

01

## Статистическое моделирование течения предварительно колебательно возбужденного водорода в ударной трубе и возможность „физической детонации“

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

Институт проблем химической физики РАН,  
142432 Черноголовка, Московская область, Россия  
e-mail: kuls@icp.ac.ru

(Поступило в Редакцию 1 ноября 2015 г.)

Метод Монте-Карло нестационарного статистического моделирования применен для численного моделирования задачи о фронте ударной волны в колебательно-возбужденном  $H_2$ , помещенном в канал низкого давления (КНД) ударной трубы. Полагалось, что колебательная температура  $H_2$  была 3000 К. Рассматривались случаи частично и полностью возбужденного  $H_2$ . Газом-толкателем также был равновесный  $H_2$ , но с концентрацией, в 50 раз большей, чем  $H_2$  в КНД. Дополнительно интенсивность ударной волны варьировалась путем подогрева газа толкателя. Показано, что при достаточно слабом переходе предварительно запасенной колебательной энергии в поступательную наблюдается замедление волны со временем. В случае довольно интенсивного обмена колебательной энергии, когда газ-толкатель подогрет и в КНД находится полностью колебательно-возбужденный  $H_2$ , имеет место увеличение скорости волны со временем (приблизительно в 1.5 раза). Это приводит к „физической детонации“, когда параметры волны начинают определяться переходом колебательной энергии в тепловую и не зависят от условий ее инициирования.

### Введение

Детонация газовых смесей представляет собой интересное и сложное явление, систематическим изучением которого занимаются уже более века [1]. Возникает вопрос: а может ли при определенных условиях вызывать детонацию не химическая, а физическая энергия, сосредоточенная на внутренних степенях свободы, например, в колебательно-возбужденных молекулах. Если это возможно, то такую детонацию можно назвать „физической детонацией“. Колебательно возбужденный  $H_2$  является наиболее подходящим газом для реализации „физической детонации“ [2]. Ниже представлены результаты моделирования течения предварительно колебательно-возбужденного водорода в ударной трубе и изучено влияние выделяемой колебательной энергии на параметры потока.

### 1. Постановка задачи

На первой стадии исследований в начальный момент канал низкого давления (КНД) ударной трубы заполнялся двумя равными частями  $H_2$ . Одной частью является водород с начальной колебательной температурой 3000 К. (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 292 К. 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) вначале заполняется  $H_2$  при гораздо более высоком давлении. И начинается численное моделирование процесса в ударной трубе.

### 2. 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 [3]. Основные детали моделирования ударной волны (УВ) в ударной трубе (УТ) приведены в [4]. 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  $\Delta t$  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  $\Delta x$  не превышал среднюю длину свободного пробега моле-

кул в газе  $\lambda$ , 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  $\Delta x$  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. разд. 11.3 в [3]). 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 ( $\Delta_i$ ) 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  $c \leq g < 9749$  м/с  $R_{i2} = 0.00005$ , при  $g \geq 9749$  м/с  $R_{i2} = 0.01$ . Это сделано так, чтобы зависимость времени колебательной релаксации  $\tau_v$   $H_2$  от температуры соответствовала реальности. При определении скоростей пары частиц после столкновения полагалось, что изменение энергии поступательного движения рассматриваемой пары равно по абсолютной величине и противоположно по знаку изменению внутренней энергии данных частиц.

Полагалось, что  $\Delta t = 0.04$ . Здесь и далее  $t$  нормировано на  $\lambda_1/u$ , где  $\lambda_1$  есть  $\lambda$  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  $\lambda_1$ . 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. Приме-

нялась блочная декомпозиция области моделирования [4,5]. 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 [6]. Это дает возможность, повышая в принципе число процессоров вплоть до нескольких тысяч, расширять области моделирования, не увеличивая практически 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 [4,5], такая организация параллельных вычислений является, вероятно, наиболее разумной.

### 3. Проверка заложенной модели колебательной релаксации

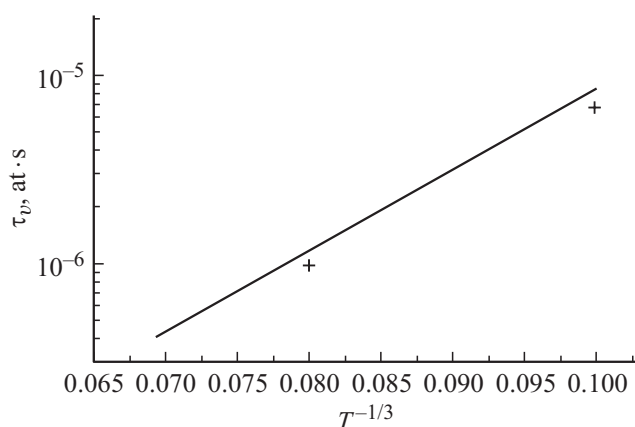
Выше указывалось, что были подобраны параметры модели колебательной релаксации со стоком энергии, которые обеспечивали реальные  $\tau_v$  для  $H_2$  при различных температурах. Проверка проводилась следующим образом: в КНД моделировались условия, соответствующие  $T_1 = 1000$  К и  $T_1 = 2000$  К, и задавались начальные колебательные температуры  $T_{v1}$ , равные 3000 К при обеих  $T_1$ . Чтобы использовать одни коды во избежание дополнительных внесенных ошибок моделировалась произвольная УВ. До того времени, пока она не подходила близко к левому краю области моделирования, прослеживалось изменение колебательной температуры со временем  $T_{vt}$ . Это позволяло получить  $\tau_v$  из определяющей формулы

$$dT_v/dt = (T_v - T_{v1})/\tau_v.$$

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

### 4. Результаты моделирования на первой стадии исследований

Ранее была создана вычислительная программа моделирования УВ в УТ для газов [4]. Она позволяла в нашем случае проводить корректные расчеты при отношении начальных давлений в КВД и КНД 50 без значительной ее 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 (в области ударно нагретого газа из КНД). При этом будет и малое изменение колебательной энергии ( $E_v$ ) в пробке. Результаты моделирования это подтвердили.



**Рис. 1.** Экспериментальная зависимость  $\tau_v$  от температуры [7] (сплошная линия) и полученные результаты численного моделирования (крестики).

Так, температура в пробке была 1.7 ( $\sim 500$  К). Здесь и ниже температура ( $T$ ) нормирована на  $T_1$ , скорость на  $u$ . Уменьшение  $E_v$  за время пребывания  $\text{H}_2$  в пробке составило 0.5%.

Интересно отметить, что скорость волны  $D = 1.730 \pm 0.015$  на начальной стадии ее 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.

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  $\Delta_x$  в КВД и соответственным увеличением времени счета и разумного числа процессоров. Более простой и экономный путь — это увеличение температуры газа в КВД при сохранении числа процессоров, незначительного изменения времени счета 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  $E_v$ .

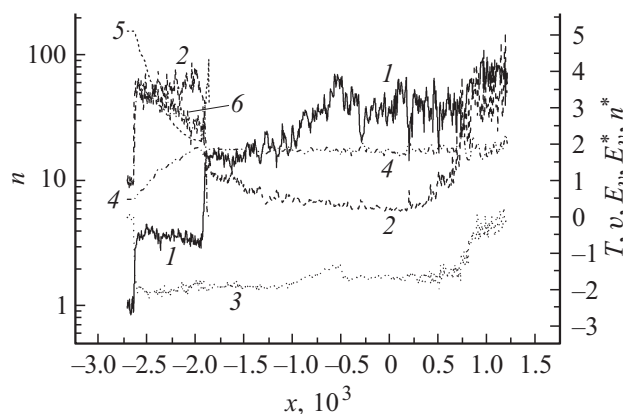
Было проведено моделирование, когда в начальный момент в КВД помещался полностью равновесный  $\text{H}_2$ , подогретый до температуры  $T_k = 4$  (1170 К). Все остальные параметры моделирования неизменны. Результаты представлены на рис. 2 в момент времени моделирования 884.2. Здесь приведены профили концентраций равновесного ( $n$ ) и колебательно возбужденного ( $n^*$ )  $\text{H}_2$ , полных кинетических температур ( $T$ ), продольных скоростей ( $v$ ),  $E_v$  для равновесного и  $E_v^*$  для возбужденного  $\text{H}_2$  в момент времени моделирования 884.2. В данный момент фронт волны почти вплотную подошел к левому краю области моделирования. Здесь и ниже  $n$  нормирована на начальную  $n^*$  в КНД. 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  $T_v$   $\text{H}_2$  в КНД равнялась 5.14. На

этом рисунке температуры и скорости колебательно возбужденного и равновесного  $\text{H}_2$  совпадают там, где они перекрываются. Значения для  $n^*$  чуть меньше, чем для  $n$ , но значения  $n$  приведены в логарифмическом масштабе в отличие от значений  $n^*$ . Поэтому они заметно различаются на рис. 2.

Как видно, колебательная релаксация идет в этом случае более интенсивно. Но в пробке наряду с уменьшением  $E_v^*$ , предварительно возбужденного в КНД,  $\text{H}_2$  идет рост  $E_v$  предварительно невозбужденного в КНД  $\text{H}_2$ . 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 возбужденного в КНД  $\text{H}_2$ .

Интересно отметить, что скорость УВ, как и выше, падает по мере продвижения в КНД. Так,  $D = 3.370 \pm 0.4$  на начальной стадии ее 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, так как во втором случае процесс колебательно-поступательного энергообмена более интенсивен.

Как видно, ничего похожего на „физическую детонацию“ не наблюдается. В рассмотренных примерах только малая часть первоначально запасенной колебательной энергии переходит на поступательные степени свободы. Значительная ее часть идет на возбуждение колебательных и вращательных степеней свободы первоначально равновесного  $\text{H}_2$  и вращательных степеней свободы первоначально возбужденного  $\text{H}_2$  в КНД. Чтобы уменьшить этот эффект, было решено на второй стадии исследований рассмотреть случай колебательного возбуждения всего  $\text{H}_2$  в КНД, т.е. отсутствия равновесного  $\text{H}_2$  в КНД, и продолжить поиск условий возникновения „физической детонации“.



**Рис. 2.** Профили параметров  $\text{H}_2$ , колебательно возбужденного в КНД и первоначально нагретого в КВД: 1 —  $n$ , 2 —  $T$ , 3 —  $v$ , 4 —  $E_v$ , 5 —  $E_v^*$ , 6 —  $n^*$ .

### 5. Изменение постановки задачи

На второй стадии исследований в начальный момент КНД заполнялась только колебательно-возбужденным до 3000 К (при принятой нормировке 5.14)  $H_2$ , а вращательная и поступательная температуры были равны  $T_1$ , которая, как и на предыдущей стадии, задавалась равной 292 К. Все остальное, как и выше. В данном случае КВД заполнялась подогретым  $H_2$ .

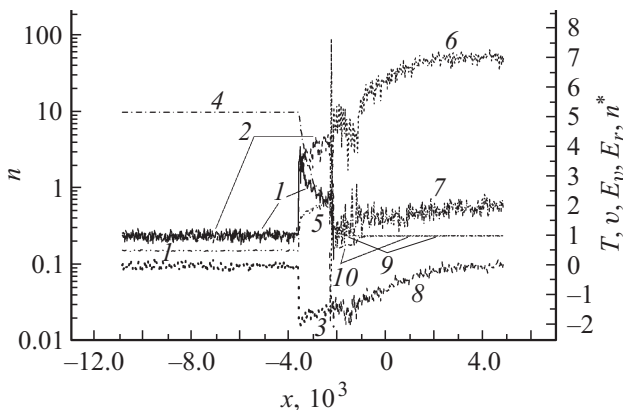
### 6. Результаты моделирования на второй стадии исследований

Далее были проведены расчеты с увеличенной областью моделирования. При этом размер КВД составлял 4795.2, а КНД — 10873.2. Это связано с тем, чтобы иметь возможность более продолжительное время исследовать релаксационные процессы в пробке.

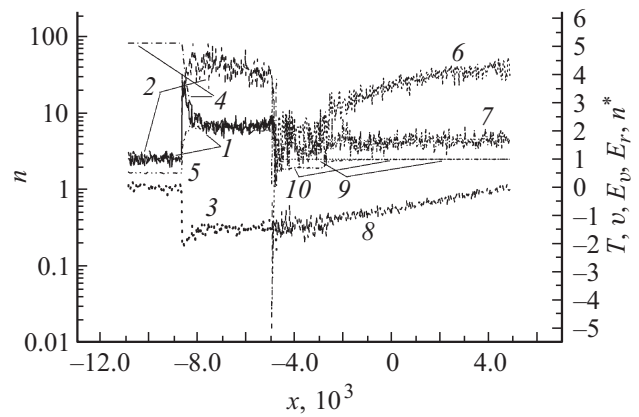
Ниже на рис. 3,4 представлены результаты расчетов двух различных времен моделирования, когда в начальный момент в КВД помещался полностью равновесный  $H_2$ , подогретый до температуры  $T_k = 2$  (585 К). Дополнительно показана средняя вращательная энергия молекул  $E_r$ . Ее нормировка аналогична нормировке  $E_v$ . Кроме того, профили параметров газа, первоначально находившегося в КНД, отмечены звездочкой, как и в разд. 4. Только значения  $n$  представлены в логарифмическом масштабе. На рис. 5 приведены величины скорости волны  $D$ .

Наблюдается заметное изменение вида профилей параметров газа со временем в пробке (рис. 3 и 4). При этом максимум температуры возрастает и перемещается ближе к передней кромке фронта (к левому краю пробки).

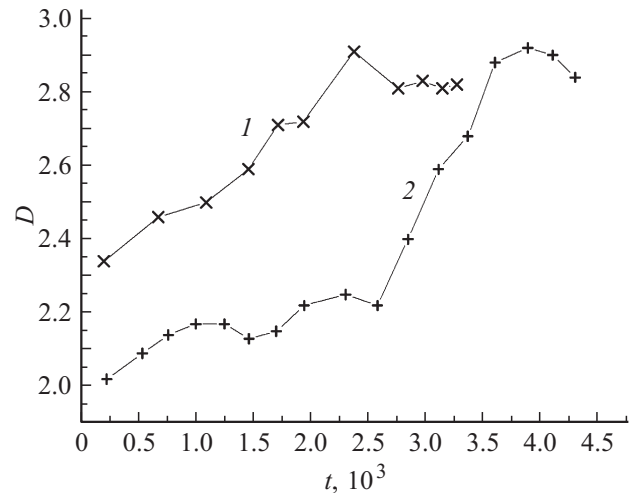
Следует отметить, что графики на рис. 3,4,6,7 получены при выборке параметров потока через пространственные интервалы 25.483. Чтобы получить достаточную точность определения  $D$ , пришлось в ряде случаев



**Рис. 3.** Профили параметров  $H_2$ , колебательно возбужденного в КНД и первоначально нагретого в КВД при  $t = 1454.7$ : 1 —  $n^*$ , 2 —  $T^*$ , 3 —  $v^*$ , 4 —  $E_v^*$ , 5 —  $E_r^*$ , 6 —  $n$ , 7 —  $T$ , 8 —  $v$ , 9 —  $E_v$ , 10 —  $E_r$ .



**Рис. 4.** Профили параметров  $H_2$ , колебательно возбужденного в КНД и первоначально нагретого в КВД при  $t = 3269.725$ : 1 —  $n^*$ , 2 —  $T^*$ , 3 —  $v^*$ , 4 —  $E_v^*$ , 5 —  $E_r^*$ , 6 —  $n$ , 7 —  $T$ , 8 —  $v$ , 9 —  $E_v$ , 10 —  $E_r$ .

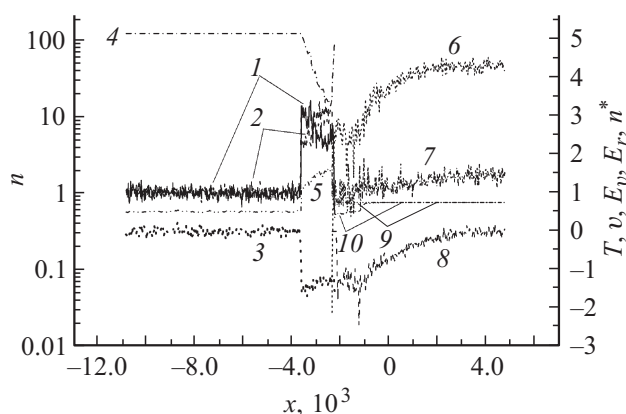


**Рис. 5.** Зависимость скорости волны  $D$  от времени моделирования.

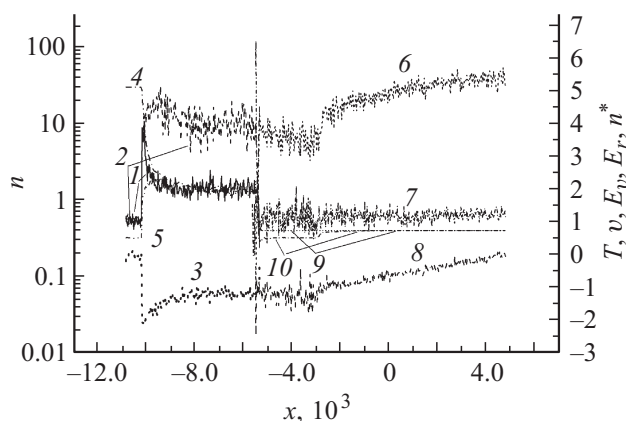
делать выборки в каждой ячейке. Достигнутый разброс значений  $D$  укладывался в интервал  $\pm 0.03$ .

Видно, что со временем по мере увеличения долготы пребывания газа в пробке в силу ее уширения  $D$  существенно увеличивается и выходит на стационарное значение, которое немного меньше максимального (рис. 5). Это свидетельствует о значительной перестройке волны и возникновении „физической детонации“. Следует отметить, что при менее сильном переходе внутренней энергии на поступательные степени свободы (разд. 4) наблюдалась противоположная зависимость  $D$  от времени.

Можно рассматривать  $H_2$  как бесструктурный газ, но с некоторой внутренней энергией. Разность данных энергий перед и за фронтом будет тепловым эффектом реакции  $Q$ . Так как в рассматриваемом случае перед фронтом и за фронтом волны только частицы одной массы, то для определения скорости детонации можно



**Рис. 6.** Профили параметров  $\text{H}_2$ , колебательно возбужденного в КВД и первоначально нагретого в КВД при  $t = 1697.6$ : 1 —  $n^*$ , 2 —  $T^*$ , 3 —  $v^*$ , 4 —  $E_v^*$ , 5 —  $E_r^*$ , 6 —  $n$ , 7 —  $T$ , 8 —  $v$ , 9 —  $E_v$ , 10 —  $E_r$ .



**Рис. 7.** Профили параметров  $\text{H}_2$ , колебательно возбужденного в КВД и первоначально нагретого в КВД при  $t = 4298.55$ : 1 —  $n^*$ , 2 —  $T^*$ , 3 —  $v^*$ , 4 —  $E_v^*$ , 5 —  $E_r^*$ , 6 —  $n$ , 7 —  $T$ , 8 —  $v$ , 9 —  $E_v$ , 10 —  $E_r$ .

воспользоваться формулами, полученными в [8]. Они приведены ниже. Для рассматриваемого случая есть аналитическое выражение для адиабаты Гюнионо:

$$p_2/p_1 = (4 + 2Q/kT_1 - n_1/n_2)/(4n_1/n_2 - 1).$$

Здесь индексы 1 и 2 относятся к параметрам потока перед и за волной. Отсюда легко получается аналитическое выражение для параметров в точке Чепмена-Жуге. Если обозначить  $z = 2Q/kT_1$ , то

$$n_1/n_2 = [2(z + 5) - (4z^2 + 15z)^{1/2}]/10,$$

$$D/u = [(T_2/T_1) - (n_1/n_2)]/[2(n_1/n_2)(1 - (n_1/n_2))]^{0.5}.$$

Следует напомнить, что величины  $E_{v1} = 5.14$ ,  $E_{r1} = 0.5$ . Данные, представленные на рис. 8, позволяют оценить значения  $E_{v2}$  и  $E_{r2}$  в интервале от 1.8 до 2.1, а  $T_2 = 4$ . Следовательно,  $Q$  лежит в интервале от 1.64

до 2. Отсюда скорость детонационной волны  $D$  может меняться в интервале от  $2.72u$  до  $2.75u$ , что очень близко к величине  $D = 2.81u$ , полученной при численном моделировании. Это является дополнительным аргументом в пользу того, что реализован случай „физической детонации“.

Кроме того, было выполнено моделирование, когда в начальный момент в КВД помещался полностью равновесный  $\text{H}_2$ , подогретый до еще меньшей температуры  $T_k = 1.5$  (439 К). Полученные результаты представлены на рис. 5–7 для двух различных времен моделирования. Обозначения на рис. 6, 7 такие же, как и на рис. 3, 4.

Эволюция профилей предварительно колебательно-возбужденного  $\text{H}_2$  в пробке (рис. 6 и 7) во многом аналогична рассмотренному выше случаю  $T_k = 2$  (рис. 3 и 4). В силу меньшего нагрева  $\text{H}_2$  и соответственно меньшего давления в КВД на начальной стадии образования пробки (рис. 5, 6)  $D$  и  $T$  в ней ниже для случая  $T_k = 1.5$  чем для случая  $T_k = 2$  (рис. 3–5). Но при выходе  $D$  на стационар обнаруживается удивительное совпадение фактически с точностью до статистического разброса профилей параметров в пробке для этих нескольких различных способов инициирования волны (рис. 4 и 7). Это является еще одним аргументом того, что для случаев  $T_k = 1.5$  и 2 ударная волна переходит в детонационную. Ведь хорошо известно, что параметры классической детонационной волны в заданной газовой среде не зависят от способа инициирования детонации.

Видно, что при  $T_k = 1.5$  со временем по мере увеличения долготы пребывания газа в пробке  $D$  существенно увеличивается и достигает значения 2.84, практически такого же как при  $T_k = 2$  (рис. 5). Как и в случае  $T_k = 2$ , это подтверждает факт возникновения „физической детонации“. В силу совпадения с точностью до статистического разброса профилей параметров в пробке оценка  $D$ , аналогична приведенной выше, должна дать тот же интервал значений от  $2.72u$  до  $2.75u$ .

## Заключение

Представленные результаты численного моделирования показывают, что для  $\text{H}_2$  при достаточно интенсивном переходе предварительно запасенной колебательной энергии на поступательные степени свободы имеет место „физическая детонация“. При этом, как и для случая классической детонационной волны, ее параметры в заданной газовой среде не зависят от условий инициирования детонации. При переходе от УВ к „физической детонационной волне“  $D$  сильно возрастает.

## Список литературы

- [1] Физика взрыва / Под ред. Л.П. Орленко. Т. 1. М.: Физматлит, 2002. 832 с.
- [2] Евтюхин Н.В., Марголин А.Д., Шмелёв В.М. // Хим. физика. 1985. Т. 4. № 9. С. 1276–1280.

- [3] *Berd G.* Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981. 319 с. [Bird G.A. Molecular gas dynamics. Clarendon Press, Oxford, 1976].
- [4] *Куликов С.В.* // Хим. физика. 2008. Т. 27. № 12. С. 40-45.
- [5] *Куликов С.В., Терновая О.Н.* // Вычисл. методы и програм. 2004. Т. 5. № 2. С. 5-9.
- [6] *Snir M., Otto S., Huss-Lederman S., Walker D., Dongarra J.* MPI: The Complete Reference. V. 1. The MPI Core. Boston: MIT Press, 1998.
- [7] *Kiefer J.H., Lutz R.J.* // J. Chem. Phys. 1966. Vol. 44. P. 668.
- [8] *Куликов С.В., Покатович Г.А., Терновая О.Н.* // Хим. физика. 2008. Т. 27. № 5. С. 49-52.