

В.Э. Борзых, Б.В. Семенов, С.Н. Соколко

ПРОЕКТИРОВАНИЕ АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ПРОЦЕССОВ САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗА

Статья посвящена вопросам создания автоматизированной системы для изучения процессов самораспространяющегося высокотемпературного синтеза. В качестве примера рассмотрена задача зажигания с лазерным иницированием реакции. Такая система позволит использовать вычислительную технику для исследования математических моделей СВС-процессов и проведения компьютерных экспериментов имитационного моделирования.

Самораспространяющийся высокотемпературный синтез, исследование, автоматизация, SADT.

Самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС) — безгазовое горение, в результате которого образуются новые вещества, обладающие уникальными свойствами [5]. Процессы СВС все еще слабо изучены, решаемые при моделировании задачи остаются сложными, а исследование каталитических свойств получаемых по данной технологии материалов представляет немалый интерес. Поэтому актуально создание автоматизированной системы (АС) [3] для изучения СВС-процессов, которая, в частности, позволит проводить исследование свойств и применимости новых материалов посредством компьютерных экспериментов имитационного моделирования [2].

В области изучения СВС разработан целый ряд физических моделей исследуемых процессов, построены математические модели данных процессов [1, 2]. Однако создание компьютерных моделей СВС-экспериментов до сих пор остается актуальной задачей. Особый интерес представляет возможность автоматизированного построения компьютерных моделей средствами системы на основе задаваемых исследователем математических моделей рассматриваемых процессов (например, путем набора экранных форм либо средствами внутреннего языка). При этом следует предусмотреть возможность изменять и уточнять модель в ходе компьютерного эксперимента.

Очевидно, что в состав АС необходимо включить базу данных (БД), содержащую теплофизические свойства веществ, участвующих в реакции синтеза, и таблицу статистических параметров. Эта БД должна быть пополняемой, а ее структура — достаточно гибкой для того, чтобы хранить разнородные справочные и экспериментальные данные и служить надежной платформой хранения, обеспечивающей дальнейшее совершенствование системы. Этого можно добиться применением реляционной СУБД. Кроме БД в АС целесообразно включить базу знаний (БЗ), содержащую сведения из области СВС. БЗ следует снабдить поисковой системой и средствами ее пополнения.

При реализации АС желательно использовать свободное программное обеспечение. В частности, это ОС Linux, СУБД PostgreSQL в качестве подсистемы хранения, система ROOT в качестве подсистем расчетов и визуализации, средства разработки на основе библиотеки QT. Применение библиотеки QT и системы ROOT позволит повысить переносимость полученного про-

граммного комплекса и обеспечить его запуск под управлением других ОС (в частности, Microsoft Windows).

Рассматриваемая система ориентирована на поддержку теоретических и экспериментальных исследований. Основной задачей блока экспериментальных исследований является обработка первичной экспериментальной информации и ее хранение. Блок синтеза компьютерных моделей ориентирован прежде всего на проведение численных экспериментов при имитационном моделировании.

Среди представляющих интерес процессов можно выделить зажигание, горение и формирование компактной структуры [1, 2]. Для инициирования процесса синтеза могут применяться различные способы (в частности, метод электротеплового взрыва и лазерное инициирование реакции).

В качестве примера рассмотрим задачу о лазерном зажигании конденсированного вещества [1]. Математическая постановка данной задачи включает уравнение теплопроводности с источником и уравнение кинетики [1]:

$$\begin{cases} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \Phi, \\ \frac{\partial \eta}{\partial t} - k_0 \exp(-\sigma_1 \eta) \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \cdot r_0^{n+1} \cdot \eta^n, \end{cases} \quad (1)$$

а также следующие начальные и граничные условия [1]:

$$\begin{aligned} -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} &= q - \varepsilon \sigma_0 (T^4 - T_0^4), \text{ при } x = 0, \\ \frac{\partial T}{\partial x} &= 0, \text{ при } x = \infty, \\ T &= T_N, \eta = \eta_N, \text{ при } t = 0, \end{aligned} \quad (2)$$

где ρ , c , λ — плотность и коэффициенты теплоемкости, теплопроводности исходной реакционноспособной смеси; x — координата; q — плотность теплового потока от лазера; T_N , T_0 — начальная и окружающих тел температуры соответственно; $\eta_N = \frac{\delta_N}{r_0}$ — глубина превращения, соответствующая начальной

толщине пленки продукта реакции δ_N ; r_0 — характерный размер частицы горючего; ε — степень черноты; σ_0 — постоянная Стефана — Больцмана; T — температура; R — универсальная газовая постоянная; k_0 — предэкспонент; E — энергия активации; $\sigma_1 = \sigma_0$; σ и n — кинетические параметры, характеризующие степень торможения скорости реакции ее продуктами ($\sigma = n = 0$ — линейный закон скорости реакции; $n = 0$, $\sigma > 0$ — экспоненциальный закон). Объемная скорость тепловыделения Φ может быть представлена в виде [1]

$$\Phi = Q(1 - \eta)^a \frac{k_0 \exp(-\sigma_1 \eta)}{r_0^{n+1}} \exp\left(-\frac{E}{RT}\right), \quad (3)$$

где $Q = Q_0 a' r_0 S_0$; Q_0 — тепловой эффект реакции на единицу объема; a — доля горючего компонента в смеси; S_0 — начальная поверхность частицы; δ — текущая толщина слоя продукта реакции; a' — показатель формы частицы ($a' = 0$ — пластина, $a' = 1$ — цилиндр, $a' = 2$ — шар).

Если в качестве T принять температуру зажигания T_z , то решение задачи примет вид [1]

$$\ln\left(\frac{q_s}{T_z}\right) = \frac{1}{2} \ln\left(\frac{R\lambda\rho(Qk)_0}{E}\right) - \frac{E}{2RT_z}, \quad (4)$$

где

$$T_z = T_N + 2q_s \sqrt{\frac{t_z}{\pi\lambda\rho c}}, \quad (5)$$

$$q_s = q - \varepsilon\sigma_0(T^4 - T_0^4). \quad (6)$$

Уравнение (4) в координатах $Y = \ln\left(\frac{q_s}{T_z}\right)$ и $X = \frac{1}{T_z}$ представляет собой

прямую линию, тангенс угла наклона к оси X которой есть величина $\frac{E}{2R}$, а

отсекаемый этой прямой на оси Y отрезок есть величина $\frac{1}{2} \ln\left(\frac{R\lambda\rho(Qk)_0}{E}\right)$.

Таким образом, зная t_z , $\lambda\rho c$, ε , можно определить формальные кинетические параметры реакции синтеза порошковых систем лазерным излучением.

Для определения T_z воспользуемся соотношением [1]

$$Nt_z^4 + T_z - S = 0, \quad (7)$$

где $N = \varepsilon\sigma_0 F$, $F = 2\sqrt{\frac{t_z}{\pi\lambda\rho c}}$, $S = Fq_z + NT_0^4 + T_N$.

В период прогрева система ведет себя как инертное тело, обладающее определенными теплофизическими свойствами. Для определения комплекса $\lambda\rho c$ можно воспользоваться следующим соотношением [1]:

$$\lambda\rho c = \frac{\pi\Delta\tau_k \{q - \varepsilon\sigma_0 [T_w^4 - T_0^4]\}}{4 \left[\sum_{s=1}^k (T_s - T_{s-1})(\sqrt{k-s+1} - \sqrt{k-s}) \right]^2}, \quad (8)$$

где $T_s = T_w(t_s) = T_w(s \cdot \Delta\tau)$, $s = 1, 2, \dots, k$; $\Delta\tau$ — временной интервал измерения температуры.

Рассмотрим порядок работы с экспериментальными данными при определении формальных термокинетических параметров. Вначале по известной опытной зависимости температуры на поверхности образца от времени и для заданной степени черноты определяется комплекс $\lambda\rho c$. Затем с использованием экспериментальных значений периода индукции и плотности потока находится температура зажигания и сравнивается с полученной из эксперимента. После этого по известным температуре зажигания и плотности потока вычисляются энергия активации и предэкспонент.

Вышеперечисленные параметры определяются для отдельной полученной экспериментально зависимости. В результате проведения эксперимента получается семейство таких зависимостей и набор значений исследуемых параметров. Будем считать, что исследуемые параметры получены в ходе прямых измерений. Тогда для статистической обработки результатов измерений можно воспользоваться следующей методикой [6]:

- 1) исключить (или уменьшить) систематические погрешности из стохастического ряда измерений;
- 2) упорядочить выборку в виде вариационного ряда и провести проверку на «нормальность» с помощью критерия W по СТ СЭВ 1190-78;
- 3) вычислить среднеарифметическое значение выборки;
- 4) вычислить среднеквадратичное отклонение по формуле Бесселя;
- 5) вычислить среднеквадратичное отклонение результата измерения по ГОСТ 11.0004-74 и СТ СЭВ 876-78;
- 6) определить доверительные границы случайной составляющей погрешности по ГОСТ 8.207-76;
- 7) провести отсев промахов по критерию Стьюдента;
- 8) вычислить доверительные границы не исключенных остатков систематической погрешности;
- 9) вычислить доверительные границы общей погрешности результата измерения по ГОСТ 8.207-76.

Методология IDEF0 [4, 7] позволяет наиболее наглядно отобразить взаимосвязи между этапами процесса определения термокинетических параметров. Диаграмма A-0 для данного процесса представлена на рис. 1. В качестве входов выступают полученные в ходе эксперимента данные, управление — приведенные выше соотношения, механизмы — рассматриваемая автоматизированная система, выходы — значения формальных термокинетических параметров (комплекс $\lambda_{рс}$, расчетная температура зажигания, результаты сравнения расчетной и полученной из эксперимента температур зажигания, предэкспонент, энергия активации).

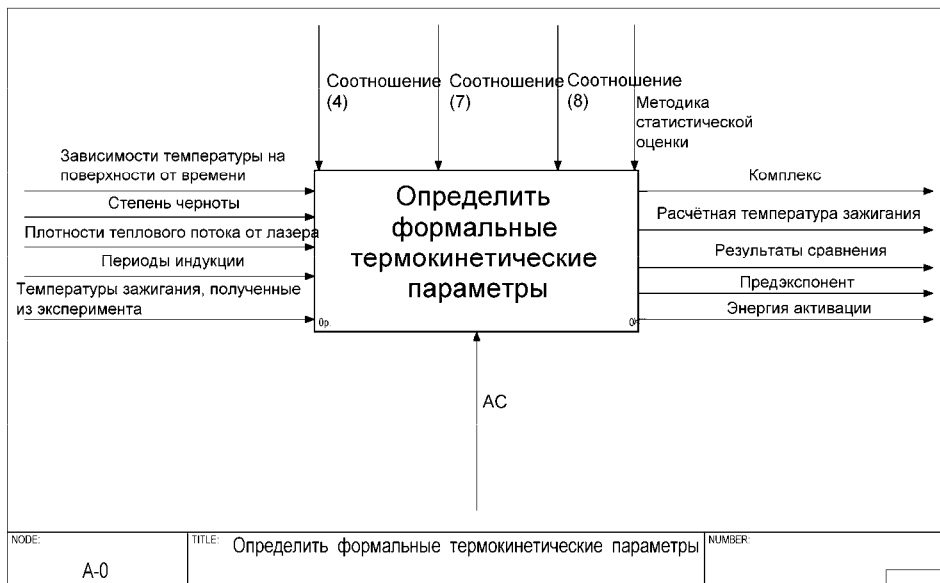


Рис. 1. Диаграмма A-0 для процесса определения формальных термокинетических параметров в методологии IDEF0

Изображенная на рис. 2 диаграмма детализирует диаграмму A-0 и определяет блоки, на которые разбивается процесс определения термокинетических параметров: определение параметров отдельной кривой и статистическая обработка результатов.

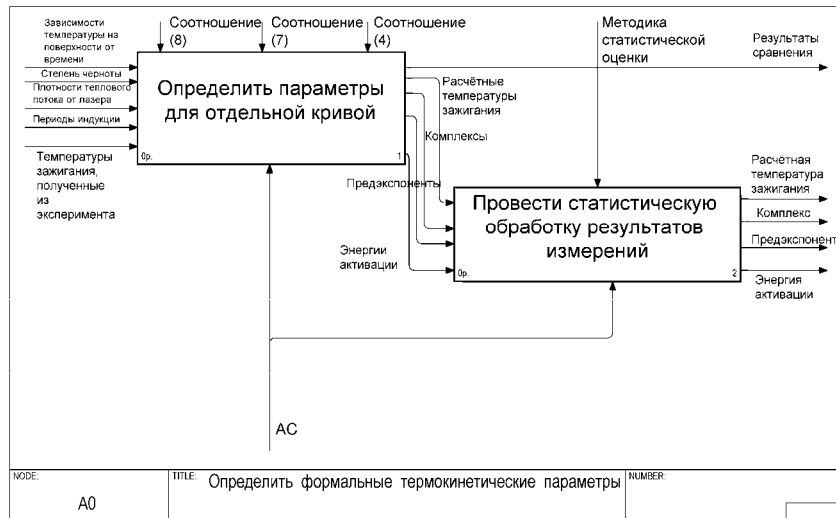


Рис. 2. Диаграмма A0 для процесса определения формальных термокинетических параметров в методологии IDEF0

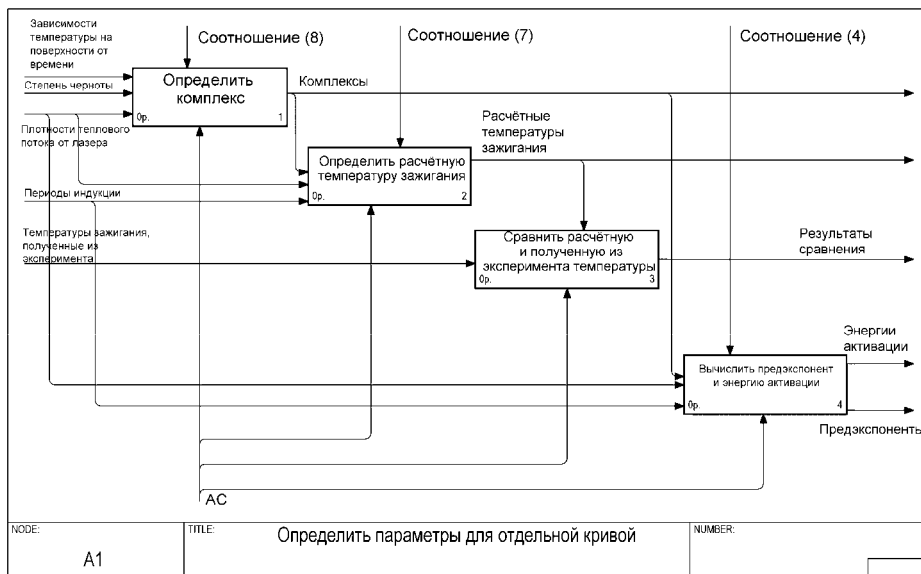


Рис. 3. Диаграмма A1 для процесса определения формальных термокинетических параметров в методологии IDEF0

На рис. 3 приведена диаграмма A1 методологии IDEF0. Она отражает тот факт, что вначале необходимо рассчитать комплекс по формуле (8), затем — вычислить расчётную температуру зажигания из соотношения (7), сравнить ее с полученной в ходе эксперимента. Предэкспонент и энергия активации могут быть вычислены из соотношения (4).

Наглядно процесс статистической обработки результатов в соответствии с изложенной выше методикой приводится на диаграмме A2 (рис. 4).

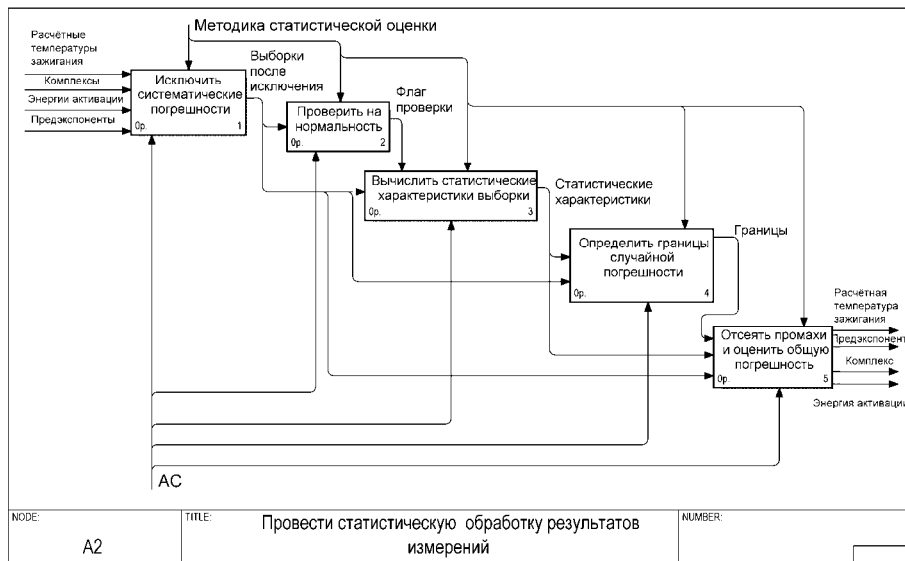


Рис. 4. Диаграмма A2 для процесса определения формальных термокинетических параметров в методологии IDEF0

Таким образом, была рассмотрена задача создания АС для изучения СВС-процессов посредством компьютерного моделирования. На примере задачи о лазерном зажигании показано, что представленный алгоритм может быть включен в АС в качестве одного из модулей. Решение этой задачи позволяет получить значения формальных термокинетических параметров, а также рассмотреть механизмы взаимодействия реагентов в различных условиях.

ЛИТЕРАТУРА

1. Борзых В.Э., Дорохов А.Р., Шляев М.И. К вопросу о лазерном зажигании порошковых систем никель-алюминий // Физика горения и взрыва. Т. 30, № 2. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 1994. С. 14–18.
2. Борзых В.Э., Семенов Б.В., Соколко С.Н. Организация вычислительного эксперимента для задач моделирования отработанных газов через пористую структуру выпускной системы автомобиля // Вестн. кибернетики. Тюмень: Изд-во ИПОС СО РАН, 2009. № 8. С. 25–31.
3. ГОСТ 34.003-90. Информационная технология. Комплекс стандартов на автоматизированные системы. Автоматизированные системы. Термины и определения. М.: Изд-во стандартов, 1992. 21 с.
4. Марка Д. А., МакГоуэн К. Методология структурного анализа и проектирования SADT. М.: Метатехнология, 1993. 239 с.
5. Мержанов А.Г. Концепция развития самораспространяющегося высокотемпературного синтеза как области научно-технического прогресса. Черноголовка: Территория, 2003. 368 с.
6. Рего К.Г. Метрологическая обработка результатов технических измерений: Справ. пособие. К.: Техніка, 1987. 128 с.
7. Черемных С.В., Семенов И.О., Ручкин В.С. Моделирование и анализ систем. IDEF-технологии: Практикум. М.: Финансы и статистика, 2006. 192 с.

V.E. Borzykh, B.V. Semyonov, S.N. Sokolko

**DESIGNING AN AUTOMATICALLY CONTROLLED SYSTEM TO INVESTIGATE
PROCESSES OF SELF-PROPAGATING HIGH-TEMPERATURE SYNTHESIS**

The article is devoted to designing an automatically controlled system to investigate processes of self-propagating high-temperature synthesis (SHS). As an example, subject to consideration being a problem of ignition with laser initiation of reaction. Creation of such a system will enable to apply computer facilities for investigating mathematical models regarding SHS-processes and making computer experiments in simulation modeling.

Self-propagating high-temperature synthesis, investigation, automatic control, SADT.