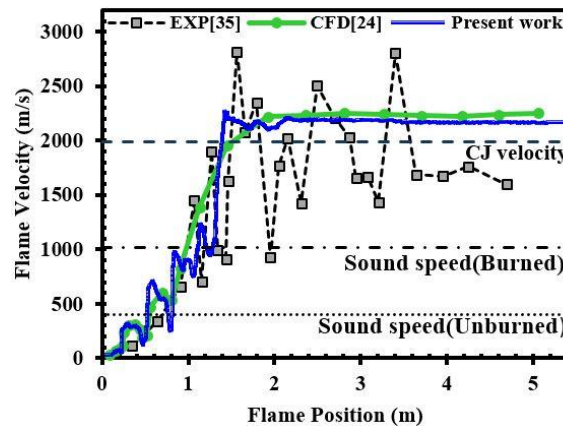


Figure 6- Flame-tip velocity for the inhomogeneous hydrogen-air mixture along with the experimental [35] and numerical [24] results, the blockage ratio is 60% and $S/H=5$.

شکل ۶- سرعت جبهه شعله در مخلوط غیرهمگن هیدروژن-هوا در کنار نتایج تجربی مرجع [۳۵] و نتایج عددی مرجع [۲۴] (نسبت انسداد موانع برابر ۶۰ درصد و $S/H=5$ است).

همان‌طور که مشاهده می‌شود، سرعت شعله در ناحیه مانع‌دار کانال تا مقدار تقریبی ۱۰۰۰ متر بر ثانیه افزایش می‌یابد و سپس به‌صورت ناگهانی پرش می‌کند و پس از آن DDT اتفاق می‌افتد. درنهایت، تراک با سرعت ۲۲۰۰ متر بر ثانیه به حرکت خود ادامه می‌دهد. دلیل نوسانات بزرگ در سرعت تجربی بعد از آغاز تراک، اندک خطای اندازه‌گیری در زمان رسیدن شعله است که این خطای کوچک تأثیر زیادی در محاسبه سرعت به‌صورت عددی گذاشته است. استفاده از شکل ۵ با وجود اینکه در مقالات رایج است، اما این اختلاف را آشکار نمی‌کند. تفاوت نتایج سرعت تجربی و عددی، به‌دلیل سرعت سوزش آرام و آشفته شعله، که تحت تأثیر شبکه محاسباتی، مدل‌سازی ضریب نفوذ مولکولی آرام و مدل‌های زیرشبکه اغتشاشی‌اند، با اندکی اختلاف نسبت به واقعیت پیش‌بینی شده‌اند. از آنجایی که شبکه محاسباتی در شبیه‌سازی‌های عددی بسیار بزرگ‌تر از مقیاس طولی نقاط داغ است، این احتمال وجود دارد که دمای نقاط داغ در طول سلول متوسط‌گیری شده و درنهایت دمای نقاط داغ کمتر پیش‌بینی شود که این موضوع بر وقوع DDT تأثیرگذار است. از طرفی، فرض دوبعدی بودن شعله فرض دقیقی نیست و همچنین مکان و زمان DDT در مطالعات تجربی نیز به‌علت طبیعت تصادفی ظهور نقاط داغ و آغاز تراک از پراکندگی قابل‌توجهی برخوردارند که این موضوع نیز بر اختلاف نتایج عددی و تجربی موثر خواهد بود.

تأثیر فاصله موانع و نسبت انسداد بر شتاب‌گیری شعله و گذار به تراک

در شکل ۷، تأثیر نسبت فاصله به ارتفاع موانع، S/H ، بر روی سرعت جبهه شعله برای مخلوط غیرهمگن هیدروژن-هوا با غلظت هیدروژن متوسط ۳۰ درصد و نسبت انسداد موانع ۱۰ درصد مورد بررسی قرار گرفته است. با بررسی نتایج مشاهده می‌شود که برای تمامی حالت‌ها، اندرکنش‌های شدید بین جریان آشفته و شعله در حال انتشار، منجر به رسیدن سرعت شعله به سرعت صوت محصولات احتراق شده و در ادامه گذار از شعله به تراک رخ می‌دهد.

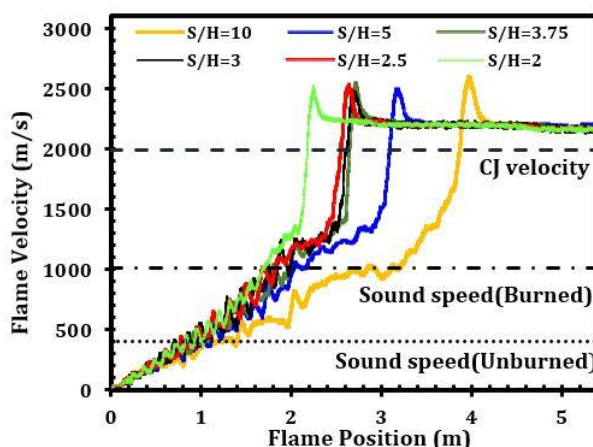


Figure 7- Flame-tip velocity for the inhomogeneous hydrogen-air mixture in a channel with the blockage ratio of 10% for different S/H ratios

شکل ۷- سرعت جبهه شعله در مخلوط غیرهمگن هیدروژن-هوا با غلظت هیدروژن متوسط ۳۰ درصد و نسبت انسداد ۱۰ درصد برای S/H های مختلف

در این حالت، به دلیل اندرکش شعله با امواج شوک، شتاب‌گیری شعله به صورت کامل رخ می‌دهد. در این شرایط، یک پرش ناگهانی در سرعت انتشار شعله مشاهده می‌شود که به عنوان گذار از شعله به تراک (DDT) تفسیر می‌شود. تراک ایجاد شده در لحظات اولیه به صورت بیش‌رانده بوده، اما پس از لحظاتی به تراک پایا با سرعت نسبتاً ثابت (حدوداً ۲۲۰۰ m/s) تبدیل می‌شود. سرعت تراک پایا در مخلوط غیرهمگن با غلظت متوسط ۳۰ درصد حدود ۲۰۰ m/s از سرعت تراک CJ در مخلوط همگن با غلظت ۳۰ درصد بیشتر است. در این نسبت انسداد، برای تمامی حالت‌ها، گذار از شعله به تراک بعد از عبور شعله از موانع در قسمت بدون مانع کانال ($x > 2.05$ m) رخ می‌دهد. در این نسبت انسداد، برای S/H های ۲/۵، ۳، ۳/۷۵، یک همگرایی در مکان DDT مشاهده می‌شود، اما برای نسبت ۲ مکان DDT تغییر زیادی داشته است و بلافاصله پس از عبور از موانع اتفاق می‌افتد.

در کانال‌هایی با نسبت انسداد نسبتاً کوچک (۱۰ درصد و کمتر)، ویژگی‌های مشخصه شتاب‌گیری شعله و ساختارهای شعله مشابه کانال‌های بدون مانع است [۶]. در مطالعات متعددی [۴۵-۴۷] نشان داده شده است که شتاب‌گیری شعله در کانال‌های بدون مانع به شدت تحت تأثیر زبری دیوار قرار می‌گیرد. در زمان شتاب‌گیری شعله، اندرکنش جریان با دیواره‌های کانال باعث تشکیل یک لایه مرزی آشفته می‌شود. اندرکنش شعله با لایه مرزی موجب افزایش قابل توجه نرخ سوزش در نزدیکی دیواره‌های کانال می‌شود. این لایه مرزی نه تنها نقش مهمی در شتاب‌گیری شعله بازی می‌کند، بلکه مقیاس آشفستگی حرکات در جریان را نیز کنترل می‌کند [۴۶]. از این رو، فرایند DDT در کانال‌های بدون مانع (یا در کانال‌های مانع‌دار با نسبت انسداد

کم) دارای عدم قطعیت زیادی در آغازش تراک و نحوه DDT است. با توجه به اینکه در حل حاضر از شبکه‌بندی یکنواخت به نسبت درشتی (در مقایسه با ضخامت لایه مرزی) استفاده شده است، لذا در نسبت انسداد ۱۰ درصد به دلیل عدم حل دقیق لایه مرزی است که احتمالاً اینچنین اختلافاتی مشاهده می‌شود. گمزو و همکاران [۴۸] نیز نقش اندرکنش بین شوک منعکس شده و لایه مرزی ایجاد شده توسط شوک ضربه‌ای برخوردی در فرایند DDT در کانال بدون مانع را مورد مطالعه قرار داده و مشاهده کردند که لایه مرزی نقش مهمی در وقوع DDT در کانال‌های بدون مانع دارد، اما تاثیر آن در کانال‌های مانع‌دار کم است و لذا شبکه‌بندی یکنواخت در نسبت انسدادهای ۳۰ و ۶۰ درصد تاثیری بر دقت پاسخ‌ها ندارد.

در شکل ۸، تاثیر فاصله موانع بر روی سرعت جبهه شعله برای نسبت انسداد ۳۰ درصد مورد بررسی قرار گرفته است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، سرعت شعله شتاب‌گیرنده در کانال مانع‌دار رفتاری نوسانی دارد که بیانگر عبور شعله از موانع است. این نوسانات سرعت برای موانع با نسبت انسداد ۱۰ درصد (شکل ۷) دارای دامنه‌های بسیار کمتری بود. سرعت شعله در زمان عبور از مانع، به دلیل ازدیاد سطح آشفته‌گی جریان و کاهش سطح مقطع جریان عبوری، افزایش می‌یابد و پس از عبور از مانع، به دلیل انبساط ناگهانی شعله در راستای عرضی و افزایش سطح مقطع جریان، کاهش می‌یابد. کاهش سرعت شعله را می‌توان بدین صورت نیز توضیح داد که شعله از درون منطقه‌ای عبور می‌کند که در اثر انعکاس موج ضربه‌ای از یکی از موانع پیش‌گرم شده و دارای سرعت جریانی نزدیک به صفر است. همچنین، مشاهده می‌شود که در تمامی حالت‌ها پس از عبور سرعت شعله از سرعت صوت محصولات سوخته و وارد شدن شعله به رژیم خفه یک پرش ناگهانی رخ داده و DDT اتفاق می‌افتد. موج تراک شکل گرفته در تمامی حالت‌ها پس از مدتی به سرعت پایای خود (حدوداً ۲۲۰۰ متر بر ثانیه) رسیده و تا انتهای قسمت بدون مانع کانال با همان سرعت منتشر می‌شود. در این حالت، با کاهش فاصله بین موانع درون کانال تا $S/H=2$ ، مکان و زمان DDT زودتر اتفاق می‌افتد. مطابق شکل زیر، در این حالت برای اغلب موارد به جز $S/H=10$ مکان رخداد DDT در قسمت مانع‌دار کانال ($x < 2.5$ m) رخ داده است.

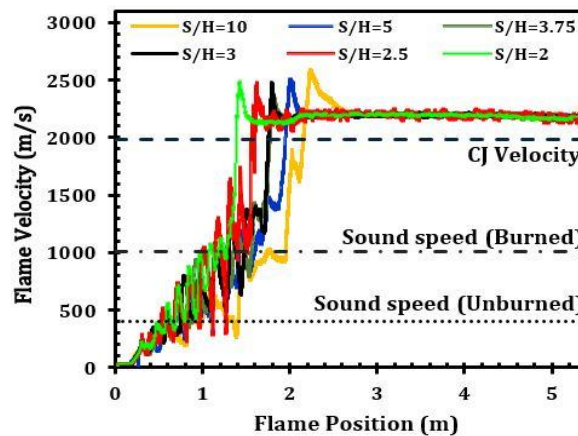


Figure 8- Flame-tip velocity for the inhomogeneous hydrogen-air mixture in a channel with the blockage ratio of 30% and different S/H ratios

شکل ۸- سرعت جبهه شعله در مخلوط غیرهمگن هیدروژن-هوا با غلظت متوسط ۳۰ درصد و نسبت انسداد ۳۰ درصد برای S/H های مختلف

در شکل ۹، تاثیر فاصله موانع بر روی سرعت جبهه شعله برای نسبت انسداد ۶۰ درصد مورد بررسی قرار گرفته است. با توجه به اینکه با قرارگیری موانع مرتفع‌تر در جلو شعله مکانیزم‌های تولید گردابه متفاوتی، نظیر اندرکنش موج ضربه‌ای-شعله،

انواع ناپایداری‌های هیدرودینامیکی، رایلی-تیلور (RT)^۱، ریچمایر-مشکوف (RM)^۲ و غیره، فعال شده که باعث تقویت اختلاط آشفته، شدت یافتن آشفستگی سطح شعله و تقویت احتراق می‌شوند، وقوع DDT در یک موقعیت طولی بسیار زودتری نسبت به حالت اول (موانع با نسبت انسداد ۱۰ درصد) رخ می‌دهد. اگر از منظر وقوع سریع‌تر DDT به این موضوع نگاه شود، حالت $S/H=2.5$ مناسب‌ترین حالت آغازش تراک بوده و افزایش تعداد موانع بیش از آن در بهبود شتاب‌گیری شعله تاثیر چندانی ندارد. مطابق شکل ۹، در نسبت انسداد ۶۰ درصد، برای تمامی نسبت‌های S/H ، مکان وقوع DDT در قسمت مانع‌دار کانال رخ داده است. نکته جالب توجه دیگر در شکل ۹، که برای نسبت $S/H=2$ وضوح بیشتری دارد، آن است که سرعت انتشار تراک پایا در قسمت مانع‌دار کانال 170 m/s کمتر از قسمت بدون مانع است. درحقیقت، افت تکانه ناشی از حضور موانع در کانال باعث کم‌تر بودن سرعت انتشار تراک پایا در این قسمت است.

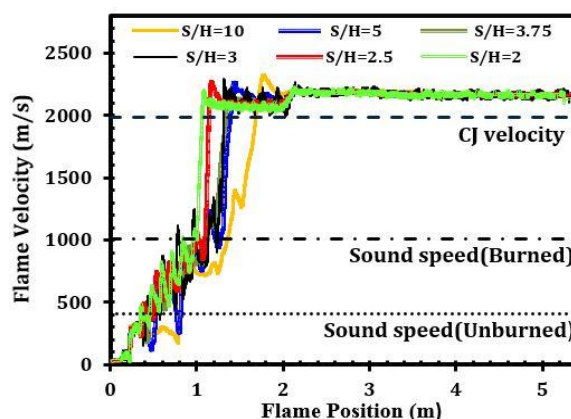


Figure 9- Flame-tip velocity for the inhomogeneous hydrogen-air mixture in a channel with the blockage ratio of 60% and different S/H ratios

شکل ۹- سرعت جبهه شعله در حالت غیرهمگن هیدروژن-هوا با غلظت ۳۰ درصد و نسبت انسداد ۶۰ درصد برای S/H های مختلف

از آنجایی که در یک کانال بدون مانع گازهای نسوخته قابل دسترسی‌اند، اما وقتی که موانع در کانال قرار می‌گیرند انسداد به‌وجودآمده توسط موانع تا حدودی از جریان گازهای نسوخته به سمت جلوی شعله جلوگیری می‌کند. از این رو، شعله منتشرشده در داخل کانال مانع‌دار تمایل به پیشروی و رشد سریع‌تر در مسیر طولی کانال در مقایسه با حرکت عرضی در کانال دارد و شتاب‌گیری شعله در حالت مانع‌دار به‌صورت قابل‌توجهی بیشتر از حالت بدون مانع است. این موضوع منجر به رخداد سریع‌تر گذار از شعله به تراک می‌شود. این مشاهدات در مخلوط‌های همگن نیز توسط گمزو و همکاران [۱۵] گزارش شده است. با مقایسه نمودارهای سرعت شعله مربوط به نسبت انسدادهای ۱۰، ۳۰ و ۶۰ درصد نتیجه می‌شود که با افزایش نسبت انسداد، انتشار شعله و وقوع DDT در کانال سریع‌تر اتفاق می‌افتد. اما، مشاهده می‌شود که بیشینه سرعت انتشار، که مربوط به تراک پیش‌رانده است، در نسبت انسداد ۶۰ درصد در مقایسه با نسبت‌های انسداد ۱۰ و ۳۰ درصد کمتر است که به‌علت افت تکانه بیشتر ناشی از حضور موانع مرتفع‌تر در این حالت است. همچنین، در مخلوط غیرهمگن هیدروژن-هوا با غلظت متوسط هیدروژن ۳۰ درصد، برای نسبت انسداد ۱۰ درصد آغازش تراک در قسمت بدون مانع کانال و در نسبت انسدادهای ۳۰ و ۶۰ درصد آغازش تراک در قسمت مانع‌دار کانال اتفاق می‌افتد. میانگین سرعت انتشار تراک پایا در قسمت بدون مانع کانال در همه نسبت‌های انسداد یکسان است (۱۰ درصد بیشتر از تراک CJ) که این موضوع نشان می‌دهد که ارتفاع موانع نقش چندانی در به‌هم‌ریختن توزیع اولیه غلظت در قسمت بدون مانع کانال نداشته است.

1. Rayleigh-Taylor
2. Richtmyer-Meshkov

تأثیر نسبت انسداد بر مکانیزم‌های موثر بر گذار از شعله به تراک

در شکل ۱۰، کانتورهای دما و فشار در حین فرایند DDT برای نسبت انسداد ۱۰ درصد و نسبت $S/H=2$ ، که موجب وقوع سریع‌تر DDT می‌شود، بررسی شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، به‌علت توزیع غلظت متفاوت هیدروژن در داخل کانال، جبهه شعله و به‌دنبال آن موج ضربه‌ای پیش‌تاز دارای تقارن نسبت به خط مرکزی کانال نیستند. حتی، مشاهده می‌شود که در مجاورت دیواره پایینی، که دارای نسبت سوخت به هوایی در نزدیکی مرز پایینی حد شعله‌وری مخلوط هیدروژن-هواست، واکنشی رخ نداده است. در لحظات نشان‌داده‌شده در شکل، موج ضربه‌ای خمیده به‌نسبت قوی‌ای در جلو شعله در حال انتشار است. در زمان ۱۰ میلی‌ثانیه، این موج خمیده در برخورد به دیواره پایینی تشکیل یک ساقه ماخ داده است. این ساقه ماخ به‌حدی قوی است که در ادامه به یک موج واکنشی تبدیل شده است. در زمان ۱۰/۰۷۰ میلی‌ثانیه، در اثر تمرکز امواج فشاری در نزدیکی جبهه شعله یک ناحیه دمابالا یا یک نقطه داغ در نزدیکی دیوار بالایی کانال در کانتور دما ظاهر می‌شود. با گذشت زمان این نقطه داغ منجر به یک انفجار موضعی می‌شود که در کانتورهای دما و فشار قابل‌رویت است. در این حالت موج تراک پیش‌رانده شکل‌گرفته در مجاورت دیواره بالایی به موج واکنشی شکل‌گرفته در پشت ساقه ماخ برخورد کرده و یک جبهه واحد را تشکیل می‌دهند. مطابق شکل ۷، در نسبت انسداد ۱۰ درصد برای تمام حالت‌های S/H ، گذار به تراک در قسمت بدون مانع کانال صورت می‌پذیرد. به‌طور خلاصه، در این حالت‌ها دلیل رخداد DDT تشکیل یک ساقه ماخ قوی و اندرکنش و ادغام امواج ضربه‌ای پیشرو در مجاورت دیوار بالایی است.

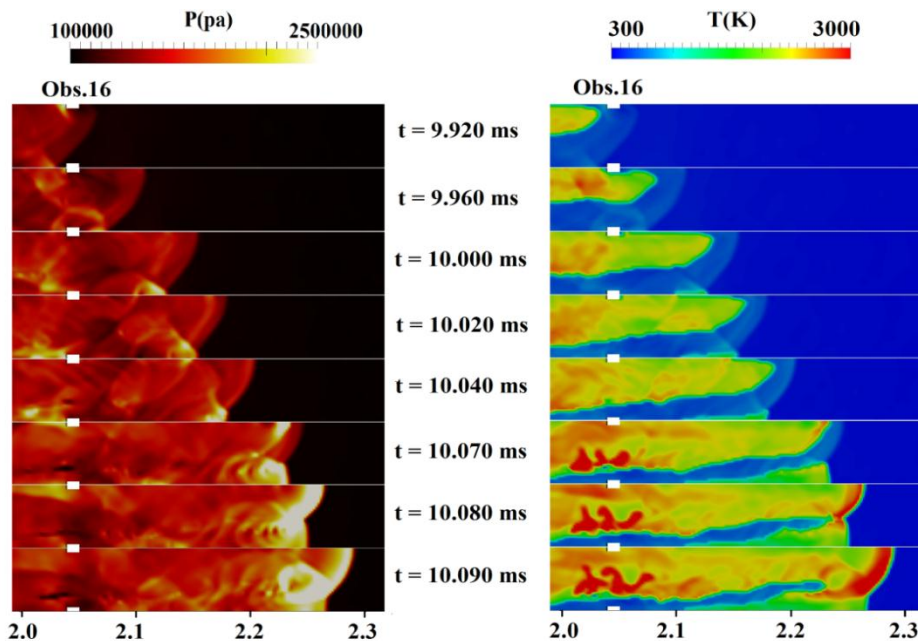


Figure 10- Temperature and pressure contours in the downstream area of obstacle #16 for the inhomogeneous mixture of hydrogen-air in a channel with the blockage ratio of 10% and $S/H=2$

شکل ۱۰- کانتورهای دما و فشار در پایین‌دست مانع شماره ۱۶ در مخلوط غیرهمگن هیدروژن-هوا در کانالی با نسبت انسداد موانع ۱۰ درصد و $S/H=2$

در نسبت انسدادهای ۳۰ و ۶۰ درصد، برای تمامی حالت‌ها گذار به تراک در قسمت مانع‌دار کانال صورت می‌پذیرد. شکل ۱۱ کانتورهای دما برای نسبت انسدادهای ۳۰ و ۶۰ درصد و $S/H=5$ را در اطراف موانع، جایی که آغازش تراک رخ داده است، نشان می‌دهد. به‌علت توزیع غلظت متفاوت هیدروژن درون کانال، در این حالت نیز جبهه شعله و متعاقباً موج ضربه‌ای پیش‌تاز دارای تقارن نسبت به خط مرکزی کانال نیستند. در شکل ۱۱-الف، (نسبت انسداد ۳۰ درصد) زاویه موج ضربه‌ای در نزدیکی

دیواره پایینی به اندازه‌ای است که یک انعکاس ماخ از دیواره پایینی روی داده و یک ساختار سه‌موجی شامل موج ضربه‌ای برخوردی، ساقه ماخ و موج ضربه‌ای منعکس شده (موج عرضی) مشاهده می‌شود. در زمان ۱۱/۰۷۵ میلی‌ثانیه، فعال شدن واکنش‌های شیمیایی، که همراه با افزایش فشار شدید است، در پشت ساقه ماخ روی می‌دهد. این مرکز انفجاری در ناحیه‌ای از کانال، که دارای مخلوط رقیق‌تری است (ناحیه با غلظت هیدروژن ۱۰٪)، اتفاق می‌افتد. درحقیقت، فاصله زیاد بین موانع در این حالت سبب می‌شود که ساقه ماخ پر قدرت شکل گرفته باعث آغازش مستقیم تراک شود. آغازش تراک در اثر انعکاس ساقه ماخ از موانع در برخی از نسبت‌های S/H برای مخلوط‌های همگن نیز گزارش شده است [۴۹]. در شکل ۱۱-ب، (نسبت انسداد ۶۰ درصد) در زمان ۷/۷۴۰ ms یک ناحیه داغ در بالادست مانع شماره ۵ شکل گرفته است. در این حالت، در اثر انعکاس موج ضربه‌ای پیشرو از دیواره مانع بالایی یک کانون انفجاری شکل گرفته و موج تراک ایجاد می‌شود. این موج تراک به‌مرور پهنای کانال را اشغال می‌کند.

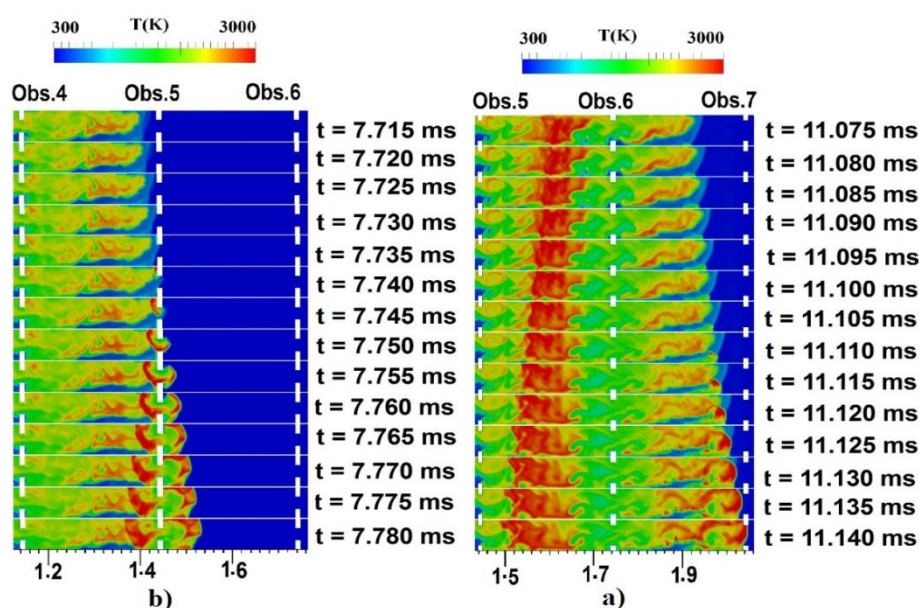


Figure 11- The temperature contours in the area around the obstacles for the inhomogeneous mixture of hydrogen-air for S/H=5: (a) blockage ratio of 30%, and (b) blockage ratio of 60%

شکل ۱۱- کانتورهای دما در ناحیه اطراف موانع در مخلوط غیرهمگن هیدروژن-هوا برای S/H=۵: الف) نسبت انسداد ۳۰ درصد و ب) نسبت انسداد ۶۰ درصد

در شکل ۱۲، کانتورهای دما در ناحیه اطراف موانع نشان داده شده است. در این کانتورها فرایند وقوع DDT در نسبت انسدادهای ۳۰ و ۶۰ درصد برای حالت S/H=3.75 بررسی شده است. برای کانالی با نسبت انسداد ۳۰ درصد (شکل ۱۲-الف) انعکاس ماخ از دیواره پایینی مشاهده می‌شود، با این تفاوت که در این حالت دو کانون انفجاری ایجاد شده است. انعکاس موج ضربه‌ای برخوردی از مانع بالایی و همچنین انعکاس ساقه ماخ از دیواره پایینی، که سبب ایجاد نواحی داغ در مجاورت موانع است، در زمان ۱۰/۷۲۰ ms به‌خوبی مشاهده می‌شود. درحقیقت، در این حالت دو موج تراک شکل گرفته که به همدیگر برخورد می‌کنند. سرعت انتشار تراک بالایی به‌خاطر انتشار در محیطی که دارای درصد هیدروژن بالاتری است بیشتر است و تراک غالب محسوب می‌شود. در نسبت انسداد ۶۰ درصد (شکل ۱۲-ب)، انعکاس ساقه ماخ از دیواره پایینی موجب شکل‌گیری ناگهانی نقاط داغ در مجاورت موانع در زمان ۷/۴۷۰ ms می‌شود. موج انفجاری حاصل از این نقاط داغ به‌سرعت درون گازهای متراکم‌شده شتاب گرفته و با موج ضربه‌ای پیشرو ادغام می‌شود. نکته حائز توجه در هر دو شکل ساقه ماخ بسیار قوی است که در پشت آن واکنش‌های شیمیایی آغاز شده‌اند.

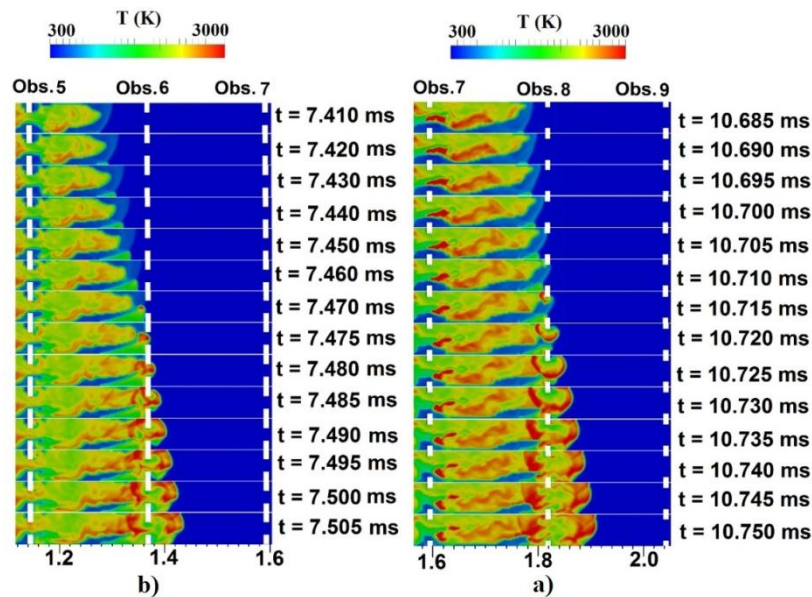


Figure 12- The temperature contours in the area around the obstacles for the inhomogeneous mixture of hydrogen-air for $S/H=3.75$, (a) blockage ratio of 30%, and (b) blockage ratio of 60%

شکل ۱۲- کانتورهای دما در ناحیه اطراف موانع در مخلوط غیرهمگن هیدروژن-هوا برای $S/H=3.75$ (الف) نسبت انسداد ۳۰ درصد و (ب) نسبت انسداد ۶۰ درصد

در شکل ۱۳، کانتورهای دما در نسبت انسدادهای موانع ۳۰ و ۶۰ درصد برای نسبت $S/H=3$ مورد بررسی قرار گرفته است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، برای نسبت انسداد ۳۰ درصد (شکل ۱۳-الف) یک ناحیه داغ در لبه بالایی مانع پایینی (مانع شماره ۹) شکل گرفته است. این ناحیه داغ منبع اصلی آغازش تراک است. این موج تراک با عبور از مانع تقویت شده و به یک تراک خوداتکا، که به‌مرور پهنای کانال را اشغال می‌کند، تبدیل می‌شود. در نسبت انسداد ۶۰ درصد (شکل ۱۳-ب)، یک موج ضربه‌ای خمیده قوی در جلو شعله شکل گرفته که انعکاس آن از دیواره کانال یک ساقه ماخ را تشکیل می‌دهد. قدرت این ساقه ماخ به قدری زیاد است که واکنش‌های شیمیایی در پشت این موج فعال شده و باعث افزایش دما در این ناحیه می‌شوند. درحقیقت، ساقه ماخ در این حالت به یک موج ضربه‌ای واکنشی تبدیل شده که البته قدرت و سرعت یک موج تراک را ندارد. در زمان $7/395$ میلی‌ثانیه و قبل از برخورد ساقه ماخ واکنشی به مانع پایینی (مانع شماره ۷) جبهه شعله به ناحیه واکنشی پشت ساقه ماخ برخورد کرده و یک کانون انفجاری در محل این برخورد شکل می‌گیرد. موج واکنشی حاصل از این کانون انفجاری به‌صورت یک موج تراک به‌سمت مواد نسوخته حرکت می‌کند. این موج تراک به‌مرور کل پهنای محفظه را دربر گرفته و به‌صورت یک موج تراک با ساختار سه‌موجی منتشر می‌شود.

در شکل ۱۴، کانتورهای دما مربوط به مراحل انتهایی فرایند DDT در کانال‌هایی با نسبت انسدادهای ۳۰ و ۶۰ درصد و نسبت $S/H=2.5$ مشاهده می‌شود. در شکل ۱۴-الف (نسبت انسداد ۳۰ درصد)، دو کانون انفجاری قابل مشاهده است. در لحظه $10/200$ میلی‌ثانیه، انعکاس موج ضربه‌ای برخوردی از مانع بالایی شماره ۱۰ منجر به شکل‌گیری اولین کانون انفجاری در مجاورت جبهه شعله می‌شود. در لحظه $10/210$ میلی‌ثانیه، انعکاس ساقه ماخ از مانع پایینی شرایط را برای شکل‌گیری دومین کانون انفجاری فراهم کرده است. در مجموع مراحل مشاهده‌شده در طی فرایند DDT در نسبت انسداد ۳۰ درصد برای حالت‌های $S/H=2.5$ و $S/H=3.75$ مشابه‌اند. در شکل ۱۴-ب (نسبت انسداد ۶۰ درصد)، در زمان $7/165$ میلی‌ثانیه در بالادست مانع پایینی شماره ۷ نقطه داغی مشاهده می‌شود. مطابق شکل، بازهم انعکاس ساقه ماخ از دیواره مانع پایینی عامل ظهور کانون انفجاری و گذار به تراک است. موج تراک منتشرشده از این نقطه داغ در نهایت با موج ضربه‌ای پیشرو یکی شده و به انتشار خود ادامه می‌دهد.

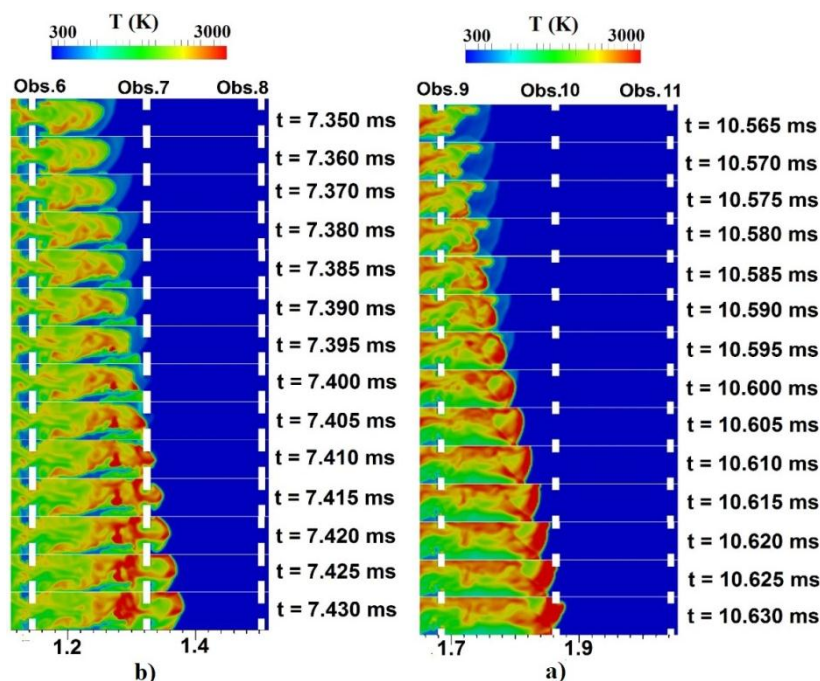


Figure 13- The temperature contours in the area around the obstacles for the inhomogeneous mixture of hydrogen-air for $S/H=3$, (a) blockage ratio of 30%, and (b) blockage ratio of 60%

شکل ۱۳- کانتورهای دما در ناحیه اطراف موانع در مخلوط غیرهمگن هیدروژن-هوا برای $S/H=3$ (الف) نسبت انسداد ۳۰ درصد و (ب) نسبت انسداد ۶۰ درصد

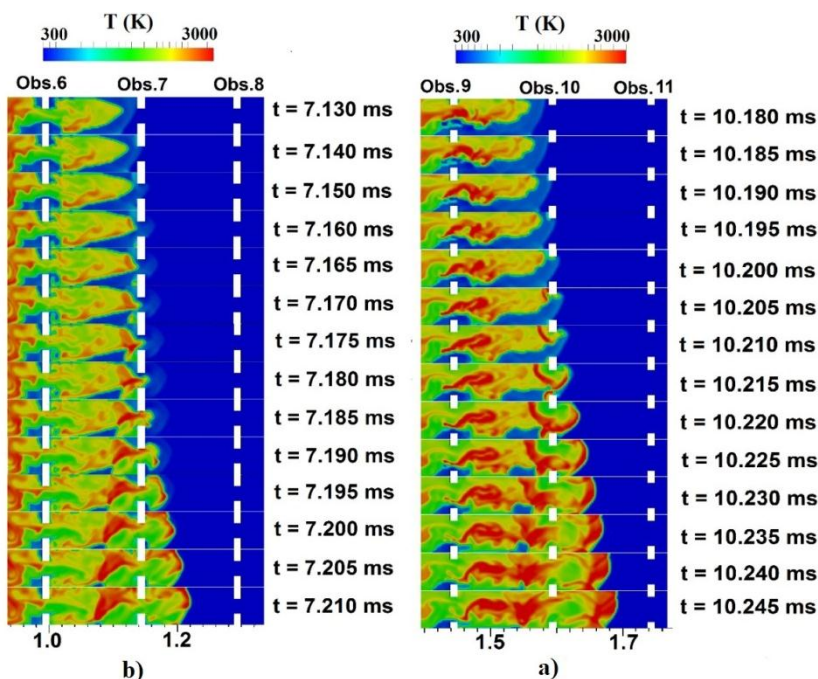


Figure 14- The temperature contours in the area around the obstacles for the inhomogeneous mixture of hydrogen-air for $S/H=2.5$, (a) blockage ratio of 30%, and (b) blockage ratio of 60%

شکل ۱۴- کانتورهای دما در ناحیه اطراف موانع در مخلوط غیرهمگن هیدروژن-هوا برای $S/H=2.5$ (الف) نسبت انسداد ۳۰ درصد و (ب) نسبت انسداد ۶۰ درصد

در نتایج حاضر، مشابه با نتایج گمزو و همکاران [۴۹]، که به بررسی مکانیزم‌های DDT در مخلوط استوکیومتری هیدروژن- هوای همگن پرداخته‌اند، با تغییر نسبت انسداد و فاصله موانع، سه رژیم مختلف برای DDT مشاهده شده است. در هر دو تحقیق اهمیت شکل‌گیری ساقه ماخ در بین موانع، برخورد و انعکاس آن از موانع و پیرو آن شکل‌گیری موج تراک نشان داده شده است. در شبیه‌سازی‌های گمزو و همکاران در $S/H=1.5-3$ ساقه ماخ شکل نگرفته و تراک آغاز نشده است، اما در کار حاضر در هر سه نسبت انسداد در تمامی محدوده S/H آغازش تراک مشاهده شده است.

همان‌طور که مشاهده شد، در مخلوط غیرهمگن حاضر با تغییر نسبت انسداد و فاصله موانع مکانیزم‌های گذار از شعله به تراک تغییر می‌کنند. برای نسبت انسداد ۳۰ درصد سه رژیم متفاوت از DDT در قسمت مانع‌دار کانال قابل تشخیص است. در رژیم اول، شکل‌گیری ساقه ماخ پر قدرت در میانه موانع سبب آغازش مستقیم تراک در پشت ساقه ماخ می‌شود. در رژیم دوم، انعکاس موج ضربه‌ای و ساقه ماخ از دیواره کناری موانع منجر به پیدایش دو کانون انفجاری هم‌زمان در پشت موانع بالایی و پایینی شده که پس از برخورد این دو جبهه با یکدیگر موج تراک خوداتکا شکل می‌گیرد. در رژیم سوم، ناحیه داغ و کانون انفجاری قسمت بالایی مانع منبع اصلی آغازش تراک است. برای نسبت انسداد ۶۰ درصد نیز حضور ساقه ماخ قوی در حال انتشار در بین موانع یکی از عوامل آغازش تراک است (نسبت‌های S/H ، ۳ و $۳/۷۵$). در نسبت‌های S/H ، ۵ و $۲/۵$ به ترتیب انعکاس موج ضربه‌ای برخوردی و ساقه ماخ از دیواره موانع شرایط را برای پدیدار شدن کانون‌های انفجاری مهیا می‌کنند.

جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در این مطالعه، به بررسی مکانیزم‌های حاکم بر DDT در مخلوط استوکیومتری هیدروژن- هوای غیرهمگن با غلظت ۳۰ درصد در کانال‌های بسته پرداخته شده است. با تغییر نسبت انسداد و فاصله موانع مکانیزم‌های موثر بر گذار از شعله به تراک تغییر و سه رژیم مختلف برای DDT مشاهده شد. برای نسبت انسداد ۳۰ درصد، هر سه رژیم متفاوت از DDT در قسمت مانع‌دار کانال قابل تشخیص است. در رژیم اول، شکل‌گیری ساقه ماخ پر قدرت در میانه موانع سبب آغازش مستقیم تراک در پشت ساقه ماخ می‌شود (نسبت $S/H=5$). در رژیم دوم، انعکاس موج ضربه‌ای برخوردی و ساقه ماخ از دیواره کناری موانع منجر به پیدایش دو کانون انفجاری در پشت موانع بالایی و پایینی شده که پس از برخورد این دو جبهه با یکدیگر موج تراک خوداتکا شکل می‌گیرد (نسبت S/H ، $۳/۷۵$ و $۲/۵$). در رژیم سوم، ناحیه داغ و کانون انفجاری قسمت بالایی مانع منبع اصلی آغازش تراک است (نسبت $S/H=3$). برای نسبت انسداد ۶۰ درصد نیز حضور ساقه ماخ قوی در حال انتشار در بین موانع یکی از عوامل آغازش تراک است (نسبت‌های S/H ، ۳ و $۳/۷۵$). در نسبت‌های S/H ، ۵ و $۲/۵$ به ترتیب انعکاس موج ضربه‌ای برخوردی و ساقه ماخ از دیواره موانع شرایط را برای پدیدار شدن کانون‌های انفجاری مهیا می‌کنند. بررسی‌های انجام‌شده در این مطالعه نشان می‌دهد که فاصله بین موانع و همچنین نسبت انسداد می‌تواند عوامل تاثیرگذار بر شتاب‌گیری شعله و محل وقوع DDT باشد. در مخلوط غیرهمگن هیدروژن- هوا با غلظت متوسط ۳۰ درصد، در نسبت انسداد ۱۰ درصد آغازش تراک در قسمت بدون مانع کانال و در نسبت انسدادهای ۳۰ و ۶۰ درصد آغازش تراک در قسمت مانع‌دار کانال اتفاق می‌افتد. با مقایسه نمودارهای سرعت شعله برای مخلوط غیرهمگن هیدروژن- هوا نتیجه می‌شود که با افزایش نسبت انسداد، شتاب‌گیری شعله و وقوع DDT در کانال سریع‌تر اتفاق می‌افتند. همچنین، در وقوع سریع‌تر DDT تاثیر پارامتر نسبت انسداد بیشتر از پارامتر افزایش تعداد موانع است. برای مخلوط غیرهمگن هیدروژن- هوا در نسبت انسداد ۶۰ درصد با کاهش فاصله بین موانع درون کانال تا $S/H=2.5$ مکان و زمان DDT زودتر اتفاق می‌افتد و افزایش تعداد موانع بیش از آن بر شتاب‌گیری سریع‌تر شعله تاثیر ندارد.

منابع

1. K. Wang, Z. Wang and et al, "Study on a simplified double-frequency scheme for pulse detonation rocket engines", *Acta Astronautica*, 148, 2018, pp. 337-344.
2. N. N. Smirnov, O. G. Penyazkov and et al, "Onset of detonation in hydrogen-air mixtures due to shock wave reflection inside a combustion chamber", *Acta Astronautica*, 149, 2018, pp. 77-92.
3. Yu. G. Phylippov, V. R. Dushin and et al, "Fluid mechanics of pulse detonation thrusters", *Acta Astronautica*, 76, 2012, pp. 115-126.
4. M. A. Liberman, M. F. Ivanov and et al, "Deflagration-to-detonation transition in highly reactive combustible mixtures", *Acta Astronautica*, 67, 2010, pp. 688-701.
5. B. Zhang, L. Pang and Y. Gao, "Detonation limits in binary fuel blends of methane/hydrogen mixtures", *Fuel*, 168, 2016, pp. 27-33.
6. G. Ciccarelli and S. Dorofeev, "Flame acceleration and transition to detonation in ducts", *Progress in Energy and Combustion Science*, 34, 2008, pp. 499-550.
7. N. N. Smirnov, V. F. Nikitin and S. Alyari Shurekhdeli, "Investigation of self-sustaining waves in metastable systems: deflagration-to-detonation transition", *Journal of Propulsion and Power*, 25, 2009, pp. 593-608.
8. N. N. Smirnov, V. F. Nikitin and Yu. G. Phylippov, "Deflagration to detonation transition in gases in tubes with cavities", *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 83, 2010, pp. 1287-1316.
9. N. N. Smirnov, V. F. Nikitin, J. Khadem and Sh. Alyari-Shourekhdeli, "Onset of detonation in poly dispersed fuel-air mixtures", *Proceedings of the Combustion Institute*, 31. No. 2, 2007, pp. 2195-2204
10. N. N. Smirnov, V. F. Nikitin, V. R. Dushin, Y. Filippov, V. Nerchenko and J. Khadem, "Combustion onset in non-uniform dispersed mixtures", *Acta Astronautica*, 115, 2015, pp. 94-101
11. S. Emami, K. Mazaheri, A. Shamooni and Y. Mahmoudi, "LES of flame acceleration and DDT in hydrogen-air mixture using artificially thickened flame approach and detailed chemical kinetics", *Hydrogen Energy*, 40, 2015, pp. 7395-7408.
12. J. H. S. Lee, "Initiation of gaseous detonation", *Annual Review of Physical Chemistry*, 28. No. 1, 1977, pp. 75-104.
13. A. Teodorczyk, "Scale effects on hydrogen-air fast deflagrations and detonations in small obstructed channels", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 21, No. 2, 2008, pp. 147-153.
14. S. M. Frolov, "Acceleration of the deflagration-to-detonation transition in gases: from Shchelkin to our days", *Combustion Explosion Shock Waves*, 48, No. 3, 2012, pp. 258-268.
15. V. N. Gamezo, T. Ogawa and E. S. Oran, "Numerical simulations of flame propagation and DDT in obstructed channels filled with hydrogen-air mixture", *Proceedings of the Combustion Institute*, 31. No. 2, 2007, pp. 2463-2471.
16. D. A. Kessler, V. N. Gamezo and E. S. Oran, "Simulations of flame acceleration and deflagration-to-detonation transitions in methane-air systems", *Combustion and Flame*, 157, 2010, pp. 2063-2077.
17. A. Na'Inna, H. Phylaktou and G. Andrews, "Effects of obstacle separation distance on gas explosions: the influence of obstacle blockage ratio", *Procedia Engineering*, 2014, 84, pp. 306-319.
18. G. Ciccarelli, C. Fowler and M. Bardon, "Effect of obstacle size and spacing on the initial stage of flame acceleration in a rough tube", *Shock Waves*, 161, 2005, pp. 161-166.
19. J. Ni, J. Pan, Y. Zhu, C. Jiang, J. Li and E. K. Quaye, "Effect of arc obstacles blockage ratio on detonation characteristics of hydrogen-air", *Acta Astronautica*, 170, 2020, pp. 188-197.
20. K. G. Vollmer, F. Ettner and T. Sattelmayer, "Deflagration to detonation transition in hydrogen/air mixtures with a concentration gradient", *Combustion Science and Technology*, 184, 2012, pp. 1903-1915.
21. S. B. Dorofeev, V. P. Sidorov, M. S. Kuznetsov, I. D. Matsukov and V. I. Alekseev, "Effect of scale on the onset of detonations", *Shock Waves*, 10, 2000, pp. 137-149.
22. L. R. Boeck, J. Hasslberger and T. Sattelmayer, "Flame acceleration in hydrogen/air mixtures with concentration gradients", *Combustion Science and Technology*, 186, 2014, pp. 1650-1661.
23. L. R. Boeck, J. Hasslberger, F. Ettner and T. Sattelmayer, "Investigation of peak pressures during explosive combustion of inhomogeneous hydrogen-air mixtures", in *Proceedings of the 7th International Fire and Explosion Hazards Seminar*, Providence, RI, USA, 2013.
24. C. J. Wang and J. X. Wen, "Numerical simulation of flame acceleration and deflagration-to-detonation transition in hydrogen-air mixtures with concentration gradients", *International Journal of Hydrogen Energy*, 42, No. 11, 2016, pp. 7657-7663.
25. A. Karanam, P. K. Sharma and S. Ganju, "Numerical simulation and validation of flame acceleration and DDT in hydrogen air mixtures", *International Journal of Hydrogen Energy*, 43, 2018, pp. 17492-17504.
26. A. Karanam, S. Ganju and J. Chattopadhyay, "TimeScale Analysis, analysis, numerical simulation and validation of flame acceleration, and DDT in hydrogen-air mixtures", *Combustion Science and Technology*, DOI: 10.1080/00102202.2020.1732363, 2020, pp. 1-24.
27. R. Khodadadi Azadboni, J. X. Wen, A. Heidari, S. P. R. Muppala and C. J. Wang, "Numerical modeling of deflagration to detonation transition in inhomogeneous hydrogen/air mixtures", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 49, 2017, pp. 722-730.
28. R. Khodadadi Azadboni, A. Heidari and J. X. Wen, "Numerical studies of flame acceleration and onset of detonation in homogenous and inhomogeneous mixture", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 64, 2020, pp. 104063

29. R. Soleimanpour and H. Nemati, "Numerical investigation of deflagration to detonation transition in closed ducts under various working conditions", *Acta Astronautica*, 162, 2019, pp. 109–120.
30. R. Khodadadi Azadboni, A. Heidari, L. R. Boeck and J. X. Wen, "The effect of concentration gradients on deflagration-to-detonation transition in a rectangular channel with and without obstructions a numerical study", *International Journal of Hydrogen Energy*, 43, 2019, pp. 7032-7040.
31. E. S. Oran, G. Chamberlain and A. Pekalski, "Mechanisms and occurrence of detonations in vapor cloud explosions", *Progress in Energy and Combustion Science*, 77, 2020, 100804, pp. 1-37.
32. G. B. Goodwin, R. W Houim and E. S. Oran, "Effect of decreasing blockage ratio on DDT in small channels with obstacles", *Combustion and Flame*, 173, 2019, pp. 16–26.
33. G. B. Goodwin, R. W Houim, E. S. Oran, "Shock transition to detonation in channels with obstacles", *Proceedings of the Combustion Institute*, 36, No. 2, 2017, pp. 2717–2724.
34. M. H. S. Saeid, J. Khadem and S. Emami, "Numerical investigation of the mechanism behind the deflagration to detonation transition in homogeneous and inhomogeneous mixtures of H₂-air in an obstructed channel", *International Journal of Hydrogen Energy*, 46, No. 41, 2021, pp. 21657-21671.
35. F. Eitner, K. G. Vollmer and T. Sattelmayer, "Numerical simulation of the deflagration-to-detonation transition in inhomogeneous mixtures", *Journal of Combustion*, Article ID 686347, 2014, pp. 1-15.
36. X. Chen, N. Zhao, X. Jia, S. Liu, H. Zheng and Z. Li, "Numerical investigation on detonation initiation using toroidal shock wave focusing", *Aerospace Science and Technology*, 92, 2019, pp. 300-313.
37. B. Olcucuoglu and B. H. Saracoglu, "preliminary heat transfer analysis of pulse detonation engines", *Transportation Research Procedia*, 29, 2018, pp. 279-288.
38. D. Veynante and L. Vervisch, "Turbulent combustion modeling", *Progress in Energy and Combustion Science*, 28, 2002, pp. 193-266.
39. H. G. Weller, G. Tabor, A. D. Gosman and C. Fureby, "Application of a flame-wrinkling LES combustion model to a turbulent mixing layer," *Proceeding of the Combustion Institute*, 27, 1998, pp. 899–907.
40. M. O. Conaire, H. J. Curran, J. M. Simmie, W. J. Pitz and C. K. Westbrook, "A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation", *International Journal of Chemical Kinetics*, 36, No. 11, 2004, pp. 603–622.
41. F. Ormano, J. Braun and B. H. Saracoglu, "Multi-stage nozzle-shape optimization for pulsed hydrogen–air detonation combustor", *Advances in Mechanical Engineering*, 9, No. 2, 2017, pp. 1-9.
42. E. F. Toro, M. Spruce and W. Speares, "Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver", *Shock Waves*, 4, No. 1, 1994, pp. 25–34.
43. F. Eitner and T. Sattelmayer, *Effiziente numerische Simulation des Deflagrations-Detonations- Ubergangs*, PhD thesis, Technical University of Munich, Department of Mechanical Engineering, 2013. (in German)
44. S. Emami and K. Mazaheri, "Numerical investigation of the effects of blockage ratio and obstruction geometry on flame acceleration and overpressure of gas explosion", *Journal of Fuel and Combustion*, 5, 2013, pp.1-24. (in Persian)
45. M. Kuznetsov, I. Matsukov, V. Alekseev, W. Breitung and S. Dorofeev, "Effect of boundary layer on flame acceleration and DDT", *Proceedings of 20th international colloquium on the dynamics of explosions and reactive systems (ICDERS)*, Montreal, Canada, 2005.
46. M. Kuznetsov, V. Alekseev, I. Matsukov and S. Dorofeev, "DDT in a smooth tube filled with a hydrogen–oxygen mixture", *Shock Waves*, 14, No. 3, 2005, pp. 205–215.
47. W. Han, Y. Gao and C. K. Law, "Flame acceleration and deflagration-to-detonation transition in micro- and macro-channels: An integrated mechanistic study", *Combustion Flame*, 176, 2017, pp. 285–298.
48. V. N. Gamezo, A. M. Khokhlov and E. S. Oran, "The influence of shock bifurcations on shock–flame interactions and DDT", *Combustion Flame*, 126, 2001, pp. 1810–1826.
49. V. N. Gamezo, T. Ogawa and E. S. Oran, "Flame acceleration and DDT in channels with obstacles: effect of obstacle spacing", *Combustion and Flame*, 155, 2008, pp. 302-315.

English abstract

Mechanisms governing the deflagration to detonation transition in inhomogeneous mixtures of H₂-air; A study on the effect of blockage ratio

Mohammad Hosein Shamsadin Saeid¹, Javad Khadem^{*2} and Sobhan Emami³

1- Department of Mechanical Engineering, University of Birjand, Birjand, Iran, m.h.shamsaddinsaeid@birjand.ac.ir

2- Department of Mechanical Engineering, University of Birjand, Birjand, Iran, jkhadem@birjand.ac.ir

3- Department of Mechanical Engineering, Najafabad Branch, Islamic Azad University, Najafabad, Iran, sobhan@pmc.iaun.ac.ir

*Corresponding author

(Received: 2021.04.28, Received in revised form: 2021.05.23, Accepted: 2021.05.29)

This paper aims to numerically investigate the effect of blockage ratio on the mechanisms governing the deflagration to detonation transition (DDT) in inhomogeneous mixtures of H₂-air. The study combustion chamber is a closed rectangular cross-section channel with obstacles that have been studied in three blockage ratios of 10, 30, and 60 percent and at different obstacle spacing. The present numerical simulation was performed using the SST-K- ω turbulence model and the combustion model of the Weller flame wrinkling and the HLLC method was used to shock-capturing. The results show that for the 10% blockage ratio, the onset of detonation occurred in the unobstructed part of the channel and for the blockage ratios of 30% and 60% DDT occurred in the obstructed section of the channel. The mechanisms governing the DDT process change as the blockage ratio and obstacle spacing change. The Mach reflection from the lower wall of the channel and the formation of the reactive Mach stem, the reflection of the Mach stem from the wall of the lower obstacles, and the reflection of incident shock from the wall of the upper obstacles are the most important governing mechanisms observed. The results also show that flame acceleration and the occurrence of DDT in the channel occur faster as the blockage ratio increases. The fastest onset of detonation occurred at the blockage ratio of 60% and the space to height ratio of $S/H = 2.5$.

Keywords: Deflagration-to-detonation transition, Inhomogeneous mixture, Reactive Mach stem, Blockage ratio