

УДК 519.876.5:004.942

О. В. ХАЙЛЕНКО, Ю. К. ЧЕРНЫШЕВ*Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского «ХАИ», Украина*

ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ

Предложенный метод моделирования детонации водород-кислородной смеси, основанный на событийном подходе, характеризуется высокой степенью эффективности вычислений за счет наблюдения только зоны активной химической реакции. Предложена короткая схема протекания химических реакций окисления водорода, с помощью которой становится возможным моделирование событийными средствами. Метод обладает большой гибкостью за счет возможности варьирования такими параметрами как плотность, концентрация и энергетические барьеры.

Ключевые слова: детонация, детонационная волна, водород-кислородная смесь, дискретно-событийное моделирование, потенциалы взаимодействия, химическая реакция.

Введение

В настоящее время для решения энергетических проблем авиационного двигателестроения активно изучаются альтернативные источники энергии, одним из которых может быть водород.

Детонация – один из самых перспективных методов получения механической энергии.

Детонация может возникать в газах, жидкостях, конденсированных веществах и гетерогенных средах. В ходе химических реакций выделяется энергия, подпитывающая ударную волну. Такое взаимодействие газодинамических и физико-химических факторов приводит к образованию комплекса из ударной волны и следующей за ней зоны химических реакций, называемого детонационной волной. Механизм превращения энергии в детонационной волне отличается от механизма в волне медленного горения (дефлаграции), движущейся с дозвуковой скоростью, в которой передача энергии в исходную смесь осуществляется в основном теплопроводностью [1].

Для моделирования детонационных процессов применяются два метода: континуальный и метод молекулярной динамики.

Континуальный метод, основанный на решении уравнений газовой динамики, прошел три этапа:

1. Гидродинамическая теория. Если характерные размеры системы заметно превышают толщину детонационной волны, то её можно считать поверхностью нормального разрыва между исходными компонентами и продуктами детонации.

2. Модель Чепмена-Жуге. Система двух уравнений (для прямой Михельсона и кривой Гюгонно) содержит три неизвестных, поэтому для определения скорости детонации D требуется дополнитель-

ное уравнение, которое невозможно получить только из термодинамических соображений. Поскольку детонационная волна устойчива, звуковые возмущения в продуктах реакции не могут догонять фронт детонационной волны, иначе он будет разрушаться. Таким образом, скорость звука в продуктах детонации не может превышать скорости течения за фронтом детонационной волны.

3. Модель Зельдовича, Неймана, Дёринга. В этой модели считается, что при распространении детонации вещество сначала нагревается при прохождении фронта ударной волны, а химические реакции начинаются в веществе спустя некоторое время, равное задержке самовоспламенения. В ходе химических реакций выделяется тепло, которое приводит к дополнительному расширению продуктов и увеличению скорости их движения. Таким образом, зона химических реакций выступает в роли своего рода поршня, толкающего ведущую ударную волну и обеспечивающего её устойчивость [2].

Основой семейства методов молекулярной динамики является замена моделируемых веществ (атомов, молекул) упругими твердыми сферами [3].

В настоящее время существует заинтересованность в обосновании методов безигольчатого впрыскивания лекарственных веществ с использованием явлений детонации.

Основное требование к алгоритмам, основанным на применении метода молекулярной динамики – возможность учета как можно большего количества модельных частиц.

1. Основные характеристики модели

Объектами в данном методе являются как атомы, так и молекулы, представленные в виде твердых

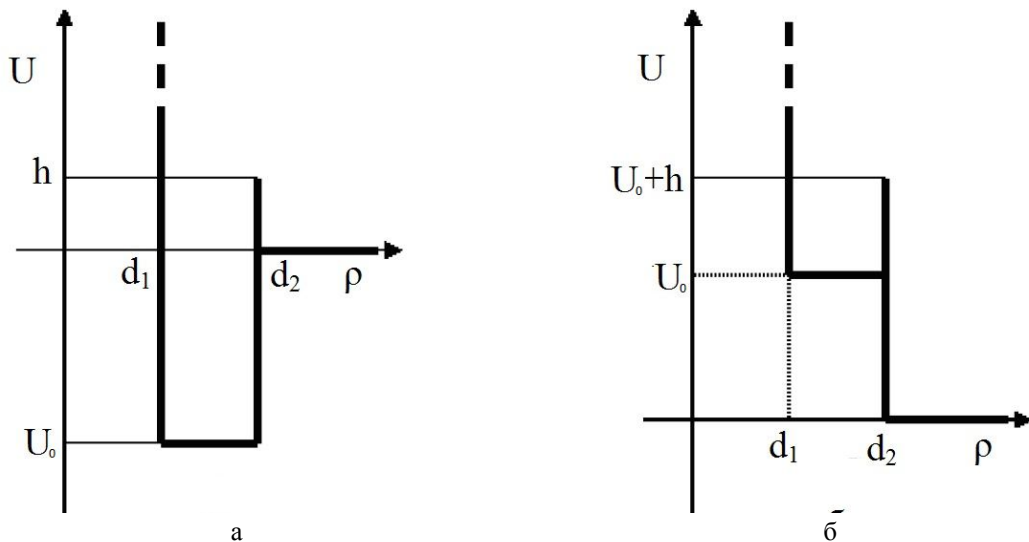


Рис. 1. Прямоугольный потенциал для описания:
а - эндотермических; б - экзотермических процессов

сфер с заданными радиусами. Для моделирования более сложных систем, объектами которых являются не простые сферы, а коллективы взаимодействующих сфер (молекул), применяется обобщенная модель твердых сфер. В этой модели объекты представляются в виде пары концентрических сфер и рассматриваются события-столкновения как внешних, так и внутренних сфер. Связанные сферы называются «соседями». Взаимодействие объектов определяется наличием прямоугольной двухчастной потенциальной функции, содержащей потенциальную яму и барьер (рис. 1).

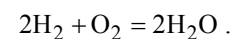
Потенциальная яма отвечает за изменение энергетической составляющей пары частиц (атомов) при химической реакции (как экзотермической, так и эндотермической). Барьер не дает частицам вступать в химическую реакцию, пока их энергии взаимодействия при столкновении не будет достаточно для преодоления этого барьера. Величина барьера указывает на энергию активации реагирующих веществ.

При моделировании некоторых химических реакций нет необходимости описывать все возможные химические взаимодействия в веществе. Для описания этих процессов с некоторой степенью точности достаточно ограничиться только теми реакциями, которые вносят наибольший энергетический внос. В остальных реакциях (включая диссоциацию) используется некоторая неизотропность пространства: после того как частицы вступают в реакцию (становятся соседями) барьер между ними становится равным бесконечности.

Одним из таких процессов является процесс окисления водорода.

Водород – высокоэффективное и экологически чистое горючее с энергией на единицу массы 120,7 МДж / кг, что выше, чем у любого органического топлива. Водород как источник энергии получил применение в ядерных реакторах, высокотемпературных гелиевых реакторах, атомных энерготехнологических станциях, ядерных ракетных двигателях. Водород — хороший энергоноситель для использования в двигателях внутреннего и внешнего сгорания, автономных генераторах электричества и тепла. Обеспечение безопасности при использовании водорода сводится к предотвращению аварийных ситуаций, которые связаны с потерей герметичности систем, производящих и использующих водород, а также к изучению процессов, протекающих при авариях, и разработке методов снижения возможных вредных последствий [4].

В самом общем виде уравнение химической реакции окисления водорода выглядит следующим образом:



При моделировании каждую из этих молекул предлагается представить в виде двух связанных «соседством» модельных частиц.

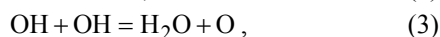
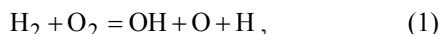
Полная кинетика химической реакции описывается разветвленно-цепными процессами, предложенными академиком Н. Н. Семеновым [5], и включает 22 прямых и 22 обратных реакций.

Такое количество реакций сложно описать дискретно-событийными средствами, а некоторые из них – невозможно.

В данной работе излагается методика идентификации модели минимального набора химических

взаимодействий, эквивалентных брутто-приближению реальной цепочки.

С этой целью произведен анализ глубин потенциальных ям, высот потенциальных барьеров, времен взаимодействия, длительности устойчивых состояний отдельных элементов цепи. Среди промежуточных состояний выделены те, которые обладают наибольшей длительностью устойчивости и существенным вкладом в энергетическое поведение системы [6]. В результате была предложена упрощенная цепочка реакций:



Рассмотрим эти уравнения подробнее.

На начальном этапе моделирования в системе присутствуют только два типа молекул – водород и кислород. Частицы в одной молекуле колеблются, сталкиваясь то внутренними, то внешними сферами. Частицы различных молекул сталкиваются внешними сферами снаружи, но энергии для преодоления барьера недостаточно и происходит упругое отражение. После подачи инициирующей энергии, достаточной для преодоления барьера между частицами молекул кислорода и водорода, эти молекулы становятся «соседями», при этом их суммарной энергии становится достаточно для преодоления барьера между частицами одной молекулы. Этот процесс описывает уравнение (1). Рассуждения аналогичны и для уравнений (2) – (4).

Такой подход к описанию разветвлено-цепной химической реакции является упрощенным, и, как следствие, неточным. Но он дает возможность сделать некоторые статистические выводы.

Поведение энергии при химических реакциях для этой модели зависит от глубины потенциальной ямы и высоты потенциального барьера (табл. 1). Условной единице соответствует две тепловые энергии отдельного атома в начальный момент времени.

Таблица 1

Параметры потенциала

Реакция	Глубина потенциальной ямы	Высота барьера
(1)	-35	6
(2)	-30	12
(3)	-35	6
(4)	-50	12

2. Результаты тестового примера

Рассматривается процесс распространения детонационной волны в гремучей смеси.

На рисунке 2 представлен график распределения энергии на профиле системы. Профиль можно разбить на три зоны: I – исходная смесь, II – зона реакции, III – продукты реакции. Что полностью соответствует протеканию химической реакции в детонационной волне, полученной в [2]. Ширина зоны реакции зависит от концентрации горючего в веществе и плотности. Эта зона характеризуется высокой кинетической энергией. Исследование результатов при различных параметрах сетки поперечного сечения (при 10x10, 20x20, 30x30 и т.д.) показали, что зависимость параметров от размеров сетки практически отсутствует. При этом с уменьшением количества разбиений в поперечных сечениях скорость вычислений возрастает, но увеличивается дисперсия, что связано с уменьшением количества модельных частиц. Применяв операцию сглаживания по центральной оси, можно уменьшить общее количество вычислений без существенной потери точности, что также служит оптимизации процесса расчетов.

Концентрация веществ в разных зонах профиля представлена на графике рис. 3.

Как видно из графика, при стехиометрической концентрации кислорода и водорода, после прохода детонационной волны сквозь смесь полного окисления частиц не происходит. Зона продуктов реакции содержит небольшой процент молекул и ионов кислорода и водорода, а также ионов гидроксида.

Скорость детонационной волны при коэффициенте заполнения $\eta = 0,08$ в среднем равна 18,05. При скорости звука при том же коэффициенте заполнения – 2,19. При этом отношение скорости детонационной волны к скорости звука равно 8,21, что значительно превышает отношение, полученное экспериментальным путем в [7]. Это связано с плотностью газа. Так, по данным [8], при повышении плотности гремучего газа с 0,1 до 0,5 г/см³ скорость детонационной волны увеличивается с 3000 до 4500 м/сек. Привести полученную скорость детонации к скорости при нормальных условиях можно, воспользовавшись поправками к давлению в уравнении состояния, что совпадает с поправками к скорости звука. При $\eta = 0,08$ $k_p = 0,7$ и, следовательно, отношение скорости детонации к скорости звука равно 5,74, что на две десятые больше экспериментальных данных. Такая разница может быть связана со способом вычисления скорости звука. В модели учитывается колебательная степень свободы.

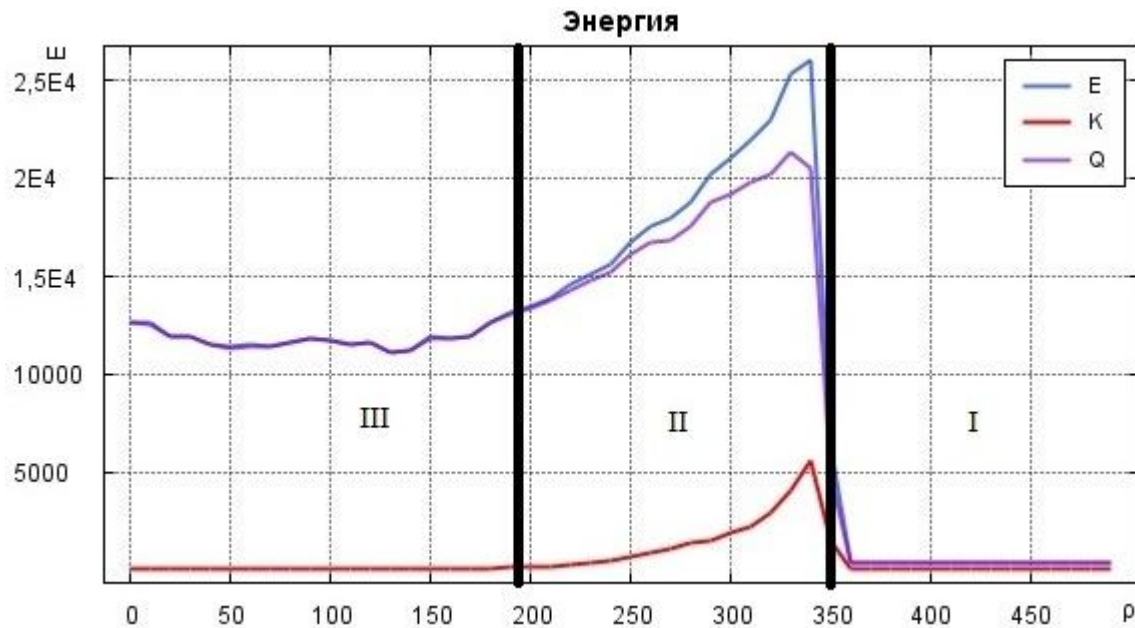


Рис. 2. Распределение энергии на профиле системы:
I – исходная смесь; II – зона реакции; III – продукты реакции

На рис. 4 изображен график профиля давления. Для вычисления давления высчитывался суммарный импульс, переданный единице площади за единицу времени. Статистика собиралась через небольшие промежутки времени, с этим и связаны столь большие флуктуации.

Из [8] известно, что давление в зоне III в 18 раз больше, чем давление в исходной смеси, что совпадает с полученными данными.

Из тестового примера видно, что предложенный способ моделирования подходит для вычисления параметров детонационных волн. Благодаря гибкости модели становится возможным варьирование концентрациями исходной смеси, добавление инертного газа, а также ингибиторов и катализаторов.

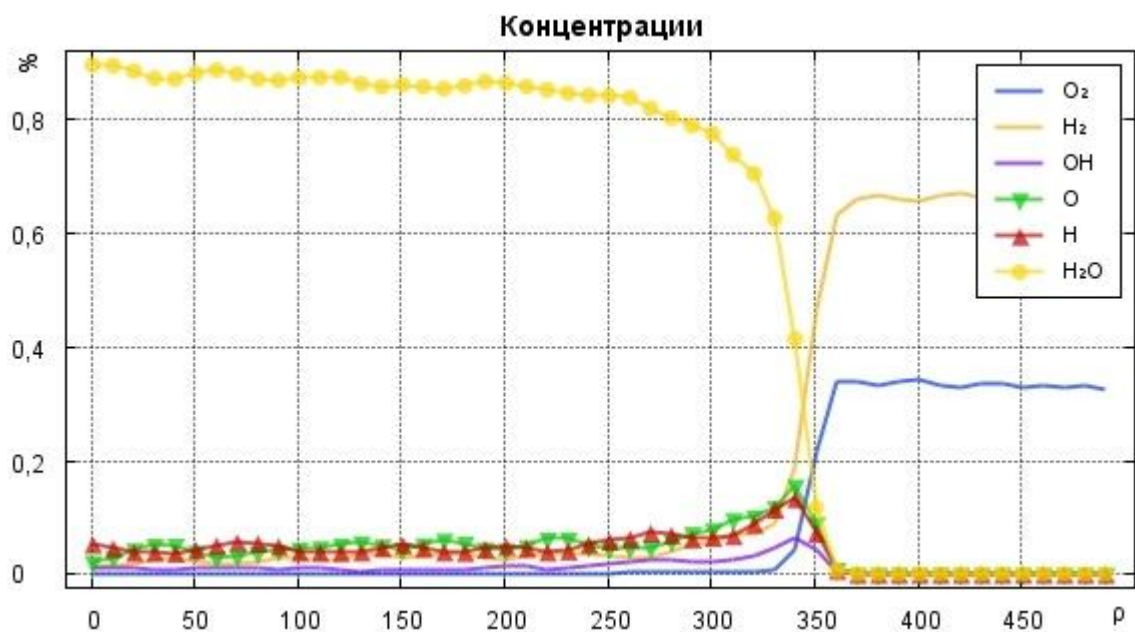


Рис. 3. Концентрация веществ на профиле



Рис. 4. Профиль давления

3. Возможности оптимизации процесса расчета

Анализ полученных тестовых примеров позволяет сделать вывод о том, что область развития детонационной волны состоит из трех участков:

- 1) фронт – порядка нескольких длин свободного пробега;
- 2) область химических преобразований, в которой наблюдается изменение таких величин как энергия, температура, а главное – концентрации веществ;
- 3) шлейф после зоны химических реакций, в котором эти параметры можно считать установившимися.

Именно особенности этого шлейфа позволяют увеличить скорость расчетов.

Методика увеличения расчетов заключается в перемещении зоны химической реакции путем отбрасывания шлейфа (рис. 5).

Указанные преобразования резко уменьшают общее количество обрабатываемых событий, но требуют тщательного отслеживания зоны химических реакций в связи с ее увеличением во времени. Эта проблема легко решается, т.к. только для этой зоны характерно наличие ненулевой суммарной кинетической энергии.

Выводы

Решение задачи моделирования распространения детонационной волны методами сплошной среды осложнено несколькими факторами:

- нет доказательства существования и единственности решения;
- применение численных методов для решения дифференциально-интегральных уравнений требует дополнительных методик, направленных на гарантирование выполнения законов сохранения энергии и массы вещества, а также требуют нетривиальных методов аппроксимации.

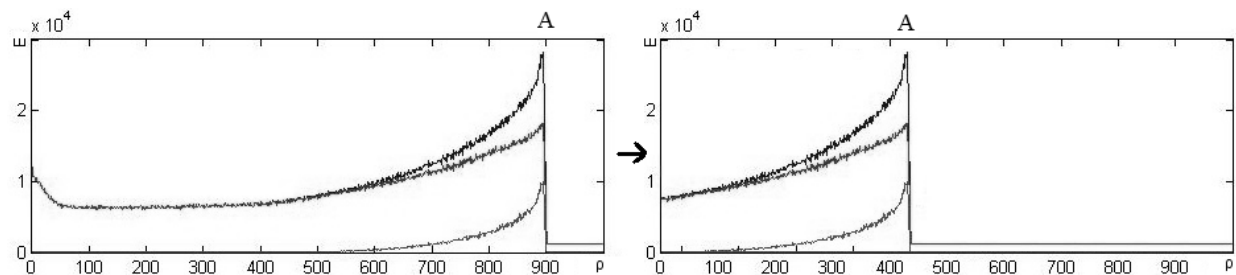


Рис. 5. Перемещение зоны реакции

Предложенный метод характеризуется высокой скоростью моделирования за счет наблюдения системы только в моменты изменения ее состояния и наблюдения только той части трубы, в которой находится зона реакции.

Предложена короткая схема протекания химических реакций окисления водорода, с помощью которой становится возможным моделирование событийными средствами.

Метод обладает большой гибкостью за счет возможности варьирования такими параметрами, как плотность, концентрация и энергетические барьеры.

Литература

1. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика [Текст] : учеб. пособ. для вузов. В 10 т. Т. VI. Гидродинамика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : ФИЗМАТЛИТ, 2001. – 736 с.
2. Зельдович, Я. Б. Теория детонации [Текст] / Я. Б. Зельдович, А. С. Компанеец. – М. : Изд. Акад. наук СССР, 1955. – 268 с.
3. Чернышев, Ю. К. Событийное программирование. Применение к решению некоторых задач физики [Текст] / Ю. К. Чернышев. – Х. : Нац. аэрокосм. ун-т им. Н. Е. Жуковского «ХАИ», 2008. – 68 с.
4. Гельфанд, Б. Е. Водород: параметры горения и взрыва [Текст] / Б. Е. Гельфанд, О. Е. Попов, Б. Б. Чайванов. – М. : ФИЗМАТЛИТ, 2008. – 288 с.
5. Семенов, Н. Н. Цепные реакции [Текст] / Н. Н. Семенов. – 2-е изд., испр. и доп. – М. : Наука, 1986. – 535 с.
6. Hoi Dick Ng Assessment of detonation hazards in high-pressure hydrogen storage from chemical sensitivity analysis / Hoi Dick Ng, Yiguang Ju, John H. S. Leeb – International Journal of Hydrogen Energy, 2006. – P. 93-99
7. Хитрин, Л. Н. Физика горения и взрыва [Текст] / Л. Н. Хитрин. – М. : Изд. Московского университета, 1957. – 452 с.
8. Баум, Ф. А. Физика взрыва [Текст] / Ф. А. Баум, К. П. Станюкович, Б. И. Шехтер. – М. : Гос. изд. физ.-мат. лит., 1959. – 801 с.

Поступила в редакцию 12.11.2014, рассмотрена на редколлегии 20.01.2015

ОПТИМІЗАЦІЯ ПРОЦЕСУ РОЗРАХУНКУ ПАРАМЕТРІВ ДЕТОНАЦІЙНОЇ ХВИЛІ

О. В. Хайленко, Ю. К. Чернышев

Запропоновано метод моделювання детонації водень-кисневої суміші, який засновано на подієвому підході, характеризується високим ступенем ефективності обчислень за рахунок спостереження тільки зони активної хімічної реакції. Запропоновано коротку схему протікання хімічних реакцій окиснення водню, за допомогою якої стає можливим моделювання подієвими засобами. Метод має велику гнучкість за рахунок можливості варіювання такими параметрами як щільність, концентрація і енергетичні бар'єри.

Ключові слова: детонація, детонаційна хвиля, воднево-киснева суміш, дискретно-подієве моделювання, потенціали взаємодії, хімічна реакція.

OPTIMIZATION OF THE CALCULATION OF DETONATION WAVE

O. V. Khailenko, Yu. K. Chernyshev

The proposed method of modeling the detonation of hydrogen-oxygen mixture, based on the event-driven approach, a high degree of computational efficiency by observing only the active area of the chemical reaction. Offered a short circuit of the chemical reactions of oxidation of hydrogen by means of which it is possible to modeling event-trigger means. The method is very flexible due to the possibility of varying parameters such as the density, concentration and energy barriers.

Key words: detonation, the detonation wave, the hydrogen-oxygen mixture, discrete-event simulation, interaction potentials, the chemical reaction.

Хайленко Олег Викторович - аспирант каф. інформатики, Национальний аерокосмічний університет ім. Н. Е. Жуковського «Харьківський авіаційний інститут», Харків, Україна, e-mail: oleg_hai@bigmir.net.

Чернышев Юрий Константинович - канд. техн. наук., доцент, доцент каф. інформатики, Национальний аерокосмічний університет ім. Н. Е. Жуковського «Харьківський авіаційний інститут», Харків, Україна, e-mail: annu_cern@hotmail.com.