

Statistical simulation of flow of vibrationally pre-excited hydrogen in a shock tube

Kulikov S.V., Chervonnaya N.A., Ternovaya O.N

*Institute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, Moscow Region, 142432, 1, prosp. Akad. Semenova, Russia,
kuls@icp.ac.ru*

Abstract

The direct simulation Monte Carlo method was applied for numerical simulation of the problem of the shock wave front in vibrationally pre-excited H_2 , placed in the channel of low pressure (CLP) of the shock tube. It was assumed that the vibrational temperature of H_2 was 3000K. The cases of half-excited H_2 were considered. Gas pusher was also the equilibrium H_2 but at concentration by 50 times greater than H_2 in the CLP. Additionally, the intensity of the shock wave was varied by heating the gas pusher. It was shown that the wave slows down in time under rather weak transition of the previously stored vibrational energy into translational energy. It was not observed “the physical detonation” when the wave velocity begins to be determined by the transition of the vibrational energy into heat and does not depend on the conditions of its initiation.

Keywords: vibrational non-equilibrium, rotational relaxation, shock wave.

УДК 533.72, 519.245.

Статистическое моделирование течения предварительно колебательно-возбужденного водорода в ударной трубе

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

*Институт проблем химической физики РАН, Россия, Московская обл., г. Черноголовка,
142432, пр-т Академика Семенова, д.1
kuls@icp.ac.ru*

Аннотация

Метод Монте-Карло нестационарного статистического моделирования применён для численного моделирования задачи о фронте ударной волны в колебательно-возбужденном H_2 , помещённом в канал низкого давления (КНД) ударной трубы. Полагалось, что колебательная температура H_2 была 3000К. Рассматривались случаи частично (наполовину) возбуждённого H_2 . Газом толкателем также был равновесный H_2 , но с концентрацией в 50 раз большей чем H_2 в КНД. Дополнительно интенсивность ударной волны варьировалась путём подогрева газа толкателя. Показано, что при достаточно слабом переходе предварительно запасенной колебательной энергии в поступательную наблюдается замедление волны со временем. При этом не наблюдается “физическая детонация”, когда параметры волны начинают определяться переходом колебательной энергии в тепловую и не зависят от условий её инициирования.

Ключевые слова: колебательная неравновесность, вращательная релаксация, ударная волна.

1. Введение

Представляемая работа иницирована проблемой “физической детонации”, т.е. возможностью при определенных условиях вызывать детонацию за счёт выделения не химической, а физической энергии, сосредоточенная на внутренних степенях свободы, например, в колебательно-возбужденных молекулах. Колебательно-возбуждённый H_2 является наиболее подходящим газом для реализации “физической детонации” [1]. Ниже представлены результаты моделирования течения предварительно колебательно-возбужденного водорода в ударной трубе и изучено влияние выделяемой колебательной энергии на параметры потока.

2. Постановка задачи

В начальный момент канал низкого давления (КНД) ударной трубы заполнялся двумя равными частями H_2 . Одной частью является водород с начальной колебательной температурой 3000К. (Возбуждение до большей колебательной температуры приводит к заметной диссоциации водорода.) При этом вращательная и поступательная температуры были равны комнатной T_1 , которая конкретно задавалась равной 292К. Второй частью является полностью равновесный H_2 с T_1 . Иными словами полагалось, что при возбуждении водорода (например, электрическим разрядом) возбуждается половина H_2 . При этом, камера высокого давления (КВД) заполняется H_2 при гораздо более высоком давлении. После удаления диафрагмы начинается численное моделирование процесса в ударной трубе (УТ).

3. Методика моделирования

Моделирование было выполнено в одномерном пространстве координат и трехмерном пространстве скоростей. Применялся метод Монте-Карло нестационарного статистического моделирования (ММКНСМ) (или direct simulation Monte Carlo (DSMC) в англоязычной литературе), основоположником которого является Бёрд [2]. Основные детали моделирования ударной волны (УВ) в УТ приведены в [3]. Но для большей определенности изложения и удобства читателей алгоритм приведен ниже.

Моделируемая среда заменялась системой модельных частиц. В первый момент времени в соответствии с начальными условиями данные частицы имели заданные скорости и были распределены по ячейкам, на которые разбито исследуемое пространство координат. Полагалось, что столкновения парные и могут происходить с определенной вероятностью только между частицами, находящимися в одной ячейке.

Процесс эволюции рассматриваемой системы за интервал времени Δt расщепляется на два этапа: 1) только перемещение частиц с неизменными скоростями (этап А); 2) только изменение скоростей частиц в результате их столкновений (этап В).

Молекулы при столкновениях представлялись в виде жестких сфер.

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

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

Было проведено моделирование с простейшим учетом вращательных и колебательных степеней свободы молекул. Использовалась модель со стоком энергии (см. раздел 11.3 в [2]). Процедура данного учета довольно проста. Следует подчеркнуть, что при статистическом моделировании оперируют с кинетической температурой, как со средней энергией приходящей на соответствующие степени свободы молекулы. При равновесии по данным степеням свободы, эта температура равна соответствующей термодинамической. Каждый раз при переходе к этапу столкновений определялась полная (по всем поступательным степеням свободы) кинетическая поступательная температура (T) рассматриваемого сорта молекул в ячейке. Затем при каждом принятом после розыгрыша столкновении определялась разница (Δ_i) между T и температурой рассматриваемой внутренней степени свободы. Задавался параметр R_{ij} , (i – номер компонента, j равно 1 для вращательных степеней свободы и 2 – для колебательных). Затем данная внутренняя температура (и соответствующая внутренняя энергия) менялась на произведение $R_{ij} * \Delta_i$ в сторону приближения к T . Причем, считалось при определении равновесной внутренней энергии, что для вращательной и колебательной энергий теплоемкость молекулы равнялась k (k – постоянная Больцмана, в используемых при моделировании единицах $k = 0.5$) и $R_{i1} = 0.01$. Но, значение R_{i2} зависело от относительной скорости сталкивающихся частиц g . При $g < 3.726$ м/с $R_{i2} = 0$, при 3.726 м/с $\leq g < 9749$ м/с $R_{i2} = 0.00005$, при $g \geq 9749$ м/с $R_{i2} = 0.01$. Это сделано так, чтобы зависимость времени колебательной релаксации (τ_v) H_2 от температуры соответствовала реальности. Относительная скорость частиц после столкновения вычислялась с учётом закона сохранения энергии.

Полагалось, что $\Delta t = 0.04$. Здесь и далее t нормировано на λ_l / u , где λ_l – λ в КНД в начальный момент времени, а u – наиболее вероятная тепловая скорость частиц в газовой смеси перед ударной волной ($u = (2kT/m)^{0.5}$). Здесь m – масса молекулы водорода. Расстояние нормировано на λ_l . Первоначально в КНД $\Delta x = 0.15$. Размер КВД составлял 1198.8, а КНД – 2718.3. Диафрагма располагалась в точке $x = 0$. Число модельных частиц в ячейке задавалось 90.

Использовалось 274 процессора ЭВМ МВС15000М Межотраслевого суперкомпьютерного центра. Применялась блочная декомпозиция области моделирования [3,4]. При этом область моделирования разбивалась на ряд доменов, эволюция подсистемы в каждом из которых моделировалась только одним процессором. Каждый раз после проведения этапа перемещений информация о частицах, покидающих домены, в которых они находились в начале данного этапа, и переходящих в соседние, пересылалась туда с помощью процедур SEND и RECV библиотеки MPI [9]. Это дает возможность, увеличивая в принципе число процессоров вплоть до нескольких тысяч, увеличивать размер области моделирования, не увеличивая время счета при фиксированном времени эволюции системы, в силу обмена информацией только между соседними доменами. Время передачи этой информации практически не зависит от числа процессоров. Как показал предыдущий опыт [3,4], такая организация параллельных вычислений является, вероятно, наиболее разумной.

4. Проверка заложенной модели колебательной релаксации

Выше указывалось, что были подобраны параметры модели колебательной релаксации со стоком энергии, которые обеспечивали реальные τ_v для H_2 при различных температурах. Проверка проводилась следующим образом: В КНД моделировались условия, соответствующие T_I 1000К и 2000К, и задавались начальные колебательные температуры, равные 3000К при обеих T_I . Чтобы использовать одни коды во избежание дополнительных внесённых ошибок моделировалась произвольная УВ. До того времени, пока она не подходила близко к левому краю области моделирования, прослеживалось изменение колебательной температуры со временем T_v . Это позволяло получить τ_v из определяющей формулы:

$$dT_{v,v}/dt = (T_v - T_I) / \tau_v.$$

На рис.1 представлены полученные результаты. Как видно получено неплохое соответствие.

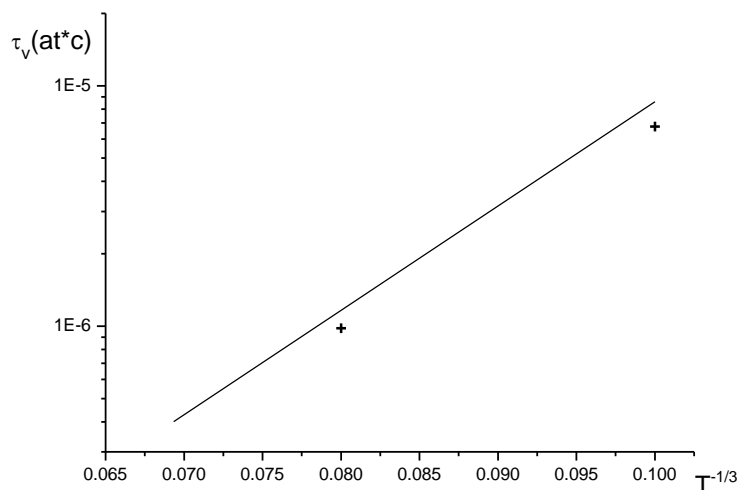


Рис. 1. Экспериментальная зависимость τ_v от температуры [5] (сплошная линия) и полученные результаты численного моделирования (крестики)

5. Результаты моделирования

Ранее была создана вычислительная программа моделирования УВ в УТ для газов. [3] Она позволяла в нашем случае проводить корректные расчёты при отношении давлений в КВД и КНД 50 без значительной её модернизации. В данном случае температуры как в КВД, так и в КНД полагались в начальный момент моделирования равными комнатной.

При таких условиях следует ожидать слабую ударную волну с довольно низкой поступательной температурой в пробке. При этом будет и малое изменение колебательной энергии (E_v) в пробке. Результаты моделирования, представленные на рис.2 и 3, это подтвердили. В данном случае и ниже для удобства читателя на рисунках показана вся пространственная область моделирования.

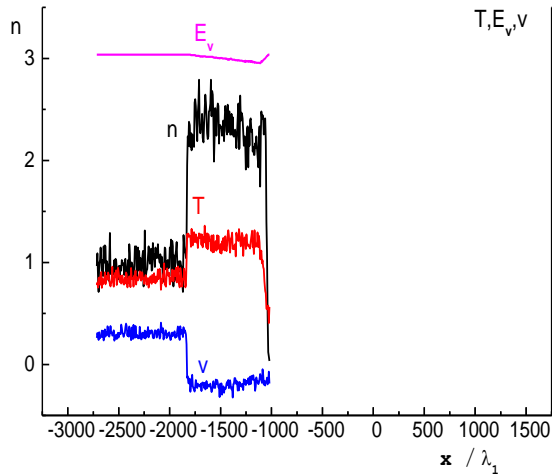


Рис. 2. Профили параметров колебательно-возбуждённого в КНД H_2

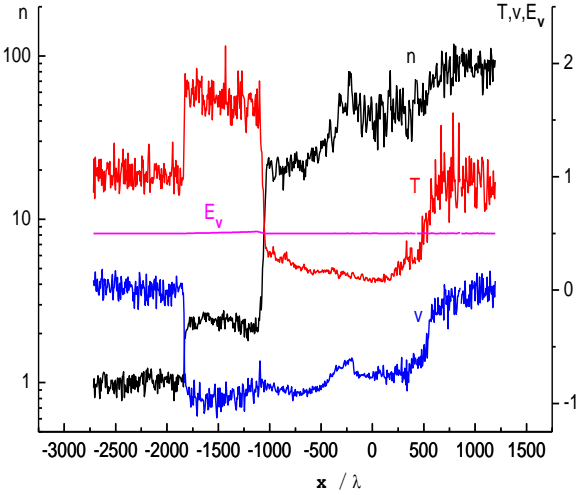


Рис. 3. Профили параметров колебательно-невозбуждённого в КНД H_2

Здесь приведены профили концентраций (n), полных кинетических температур (T), продольных скоростей (v) и E_v в момент времени моделирования 1060.5, когда УВ уже сформировалась и подошла к левому краю области моделирования. Здесь и ниже n нормирована на начальную n колебательно-возбуждённого в КНВ H_2 , T – на T_1 , v – на u и E_v при этом определяется выражением $E_v = k(T_v/T_1)$, где T_v – текущая колебательная температура. При принятой нормировке $k=0.5$ и начальная T_v H_2 в КНД равнялась 5.14. В данном случае, как видно, $T \approx 1.7$ в пробке, что в обычных величинах соответствует 500К. Естественно, что колебательная релаксация при таких температурах даже в пробке практически не идёт. Интересно отметить, что скорость волны $D = 1.730 \pm 0.015$ на начальной стадии её образования в промежутке времени 250 – 577. На конечной стадии моделирования $D = 1.623 \pm 0.015$ в промежутке времени 1060 – 1546. Как видно, УВ немного замедлилась.

Следует отметить, что графики на рис. 2–5 получены при выборке параметров потока через пространственные интервалы 6.12.

Для увеличения D необходимо поднять перепад давлений между КВД и КНД. Можно это сделать, увеличив плотность молекул в КВД. Последнее сопряжено с еще с большим уменьшением Δx в КВД и соответственным увеличением времени счёта и разумного числа процессоров. Более простой и экономный путь – это увеличение температуры газа в КВД при сохранении числа процессоров, незначительного изменения времени счёта и минимальной переделки вычислительной программы. Но следует отметить, что слишком сильное увеличение D может привести в пробке к чересчур высокой температуре и соответственно опять к малому изменению E_v .

Было проведено моделирование, когда в начальный момент в КВД помещался полностью равновесный H_2 , подогретый до температуры $T_k = 4$ (1170К). Результаты для двух различных времён моделирования представлены на рис. 4–7. Всё остальные параметры моделирования неизменны. Обозначения на рисунках такие же, как и выше.

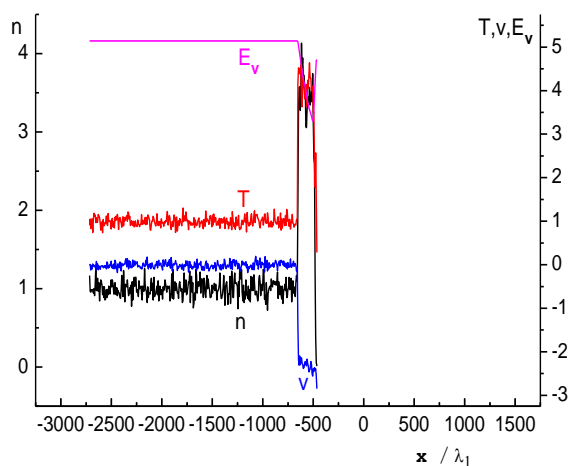


Рис. 4. Профили параметров колебательно-возбуждённого в КНД H_2 при нагревом в КВД H_2 , $T_k = 4$, $t = 202.8$

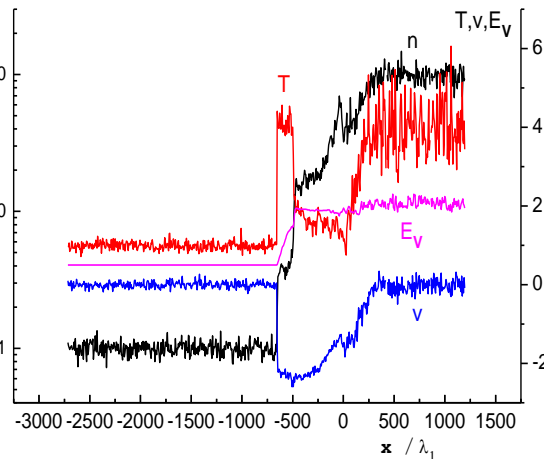


Рис.5. Профили параметров колебательно-невозбуждённого в КНД H_2 , но нагретого в КВД H_2 , $T_k = 4$, $t = 202.8$

Как видно, колебательная релаксация идёт в этом случае более интенсивно. Но в пробке наряду с уменьшением E_v , предварительно возбуждённого в КНД H_2 идёт рост E_v предварительно невозбуждённого в КНД H_2 . Это заметно уменьшает эффект перехода колебательной энергии в поступательную, что дополнительно свидетельствует о необходимости поиска оптимальной величины T в пробке. Следует отметить, что из-за колебательной релаксации параметры потока в пробке ведут себя немонотонно. Особенно это относится к T предварительно возбуждённого в КНД H_2 .

Интересно отметить, что скорость УВ, как и выше, падает по мере продвижения в КНД. Так $D = 3.370 \pm 0.4$ на начальной стадии её образования в промежутке времени 130–147. На конечной стадии моделирования $D = 2.52 \pm 0.4$ в промежутке времени 884–901. Это замедление УВ во втором случае более сильное. Оно, вероятно, обусловлено колебательной релаксацией в газе, т.к. во втором случае процесс колебательно – поступательного энергообмена более интенсивен.

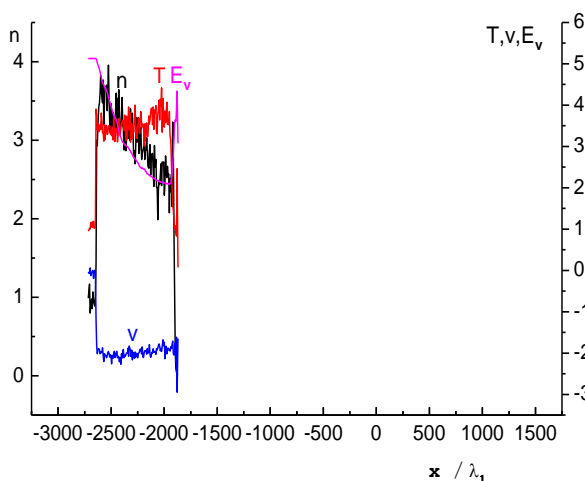


Рис. 6. Профили параметров колебательно-возбуждённого в КНД H_2 при нагревом в КВД H_2 , $T_k = 4$, $t = 884.2$

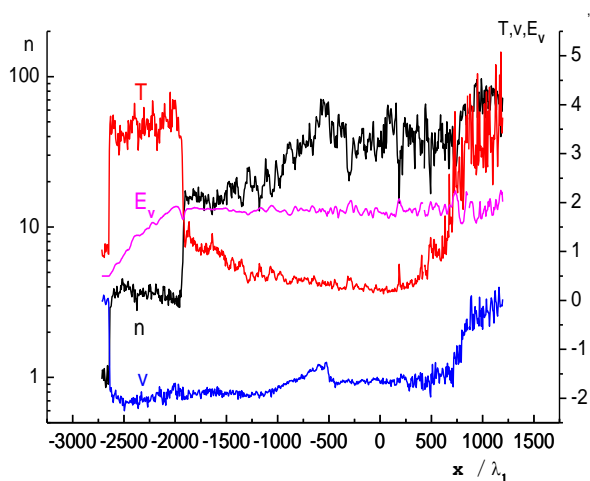


Рис. 7. Профили параметров колебательно-невозбуждённого в КНД H_2 , но нагретого в КВД H_2 , $T_k = 4$, $t = 884.2$

Как видно, ничего похожего на “физическую детонацию” не наблюдается. В рассмотренных примерах только малая часть первоначально запасённой колебательной энергии пе-

переходит на поступательные степени свободы. Значительная её часть идёт на возбуждение колебательных и вращательных степеней свободы первоначально равновесного H_2 и вращательных степеней свободы первоначально возбуждённого H_2 в КНД.

6. Заключение

Представленные результаты численного моделирования показывают, что в рассмотренных случаях только небольшая доля предварительно запасенной колебательной энергии переходит в энергию поступательного движения молекул. Поэтому и не проявляется “физическая детонация”. В дальнейшей работе следует подобрать условия, когда эта доля энергии увеличится, и возможно реализуется “физическая детонация”.

Литература

1. Евтюхин Н.В., Марголин А.Д., Шмелёв В.М. Взаимодействие ударных волн с колебательно-возбуждённым газом. // Хим. Физика. 1985.Т. 4. № 9. С. 1276–1280.
2. Берд Г., Молекулярная газовая динамика. Мир. Москва. 1981. 319 с. [Bird G.A. Molecular gas dynamics. Clarendon Press. Oxford. 1976].
3. Куликов С.В. Нестационарное статистическое моделирование процессов в ударных трубах для газов с учетом внутренних степеней свободы молекул // Хим. Физика. 2008. Т. 27. №12. С. 40–45.
4. Куликов С.В., Терновая О.Н. Статистическое моделирование процесса образования ударной волны в ударной трубе на многопроцессорном компьютере // Вычисл. методы и программ., 2004. Т. 5. № 2. С. 5–9.
5. Kiefer J.H., Lutz R.J. Vibrational relaxation of hydrogen // J.Chem. Phys. 1966. V.44. P.668.

Статья поступила в редакцию 3 ноября 2015 г.