

УДК 519.6+532.5+533.7+338.3

О. В. ХАЙЛЕНКО, М. А. ХАЙЛЕНКО, Ю. К. ЧЕРНЫШЕВ

Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского «ХАИ», Украина

**СОБЫТИЙНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИИ В СИСТЕМЕ
ГАЗ-ПОРШЕНЬ ПРИ ВЫСОКИХ СТЕПЕНЯХ СЖАТИЯ**

Приведены результаты имитационного моделирования возникновения и распространения ударной волны в сильно сжатом одноатомном газе с возможным возникновением детонационной волны. Использовалась упрощённая модель твёрдых сфер с добавлением свойства возникновения экзотермических реакций в парных столкновениях в условиях преодоления энергетического барьера. Рассмотрен процесс возникновения детонации с последующим выталкиванием поршня из рабочей области при различных параметрах процесса. Обнаружено наличие пульсаций давления на стенку поршня.

Ключевые слова: событийное моделирование, поправки к давлению, твёрдые сферы, детонация, поршень.

Введение

Детонационные явления могут сопровождать химические реакции в веществе. Если в целом комплекс реакций является экзотермическим, то зона их протекания со временем расширяется вместе с повышением местной температуры и возникновением конвекционных потоков. Детонационный разрыв термодинамических параметров среды возникает при том условии, когда скорость распространения зоны реакции достигает величины скорости распространения малых колебаний (т. е. звука). Это есть содержание термина «условие Чепмена-Жуге» [1]. Детонация сопровождает множество процессов в природе и технике. В некоторых случаях она играет положительную роль; например, при использовании взрывчатых веществ, при создании новейших устройств впрыска лекарственных веществ без использования игл и т.п. В некоторых случаях возникновение детонации является категорически недопустимым; например, в двигателях внутреннего сгорания и в ГТД. Существуют попытки использовать детонацию для конструирования новых систем двигателей [2]. В целом детонация представляет собой чрезвычайно «капризный» объект для теоретического и экспериментального изучения. Основная особенность уравнений химической кинетики и газодинамики, описывающих химические явления с возможностью детонации – нелинейность и существование разрывных решений [3]. В нормальных условиях среднее расстояние между молекулами газа имеет порядок десяти диаметров. Газ в нормальных условиях «почти пустой», и скорость распространения малых колебаний плотности или давления рассчитывается с высокой степенью точности класси-

ческими средствами. При повышении плотности, когда среднее расстояние уменьшается до величин порядка диаметра молекул, начинает играть значительную роль чисто геометрический фактор, не связанный с процессами, описываемыми средствами термодинамики. Ввиду этого меняется зависимость скорости звука от температуры, т. е. требуется учесть поправки к уравнению состояния. Проблема учёта поправок рассматривалась в большом количестве работ. Наиболее полные результаты приведены в [4]. Но они также недостаточны для решения актуальных задач газовой динамики при высоких плотностях. С учётом этого авторы [5] предложили подход, используемый в данной работе, согласно которому вещество представлено в виде коллектива твёрдых сфер. Успех в применении этой модели вещества зависит от степени разработанности соответствующих численных методов. Таким образом, актуальным является рассмотрение вещества на локальном уровне с привлечением идей прямого имитационного моделирования [7 – 9].

**1. Применение метода твёрдых сфер
для уточнения уравнения состояния**

Использование оптимальных расчётных схем для последовательности событий-столкновений позволило получить таблицы [8] поправок κ_p , κ_λ зависимостей давления P и длины свободного пробега l модельных сфер от степени заполненности η , как отношения суммарного объёма V_0 модельных сфер ко всему объёму рабочей области V : $\eta = \frac{V_0}{V}$

(рис. 1). Аналогичные таблицы и соответствующие графики найдены и в двумерном случае.

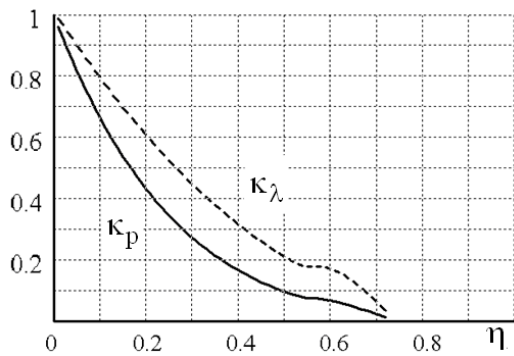


Рис. 1. Зависимости поправочных коэффициентов

$$\kappa_p = \frac{P_{th}}{P} \text{ и } \kappa_\lambda = \frac{1}{l_{th}} \text{ от степени заполнения}$$

Истинные значения давления путём сплайн-интерполирования в узлах таблицы для поправок [8] вычисляются по формуле:

$$P = \frac{P_{th}}{\kappa_p(\eta)}, \quad (1)$$

где $P_{th} = nkT$ – стандартное уравнение газового состояния;

n – количество молекул в единице объёма;

$k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж / К⁰ – постоянная Больцмана;

T – температура в градусах Кельвина.

Поправки к реальному давлению при малых степенях заполнения $\eta \leq 0,05$ могут быть получены путём использования уравнения Ван-дер-Ваальса, как результата линеаризации функции $\kappa_p(\eta)$. Но для достаточно больших значений параметра η , тем более для плотностей, близких к плотностям жидкого состояния ($0,54 \leq \eta \leq 0,57$), соответствующим плато на графике для $\kappa_p(\eta)$ (рис. 1), «практическая ценность уравнения Ван-дер-Ваальса невелика» [10].

Скорость распространения $v_{0\text{sound}}$ малых возмущений в идеальном газе зависит лишь от температуры:

$$v_{0\text{sound}} = \sqrt{\frac{\gamma kT}{m_0}}, \quad (2)$$

где $\gamma = \frac{C_p}{C_v}$ – отношение теплоёмкостей;

$m_0 = \mu \cdot 1,674 \cdot 10^{-27}$ кг – масса одной молекулы;

μ – молекулярный вес.

Прямые имитационные расчёты с привлечением событийного метода [8] показывают, что поправ-

ки, совпадающие с поправками к давлению, применимы и к вычислению скорости звука:

$$v_{\text{sound}} = \frac{1}{\kappa_p(\eta)} \sqrt{\frac{\gamma kT}{m_0}}. \quad (3)$$

При высоких степенях заполнения неучёт этого обстоятельства приводит к грубым ошибкам при решении уравнений газовой динамики. Например, при $\mu = 29$ (т. е. рассматривается воздух), $\gamma = 1,41$, $\eta \approx 0,6 \cdot 10^{-3}$ скорость звука, вычисленная по формуле (3), равна 343,5 м/с. Здесь учтено, что при малых значениях аргумента η линеаризация приводит к формуле Ван-дер-Ваальса: $\kappa_p(\eta) \approx 1 - 4\eta = 0,9976$. При степени заполнения $\eta \approx 0,2$ теоретическое значение давления превышает нормальное атмосферное примерно в 330 раз, в соответствии с увеличением количества молекул в единице объёма. В этих условиях скорость звука при той же тепловой $v_{\text{heat}} = 500$ м/с должна возрасти до величины порядка 760 м/с, поскольку, согласно графику на рис. 1, $\kappa_p(0,2) \approx 0,45$.

Рассмотрим две модельные твёрдые сферы в момент столкновения. Пусть их массы равны m_1 , m_2 , радиусы – R_1 , R_2 , скорости – \vec{v}_1 , \vec{v}_2 , центры находятся точках \vec{r}_1 и \vec{r}_2 . После столкновения новые скорости с учётом выполнения законов сохранения вычисляются так:

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_1 + \frac{\lambda_0}{m_1} \vec{n}, \quad \vec{v}'_2 = \vec{v}_2 - \frac{\lambda_0}{m_2} \vec{n}, \quad (4)$$

где $\lambda_0 = 2M(\Delta\vec{v}, \vec{n})$,

$$\Delta\vec{v} = \vec{v}_2 - \vec{v}_1,$$

$$\vec{n} = \frac{\vec{r}_2 - \vec{r}_1}{R_2 + R_1},$$

$$M = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \text{ – приведенная масса.}$$

С помощью формул (4) описывается упругое взаимодействие модельных твёрдых сфер. Простейшее предположение при моделировании химических взаимодействий заключается в том, что формулы (4) справедливы, если переданная энергия не превосходит некоторое пороговое значение ε_{lim} . Пусть, напротив,

$$\frac{M(\Delta\vec{v}, \vec{n})^2}{2} > \varepsilon_{\text{lim}}. \quad (5)$$

Тогда в результате взаимодействия выделяется дополнительная энергия $\varepsilon > 0$. Формулы преобразования скоростей с учётом неравенства $(\Delta\vec{v}, \vec{n}) < 0$ принимают следующий вид:

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_1 + \frac{\lambda}{m_1} \vec{n}, \quad \vec{v}'_2 = \vec{v}_2 - \frac{\lambda}{m_2} \vec{n}, \quad (6)$$

где $\lambda = M((\Delta\vec{v}, \vec{n}) - \sqrt{D})$,

$$D = (\Delta\vec{v}, \vec{n})^2 + \frac{2\varepsilon}{M}.$$

Данное предположение является огрублённым, т.к. не учитывается изменение химического потенциала, т.е. возможность изменения общего количества модельных молекул, и изменения количества внутренних степеней свободы молекул. Некоторые уточнения модели, связанные с введением в рассмотрение ядра (керна) и оболочки рассмотрены в работах [9, 11, 12]. Однако при этом резко уменьшается доступное для расчётов количество модельных частиц.

2. Расчётная схема системы газ-поршень

Специфика рассматриваемой задачи заключается в том, что интересующие параметры изменяются в выделенном направлении, но модельные частицы для адекватности модели в целом должны располагаться в трёхмерном пространстве. Поэтому в качестве рабочей области выбрана цепочка n_{cells} кубических ячеек с единичными рёбрами, причём общие грани двух ячеек считаются проницаемыми, а внешние – отражающими. Дополнительно рассматривается подвижная стенка с заданным расположением X_{body} по оси цепочки ячеек. Она моделирует границу тела (поршня) массы m_{body} . Изначально n модельных сфер единичной массы и общего для всех радиуса R хаотически заполняют часть рабочей области, задаваемую неравенством $1 \leq x < X_{\text{body}} \leq n_{\text{cell}}$. Каждой из модельных частиц приписана случайная скорость \vec{v}_i единичной длины.

В одной ячейке в среднем содержится $n/(X_{\text{body}}-1)$ модельных частиц. Приближённое значение параметра заполнения принимается равным

$$\eta = V_{\text{part}} / V_{\text{all}}, \quad (7)$$

где $V_{\text{part}} = (4\pi R^3 / 3)n$,

$$V_{\text{all}} = (X_{\text{body}} - 1 + 2R)(1 + 2R)^2.$$

Начальным этапом процесса расчётов является «максвеллизация», т. е. предоставление модельным частицам возможности перемещений с упругими парными взаимодействиями [13]. Для установления распределения Максвелла достаточно достичь 10 столкновений в среднем для каждой модельной частицы, что требует 10 – 20 секунд реального времени

работы ЭВМ. При этом средняя квадратичная скорость равна единице, а средняя энергия строго равна 0,5. В этих условиях давление, оказываемое одной модельной частицей на стенки ячейки, равняется $\frac{1}{3}$

условных единиц, а температура $T_{\text{simul}} = \frac{1}{3}$ [8].

Если скорость модельной частицы при столкновении со стенкой равна \vec{v} , причём $v_x > 0$, то при упругом взаимодействии скорости частицы и поршня изменяются так:

$$\begin{aligned} v'_x &= (2m_{\text{body}} V_{\text{body}} + (m - m_{\text{body}})v_x) / (m + m_{\text{body}}), \\ V'_{\text{body}} &= (2m v_x - (m - m_{\text{body}})V_{\text{body}}) / (m + m_{\text{body}}), \end{aligned} \quad (8)$$

где m_{body} – масса поршня,

V_{body} – скорость поршня в выделенном направлении.

Для моделирования химических взаимодействий должны быть заданы два энергетических параметра – пороговое значение ε_{lim} и выделение энергии ε при условии возможности реакции в парном взаимодействии. Параметр ε тесно связан с теплотворной способностью. В начальный момент полная энергия равна $0,5n$; она сопоставляется внутренней энергии. Предположим, все модельные частицы прореагировали. Тогда в коллективе модельных частиц полная энергия станет равной $0,5n\varepsilon$. Значит, в качестве параметра ε следует выбрать отношение дополнительной суммарной внутренней энергии после сгорания к внутренней энергии до начала реакции в реальном моделируемом веществе. Довольно неопределённым является выбор параметра ε_{lim} . В таблицах физических величин ему отвечает температура начала реакции, которая, как правило, весьма размыта и зависит от массы в целом и плотности. При достаточно большом количестве вещества в силу случайности распределения скоростей повышается вероятность того, что какая-то пара молекул вступит в экзотермическую реакцию; при этом выделившейся энергии при большой плотности окажется достаточно для возникновения цепочки индуцированных взаимодействий, что и порождает детонацию. Например, стехиометрическая смесь водорода и кислорода в нормальных условиях может сохраняться неизменной миллионы лет, т. е. порог реакции соединения очень высок. Однако достаточно создать местное повышение скоростей молекул, – как смесь бурно прореагирует, поскольку выделяемая энергия в одном парном взаимодействии достаточно велика, чтобы передать её соседним молекулам с последующими реакциями. Известны

исторические примеры, когда обычная селитра, накопленная в большом количестве и потому самоуплотнившаяся, в непредсказуемый момент времени взрывалась в полном объёме; это приводило к многотысячным жертвам среди персонала предприятий. Таким образом, при фиксированном значении пороговой энергии ε_{lim} в отдельном акте модели химической реакции появление детонации зависит, прежде всего, от величины местного параметра заполненности. Местного повышения давления (и плотности) в пристеночной области при распространении обычного фронта ударной волны, либо при наличии тяжёлой отражающей молекулы катализатора может оказаться достаточным для возникновения детонации. Однако местное разрежение может привести к исчезновению распространения детонационной волны. Построение имитационной модели и служит проведению численных экспериментов с целью установления критических значений соответствующих параметров. Моделирование инициации химических реакций осуществляется приданием в начальный момент времени программным путём дополнительной скорости всем модельным частицам, заполняющим 2 – 3 начальные ячейки. Это соответствует механическому удару в малой области вещества, либо поджигу в этой области.

В данной работе основным алгоритмическим средством для расчётов является дискретно-событийное моделирование (или для простоты – событийное). Каждому объекту приписывается помимо свойств типа размеров, масс, параметров энерговыделения и т.п. свойство пребывания в определённый локальный момент времени. Событиями являются столкновения частиц между собой, столкновения центра частицы со стенками ячейки, в которой она находится. Все моменты времени для ближайших событий, в которых участвуют частицы, располагаются в очередь. Обработке подлежит ближайшее по времени событие. В процессе обработки производятся расчёты по формулам (6), (8), после чего с использованием классической механики определяется момент времени для ближайшего события, в котором участвует объект (модельная частица), и тип этого события. Найденные моменты ставятся в общую очередь: после этого процесс расчётов повторяется.

Успех применения событийного моделирования зависит от выбора метода поддержания очереди событий. Дополнительным является требование декомпозиции. Оно обеспечивается разбиением на подсистемы, для каждой из которых вычисление ближайших моментов времени событий, в которых участвуют объекты подсистемы, - является оптимальным.

3. Численное моделирование пульсации давления на поршень

Рассматривается перемещение поршня под воздействием силы давления со стороны газа, заполняющего рабочую область. Количество модельных частиц $n = 10^4$. Масса поршня в три раза превышает массу газа: $m_{body} = 3n$. Выберем следующие значения основных параметров: $\varepsilon = 8$, $\varepsilon_{lim} = 6$. Выбором радиуса частиц обеспечивается поправка к давлению $\kappa_p = 0,1$. Начальное расположение модельных частиц в нескольких ячейках после максвеллизации проиллюстрировано на рис. 2. Длине цепочки ячеек $n_{cells} = 10^4$ сопоставляется 1 м.

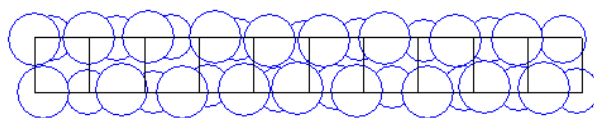


Рис. 2. Заполнение модельными частицами рабочей области при $\eta = 0,49$

В начальный момент времени стенка поршня имеет координату $X_{body} = 3325$ модельных единиц, что соответствует $0,3325$ м. При $\mu = 29$ и $T = 293^0$ К условной единице скорости сопоставляется тепловая, равная 500 м/с, а скорость звука в разреженном газе равна 343 м/с. Согласно формуле (3), скорость звука при нормальной температуре в сжатом газе с учётом поправки $\kappa_p = 0,1$ составит 3430 м/с. На рис. 3 показана зависимость скорости поршня от времени. Статистической обработкой достигается оценивание местной температуры. В рассматриваемом случае температура в области фронта детонационной волны оказывается приблизительно в 8 раз выше нормальной и достигает величины 2340^0 К. Поэтому и скорость звука, пропорциональная корню квадратному из температуры, повышается до (9700 ± 100) м/с.

Скорость выталкиваемого тела на выходе достигает величины $velocity = 1,60$, что соответствует 800 м/с. Обнаруживается следующий факт: скорость поршня после достижения стенки фронтом детонационной волны в дальнейшем возрастает с нарушением непрерывности производной, т.е. график скорости имеет излом (или даже несколько при большей массе поршня).

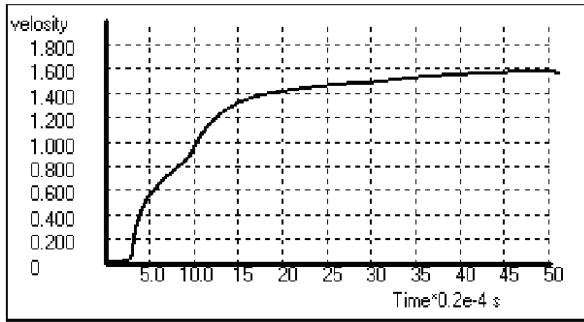


Рис. 3. Зависимость скорости поршня от времени

Для прояснения причин этого явления реализовано численное дифференцирование сглаженного графика скорости поршня, что позволило установить поведение ускорения, а значит, и силы давления на поршень со стороны газа. На рис. 4 приведена зависимость давления на стенку поршня от времени. На оси ординат откладывается отношение величины модельного давления к величине модельного давления в нормальных температурных условиях. Оно зависит от количества молекул в единице объёма. Поэтому повышение уровня заполненности автоматически приводит к повышению плотности, а значит, к повышению давления в нормальных условиях. Предполагая это давление равным одной атмосфере, т.е. 100000 Па, единице оси ординат будем сопоставлять давление 0,1 МПа. Момент начала детонации отмечен вертикальным отрезком. Первый пик давления на тело, равный 16 МПа, соответствует моменту контакта фронта детонационной волны с подвижной стенкой. Время прохождения фронта равно $0,34 \cdot 10^{-4}$ с. Отсюда скорость распространения фронта детонационной волны равна 9780 м/с. С учётом погрешностей оценивания можно утверждать, что в данной имитационной модели газа с энерговыделением условие Чепмена-Жуге соблюдается.

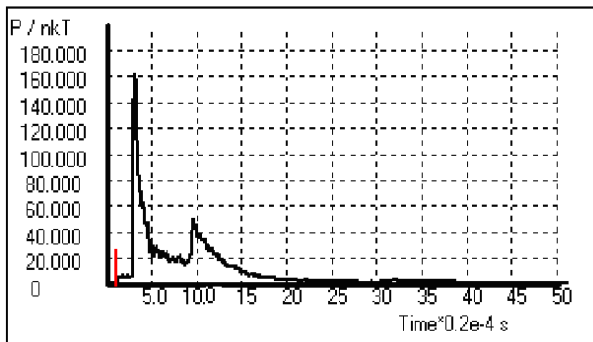


Рис. 4. Зависимость давления на стенку поршня от времени

В газе за счёт химических реакций почти все молекулы вступили в реакции, так что в дальнейшем его можно считать химически нейтральным. Волна детонации отражается, превращаясь в обычную ударную. Фронт ударной волны пробегает путь к стенке рабочей области. Затем, отразившись ещё раз, «догоняет» поршень, который перемещается с возрастающей скоростью. Второй пик давления соответствует моменту столкновения вторичной ударной волны с поршнем. Длина пути, пройденного вторичной волной, оценивается непосредственно по графикам движения и равна 0,683 м. Время прохождения этого пути рассчитывается по данным графика на рис. 4. Средняя скорость вторичной волны равна 7700 м/с. Пик давления, оказываемого вторичной волной, меньше пика от детонационной волны примерно в три раза, но площади под обоими пиками сравнимы. Это значит, что процесс выталкивания поршня состоит из нескольких этапов передачи импульсов примерно равной величины.

4. Термодинамические параметры в газе

Изменение со временем координаты стенки и величины скорости поршня зависит от развития картины изменения термодинамических параметров газа по длине тракта. Модель твёрдых сфер позволяет получить информацию о состоянии модельного газа прямым статистическим оцениванием без предварительного решения уравнений газовой динамики. Цепочку ячеек разбивают на участки Δ_i одинаковой длины. В момент снятия информации подсчитываются на каждом отдельном участке количества модельных частиц, их массы, модельные энергии, а также суммы этих энергий, масс, импульсов. Это позволяет вычислить суммарную кинетическую энергию. Тепловая энергия в случае одноатомного модельного газа является их разностью:

$$Q_i = E_i - K_i, \tag{9}$$

где Q_i – тепловая энергия на участке усреднения Δ_i ,

$$E_i = \sum_{x_k \in \Delta_i}^{n_i} \frac{m_k \bar{v}_k^2}{2} - \text{суммарная энергия,}$$

$$K_i = \frac{\bar{p}_i^2}{2 \text{massa}_i} - \text{кинетическая энергия,}$$

$$\bar{p}_i = \sum_{x_k \in \Delta_i}^{n_i} m_k \bar{v}_k - \text{суммарный импульс,}$$

massa_i – суммарная масса модельных частиц на участке газа Δ_i ,

n_i – количество модельных частиц на Δ_i .

На рис. 5 дан график энергии E и кинетической составляющей энергии K , приходящихся на одну частицу, в зависимости от координаты по длине тракта в момент достижения фронтом детонационной волны стенки поршня.

По оси ординат в условных единицах представлены эти величины. Средняя энергия в нормальных условиях равна 0,5. Согласно этим данным в рассматриваемом численном эксперименте, температура в области фронта волны превышает нормальную в 11 раз, что составляет 3223°K .

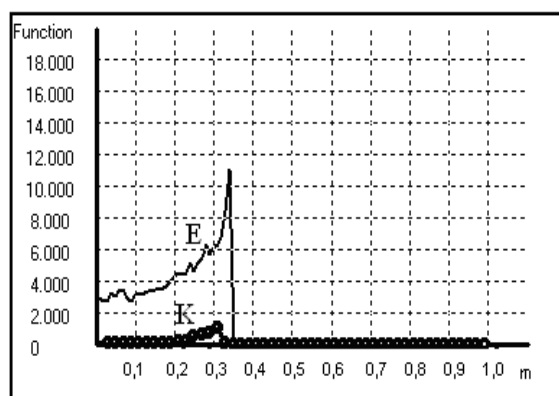


Рис. 5. Энергия (E) и кинетическая энергия (K) в момент воздействия детонационной волны на поршень

На рис. 6. рассмотрено распределение по длине тракта этих же величин в момент, близкий к покиданию рабочей области.

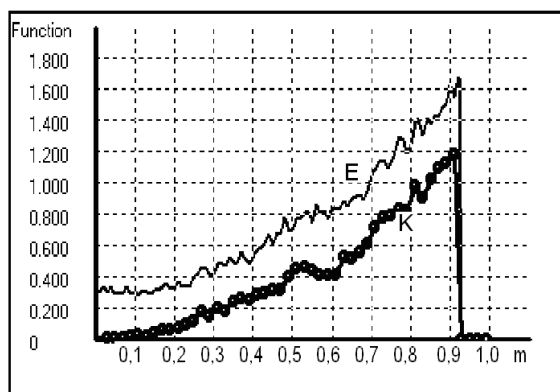


Рис. 6. Энергия (E) и кинетическая энергия (K) газа в момент, близкий к покиданию поршнем рабочей области

Согласно приведенным результатам, температура по длине тракта выравнивается, составляя в среднем около 300°K , основная часть энергии приходится на кинетическую составляющую. По

графику прослеживается распределение кинетической энергии вдоль тракта.

Простым усреднением по всему количеству модельных частиц получено отношение кинетической энергии, обретенной поршнем, к полной энергии газа; оно равно для данного примера 4,97. Поэтому к.п.д. выполнения детонирующим газом работы по выталкиванию поршня равен 83%.

Заключение

В данной работе рассмотрен пример применения метода событийного моделирования к решению задачи установления числовых параметров процесса взаимодействия газа и поршня в условиях возможности энерговыделения в моделируемой среде. Адекватность модели определяется строгим соблюдением законов сохранения энергии, импульса и момента импульса в парных взаимодействиях модельных частиц. Отдельные этапы математического моделирования в данном методе достаточно просто реализуются в виде пакета программ без привлечения необоснованных предположений.

Принята некоторая степень идеализации: сохранение общего количества молекул, усреднённое представление веществ различных видов простейшими объектами типа упругих сфер. Это затрудняет учёт внутреннего состояния при увеличении числа степеней свободы молекул. В дальнейшем предполагается расчётную схему пополнить учётом возможности изменения химического потенциала.

Использование описанного в работе подхода позволяет рассматривать простейшую модель детонации не только в газах, но и в жидкостях и твёрдых веществах. При интенсивном энерговыделении развивается температура, достаточная для устранения влияния химических связей, обеспечивающих соответствующее фазовое состояние. Иными словами, при прохождении фронта детонационной волны частицы вещества в совокупности представляют собой коллектив несвязанных фрагментов, что и позволяет рассматривать их как множество упругих объектов, моделируемых упрощённо в виде твёрдых сфер.

Достоинством рассматриваемого метода является то, что его применение не требует необходимости численного решения систем существенно нелинейных уравнений химической кинетики и газодинамики; результаты расчётов обрабатываются методами математической статистики.

Можно также отметить, что рассмотренный метод вычислений не использует обычного для дискретно-событийного моделирования метода Монте-Карло, т.е. является полностью детерминированным. Это обеспечивает строгое соблюдение законов

сохранения, но требует очень аккуратного программирования для оптимального построения и поддержания очереди событий.

Литература

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. Импульсные детонационные двигатели [Текст] / под ред. С. М. Фролова. – М. : ТОРУС ПРЕСС, 2006. – 592 с.
3. Смирнов, Н. Н. Влияние геометрии канала и температуры смеси на переход горения в детонацию в газах [Текст] / Н. Н. Смирнов, В. Ф. Никитин. // Физика горения и взрыва. – 2004. – Т. 40, № 2. – С. 68 – 83.
4. Черчиньяни, К. Теория и приложения уравнения Больцмана [Текст] / К. Черчиньяни. – М. : Мир, 1978. – 496 с.
5. Alder, B. J. Molecular Dynamics by Electronic Computers [Text] / B. J. Alder, T. Wainwright // Proceedings of the International Symposium on Transport Processes in Statistical Mechanics. – New York : Interscience, 1958. – P. 97 – 131.
6. Чернышев, Ю. К. Решение задач имитационного моделирования поведения большого количества модельных частиц [Текст] / Ю. К. Чернышев. – Х. : ХАИ, 2006. – 58 с.
7. Чернышев, Ю. К. Событийное программирование. Применение к решению некоторых задач физики [Текст] / Ю. К. Чернышев. – Х. : ХАИ, 2008. – 60 с.
8. Чернышев, Ю. К. Методы вычисления статистических параметров в событийном моделировании [Текст] / Ю. К. Чернышев. – Х. : «Фактор», 2014. – 244 с.
9. Хайленко, О. В. Оптимизация процесса расчета параметров детонационной волны [Текст] / О. В. Хайленко, Ю. К. Чернышев // Авиационно-космическая техника и технология. – 2015. – № 1 (118). – С. 68 – 73.
10. Телеснин, Р. В. Молекулярная физика [Текст] / Р. В. Телеснин. – М. : Высш. шк., 1965. – 298 с.
11. Properties Modeling of Low-Dimensional Carbon Nanostructures [Text] / M. Slepicheva, Y. Chernyshev, A. Basteev, L. Bazyma, M. Ugryumov // Fundamentals of Low-Dimensional Carbon Nanomaterials; Edited by John J. Boeckl. Mater. Res. Soc. Symp. Proc. – 2011. – Vol. 1284. – P. 149-154.
12. Чернышев, Ю. К. Моделирование самоорганизации химических соединений Fm3m-кристаллографической группы в изотермическом приближении [Текст] / Ю. К. Чернышев, О. В. Хайленко // Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии : сб. научн. тр. ХАИ. – Харьков, ХАИ, 2013. – Вып. 61. – С. 98 – 104.

13. Prigogine, I. Order out of chaos. Man's new dialogue with nature [Text] / I. Prigogine, I. Stengers. – Heinemann, London, 1984. – 430 p.

References

1. Semenov, I. V., Utkin, P. S. Chislennoe modelirovanie detonatsionnykh protsessov v gazakh [Numerical simulation of detonation processes in gases]. Moscow, Univ. avt. proekt. RAN Publ., 2011. 70 p.
2. Frolov, S. M. Impul'snye detonatsionnye dvigateli, [Pulse detonation engine]. Moscow, TORUS PRESS Publ., 2006. 592 p.
3. Smirnov, N. N., Nikitin V. F. Vliyanie geometrii kanala i temperatury smesi na perekhod goreniya v detona-tsiyu v gazakh [Effect of channel geometry and temperature of the mixture in the combustion detonation transition-tion in gases] Fizika goreniya i vzryva – Physics of burning and explosion, 2004. vol. 40, no. 2, pp. 68-83.
4. Cherchin'yan, K. Teoriya i prilozheniya uravneniya Bol'tsmana [Theory and applications of the Boltzmann equation]. Moscow, Mir Publ., 1978. 496 p.
5. Alder, B. J., Wainwright, T. Molecular Dynamics by Electronic Computers. Proceedings of the International Symposium on Transport Processes in Statistical Mechanics, New York, Interscience Publ., 1958, pp. 97-131.
6. Chernyshev, Yu. C. Reshenie zadach imitatsionnogo modelirovaniya povedeniya bol'shogo kolichestva model'nykh chastits [Simulation tasks Solution behavior of a large number of model particles]. Kharkov, KhAI Publ., 2006. 58 p.
7. Chernyshev, Yu. C. Sobytiinoe programmirovaniye. Primeneniye k resheniyu nekotorykh zadach fiziki [Event-driven programming. Application to the solution of some problems of physics]. Kharkov, KhAI Publ. 2008. 60 p.
8. Chernyshev, Yu. C. Metody vychisleniya statisticheskikh parametrov v sobytiinom modelirovanii [Methods of calculating the statistical parameters in the event simulation]. Kharkov, Faktor Publ., 2014. 244 p.
9. Khaikenko, O. V., Chernyshev, Yu. C. Optimizatsiya protsessa rascheta parametrov detonatsionnoi volny [Optimization of the process of calculating the detonation wave parameters] Aviatcionno-kosmicheskaya tekhnika i tekhnologiya – Aerospace technic and technology, Kharkov, KhAI Publ., no. 1/118, 2015, pp. 68-73.
10. Telesnin, R. V. Molekulyarnaya fizika [Molecular physics]. Moscow, Vyssh. shk. Publ., 1965. 298 p.
11. Slepicheva, M., Chernyshev, Yu. Basteev, A., Bazyma, L., Ugryumov, M. Properties Modeling of Low-Dimensional Carbon Nanostructur. Fundamentals of Low-Dimensional Carbon Nanomaterials. Edited by John J. Boeckl. Mater. Res. Soc. Symp. Proc., 2011, vol. 1284, pp. 149-154.
12. Chernyshev, Yu. K., Khaikenko, O. V. Modelirovanie samoorganizatsii khimicheskikh soedinenii

Fm3m-kristallograficheskoi gruppy v izotermicheskom priblizhenii [Modeling of self-organization of chemical compounds Fm3m-crystallographic groups in the isothermal approximation] *Otkrytye informatsionnye i komp'yuternye integrirovannye tekhnologii – Open in-*

formation and computer integrated technologies, Kharkov, KhAI Publ., 2013, vol. 61, pp. 98-104.

13. Prigogine, I., Stengers, I. *Order out of chaos. Man's new dialogue with nature*. Heinemann, London, 1984. 430 p.

Поступила в редакцию 28.04.2016, рассмотрена на редколлегии 12.05.2016

ПОДІЄВЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДЕТОНАЦІЇ В СИСТЕМІ ГАЗ-ПОРШЕНЬ З ВИСОКИМ СТУПЕНЕМ СТИСНЕННЯ

О. В. Хайленко, М. О. Хайленко, Ю. К. Чернышев

Наведено результати імітаційного моделювання виникнення і поширення ударної хвилі в сильно стислому одноатомному газі з можливим виникненням детонаційної хвилі. Використовувалася спрощена модель твердих сфер з додаванням властивості виникнення екзотермічної реакції в парних зіткненнях в умовах подолання енергетичного бар'єра. Розглянуто процес виникнення детонації з подальшим виштовхуванням поршня з робочої області при різних параметрах процесу. Виявлено наявність пульсацій тиску на стінку поршня.

Ключові слова: подієве моделювання, поправки до тиску, тверді сфери, детонація, поршень.

DETONATION EVENT-DRIVEN SIMULATION IN GAS-PISTON SYSTEM WITH HIGH COMPRESSION RATE

O. V. Khaylenko, M. A. Khaylenko, Y. C. Chernyshev

The results of the simulation and the emergence of shock wave propagation in highly compressed monatomic gas with the possible emergence of a detonation wave. Used a simplified model of hard spheres with the addition of properties occurrence of exothermic reactions in binary collisions in the conditions to overcome the energy barrier. The process of detonation and then pushes the piston out of the working area for various process parameters. Detect the presence of the pressure pulsations in the piston wall

Keywords: event simulation, the amendments to the pressure, solid spheres, knocking, piston.

Хайленко Олег Викторович – аспирант кафедри інформатики, Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт», Харьков, Украина, e-mail: oleg_hai@bigmir.net.

Хайленко Маргарита Александровна – канд. техн. наук, доцент кафедри інформатики, Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт», Харьков, Украина, e-mail: margarita.khaylenko@gmail.com.

Чернышев Юрий Константинович – канд. техн. наук, доцент, профессор кафедри інформатики, Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт», Харьков, Украина, e-mail: annu_cern@hotmail.com.

Khaylenko Oleg – graduate student of the Department of Informatics of the National Aerospace University "Kharkiv aviation Institute", Kharkiv, Ukraine, e-mail: oleg_hai@bigmir.net.

Khaylenko Margarita – Ph.D., Associate Professor, Department of Informatics of the National Aerospace University "Kharkiv aviation Institute", Kharkiv, Ukraine, e-mail: margarita.khaylenko@gmail.com.

Chernyshev Yuriy – Ph.D., Associate Professor, Professor, Department of Informatics of the National Aerospace University "Kharkiv aviation Institute", Kharkiv, Ukraine, e-mail: annu_cern@hotmail.com.