

## بررسی اثر زنجیره‌ی آغازی بر آغازش مستقیم تراک

سید عبدالمهدی هاشمی\* و مسعود افرند\*\*

دانشگاه کاشان، دانشکده مهندسی، گروه مهندسی مکانیک

(دریافت: ۱۳۸۷/۵/۱۵، پذیرش: ۱۳۸۷/۱۰/۵)

در این مقاله نقش مکانیزم واکنش احتراق بر آغازش مستقیم تراک به طور عددی مطالعه شده است. بدین منظور مکانیزم احتراق به کمک یک مدل سه مرحله‌ای مدل می‌شود که شامل زنجیره‌های آغازی، شاخه‌ای و پایانی است. در این تحقیق نقش زنجیره‌ی آغازی بر روی آغازش مستقیم تراک بررسی می‌شود. به منظور بررسی نقش مکانیزم، برای هر زنجیره یک زمان مشخصه ( $\tau$ ) تعریف می‌شود که دربرگیرنده اثر پارامترهای سینتیکی مختلف است. شبیه‌سازی عددی نشان می‌دهد که با افزایش زمان مشخصه‌ی زنجیره‌ی آغازی، انرژی بحرانی افزایش می‌یابد. برای بررسی تاثیر زنجیره‌ی آغازی در آغازش تراک نمودار رفتار فشار شوک برای زمان مشخصه‌های مختلف و همچنین انرژی‌های آغازش گوناگون رسم شده است. این نمودارها بیانگر این هستند که در  $\tau$ های کوچک‌تر، سینتیک نقش مهم‌تری را بر رفتار موج دارد. همچنین با افزایش انرژی آغازش، وابستگی مقدار حداقل فشار شوک در آغازش مستقیم به  $\tau$  کم می‌شود. رفتار موج در آغازش بحرانی برای  $\tau$ های بزرگ تقریباً مستقل از  $\tau$  است و رفتار موج طی آغازش برای یک  $E_0$  مشخص تقریباً بر هم منطبق است. رابطه انرژی آغازش بحرانی با  $\tau$  بستگی به مقدار  $\tau$  دارد. برای مقادیر کم  $\tau$  این رابطه نسبتاً خطی با شیب کم و برای مقادیر زیاد این رابطه مجدداً خطی با شیب بیش‌تری است.

**واژگان کلیدی:** زنجیره‌ی آغازی، زمان مشخصه واکنش، آغازش مستقیم، تراک، انرژی بحرانی

### مقدمه

در حالت کلی یک مخلوط قابل احتراق به دو گونه‌ی شعله (Deflagration) و تراک (Detonation) می‌تواند بسوزد. دفاگراژیشن یا شعله همان سوختن معمولی است که در آن موج احتراقی سرعتی زیر صوت دارد. گونه دیگر، تراک است که در آن سرعت موج احتراقی بیش از سرعت صوت است. به طور کلی تراک یک موج شوک قوی است که با گذشتن از یک محیط قابل احتراق آن را می‌سوزاند. انرژی ناشی از احتراق، شوک را تقویت کرده و مانع از میراشدن آن می‌شود. موج تراک در محیط‌های گازی با سرعتی حدود  $2000 \text{ m/s}$  حرکت کرده و نسبت فشاری حدود ۲۰ ایجاد می‌کند. نمونه این مشخصه‌ها در مقایسه با شعله معمولی که سرعتی حدود  $1 \text{ m/s}$  دارد تفاوت زیادی را نشان می‌دهد. قدرت موج شوک در تراک باید به قدری باشد که افزایش دمای پشت شوک بتواند موجب واکنش احتراق شود. مکانیزم این احتراق نیز باید به گونه‌ای باشد که بتواند موج شوک را تقویت کند، در غیر این صورت تراک از بین می‌رود.

اولین نظریه در مورد تراک توسط چاپمن (Chapman, ۱۸۹۹) و جوگت (Jouguet, ۱۹۰۵) ارائه و به نظریه CJ مشهور شد. این نظریه ترمودینامیکی با فرض اینکه موج تراک با سرعت ثابت حرکت می‌کند، خواص استاتیکی موج تراک (نظیر سرعت، فشار و ...) را محاسبه می‌کرد که مطابقت بسیار خوبی با نتایج تجربی داشت. خواص محاسبه شده با این نظریه به خواص CJ مشهور است. در این نظریه علاوه بر فرض پایا بودن، ضخامت موج تراک (ضخامت ناحیه واکنش) ناچیز فرض می‌شد. طبق این نظریه جریان در پایین دست موج نسبت به شوک صوتی است.

\* استادیار - نویسنده مخاطب (ایمیل: hashemi@kashanu.ac.ir)

\*\* کارشناس ارشد (ایمیل: masoud\_afrend@yahoo.com)

به طور کلی دو نوع آغاز تراک وجود دارد: آغاز آرام و آغاز مستقیم. در آغاز آرام، تراک با شتاب گرفتن شعله به وجود می‌آید. معمولاً نوع آرام ایجاد تراک را گذر از شعله به تراک (DDT) می‌گویند. در این حالت تراک از شتاب گرفتن یک شعله به وجود می‌آید. آشفستگی (توربولانس) و تاثیر متقابل امواج فشاری و شعله، مکانیزم‌های اصلی شتاب‌گیری شعله‌اند که وضعیت ویژه مورد نیاز برای ایجاد تراک را مهیا می‌کنند. معمولاً منبع اشتعال در فرایندهای DDT نقشی ندارد.

در مدل آغاز مستقیم، تراک به طور ناگهانی و از طریق یک موج انفجاری قوی اولیه تشکیل می‌شود. این موج انفجاری اولیه به طور ناگهانی و از طریق آزاد شدن سریع مقدار زیادی از انرژی در حجم کوچکی از مخلوط قابل احتراق به وجود می‌آید. منبع آغاز در روش آغاز انفجاری نقش مهمی در تولید یا عدم تولید تراک دارد. انرژی اولیه ( $E_0$ ) نه تنها باید قادر به ایجاد یک موج شوک قوی باشد، بلکه باید بتواند آن را در یک زمان معین، بالاتر از حداقل قدرت معلومی نگه دارد. بسته به مقدار ( $E_0$ ) سه رژیم مختلف در آغاز انفجاری وجود دارد. اگر انرژی اولیه ( $E_0$ ) کمتر از مقدار معینی از انرژی (حد بحرانی آغاز) باشد، موج انفجاری اولیه، به تدریج از جبهه‌ی واکنش جدا می‌شود. سپس آن اندازه قدرت آن کم می‌شود تا این که به موج صوتی تبدیل می‌شود و جبهه‌ی واکنش نیز به صورت یک شعله‌ی معمولی به حرکت خود ادامه می‌دهد. این فرایند رژیم زیر بحرانی نامیده می‌شود که طی آن تراک تشکیل نمی‌شود [۱]. اگر انرژی اولیه اشتعال بسیار بیش‌تر از مقدار بحرانی باشد، موج انفجار و جبهه‌ی واکنش طی فرایند آغاز به هم متصل‌اند. در این حالت قدرت موج انفجاری با گذشت زمان کاهش می‌یابد تا این که پس از مدتی موج به یک حالت پایا رسیده و با سرعت تقریباً ثابتی به حرکت خود ادامه می‌دهد. فرایند حرکت پایای موج تراک، حدوداً خواص CJ را دارد و به همین لحاظ تراک CJ نامیده می‌شود. جبهه‌های شوک و واکنش از ابتدا تا حالت پایای آن (تراک CJ) از یکدیگر جدا نمی‌شوند. این فرایند، رژیم فوق بحرانی نامیده می‌شود.

وقتی انرژی اولیه (آغاز) نزدیک مقدار بحرانی است، پدیده آغاز پیچیده‌تر است. در لحظات اولیه حرکت موج، جبهه‌های شوک و واکنش به هم متصل‌اند. هرچه شوک جلوتر می‌رود، قدرت آن ضعیف‌تر می‌شود و بین شوک و جبهه‌ی واکنش فاصله ایجاد می‌شود. اما برخلاف حالت زیر بحرانی فاصله گرفتن این دو ادامه ندارد و در سرعتی زیر سرعت CJ این دو در یک دوره زمانی با سرعت تقریباً ثابتی حرکت می‌کنند. طی این دوره، امواج فشاری ناشی از احتراق به سوی موج شوک فرستاده می‌شوند و آن را تقویت می‌کنند. این دوره از حرکت موج انفجاری، دوره‌ی شبه پایا نامیده می‌شود [۱]. رژیم شبه پایا با ظاهر شدن ناگهانی یک انفجار موضعی پایان می‌یابد. این انفجار در ناحیه‌ای از گازهای نسوخته، بین جبهه‌ی شوک و جبهه‌ی واکنش پدید می‌آید. در اثر این انفجار، موجی به وجود می‌آید که قدرت آن از قدرت CJ بیش‌تر است، و در نهایت با ضعیف شدن این موج پس از مدتی حالت پایا و تراک CJ پدید می‌آید. این فرایند، رژیم بحرانی نامیده می‌شود [۱].

اهمیت بحث آغاز تراک در آگاهی از نحوه‌ی رفتار موج تراک، کنترل آن، و ایجاد کردن یا میرا کردن آن است. ایجاد کردن یک موج تراک خوداتکا از نظر نظامی و برخی فرایندهای تولیدی ارزش فراوان داشته و جلوگیری از به وجود آمدن آن از لحاظ مباحث ایمنی حایز اهمیت است.

پدیده‌ی آغاز مستقیم یا انفجاری از حدود سال ۱۹۵۶ مورد بررسی قرار گرفته است. انرژی بحرانی لازم در تولید تراک یک معیار کمی است که با آزمایش برای مخلوط‌های مختلف سوخت به دست می‌آید. به همین دلیل در طول ۵۰ سال گذشته بررسی‌های زیادی برای اندازه‌گیری و ثبت این انرژی انجام شده است [۲]. بسیاری از محققان سعی کرده‌اند انرژی بحرانی را به برخی مشخصات طولی ساختار تراک، مثل اندازه سلول‌ها، قطر بحرانی لوله و غیره مربوط کنند [۳]. اولین کاری که در زمینه پیش‌گویی انرژی بحرانی انجام شد، تحقیقات زلدویچ و همکارانش بود [۱]. طبق این نظریه برای پیدایش یک آغاز موفق، وقتی شوک فاصله‌ای حداقل برابر با طول تاخیر واکنش را طی کرده باشد، سرعت آن نباید کم‌تر از یک مقدار مینیمم (یعنی سرعت CJ) باشد. آن‌ها معیاری را پیشنهاد کردند که مبنای بسیاری از نظریه‌های فعلی است. طبق این معیار، انرژی آغاز بحرانی با طول تاخیر اشتعال ( $\Delta$ ) متناسب است. برای تراک کرووی این معیار به صورت  $E_c \propto \Delta^3$  بیان می‌شود. در این معیار ثابت تناسب وجود ندارد، به همین دلیل تعیین این ثابت، موضوعی برای تحقیقات بعدی شده است.

در چند دهه‌ی اخیر استفاده از شبیه سازی عددی برای بررسی تراک گسترش زیادی یافته است. در شبیه سازی عددی نیاز به یک مدل سینتیکی برای شبیه سازی فرایند احتراق است. بسیاری از مطالعات برای مدل کردن فرایند احتراق از مدل سینتیکی ساده یک مرحله‌ای با نرخ واکنش آرنیوسی استفاده کرده‌اند. از آن جمله می‌توان از کارهای مظاهری [۱]، شارپ [۲] و اکت [۳] نام برد. مدل یک مرحله‌ای به دلیل سادگی کاربرد بسیار مناسب است اما معایبی دارد از جمله این که قادر به مدل کردن مستقل طول تاخیر نبوده و میرایی تراک را نیز شبیه سازی نمی‌کند. شرت و کوپرک [۴] از یک مدل سه مرحله‌ای (شامل مراحل آغازی، شاخه‌ای و پایانی) برای مطالعه‌ی پایداری تراک استفاده کردند. این مدل سه مرحله‌ای علاوه بر شباهت به یک مکانیزم واقعی، معایب ذکر شده برای مدل یک مرحله‌ای را نیز نداشت. از آنجا که در یک مکانیزم واکنش، زنجیره‌ی شاخه‌ای مهم‌ترین زنجیره است، شرت و کوپرک به مطالعه نقش این زنجیره روی پایداری تراک پرداختند.

لی و انجی نیز به مطالعه عددی نقش زنجیره‌ی شاخه‌ای بر آغازش مستقیم دتوئشن با استفاده از مدل سه مرحله‌ای پرداختند [۶]. آنها در این تحقیق با تغییر نرخ واکنش شاخه‌ای رژیم‌های مختلف بحرانی، زیر بحرانی و فوق بحرانی را شبیه سازی کردند و به این نتیجه رسیدند که مکانیزم سه مرحله‌ای مقدار دقیق‌تر و مناسب‌تری را نسبت به مکانیزم یک مرحله‌ای برای انرژی بحرانی ارائه می‌دهد. مظاهری و هاشمی با نشان دادن اهمیت نقش واکنش آغازی به مطالعه نقش این زنجیره بر پایداری تراک پرداختند [۵]. آنها با بررسی زمان مشخصه‌های واکنش‌های مختلف برای مکانیزم‌های واقعی در مخلوط‌هایی که تراک در آنها رفتارهای مختلفی دارد، نشان دادند که تفاوت عمده سینتیکی این مخلوط‌ها در زمان مشخصه‌ی واکنش آغازی است. این تحقیق هم‌چنین نشان می‌داد که تغییر نرخ واکنش آغازی اثری متفاوت نسبت به تغییر نرخ واکنش شاخه‌ای بر رفتار تراک دارد. با توجه به اثر زنجیره‌ی آغازی بر رفتار تراک، در این تحقیق نقش این زنجیره بر آغازش مستقیم تراک مطالعه می‌شود. بدین منظور در قسمت بعد ابتدا معادلات حاکم و جزییات مدل سینتیکی مورد استفاده و روند بی بعد سازی معادلات ارائه می‌شود. سپس روش حل عددی معادلات به اختصار توضیح داده می‌شود. در قسمت نتایج اثر واکنش آغازی با تغییر زمان مشخصه آن مطالعه می‌شود.

## معادلات حاکم

معادلات دینامیک گاز و سینتیک شیمیایی حاکم بر مسئله با در نظر گرفتن یک سری فرض‌های ساده کننده حل می‌شوند. اولین فرض، یک بعدی بودن تحلیل است. تراک واقعی ساختاری به شدت پیچیده و سه بعدی دارد. لذا در صورتی که هدف مدل سازی تراک واقعی باشد، تحلیل باید سه بعدی باشد. اما هدفی که در این جا دنبال می‌شود، مطالعه نقش سینتیک شیمیایی بر آغازش مستقیم تراک است، نه مدل سازی تراک سه بعدی. برای چنین هدفی، مناسب‌تر است که پارامترهای جانبی حتی‌الامکان ساده‌تر انتخاب شوند. هدف فعلی بررسی نقش سینتیک شیمیایی به طور خاص، و مستقل از بحث ابعاد است. ضمن این که مطالعه‌ی مذکور چنانچه به صورت دو یا سه بعدی صورت گیرد بسیار پیچیده و زمان‌بر خواهد شد و به همین دلیل منابع مختلف برای بررسی پارامترهای مختلف، تحلیل یک بعدی را برگزیده‌اند [۵].

دومین فرضی که در حل معادلات حاکم به کار می‌رود استفاده از معادله حالت گاز کامل برای مواد اولیه و محصولات است [۵]. چون دما و فشار در تراک‌های گازی واقعی در حدی است که فرض گاز کامل صادق است. بنابراین:

$$p = \rho RT \quad (1)$$

فرض سوم این است که در معادلات دینامیک گاز (معادلات ناویر استوکس) از جملات مربوط به نفوذ صرف نظر می‌شود. از نظر زمانی پدیده نفوذ بسیار کندتر از فرایندهای مطرح در تراک است. بنابر این معادلات واکنشی اولر برای حل مسئله در نظر گرفته می‌شوند.

شکل بی بعد معادلات حاکم در یک دستگاه مختصات ساکن و تخت به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial r} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}(\rho u^2 + p) &= 0 \\ \frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}[u(\rho e + p)] &= 0 \end{aligned} \quad (2)$$

که در آن پارامترهای  $\rho$ ،  $u$ ،  $p$  و  $e$  به ترتیب عبارت‌اند از چگالی سیال، سرعت، فشار و انرژی مخصوص کل. با فرض گاز ایدئال با ضریب گرمای ویژه ثابت  $\gamma$ ، انرژی مخصوص کل عبارت است از:

$$e = \frac{p}{\rho(\gamma - 1)} + \frac{u^2}{2} - q \quad (3)$$

که  $q$  انرژی شیمیایی آزاد شده است.

در بی بعد کردن معادلات از خواص جریان در محیط نسوخته استفاده شده است. یعنی دانسیته با  $\rho_0$ ، فشار با  $p_0$  و سرعت با سرعت صوت در جلو شوک  $C_0$  بدون بعد می‌شوند.

### مدل سینتیکی احتراق

یک واکنش احتراقی معمولی (مانند  $H_2 + O_2 \rightarrow H_2O$ ) از چندین واکنش مقدماتی با حضور گونه‌های میانی تشکیل شده است. به طور نمونه برای نمایش مکانیزم واکنش احتراق سوخت ساده‌ای نظیر هیدروژن حدود ۴۰ واکنش مقدماتی مورد نیاز است. برای احتراق سوخت‌های هیدروکربنی، حتی سوخت ساده‌ای همچون متان، تعداد واکنش‌های مقدماتی به مراتب از این رقم بیشتر است. در شبیه سازی فرایندهای احتراقی هر سوختی باید مکانیزم واکنش آن را به طور کامل یا حداقل کاهش یافته در نظر گرفت که این امر با توجه به تعداد زیاد واکنش‌های مقدماتی و تنوع آنها به لحاظ محاسباتی زمان قابل ملاحظه‌ای را می‌برد.

در مدل سازی تراک‌های گازی، علاوه بر معادلاتی که فرایندهای گازدینامیکی را مدل می‌کنند، معادلاتی نیز برای مدل سازی فرایند احتراق لازم است که به اصطلاح مدل واکنشی یا مدل سینتیکی خوانده می‌شود. مدل‌های سینتیکی که تا کنون ارائه شده‌اند، دو هدف متفاوت را دنبال کرده‌اند. برخی با هدف شبیه سازی تراک در یک مخلوط خاص، مدل واکنشی را برای شبیه سازی مکانیزم یک مخلوط خاص نظیر هیدروژن و هوا یا مخلوط‌های دیگر ارائه کرده‌اند. این دسته از مکانیزم کامل واکنش یا نوع کاهش یافته آن استفاده می‌کنند. دسته دیگر به دنبال مدل کردن کلی رفتار احتراق در موج تراک هستند که نمونه این دسته مدل یک مرحله‌ای و سه مرحله‌ای است [۱]. با توجه به استفاده از مدل سه مرحله‌ای در کارهای قبلی [۴-۶] و مزایای این مدل، همین مدل برای این تحقیق استفاده می‌شود. این سه مرحله، به صورت رابطه زیر نمایش داده می‌شوند [۴]:



در واکنش‌های بالا  $F$ ،  $Y$  و  $P$  به ترتیب، سوخت، رادیکال و محصولات واکنش‌اند.

### تعریف زمان‌های مشخصه

از آنجا که تعداد پارامترهای سینتیکی در مدل چهار مرحله‌ای زیاد است (تعداد ۷ پارامتر)، لازم است که با معرفی پارامترهای مناسب‌تر به صورت ترکیبی، از تعداد این پارامترها کاست. برای این منظور برای هر یک از واکنش‌ها یک زمان مشخصه تعریف می‌شود که بیانگر مرتبه زمانی آن واکنش است [۶].

زمان مشخصه برای واکنش آغازی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\tilde{\tau}_I \propto \left( \frac{I}{r_I} \right)_s = \left( \frac{I}{k_I f} \right)_s \approx \left( \frac{I}{k_I} \right)_s = \frac{e^{(Ea_I / RTs)}}{A_I} \quad (4)$$

علامت (~) بیانگر با بعد بودن این زمان مشخصه است. در رابطه بالا زیر نویس (s) نشان دهنده شرایط بلافاصله پس از شوک در ساختار ZND (شرایطی که واکنش آغازی در آن قرار دارد) است. زمان مشخصه برای واکنش شاخه‌ای به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\tilde{\tau}_b \propto \left( \frac{I}{r_b} \right)_s = \left( \frac{I}{k_b \rho f y} \right)_s \approx \left( \frac{I}{k_b \rho} \right)_s = \frac{e^{(Ea_b / RTs)}}{A_b \rho_s} \quad (5)$$

برای واکنش پایانی نیز زمان مشخصه به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\tilde{\tau}_C \propto \left( \frac{I}{r_C} \right)_s = \left( \frac{I}{k_C y} \right)_s \approx \left( \frac{I}{k_C} \right)_s = \frac{I}{A_C} \quad (6)$$

زمان مشخصه واکنش پایانی به عنوان معیار زمانی در بی بعد کردن متغیرهای زمانی استفاده می‌شود [۵]. لذا مقادیر بدون بعد هر یک از زمان‌های مشخصه عبارت خواهد بود از:

$$\tau_I = \frac{\tilde{\tau}_I}{\tilde{\tau}_C}, \quad \tau_b = \frac{\tilde{\tau}_b}{\tilde{\tau}_C}, \quad \tau_C = \frac{\tilde{\tau}_C}{\tilde{\tau}_C} = 1 \quad (7)$$

برای مکانیزم‌های واقعی تراک‌پذیر همواره  $\tau_b < 1$  و  $\tau_I \gg 1$ .

روابط بالا تناسب زمان‌های مشخصه هر یک از واکنش‌ها را با پارامترهای سینتیکی مربوط به آن واکنش نشان می‌داد. همان‌طور که انتظار می‌رود با کاهش نرخ هر یک از مراحل واکنش، زمان مشخصه آن مرحله افزایش می‌یابد.

### روش حل عددی

روش‌های عددی زیادی در چند دهه گذشته برای شبیه سازی دینامیک گازهای تراکم پذیر ارائه شده است. منابع متعددی به مقایسه این روش‌ها پرداخته‌اند که از آن جمله رساله دکترای بوریوکس است [۷]. وی پس از مقایسه چندین روش معتبر، روش PPM را به عنوان بهترین روش برای شبیه سازی تراک معرفی می‌کند. در این تحقیق نیز برای شبیه سازی جریان و حل معادلات اولر از روش PPM استفاده می‌شود که در زمره روش‌های مرتبه بالای روش کلی‌تر گدنف است [۸]. در این روش به جای استفاده از مقدار ثابت برای هر متغیر در طول یک سلول (روش کلاسیک گدنف) از پروفیل سهموی برای محاسبه متغیرها در هر سلول استفاده می‌شود.

تعقیب جبهه‌ی شوک در تحلیل ناپایداری تراک نقش اساسی دارد. برای تعقیب موقعیت لحظه‌ای تراک روش بقایی به کار می‌رود که اولین بار توسط چرن و کوللا ارائه شد [۹]. استفاده از شبکه‌های بسیار ریز در شبیه سازی امواج تراک ضروری است. برای انجام این کار روش برگر و کوللا [۱۰] در این تحقیق استفاده می‌شود. کد رایانه‌ای مورد استفاده در این تحقیق در بر دارنده ترکیبی از روش‌های بالاست. کد مزبور برای واکنش یک مرحله‌ای توسط مظاهری در سال ۱۹۹۷ تهیه و آزمون‌های متعددی برای بررسی قابلیت اعتماد کد انجام شده است [۱۱]. این کد برای مدل سه مرحله‌ای توسط هاشمی توسعه داده شد و پاسخ‌های به دست آمده از آن ارزیابی شد [۶].

عدم وابستگی به شبکه در هر سری از محاسبات کنترل شده و شبکه بهینه استفاده شده است. آزمون‌ها نشان می‌دهند که تعداد ۲۰ سلول درشت در واحد طول و گزینش ۱۰۰۰ سلول ریز در نزدیکی شوک (تعداد ۵ سلول ریز در هر سلول درشت) شبکه بهینه برای محاسبات خواهد بود. شبکه‌های ریزتر تغییرات جزئی در رفتار تراک ایجاد می‌کنند.

### بررسی اثر انرژی آغازش بر آغازش مستقیم تراک

موج انفجار اولیه توسط مدل موج انفجاری قوی ایدئال به عنوان شرایط اولیه آغازش مدل می‌شود که مظاهری [۱] و اکت [۳] نیز از آن استفاده کرده‌اند. برای امواج انفجاری قوی ایدئال، شرایط اولیه توسط حل تشابهی تیلور و سدف ارائه شده است [۱]. برای یک گاز کامل با نسبت گرمای ویژه ثابت  $\gamma$ ، داریم:

$$\left. \begin{aligned} u_s &= \frac{2}{\gamma+1} M_s, \quad p_s = \frac{2}{\gamma+1} M_s^2, \quad \rho_s = \frac{\gamma+1}{\gamma-1} \\ \frac{u}{u_s} &= f\left(\frac{r}{R_s}\right), \quad \frac{\rho}{\rho_s} = g\left(\frac{r}{R_s}\right), \quad \frac{p}{p_s} = h\left(\frac{r}{R_s}\right) \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

که در آن زیرنویس S مربوط به شرایط بلافاصله بعد از شوک است.  $M_s$  و  $R_s$  به ترتیب عدد ماخ شوک و شعاع شوک را مشخص می‌کنند. توزیع مکانی متغیرهای جریان پشت موج انفجاری (مثل سرعت  $u$ ، چگالی  $\rho$  و فشار  $p$ ) می‌توانند با حل توابع  $f$ ،  $g$  و  $h$  به دست آیند که در کتاب کوربینیکوف [۱۱]، چگونگی محاسبه آن بیان شده است. به علاوه، حل تشابهی برای امواج انفجاری قوی، رابطه زیر بین قدرت شوک ( $M_s$ )، شعاع شوک ( $R_s$ ) و انرژی آغازش بی‌بعد ( $E_0$  یا  $E_s$ )، به ترتیب بر واحد مساحت و بر واحد طول برای سه هندسه صفحه‌ای، استوانه‌ای و کروی را ارائه می‌کند:

$$E_s = \frac{\tilde{E}_s}{\tilde{p}_0 r_c^{j-1}} = \alpha_j \left(\frac{j+3}{2}\right)^2 \gamma M_s^2 R_s^{j+1} \quad (9)$$

که در آن  $\alpha_j$  ثابت انتگرال انرژی است. برای هندسه صفحه‌ای  $\alpha = 2.257$  است که توسط کوربینیکوف (۱۹۹۱) به دست آمده است. همچنین فشار اولیه مخلوط (دارای بُعد) است و زانندیس هندسی (برای صفحه‌ای ۰، برای استوانه‌ای ۱ و برای کروی ۲) است. با دانستن قدرت اولیه و موقعیت شوک، می‌توان انرژی آغازش را از این رابطه به دست آورد.

مقادیر انتخابی پارامترهای سینتیکی برای این بررسی عبارت‌اند از:  $A_c=1$ ،  $A_f=10^3$ ،  $A_b=16000$ ،  $E_b=15$ . برای تغییر زمان مشخصه واکنش آغازی انرژی فعال سازی واکنش آغازی ( $Ea$ ) تغییر داده می‌شود. مقادیر بدون بعد زمان‌های مشخصه با جاگذاری مقادیری که در طول محاسبات ثابت‌اند، از روابط ساده شده زیر به دست می‌آیند:

$$\tau_b = 0.033, \quad \tau_I = \frac{e^{Ea_I / 1.89}}{1000} \quad (10)$$

لازم به یادآوری است که در مطالعه لی و انجی اثر تغییر نرخ واکنش شاخه‌ای که موجب تغییر  $\tau_b$  می‌شود، مطالعه شده است. با افزایش  $\tau_b$  تراک از حالت پایدار تبدیل به ناپایدار (دارای رفتار نوسانی) شده و در نهایت میرا می‌شود. با توجه به این که در این مقاله هدف مطالعه اثر تغییرات  $\tau_I$  است، لذا مقدار کوچکی برای  $\tau_b$  انتخاب شد تا دامنه گسترده‌تری برای تغییرات مقادیر  $\tau_I$  فراهم باشد. افزایش مقادیر  $\tau_I$  تا جایی ادامه می‌یابد که تراک در مخلوط تشکیل نشود و به اصطلاح به مرز تراک‌پذیری (Detonability limit) مخلوط برسیم.

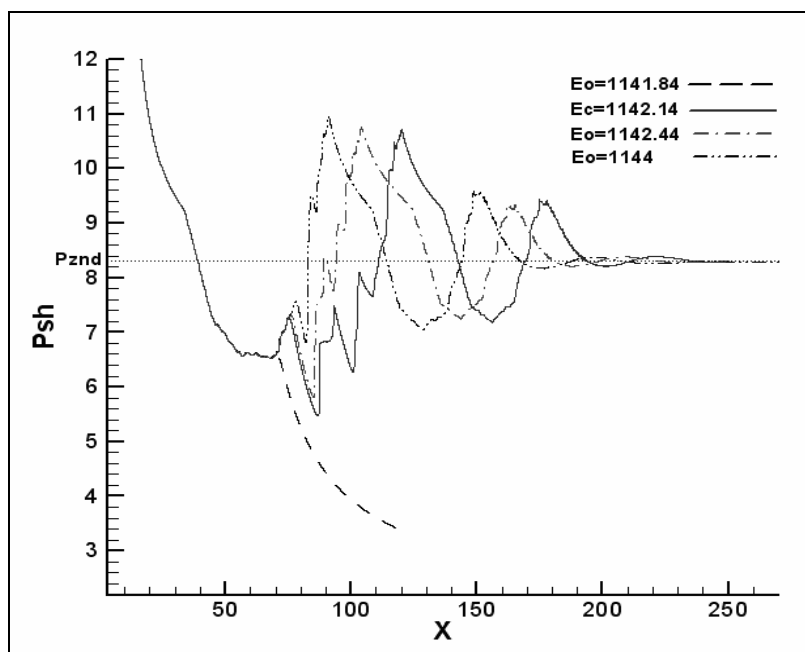
### بررسی اثر افزایش انرژی آغازش بر آغازش مستقیم برای $\tau_I = 6.13 \times 10^{10}$

در این بخش به بررسی اثر افزایش انرژی آغازش در یک  $\tau_I$  مشخص، پرداخته می‌شود. این انرژی در ابتدا به گونه‌ای در نظر گرفته می‌شود که تراک میرا شود سپس با افزایش تدریجی این انرژی به مرزی دست خواهیم یافت که تراک تشکیل شود. انرژی آغازش در این مرز همان انرژی آغازش بحرانی است.

نمودار (۱) نشان می‌دهد که در  $E_0=1141.84$  تراک میرا می‌شود. یعنی انرژی اولیه کمتر از حدی است که بتواند تراک را تشکیل دهد و رژیم زیربحرانی دیده می‌شود. با افزایش انرژی آغازش به  $E_0=1142.14$  مشاهده می‌شود که علی‌رغم نوسانات شدید و گرایش تراک به میرا شدن در نهایت تراک تشکیل می‌شود. در واقع این حد انرژی آغازش بحرانی است. با افزایش انرژی آغازش به  $E_0=1142.44$  مشاهده می‌شود که رفتار کلی تراک مانند حالت قبلی است با این تفاوت که بیشینه جهش ایجاد شده اندکی بیش از حالت قبل است و رفتار پایدار نیز کمی زودتر حاصل می‌شود. با ادامه روند افزایش انرژی آغازش از تمایل تراک به میرا شدن کاسته می‌شود.

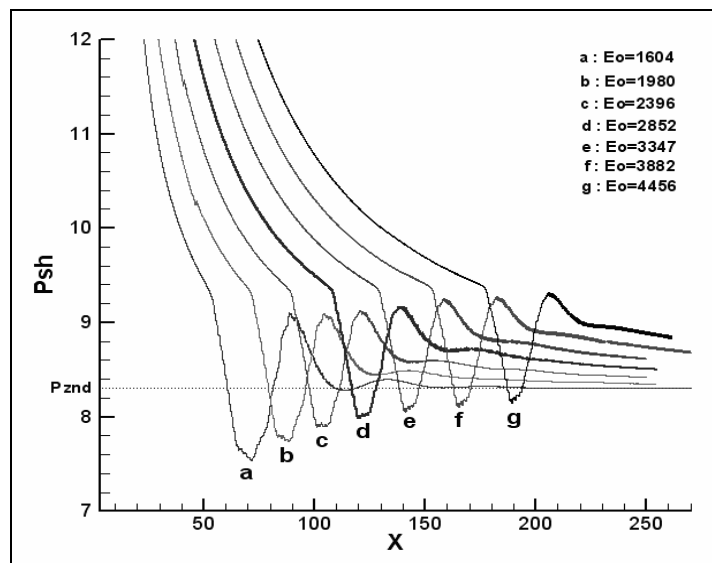
علت میرایی تراک در حالتی که انرژی آغازش کمتر از حد بحرانی است این است که نرخ واکنش در اثر افت فشار شوک به حدی کم می‌شود که انرژی ناشی از واکنش قادر به تقویت شوک نیست و میرایی تراک آغاز می‌شود. در این هنگام هیچ گونه موج فشاری از ناحیه واکنش به سمت شوک ارسال نمی‌شود و لذا افت فشار شوک همچنان ادامه می‌یابد. در پی کاهش فشار و دمای شوک نرخ واکنش نیز کاهش یافته و در نتیجه فاصله جبهه‌ی واکنش از شوک بیش‌تر می‌شود و این جدایش منجر به میرایی تراک می‌شود. علت تشکیل شدن تراک در حالتی که انرژی آغازش افزایش می‌یابد، این است که انرژی آغازش بزرگ‌تر فشار شوک بزرگ‌تری را طی مرحله آغازش ایجاد می‌کند. اگر واکنش احتراق نقش تقویت کننده موج شوک را داشته باشد، دما و فشار پشت شوک نباید از حدی کمتر باشد. زمانی که تراک میرا می‌شود فشار و دمای پشت شوک از این حد کمتر است.

این نتایج از برخی جهات دیگر نیز قابل توجه‌اند. لی و انجی در مطالعه آغازش تراک این نتیجه را ارائه دادند: "برای یک آغازش موفق، دمای پشت شوک در موج انفجار منبع آغازش، نباید تا حد دمای تقاطع (Cross over temperature) افت کند". دمای تقاطع دمایی است که در آن دما نرخ واکنش شاخه‌ای با نرخ واکنش پایانی برابر است. در واقع در این دما سرعت تولید و مصرف رادیکال‌ها یکی است و این امر جلوی انفجار زنجیره‌ای را که توسط زنجیره‌ی شاخه‌ای رخ می‌دهد، می‌گیرد و نرخ واکنش احتراق به شدت افت می‌کند. مقدار دمای تقاطع بدون بعد برای این قسمت برابر  $1/195$  به دست می‌آید که متناظر با فشار شوک  $4/2$  است. با توجه به شکل (۱) می‌توان دید که فشار شوک در موج انفجاری برای حالتی که آغازش صورت نمی‌گیرد در حدود  $6/5$  است که به مراتب از مقدار فوق بالاتر است. لذا معیار فوق لاقبل در تمام زمان مشخصه‌ها صادق نخواهد بود.



شکل ۱- اثر افزایش انرژی آغازش بر فشار شوک در نزدیکی حالت بحرانی ( $\tau_1=6.13 \times 10^{10}$ )

در شکل (۲) اثر افزایش انرژی آغازش بر فشار شوک بر حسب فاصله در آغازش مستقیم برای انرژی‌های بالاتر از حد بحرانی بررسی شده است. در این شکل مشاهده می‌شود که با افزایش انرژی آغازش حداقل فشار ایجاد شده در موج شوک طی فرایند آغازش، افزایش می‌یابد. همچنین این افت فشار اولیه در فاصله دورتری از مبدا اتفاق می‌افتد. علت این پدیده این است که عامل پیشروی موج شوک قبل از رسیدن به جهش اولیه انرژی آغازش است و هرچه این انرژی بیشتر باشد جهش اولیه آغازش در فاصله دورتری رخ می‌دهد و موج شوک فاصله بیشتری را با حمایت انرژی آغازش می‌پیماید. نکته قابل ذکر این است که نقش سینتیک پس از افت فشار اولیه ظاهر می‌شود. یعنی بعد از این که فشار تا زیر مقدار  $P_{znd}$  افت کرد، این سینتیک واکنش است که عامل افزایش فشار و رانش تراک است. در نتیجه اگر افت فشار اولیه به حدی باشد که نرخ واکنش را آن قدر کم کند که انرژی ناشی از احتراق قادر به تقویت شوک نباشد، تراک میرا می‌شود.



شکل ۲- اثر افزایش انرژی آغازش بر فشار شوک در انرژی‌های بیش از حالت بحرانی ( $\tau_1=6.13 \times 10^{10}$ )

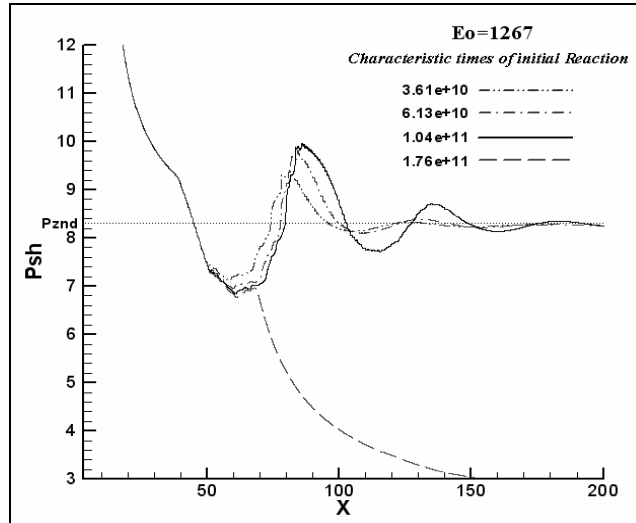
### بررسی اثر تغییر زمان مشخصه واکنش آغازی بر آغازش مستقیم تراک

در این بخش به بررسی اثر  $\tau_1$  بر آغازش مستقیم تراک پرداخته می‌شود. در شکل (۳) اثر افزایش زمان مشخصه واکنش آغازی بر آغازش مستقیم برای  $E_0=1267$  نشان داده شده است. این شکل نشان می‌دهد که با افزایش  $\tau_1$  دامنه نوسانات جبهه‌ی شوک طی آغازش بیشتر می‌شود و سرانجام در  $\tau_1=1.76 \times 10^{11}$  تراک میرا می‌شود. علت افزایش نوسانات با افزایش  $\tau_1$  نزدیک شدن بیشتر به رفتار آغازش بحرانی است که بر خلاف حالت فوق بحرانی، توام با نوسانات است.

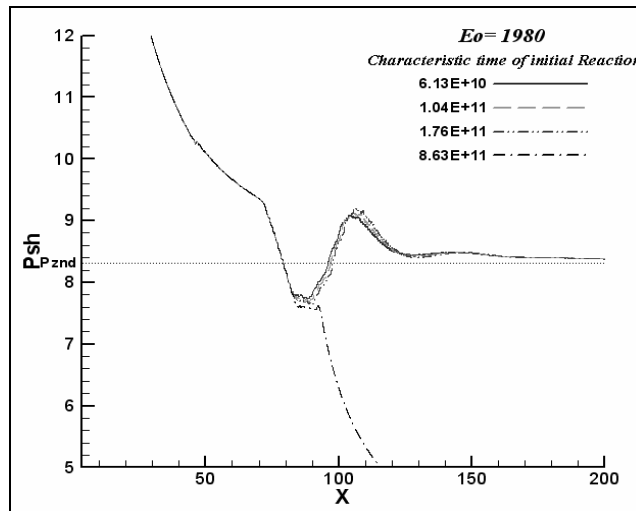
در شکل (۴) اثر افزایش زمان مشخصه واکنش آغازی برای انرژی آغازش بزرگ‌تر  $E_0=1980$  نشان داده شده است. همان‌طور که در این شکل دیده می‌شود تا قبل از میرایی تراک برای  $\tau_1=8.63 \times 10^{11}$  رفتار موج در مرحله‌ی آغازش برای  $\tau_1$ های مختلف تقریباً بر هم منطبق است. از مقایسه این شکل با شکل (۳) می‌توان نتیجه گرفت که اختلاف رفتار آغازش بحرانی برای زمان مشخصه‌های آغازی بزرگ‌تر، کم‌تر است. همچنین با مقایسه‌ای میان شکل‌های (۳) و (۴) مشاهده می‌شود که با  $E_0=1267$  میرایی تراک در  $\tau_1=1.76 \times 10^{11}$  رخ می‌دهد. در حالی که برای آغازش با  $E_0=1980$  میرایی تراک در  $\tau_1=8.63 \times 10^{11}$  رخ می‌دهد. شکل (۵) رفتار آغازش بحرانی را برای انرژی آغازش بزرگ‌تر  $E_0=4456$  نشان می‌دهد. در این شکل رفتار موج برای  $\tau_1$ های مختلف نسبت به دو حالت قبل انطباق بیشتری را نشان می‌دهد. لذا نتیجه به دست آمده مبنی بر انطباق رفتار موج در آغازش بحرانی در  $\tau_1$ های بزرگ تایید می‌شود.

با مقایسه شکل‌های (۳) تا (۵) با یکدیگر مشاهده می‌شود که با افزایش انرژی آغازش، تاثیر افزایش  $\tau_1$  بر نوسانات فشار شوک در مرحله آغازش و همچنین بر حداقل فشار شوک در مرحله‌ی آغازش ( $P_{min}$ ) کم می‌شود.

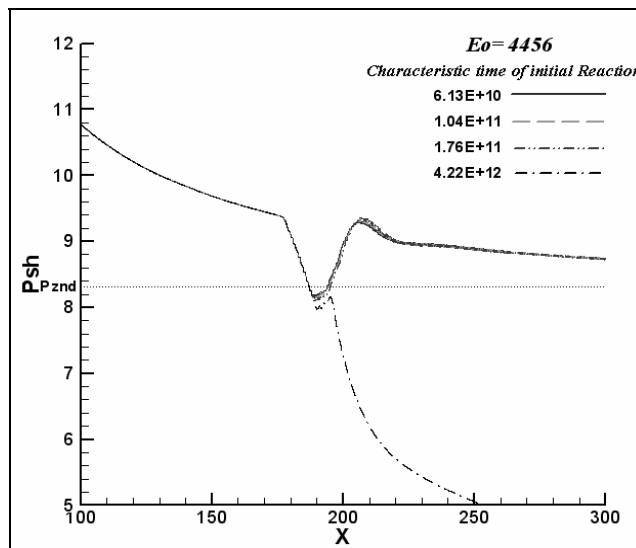




شکل ۳- اثر افزایش زمان مشخصه واکنش آغازی بر آغازش تراک ( $E_o=1267$ )



شکل ۴- اثر افزایش زمان مشخصه واکنش آغازی بر آغازش تراک ( $E_o=1980$ )



شکل ۵- اثر افزایش زمان مشخصه واکنش آغازی بر آغازش تراک ( $E_o=4456$ )

آن چه در بحث آغازش مستقیم تراک مهم است تشکیل یا میرایی تراک است. در همین راستا بررسی حداقل فشار شوک  $P_{min}$  از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است زیرا عامل میرایی تراک، دمای پایین جبهه‌ی واکنش احتراق (ناشی از افت فشار شوک) است که باعث می‌شود نرخ واکنش کاهش یابد. با بررسی حداقل فشار شوک در شکل (۳) برای انرژی آغازش  $E_0=1267$  مشاهده می‌شود که حداقل فشار شوک در منحنی مربوط به  $\tau_1=6.13 \times 10^{10}$  برابر 6.95 و برای  $\tau_1=1.76 \times 10^{11}$  برابر 6.78 است. بنابراین اختلاف بین این دو مقدار 0.17 است.

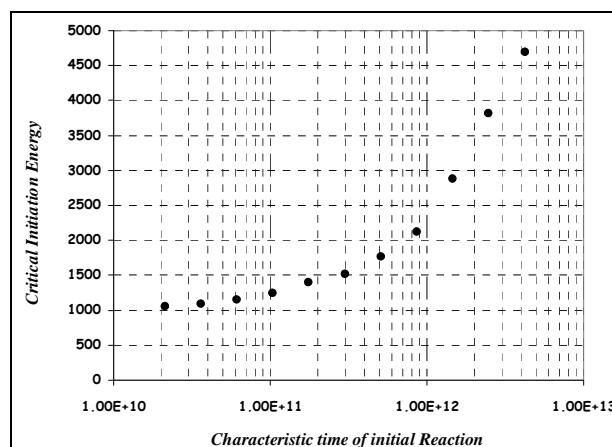
انجام بررسی بالا برای شکل (۴)، این بار برای انرژی آغازش بیش‌تر ( $E_0=1980$ )، نشان می‌دهد که حداقل فشار شوک در  $\tau_1=6.13 \times 10^{10}$  برابر 7.74 و برای  $\tau_1=1.76 \times 10^{11}$  برابر 7.66 است. اختلاف بین این دو مقدار 0.08 است. در بررسی شکل (۵) ( $E_0=4456$ ) اختلاف بین حداقل فشار شوک در دو منحنی با  $\tau_1=6.13 \times 10^{10}$  و  $\tau_1=1.76 \times 10^{11}$  برابر 0.05 است. لذا برای انرژی آغازش بیش‌تر اختلاف بین  $P_{min}$  برای دو زمان مشخصه مختلف کم‌تر است.

با توجه به مشاهدات و بررسی‌های بالا می‌توان به این نتیجه رسید که با افزایش انرژی آغازش، وابستگی مقدار حداقل فشار شوک به زمان مشخصه‌ی زنجیره‌ی آغازی کم می‌شود. این مطلب را به این گونه می‌توان توجیه کرد که با افزایش  $E_0$  قدرت شوک در مرحله‌ی آغازش از حداقل مورد نیاز برای فعال کردن واکنش آغازی بیش‌تر می‌شود. زمانی که قدرت از این حداقل فراتر رود، نقش زنجیره‌ی آغازی کم‌تر می‌شود. نکته دیگری که در شکل (۵) حائز اهمیت فراوان است این است که برای  $\tau_1=4.22 \times 10^{12}$  مقدار حداقل فشار شوک در مرحله‌ی آغازش ( $P_{min}$ ) تقریباً برابر  $P_{ZND}$  است. این بدان معناست که با افزایش  $\tau_1$  مقدار  $P_{min}$  افزایش می‌یابد به نحوی که عملاً آغازش بحرانی شکلی کاملاً مشابه آغازش بالا بحرانی به خود می‌گیرد.

در این جا مناسب است که مقایسه‌ای نیز بین نتایج این تحقیق با نتایج به دست آمده توسط لی و انجی در بررسی واکنش شاخه‌ای صورت گیرد. همان طور که ذکر شد در این تحقیق مقدار  $\tau_b$  کوچک و مقادیر بزرگی برای  $\tau_1$  در نظر گرفته شد. در حالی که در تحقیق لی و انجی مقدار  $\tau_1$  کوچک ( $\tau_1 \approx 8 \times 10^6$ ) در نظر گرفته شد تا گستره وسیع‌تری از  $\tau_b$  مورد مطالعه قرار گیرد. تفاوت اصلی در آغازش بحرانی در این دو تحقیق این است که مقدار افت فشار شوک در مرحله‌ی آغازش بحرانی در این تحقیق حدود ( $P_{min}/P_{ZND} \approx 0.8$ ) است که بیش‌تر از مقدار مربوط به تحقیق لی و انجی ( $P_{min}/P_{ZND} \approx 0.6$ ) است. لذا هر چه  $\tau_1$  بزرگ‌تر باشد، حساسیت تراک به قدرت شوک افزایش می‌یابد و برای آغازش بحرانی نیاز به دمای بالاتری (شوک قوی‌تری) در مرحله افت اولیه برای ایجاد تراک وجود دارد.

### روند تغییرات مقدار انرژی آغازش بحرانی در اثر تغییر زمان مشخصه‌ی واکنش آغازی

در این قسمت مقادیر انرژی آغازش بحرانی که برای زمان مشخصه‌های گوناگون به دست آمده است در شکل (۶) نشان داده شده است.



شکل ۶- نمودار تغییرات مقدار انرژی آغازش بحرانی در اثر تغییر زمان مشخصه‌ی واکنش آغازی ( $\tau_b = 0.033$ )

محور افقی این نمودار مقدار زمان مشخصه واکنش آغازی و محور عمودی مقدار انرژی آغازش بحرانی را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که با افزایش زمان مشخصه واکنش آغازی، انرژی آغازش بحرانی افزایش می‌یابد. این افزایش تا حدود  $\tau_1=10^{12}$  تدریجی و تقریباً خطی است. پس از آن این افزایش شدیدتر شده و مجدداً رفتاری خطی دارد. برای مقادیر بزرگ‌تر از  $\tau_1=5*10^{12}$  تراک در مخلوط تشکیل نمی‌شود و به مرز تراک‌پذیری رسیده‌ایم.

## نتیجه گیری

نتایجی که از بررسی اثر تغییر انرژی آغازش و زمان مشخصه زنجیره آغازی بر آغازش مستقیم تراک برای  $\tau_0=0.033$  می‌توان گرفت عبارت‌اند از:

- الف- با افزایش زمان مشخصه واکنش آغازی ( $\tau_1$ ) انرژی آغازش بحرانی افزایش می‌یابد.
- ب- برای  $\tau_1$ های بزرگ معیار شرت و کویرک برای رژیم زیر بحرانی آغازش صحیح نیست.
- ج- در یک  $E_0$  ثابت، با افزایش  $\tau_1$  مقدار  $P_{min}$  در مرحله افت فشار اولیه آغازش کاهش پیدا می‌کند. در حالتی که  $\tau_1$  کوچک‌تر است نرخ واکنش آغازی بیشتر بوده و پالس فشاری لازم برای تقویت موج شوک زودتر شکل می‌گیرد.
- د- برای انرژی آغازش بیشتر، اختلاف بین  $P_{min}$  برای دو زمان مشخصه مختلف کم‌تر است. بنابراین با افزایش انرژی آغازش، وابستگی مقدار حداقل فشار شوک به زمان مشخصه زنجیره آغازی کم می‌شود. در واقع با افزایش  $E_0$  قدرت شوک در مرحله آغازش از حداقل مورد نیاز برای فعال کردن واکنش آغازی بیش‌تر می‌شود. زمانی که قدرت از این حداقل فراتر رود، نقش زنجیره آغازی کم‌تر می‌شود.
- ه- رفتار موج در آغازش بحرانی برای  $\tau_1$ های بزرگ‌تر انطباق بیش‌تری نسبت به  $\tau_1$ های کوچک‌تر دارد.
- و- در  $\tau_1$ های بزرگ عملاً رژیم آغازش بحرانی و فوق بحرانی بر یکدیگر منطبق‌اند.
- ز- رابطه انرژی آغازش بحرانی با  $\tau_1$  بستگی به مقدار  $\tau_1$  دارد. برای مقادیر کم  $\tau_1$  این رابطه نسبتاً خطی با شیب کم و برای مقادیر زیاد این رابطه مجدداً خطی با شیب بیش‌تری است.

## مراجع

- Mazaheri, K., "Mechanism of the Onset of Detonation in Direct Initiation," PhD Thesis, Department of Mechanical Engineering, McGill University, Canada, 1997.
- Sharpe, G. j., and Falle, A. E. G., "One-Dimensional Numerical Simulation of Idealized Detonations," Proc. R. Soc. Lond. 455, pp. 1203-1214, 1999.
- Eckett, C. A., Quirk, J. J., and Shepherd, J. E., "The Role of Unsteadiness in Direct Initiation of Gaseous Detonation," J. Fluid Mech., 421, pp. 147-183, 2000.
- Short, M., and Quirk, J. J., "On the Nonlinear Stability and Detonability of a Detonation Wave for a Model Three-step Chain-branching Reaction," J. Fluid Mech., 339, pp. 89-119, 1997.
- Ng, H. D., and Lee, J. H. S., "Direct Initiation of Detonation with a Multi-Step Reaction Scheme," J. Fluid Mech., 476, pp. 179-211, 2002.
- Mazaheri, K., and Hashemi, S. A., "The Effect of Chain Initiation Reaction on the Stability of Gaseous Detonations," Combust. Sci. and Tech., 179, pp. 1701-1736, 2007.
- Bourlioux, A., "Numerical Studies of Unstable Detonations," PhD Thesis, Department of Applied and Computational Mathematics, Princeton University, U.S.A, 1991.
- Colella, P., and Woodward, P. R., "The Piecewise Parabolic Method (PPM) for Gas-dynamical Simulations," J. Comput. Phys., 54, pp. 174-201, 1984.
- Chern, I. L., and Colella, P., "A Conservative Front Tracking Method for Hyperbolic Conservation Laws," Lawrence Livermore National Laboratory, UCRL 97200, 1987.
- Berger, M. J., and Colella, P., "Local Adaptive Mesh Refinement for Shock Hydrodynamics," J. Comput. Phys., 82, pp. 64-84, 1989.
- Korobeinikov, V. P., Problems of Point-Blast Theory, American Institute of Physics, 1991.

## English Abstract

**Investigation of the Effect of Chain Initiation on Direct Initiation of Detonation****S. A. Hashemi and M. Afrand**

Mechanical Engineering Group, Faculty of Engineering, Kashan University

*In this paper, the role of reaction mechanism in direct initiation of detonation is studied numerically. The combustion mechanism is presented using a three-step kinetics model, which consists of chain initiation, chain branching and chain termination. In this research, the role of chain initiation on the blast initiation is studied. To investigate the role of chemical mechanism, a characteristic time ( $\tau$ ) is defined for each step, which contains the effect of various kinetics parameters. Numerical simulation shows that extending the initiation characteristic time ( $\tau_i$ ) causes an increase in the critical energy of direct initiation. To demonstrate the role of chain initiation on detonation initiation, shock pressure diagrams are presented for different values of  $\tau_i$ , and also for various initiation energies ( $E_0$ ). These diagrams show that for smaller  $\tau_i$ 's, kinetics has a more important effect than for larger values of  $\tau_i$ 's. Also, it is shown that by increasing the initiation energy, dependence of minimum value of the shock pressure on  $\tau_i$  is decreased. For large values of  $\tau_i$ 's, the behavior of the wave in the critical initiation is almost independent of  $\tau_i$ ; thus, detonation behavior for a given  $E_0$  nearly coincides with the respective  $\tau_i$ 's. The relationship between a  $\tau_i$  and  $E_0$  depends on the value of  $\tau_i$ . For small  $\tau_i$ , this relationship is linear with a small slope, whereas for large  $\tau_i$ , it is linear with a large slope.*

**Key Words:** Chain initiation, Characteristic time of reaction, Direct initiation, Detonation, Initiation energy