

## Эффект пульсаций при выталкивании тела из рабочей области при наличии энерговыделения

*Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского  
«Харьковский авиационный институт»*

Методом событийного моделирования изучен процесс взаимодействия газа, в котором происходят экзотермические реакции, и подвижного тела. Простейшее локальное представление химических реакций заключается в рассмотрении двух основных параметров: энергетического барьера и относительного выделения энергии. При некоторых соотношениях между этими параметрами возможно появление детонационной волны. При высоких плотностях скорость её распространения зависит от степени заполнения рабочей области модельным веществом. Подтверждено совпадение скорости фронта и местной скорости звука. Обнаружено появление пульсаций давления, сопровождающих процесс выталкивания подвижного тела, которые связаны с распространением отражённых волн.

**Ключевые слова:** твердые диски, событийное моделирование, энергетический барьер.

### Введение

Рассматривается детонация как гидродинамический волновой процесс распространения по веществу зоны экзотермической реакции со сверхзвуковой скоростью. Детонационная волна представляет собой самоподдерживающийся ударный разрыв, за фронтом которого непрерывно инициируется химическая реакция вследствие нагрева при адиабатическом сжатии [1 – 3]. Детонация имеет огромное практическое значение для различных областей техники. В некоторых случаях детонация является позитивным процессом (взрывы в горнодобывающей промышленности, использование взрывчатых веществ в военном деле), в некоторых – негативным (детонация в двигателях внутреннего сгорания). Теоретические исследования основываются, как правило, на использовании уравнений химической кинетики в совокупности с уравнениями газовой динамики. Основная трудность при использовании стандартного подхода – наличие большого количества «коэффициентов незнания».

В данной работе предпринята попытка имитационного моделирования химических процессов, приводящих к детонации, основанная на принципах молекулярно-кинетической теории. Намеренно введены упрощения для выделения существенных параметров. Одной из целей является получение оценок давления на преграду.

В нормальном состоянии скорости молекул модельного газа в трёхмерном случае подчиняются закону распределения Максвелла (в двумерном случае – закону распределения Рэлея). Вероятность того, что какая-то молекула приобретёт скорость, достаточную для преодоления энергетического барьера при столкновении с другой молекулой, – очень мала. Эта вероятность повышается при увеличении количества столкновений в единицу времени, которое, в свою очередь, прямо пропорционально давлению (при постоянной температуре). При столкновении с преодолением барьера продукты реакции обретают скорость, превышающую исходную тепловую (для экзотермических реакций). Местное повышение температуры перераспределяется между окружающими молекулами. Скорость расширения зоны выделения тепла зависит от скоростей продуктов

реакции, т. е. от величины энергии, выделяющейся при столкновении. Если эта скорость меньше скорости распространения малых возмущений (т. е. скорости звука), то энергия успевает рассеяться из области тепловыделения и реакция может прекратиться, а может и продолжаться в виде обычного горения.

Детонация начинается при условии, что скорость расширения области реакции достигает скорости распространения звука в области протекания реакции. Этот тезис формулируется как условие Чепмена – Жуге.

Имитационное моделирование возникновения и протекания детонационного процесса позволяет установить как общие закономерности, так и конкретные соотношения между параметрами реакции.

### 1 Локальное взаимодействие модельных частиц

Рассмотрим имитацию взаимодействия молекул вещества путём использования метода упругих сфер [4 – 8]. Пусть центр первой модельной сферы задан вектором  $\vec{r}_1$ , скорость – вектором  $\vec{v}_1$ , масса первой из частиц и её радиус обозначены как  $m_1$  и  $R_1$ , импульс  $\vec{p}_1 = m_1 \vec{v}_1$ . Аналогичные параметры второй из частиц обозначены как  $\vec{r}_2$ ,  $\vec{v}_2$ ,  $m_2$ ,  $R_2$  и  $\vec{p}_2$ . В момент соударения скалярное произведение  $(\Delta\vec{v}, \vec{n})$  отрицательно. Здесь  $\Delta\vec{v} = \vec{v}_2 - \vec{v}_1$ ,  $\vec{n} = \frac{\vec{r}_2 - \vec{r}_1}{R_1 + R_2}$ .

Обозначим приведенную массу двух частиц как  $M = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ . Согласно законам сохранения суммарных импульса и момента импульса обе частицы после столкновения обмениваются переданными импульсами  $\Delta\vec{p} = \lambda \vec{n}$ :

$$\begin{aligned} \vec{p}'_1 &= \vec{p}_1 + \Delta\vec{p}; \\ \vec{p}'_2 &= \vec{p}_2 - \Delta\vec{p}. \end{aligned} \quad (1)$$

Предположим, что в результате столкновения выделяется энергия  $\varepsilon$ :

$$\frac{(\vec{p}'_1)^2}{2m_1} + \frac{(\vec{p}'_2)^2}{2m_2} = \frac{(\vec{p}_1)^2}{2m_1} + \frac{(\vec{p}_2)^2}{2m_2} + \varepsilon.$$

Воспользовавшись формулами (1), вычислим множитель  $\lambda$  и новые скорости частиц:

$$\begin{aligned} \vec{v}'_1 &= \vec{v}_1 + \frac{\lambda}{m_1} \vec{n}; \\ \vec{v}'_2 &= \vec{v}_2 - \frac{\lambda}{m_2} \vec{n} \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\lambda = M \left( (\Delta\vec{v}, \vec{n}) - \sqrt{D} \right)$ ,  $D = (\Delta\vec{v}, \vec{n})^2 + \frac{2\varepsilon}{M}$ .

Если  $\varepsilon = 0$ , то  $\lambda = 2M(\Delta\vec{v}, \vec{n})$  и формулы преобразования скоростей соответствуют упругому столкновению:

$$\begin{aligned}\vec{v}'_1 &= \vec{v}_1 + \frac{2M(\Delta\vec{v}, \vec{n})}{m_1} \vec{n}; \\ \vec{v}'_2 &= \vec{v}_2 - \frac{2M(\Delta\vec{v}, \vec{n})}{m_2} \vec{n}.\end{aligned}\quad (3)$$

Если энергия столкновения частиц в системе центра инерции меньше энергетического барьера  $\varepsilon_{lim}$ , то выделения (или поглощения) энергии при взаимодействии не происходит. Это связано с тем, что подкоренное выражение

$D = (\Delta\vec{v}, \vec{n})^2 - \frac{2\varepsilon_{lim}}{M}$  является отрицательным. Итак, если  $\frac{M(\Delta\vec{v}, \vec{n})^2}{2} > \varepsilon_{lim}$ , то новые скорости вычисляются по формулам (2), а в противном случае – по формулам (3).

Процесс преобразования структуры взаимодействующих атомов и молекул реальных веществ исключительно сложен и теоретически может быть описан лишь методами квантовой механики.

## 2 Упрощённое описание протекания химических реакций

В результате взаимодействия реальных молекул могут появиться новые молекулы с новыми значениями основных энергетических параметров  $\varepsilon_{lim}$  и  $\varepsilon$ . Может также произойти перераспределение масс молекул, вплоть до появления новых видов и исчезновения исходных. Например, процесс преобразования стехиометрической смеси водорода и кислорода в воду содержит 44 возможных канала реакций, среди которых имеются как экзотермические ( $\varepsilon > 0$ ), так и эндотермические ( $\varepsilon < 0$ ) с самыми различными порогами  $\varepsilon_{lim}$ . Усреднённое описание заключается в следующем.

1. Массы всех частиц и средние тепловые скорости в нормальных условиях принимаются равными единице, при этом  $M = \frac{1}{2}$ . После установления теплового равновесия средняя кинетическая энергия  $\bar{\varepsilon}$  принимает значение 0,5. Параметры  $\varepsilon_{lim}$  и  $\varepsilon$  заданы как отношения к средней тепловой энергии.

2. Начальная смесь содержит вещества двух типов. Каждая пара молекул первого типа может взаимодействовать с выделением энергии, переходя в новое состояние – невзаимодействия. Молекулы второго типа представляют собой наполнитель, не принимающий участия в реакциях.

3. При тех температурах, которые развиваются во фронте детонационной волны, энергия связи между молекулами становится несущественной по сравнению с тепловой. Поэтому предлагается детонацию в твёрдых веществах рассматривать как детонацию в сильно сжатом газе. Давление, которое входит в уравнение газового состояния, должно вычисляться с учетом поправок. В работе [7] приведены результаты численных экспериментов с модельным газом упругих сфер (рисунок 1). По оси аргументов отложены значения степени заполнения: в

трёхмерном случае  $\eta = V_0/V$ , где  $V$  – общий объём газа,  $V_0$  – объём, занимаемый модельными сферами (рисунок 1, а); в двумерном  $\eta = S_0/S$ , где  $S$  – общая площадь,  $S_0$  – площадь, занимаемая модельными дисками (рисунок 1, б).

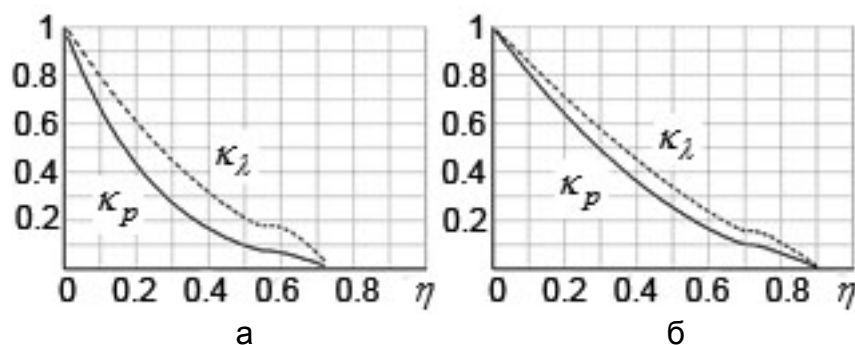


Рисунок 1 – Зависимости поправочных коэффициентов  $\kappa_p = \frac{P_0}{P}$  и  $\kappa_\lambda = \frac{l}{l_0}$  от степени заполнения в случае трёхмерного (а) и двумерного (б) пространств

Переход к стандартной форме изотерм осуществляется так:

$$P = \frac{P_0}{\kappa_p(\eta)}, \quad (4)$$

где  $P_0$  – давление в достаточно разреженном газе.

Коэффициенты  $\kappa_\lambda$  позволяют вносить поправки при определении длины свободного пробега.

Имитация возникновения и распространения звуковой волны заключается в искусственном придании части модельных частиц скоростей в выбранном направлении. При этом суммарная энергия остаётся прежней. Внесенное возмущение распространяется в виде одиночной волны. Это позволяет вычислить скорость звука, зависящую, как выяснилось, от степени заполнения точно так же, как и давление:

$$v_{sound} = \frac{v_0}{\kappa_p(\eta)}, \quad (5)$$

где  $v_0$  – скорость звука в разреженном газе.

Инициализация самоподдерживающихся реакций также реализуется путём внешнего воздействия. В частности, некоторой части модельных частиц в начальный момент времени приписывалась скорость, близкая к скорости, достаточной для преодоления энергетического барьера  $\varepsilon_{lim}$ :  $v_{start} \approx 2\sqrt{\varepsilon_{lim}}$ . Физически это эквивалентно механическому удару либо местному высокоскоростному нагреву.

### 3 Описание расчётной схемы в двумерном случае

Прямоугольная рабочая область представлена объединением единичных квадратов в количестве  $n_x \times n_y$ . В начальном состоянии в центре каждой ячейки возникающей сетки помещён центр модельной сферы радиусом  $R < 0,5$  и единичной массы. Степень заполнения  $\eta = \pi R^2$ ; её максимальное значение составляет 0,74, что соответствует границе фаз жидкость – твердое вещество (см. рисунок 1,б); начальные скорости приняты равными единице; угловое распределение – равномерное.

Таким образом, начальное состояние представлено в виде коллектива  $n = n_x n_y$  модельных сфер радиусов  $R$ . После этого всем частицам предоставляется возможность свободного перемещения.

В среднем после 10 столкновений каждой сферы, распределение скоростей с высочайшей точностью совпадет с распределением Рэлея (или Максвелла в трёхмерном варианте) [4]. Этот этап расчётов имеет название максвеллизации [9, 10]; при  $n = 500000$  потребуется порядка 30 секунд реального времени работы стандартного компьютера.

Дальнейшие вычисления относятся к слоям ячеек при их фиксированном расположении относительно оси OX. Вычисляются следующие величины: масса  $M_i$  частиц в слое с номером  $i$ ,  $i = 1..n_x$ ; количество частиц в слое  $N_i$ , суммарный импульс  $\vec{p}_i$ , энергия  $E_i$ . Полученные параметры позволяют

определить кинетическую энергию  $K_i = \frac{\vec{p}_i^2}{2M_i}$ , тепловую энергию в слое

$Q_i = E_i - K_i$ , плотность  $\nu_i = \frac{M_i}{N_i}$ , суммарную скорость слоя  $\vec{v}_i = \frac{\vec{p}_i}{m_i}$ , степень

заполнения  $\eta_i = \frac{N_i}{n_y} \pi R^2$ .

Дополнительно для найденной степени заполненности путём интерполирования вычисляется параметр поправки  $\kappa_i(\eta_i)$  к давлению  $P_i$  и местной скорости звука  $v_{sound,i}$  (4), (5). После этапа максвеллизации кинетическая энергия газа равна нулю, тепловая – совпадает со всей внутренней энергией и на одну модельную частицу приходится тепловая энергия  $q_0 = \frac{1}{2}$ . В

выбранной системе единиц температура также составляет  $\frac{1}{2}$  (в трёхмерном случае –  $\frac{1}{3}$ ). Согласно уравнению газового состояния для разреженного газа

$P = nT$  на одну частицу приходится давление, равное  $\frac{1}{2}$  ( $\frac{1}{3}$  – в трёхмерном случае).

Поскольку давление пропорционально тепловой скорости, то  $P_i = \sqrt{\frac{Q_i n_y}{Q_0 n_i} \frac{P_0}{\kappa_i}}$ ; величины  $P_0$ ,  $Q_0$  можно численно оценить после проведения этапа максвеллизации по всей рабочей области. Теоретические значения этих величин в двумерном случае составляют  $\frac{1}{2}$ , в трёхмерном –  $\frac{1}{3}$ .

#### 4 Динамика выталкивания подвижного массивного тела в результате воздействия детонационной волны

Рассматривается двумерная рабочая область, в которую помещено тело массой  $m_t$ , обладающее нулевой начальной скоростью. Расчётная сетка содержит 1000 ячеек по оси  $OX$  и порядка 200 – 500 по вертикальной оси. Часть области от стенки тела до левой стенки области заполнена модельным газом. После установления молекулярного хаоса [9, 10], что соответствует одному-двум миллионам событий-столкновений, производится учёт воздействия модельных молекул на стенку тела. При столкновении модельной частицы массой  $m$  с телом составляющая скорости частицы  $v_x$  и скорость тела  $V$  в направлении оси движения  $OX$  изменяются по такому закону:

$$v'_x = (2m_t V + (m - m_t)v_x) / (m + m_t);$$

$$V' = (2m v_x - (m - m_t)V) / (m + m_t).$$

Затем в начале рабочей области инициируется «поджиг» массы модельного газа путём придания модельным частицам в нескольких начальных слоях сетки дополнительной скорости (направление безразлично). Это приводит к возникновению детонационной волны, которая начинает распространяться от левого края рабочей области. Для каждого вертикального слоя сетки подсчитываются суммарные масса, импульс и полная энергия  $E$ . После этого вычисляются кинетическая энергия слоя  $K$  и внутренняя энергия  $Q = E - K$ , совпадающая для одноатомного газа с тепловой, что позволяет оценить температуру в слое. Ввиду недостаточности объёма выборки приходится в общем графике проводить сглаживание для устранения осцилляций. Фронт волны перемещается в сторону тела. По достижении стенки тела происходит, во-первых, придание телу ускорения, во-вторых – отражение фронта волны. В дальнейшем отражённая волна, распространяющаяся в газе без источников химических реакций, отражается от левой стенки рабочей области. Таким образом, обнаруживается система волновых явлений, сопровождающих выталкивание тела из рабочей области. Несколько фаз процесса изображено на рисунке 2. График полной энергии изображён сплошной линией, график  $K$  отмечен заполненными кружками, график  $Q$  – пустыми кружками.

На рисунке 2 показанно кадрово показаны следующие фазы процесса выталкивания: 1 – движение фронта детонационной волны вправо; 2 – момент столкновения фронта со стенкой тела; 3 – 6 – движение отражённой волны влево; 7 – отражение от неподвижной стенки; 8 – 10 – движение дважды отражённой волны вправо.

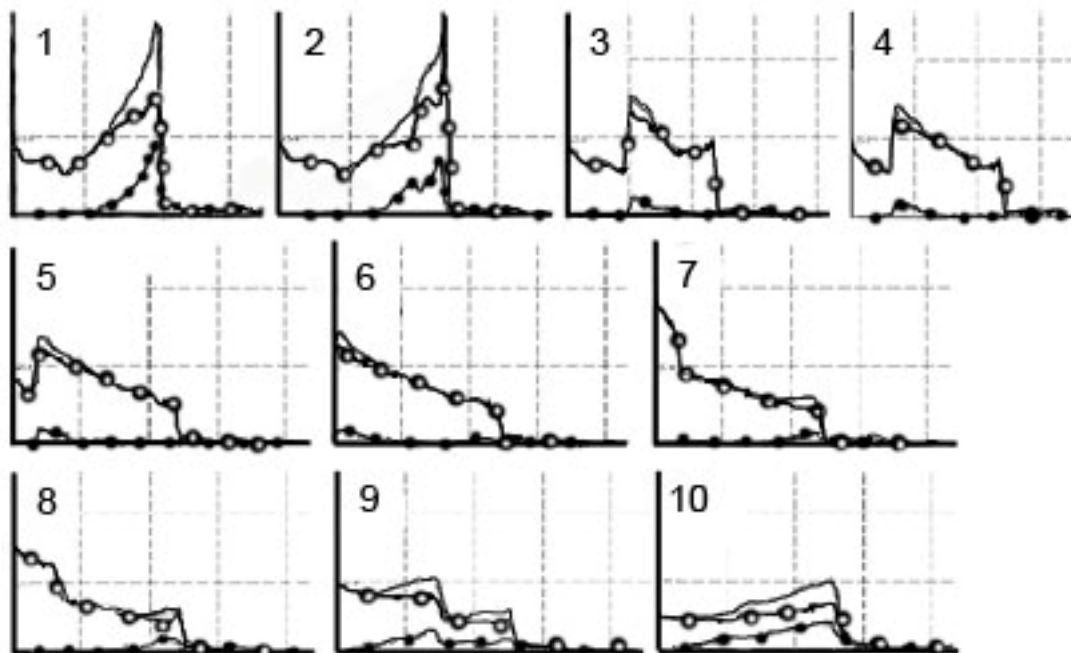


Рисунок 2 – Отражение волны в рабочей области

Изменение скорости тела со временем изображено на рисунке 3, а. По этой зависимости путём численного дифференцирования можно установить поведение со временем ускорения тела, а значит, силы, приложенной к телу (рисунок 3, б). В данном примере масса тела превышает массу реагирующего газа в 10 раз. Степень заполнения  $\eta$  в начале процесса составляет 0,157, что соответствует скорости звука, превышающей скорость звука в нормальных условиях в 1,354 раз (см. рисунок 1, б). Теплотворная способность реагирующего газа превышает внутреннюю тепловую энергию при нормальной температуре в 10 раз ( $\varepsilon = 10$ ). Энергия активации, т. е. теплота поджига (2),  $\varepsilon_{lim} = 6,5$ .

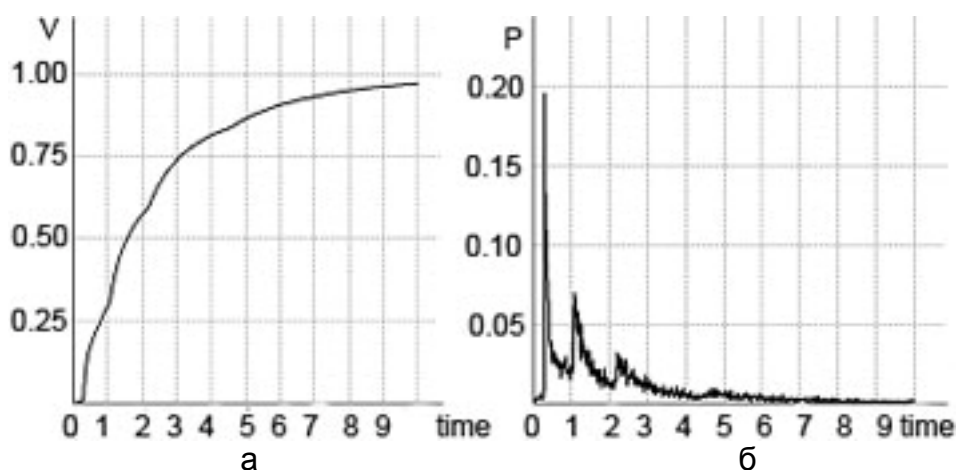


Рисунок 3 – Изменение со временем скорости тела (а) и силы, приложенной к телу со стороны газа (б)

## Заключение

Адекватность имитационного моделирования газодинамических явлений при использовании событийного подхода основывается на выполнении законов сохранения в физике. Высокая скорость расчётов обеспечивается использованием оптимальных алгоритмов поддержания очередей с приоритетами.

В результате серии численных расчётов обнаружено, что детонационная волна после отражения воздействует на выталкиваемое тело многократно, что регистрируется как последовательность пульсаций.

При переходе к трёхмерному случаю расчётная схема изменяется мало. Однако зависимость скорости звука от степени заполненности имеет иной функциональный характер.

Особую важность представляют расчёты по возникновению и протеканию детонационного процесса в среде с пылью.

## Список литературы

1. Семенов, И. В. Численное моделирование детонационных процессов в газах [Текст] / И. В. Семенов, П. С. Уткин. – М.: Ин.-т авт. проект. РАН, 2011. – 70 с.
2. Вильямс, Ф. А. Теория горения [Текст] / Ф. А. Вильямс. – М.: Наука, 1971. – 616 с.
3. Баум, Ф. А. Физика взрыва [Текст] / Ф. А. Баум, К. П. Станюкович, Б. И. Шехтер. – М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1959. – 800 с.
4. Чернышев, Ю. К. Решение задач имитационного моделирования поведения большого количества модельных частиц [Текст] / Ю. К. Чернышев. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т им. Н. Е. Жуковского "ХАИ", 2006. – 58 с.
5. Chernyshev, Y. Event-driven simulation of joint behavior of objects with complex form / Y. Chernyshev, O. Sokolov // Conference on Modeling and Simulation in International Prague: conference materials, Prague, 22-25 June 2010. – P. 34 – 40.
6. Chernyshev, Y. Properties Modeling of Low-Dimensional Carbon Nanostructures / Y. Chernyshev, M. Slepicheva, A. Basteev et al. // Fundamentals of Low-Dimensional Carbon Nanomaterials: Mat. Research Soc. Symp. Proceedings, Massachusetts, USA, Nov. 29 – Dec. 2011. – Vol. 1284.- 2011. – P. 149 –154.
7. Чернышев, Ю. К. Методы вычисления статистических параметров в событийном моделировании [Текст] / Ю. К. Чернышев. – Х.: Фактор, 2014. – 244 с.
8. Хайленко, О. В. Оптимизация процесса расчета параметров детонационной волны [Текст] / О. В. Хайленко, Ю. К. Чернышев / Авиац.-косм. техника и технология – Х. : Нац. аэрокосм. ун-т им. Н. Е. Жуковского "ХАИ". - № 1/118. – 2015. – С. 68 – 73.
9. Гринчик, Н. Н. Моделирование электрофизических и тепловых процессов в слоистых средах / Н. Н. Гринчик. – Минск: Белорус. наука, 2008. – 252 с.
10. Prigogine, I. Order out of chaos. Man's new dialogue with nature [Text] / I. Prigogine, I. Stengers. – Heinemann. London, 1984. – 430 p.

Поступила в редакцию 22.03.2016



## **Ефект пульсацій при виштовхуванні тіла з робочої області за наявності енерговиділення**

Методом подійного моделювання розглянуто процес взаємодії газу, у якому відбуваються екзотермічні реакції, і рухомого тіла. Найпростіше локальне подання хімічних реакцій полягає в розгляді двох основних параметрів: енергетичного бар'єра й відносного виділення енергії. При деяких співвідношеннях між цими параметрами можлива поява детонаційної хвилі. При високих щільностях швидкість її поширення залежить від ступеня заповнення робочої області модельною речовиною. Підтверджено збіг швидкості фронту й місцевої швидкості звуку. Виявлено появу пульсацій тиску, що супроводжують процес виштовхування рухомого тіла, які пов'язані з поширенням відбитих хвиль.

**Ключові слова:** тверді диски, подійне моделювання, енергетичний бар'єр.

## **Ripple Effect During the Pushing Out the Body From the Workspace in the Presence of Energy**

Event simulation method used to study the interaction of the gas in which the exothermic reactions occur, and the moving body. The simplest representation of local chemical reactions is to introduce into consideration two major parameters: the energy barrier and the relative energy release. In some relationships between these parameters it is possible the emergence of a detonation wave. The rate of spread depends on it at high densities on the occupancy rate of the workspace model substance. Matching of the front speed and the local speed of sound was confirmed. It was found that the appearance of pressure fluctuations that accompany the process of pushing out the movable body are associated with the spread of the reflected waves.

**Keywords:** hard drives, event-driven simulation, the energy barrier.