

ФАНО РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И ПРИКЛАДНОЙ МЕХАНИКИ
ИМ. С.А. ХРИСТИАНОВИЧА СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ
АКАДЕМИИ НАУК
(ИТПМ СО РАН)

УДК 532.529, УДК 662.612:32

№ гос. рег. 01201351872



УТВЕРЖДАЮ

Директор ИТПМ СО РАН

Чл.-корр. РАН

[Signature] А.Н. Шиплюк

29 декабря 2016

ОТЧЕТ *№ 3/17*
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

(заключительный)

Номер проекта в ИСГЗ ФАНО 0323-2014-0014

Волновая динамика химически активных/инертных гетерогенных сред микро- и наноструктуры

Приоритетное направление П.23. Механика деформирования и разрушения материалов, сред, изделий, конструкций, сооружений и триботехнических систем при механических нагрузках, воздействии физических полей и химически активных сред.

Программа ФНИ СО РАН П.23.4. Механика гетерогенных, композитных сред и технологии на их основе.

Проект П.23.4.3. Волновая динамика химически активных/инертных гетерогенных сред микро- и наноструктуры

Протокол Ученого совета *ИТПМ СО РАН*
№ *12* от «*01*» *декабря* 2016 г.

Руководитель проекта:
д. ф.- м. н. А.В. Федоров

[Signature]

Список исполнителей.

от 29.12.2016 г.

- | | | | |
|---------------------|----------------------|---------|-----------------|
| 1. Федоров А.В. | зав. лаб., д.ф.-м.н. | (р.1-2) | <i>ФМ</i> |
| 2. Хмель Т.А. | в.н.с., д.ф.-м.н. | (р. 1) | <i>Хмель</i> |
| 3. Федорова Н.Н. | в.н.с., д.ф.-м.н. | (р. 1) | <i>ФН</i> |
| 4. Бедарев И.А. | с.н.с., к.ф.-м.н. | (р. 1) | <i>Бед</i> |
| 5. Кратова Ю.В. | с. н.с., к.ф.-м.н. | (р. 1) | <i>Кр</i> |
| 6. Захарова Ю.В. | н.с., к.ф.-м.н. | (р. 1) | <i>Захар</i> |
| 7. Шульгин А.В. | с.н.с., к.ф.-м.н. | (р. 1) | <i>Шу</i> |
| 8. Жилин А.А. | с.н.с., к.ф.-м.н. | (р. 2) | <i>Ж</i> |
| 9. Тропин Д.А. | н.с., к.ф.-м.н. | (р. 1) | <i>Тр</i> |
| 10. Руев Г. А. | с.н.с., к.ф.-м.н. | (р.1) | <i>Руев</i> |
| 11. Фомин П.А. | в.м., к.ф.-м.н. | (р.1) | <i>Фом</i> |
| 12. Рылова К.В. | лаборант | (р. 1) | <i>Р</i> |
| 13. Лаврук С.А. | лаборант | (р. 1) | <i>Л</i> |
| 14. Погудалина С.А. | лаборант | (р. 1) | <i>П</i> |
| 15. Ванькова О.С. | лаборант | (р. 1) | <i>Ванькова</i> |
| 16. Брагинский А.Л. | лаборант | (р. 1) | <i>Бр</i> |
| 17. Темербеков В.М. | лаборант | (р. 1) | <i>Т</i> |

Реферат

В работе развиты физико-математические модели механики гомогенных/гетерогенных реагирующих/инертных сред микро- и нано- структуры и математические технологии для решения задач взрыво-пожаробезопасности промышленных производств, основанных на использовании дисперсных сред микро - и нано – структуры (алюминий, железо и др.), а также гомогенных реагирующих сред (силан, водород, метан и др.). Впервые получены новые данные о параметрах: - воспламенения и горения, - подавления и ослабления детонационных явлений в неоднородных средах, в том числе содержащих инертные частицы, - теплофизических характеристиках наноразмерных частиц алюминия и железа, тепломассопереноса в капиллярно-пористых телах под воздействием акусто-конвективного потока. Предложены математические модели для моделирования воздействия взрывных волн на структуры, моделирующие городскую среду, позволяющие оценить устойчивость объектов относительно подобных воздействий.

Объем отчета: 162 стр., 119 рисунка, 23 таблиц.

Дата начала и окончания НИР: 2013-2016.

Ключевые слова и словосочетания: механика гетерогенных сред, воспламенение, горение, взрыв, ударные и детонационные волны, молекулярная динамика, численные методы решения задач механики гетерогенной среды, до/сверхзвуковое обтекание мелких металлических частиц, расположенных в зоне аэродинамического влияния, силано-водородо-воздушные смеси, взаимодействия потоков со структурами.

Целью проекта является получение новых научных знаний по механике реагирующих/инертных гетерогенных сред с учетом физико-химических превращений для описания динамики газовзвесей микро - и нано – размера (рабочие тела: силан, воздух,) и разработка прикладных программ для решения практических задач детонации, взрыва и их контроля. В том числе: Построение математических моделей для описания: смешения, воспламенения, горения, детонации и ее подавления в нано- и микроструктурных газовзвесах. Рабочие тела: метан, водород, силан, смеси окислителя и алюминиевых частиц. Развитие теории ударных волн во взвесах с учетом хаотического давления и исследование их устойчивости. Анализ структуры ударной волны в газовзвеси с учетом хаотического давления частиц применительно к проблеме взаимодействия УВ со слоями. Расчет взаимодействия потоков газа (дозвуковых течений, течений продуктов катастрофических взрывов бытовых и промышленных с вмещающими структурами в плане для оценки взрыво-пожаро- устойчивости промышленных и гражданских сооружений. Создать физико-математическую и программную технологию для решения задач теплопроводности жидкости в капиллярно-пористых образцах при распространения волновых процессов по смеси конденсированных материалов (твердая, жидкая и газообразная фазы). Исследование влияния акусто-конвективных волн на экстракцию влаги из капиллярно-пористых и ячеисто-пористых сред. Экспериментально исследовать механизм ускорения сушки капиллярно – пористых материалов при акусто-конвективном воздействии на этапе осушения, характеризуемом затуханием скорости сушки. Разработать математическую модель течения гранулированной реагирующей смеси газа и мелких твердых частиц.

Краткая характеристика полученных результатов:

- Создана иерархия физико-химических математических моделей для описания волновой динамики в химически и физически неравновесных нано- и микроструктурных гетерогенных средах. В том числе для несущей фазы: силан, водород, воздух. Дискретная фаза изменяется в широком диапазоне концентраций: от

инфинитезимальной до конечной, вплоть до насыпной плотности слоев металлических частиц.

- Разработана физико-математическая модель детальной, приведенной кинетики для описания воспламенения и горения реагирующего газа (водорода, силана) в рамках единого кинетического уравнения. Создан математический инструментарий в программном комплексе ANSYS, на основе которого получены новые данные о ячеистой структуре детонации.

- Для определения теплофизических свойств наночастиц алюминия, железа пакеты прикладных программ ММД DL_POLY, модификация потенциала внедренного атома, уравнения ансамбля NVT адаптированы к имеющемуся вычислительному оборудованию лаб. 12. Проведены расчеты теплофизических параметров для частиц с размерами от 3 до 8 нм характерного размера. Решена задача Стефана для наночастиц алюминия.

- Разработана физико-математическая модель механики гетерогенной среды с учетом различных давлений фаз, развита ее гиперболическая аппроксимация для взвесей. Определены области неустойчивости / устойчивости стационарных ударноволновых режимов течения различных типов (одно и двухфронтные конфигурации УВ, дисперсные и замороженные, дисперсно-замороженные УВ) при их взаимодействия с волнами разрежения в фазовом пространстве начальных концентраций частиц, скоростей их распространения.

- Созданы прикладные программы для расчета параметров двумерного нестационарного течения высокоплотной газовой взвеси, возникающего при воздействиях на смесь: - ударных волн, - волн разрежения, образующихся при катастрофических взрывах. Результаты расчетов удовлетворительно коррелируют с расчетными данными.

- Создана математическая технология в рамках гомогенного подхода к образованию конденсированного углерода, позволяющая: – учитывать возникновение наночастиц углерода в высокоскоростных высокотемпературных потоках метана, – предсказать задержку времени образования наночастиц данных веществ, при неполном сгорании газов. Это будет способствовать уточнению структуры детонационных волн.

- На основе математического моделирования динамики и воспламенения металлических частиц, взаимодействующих с ударной волной получены оценки влияния с одной стороны массо- и теплоподвода за счет воспламенения и горения частиц на газодинамику обтекания, а с другой, воздействия газодинамических особенностей течения на динамику воспламенения за счет различного взаимного расположения частиц. Получены количественные характеристики процессов воспламенения и горения частиц и показано удовлетворительное соответствие в том числе между расчетными и экспериментальными интегральными характеристиками динамики и воспламенения.

- Разработана математическая технология для описания распространения взрывных ударных волн, образовавшихся в результате детонации конденсированного взрывчатого вещества (ВВ) в окрестности призм / комплексов призм, имитирующих городскую застройку. Определены динамические ударно-волновые воздействия на строительные объекты, что является одной из основных задач при разработке защитных мероприятий по предотвращению и оценке последствий взрывов как на стадии проектирования новых зданий и сооружений, так и в условиях уже существующей застройки.

Содержание

Введение.	6
Глава 1. Моделирование задач волновой динамики реагирующих и инертных дисперсных и ультрадисперсных систем моделирование расширяющейся гетерогенной детонации в газовзвесах частиц алюминия	7
Глава 2. Математическое моделирование химических превращений в реагирующих газах (водород / силан)	15
Глава 3. Молекулярно-динамическое моделирование физических превращений в наночастицах	34
Глава 4. Математическое моделирование распространения взрывных волн и их воздействия на объекты	73
Глава 5. Математическое моделирование взаимодействия ударных волн с инертными частицами на макро- и микроуровне	117
Глава 6. Физико-математическое моделирование динамики акусто-конвективной сушки капиллярно- и волокнисто-пористых материалов	137
Заключение	156
Приложение	157

Введение.

Работа в рамках проекта была направлена на экспериментальное и теоретическое получение новых научных знаний по механике гетерогенных сред с учетом физических и физико-химических превращений, и парциальных давлений газовых компонент и собственного давления частиц дискретной фазы на примерах задач волновой динамики гетерогенных и инертных газовзвесей. Для решения задачи о плавлении наночастиц алюминия, железа были определены их теплофизические параметры (теплоемкость и коэффициент теплопроводности в зависимости от радиуса и температуры). Это позволило в рамках феноменологического подхода определить влияние размера частиц на существование режимов двухфронтного плавления в наночастицах.

Научная новизна результатов в области гомогенной детонации обусловлена построением модели, которая единым образом позволяет описать воспламенение и горение силано-водородо-воздушной смеси и верифицирована по данным по зависимости времени задержки воспламенения от температуры и размеру ячейки от ширины канала. Значимость исследований, как в гетерогенной, так и в гомогенной детонации определяется возможностью широкого применения их в фундаментальных научных исследованиях и в современных технологиях возбуждения и подавления детонации как для разреженных, так и для плотных газовзвесей с различными динамическими и термодинамическими параметрами фаз и компонентов. Изучение задач воздействия взрывных волн на окружающую городскую застройку позволило получить количественные характеристики в плоскости фазового пространства импульс-давление, характеризующие устойчивость объектов к взрывным нагрузкам. Отметим, что по каждой главе даны краткие выводы, подытоживающие полученные научные результаты. Настоящий отчет является заключительным по теме: *Волновая динамика химически активных/инертных гетерогенных сред микро- и наноструктуры*, по которой были представлены отчеты по этапам 2013, 2014, 2015 годов.

Раздел 1.

ГЛАВА 1. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧ ВОЛНОВОЙ ДИНАМИКИ РЕАГИРУЮЩИХ И ИНЕРТНЫХ ДИСПЕРСНЫХ И УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ. МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСШИРЯЮЩЕЙСЯ ГЕТЕРОГЕННОЙ ДЕТОНАЦИИ В ГАЗОВЗВЕСЯХ ЧАСТИЦ АЛЮМИНИЯ

Актуальность исследований по гетерогенной детонации пылевзвесей обусловлена как проблемами безопасности порошковых производств, так и развитием детонационных технологий. Промышленные взрывы пыли характеризуются распространением ударных и детонационных волн в пространствах сложной геометрии: шахты и их разветвления, производственные помещения, транспортеры, вентиляционные каналы, устройства подачи и т.д. Представляет интерес анализ особенностей распространения детонации в объемах комбинированной геометрии. Типичными конфигурациями являются обратный уступ, а также канал или труба с внезапным расширением. При выходе детонационной волны (ДВ) из ограниченного объема в открытое пространство могут реализоваться различные режимы распространения. Срыв или распространение детонации определяется, прежде всего, соотношением характерных масштабов химических реакций и размера трубы. Критическим диаметром d_c обозначается минимальный диаметр трубы, при котором детонация распространяется без срыва.

Экспериментально установлено [1, 2], что для многих газовых смесей d_c можно выразить через характерный размер детонационной ячейки λ : $d_c = N\lambda$, где N составляет $10 \div 13$. В [3] на основе критерия Митрофанова-Солоухина [1] получены оценки $N \sim 10$. Для смесей, сильно разбавленных аргонном, критическое число $\sim 20 \div 30$ [4]. Формула для критической ширины плоского канала представлена в работе [5], при выходе детонации через узкую щель, параметр N уменьшается до $2 \div 3$. В [6] установлена связь между d_c и критическим радиусом инициирования сферической детонации, что указывает на определяющую роль геометрического фактора и слабое влияние поперечных волн ячеистой детонации. Аналогичные процессы в газовзвесах имеют особенности, обусловленные наличием зон тепловой и скоростной релаксации фаз и отличиями в механизмах воспламенения. В [7], [8] для дифракции детонации на обратном уступе плоского канала установлено три режима распространения, их реализация зависит как от ширины канала, так и от размера частиц. Срыв детонации происходит при одной поперечной волне (меньше одной ячейки) [8], что значительно меньше, чем в газовой детонации [5]. Представляет интерес сравнительный анализ критериев распространения для плоского канала и круглой трубы, сопоставление с критериями газовой детонации и анализ влияния фракционного состава полидисперсной смеси на режимы. Исследования детонации в бидисперсных и полидисперсных газовзвесах частиц алюминия проводились в [9-11]. В [9, 10] анализировалось влияние фракционного состава на свойства ячеистой детонации, в [11] было установлено, что малая добавка мелкой фракции значительно уменьшает величину критической энергии инициирования. Учитывая, что геометрические условия распространения плоской и ячеистой детонации близки [6, 7, 8], рассматривается выход плоской волны Чепмена–Жуге (ЧЖ) с сохранением цилиндрической симметрии [12]. Исследования проводятся на основе физико-математической модели [13], согласованной по ряду параметров с данными других авторов (см. [12, 14, 15, 16]). Основные уравнения в декартовых координатах представлены в [7, 15].

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается цилиндрический канал диаметра $2H_1$, заполненный однородной стехиометрической смесью кислорода и частиц алюминия. К выходному отверстию примыкает плоскость, ограничивающая полупространство. По трубе распространяется плоская детонационная волна в режиме ЧЖ. Начальное местоположение фронта $x=0.06$ м.

Основные уравнения для полидисперсной газовзвеси:

$$\frac{\partial \rho_1 r}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 v_1 r}{\partial r} + \frac{\partial \rho_1 u_1 r}{\partial z} = (J_2 + J_3) r,$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \rho_1 v_1 r}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_1 v_1^2 + p) r}{\partial r} + \frac{\partial (\rho_1 u_1 v_1) r}{\partial z} = (-f_{2r} + J_2 v_2) r + (-f_{3r} + J_3 v_3) r, \\
& \frac{\partial \rho_1 u_1 r}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 u_1 v_1 r}{\partial r} + \frac{\partial (\rho_1 u_1^2 + p) r}{\partial z} = p + (-f_{2z} + J_2 u_2) r + (-f_{3z} + J_3 u_3) r, \quad (1) \\
& \frac{\partial \rho_1 E_1 r}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_1 v_1 E_1 + p v_1) r}{\partial r} + \frac{\partial (\rho_1 u_1 E_1 + p u_1) r}{\partial z} = \\
& = (-q_2 - f_{2z} u_2 - f_{2r} v_2 + J_2 E_2) r + (-q_3 - f_{3z} u_3 - f_{3r} v_3 + J_3 E_3) r; \\
& \frac{\partial \rho_i r}{\partial t} + \frac{\partial \rho_i v_i r}{\partial r} + \frac{\partial \rho_i u_i r}{\partial z} = -J_i r, \\
& \frac{\partial \rho_i v_i r}{\partial t} + \frac{\partial \rho_i v_i^2 r}{\partial r} + \frac{\partial (\rho_i u_i v_i) r}{\partial z} = -(-f_{ir} + J_i v_i) r, \\
& \frac{\partial \rho_i u_i r}{\partial t} + \frac{\partial \rho_i u_i v_i r}{\partial r} + \frac{\partial \rho_i u_i^2 r}{\partial z} = -(-f_{iz} + J_i u_i) r, \quad (2) \\
& \frac{\partial \rho_i E_i r}{\partial t} + \frac{\partial \rho_i v_i E_i r}{\partial r} + \frac{\partial \rho_i u_i E_i r}{\partial z} = -(-q_i - f_{iz} u_i - f_{ir} v_i + J_i E_i) r.
\end{aligned}$$

Здесь p — давление; ρ_i, u_i, v_i, E_i — соответственно средняя плотность, скорости, полная энергия на единицу массы газа ($i=1$) и фракции частиц (для бидисперсной взвеси $i=2, 3$); r, z — цилиндрические координаты. Горение частиц алюминия описывается уравнением приведенной кинетики Аррениусовского типа с учетом неполного сгорания частиц [7, 8, 15]. Использовался как статический критерий воспламенения с $T_{ign}=900$ К [7, 8, 15], так и динамический, полученный в [16] на основе решения полной задачи воспламенения взвеси в ударных и детонационных волнах с учетом плавления и реакций поверхностного окисления частиц. Для замыкания модели привлекаются уравнения состояния идеального слабозапыленного газа. Законы обмена импульсом и энергией между фазами учитывают сверхзвуковое обтекание частиц в потоке и теплообмен в динамических условиях. Подробности модели и замыкающие соотношения приведены в [7, 15] для монодисперсных и в [9, 11] для бидисперсных взвесей. Численная технология, основанная на использовании схемы TVD для газа и Джентри-Мартина-Дэйли для частиц, представлена в [17], протестирована в [18] и опробована ранее на ряде задач в [7-11, 14-16].

АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

Режимы распространения. Режимы детонации при выходе ДВ из плоского канала (щели) и из трубы круглого сечения соответствуют аналогичным режимам в газах: докритический (срыв детонации), критический (частичный срыв с восстановлением) и закритический (непрерывное распространение детонации). На рис. 1-3 представлены численные шпирен-изображения монодисперсной смеси 2 мкм. Картины течений при $H_l = 0.01$ м соответствуют докритическому режиму: срыв детонации имеет место как в плоском случае (рис. 1,а), так и в цилиндрическом (рис. 1,б). Течение характеризуется отставанием фронта горения от ударной волны (УВ) по всему периметру фронта. Сравнение волновых картин на рис. 1,а и рис. 1,б указывает на различия лишь в положении и форме вихря и вторичных ударных волн в зоне продуктов детонации: в области за уступом и вблизи плоскости/оси симметрии. В плоской геометрии выход ударной либо детонационной волны из щели сопровождается образованием двух симметричных вихрей, а в цилиндрической — более слабого и отстоящего от стенки тороидального вихря (рис. 1).

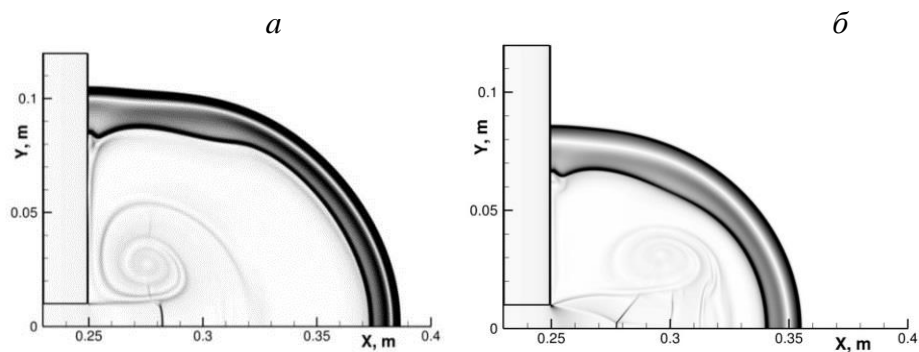


Рис. 1. Режимы со срывом детонации при $H_1=0.01$ м: плоский канал (а), цилиндрический канал (б); $t=0.25$ мс.

При увеличении ширины (радиуса) канала H_1 до 0.02 м (рис. 2) в плоском случае происходит частичное ослабление детонации: на части фронта, примыкающей к стенке уступа, происходит разделение на УВ и отстающий фронт горения (ФГ), а затем ре-иницирование в поперечной волне (рис. 2,а) с последующим восстановлением детонации (критический режим). В цилиндрическом случае имеет место срыв детонации, волновые картины (рис. 2,б) соответствуют докритическому режиму (рис. 1,б).

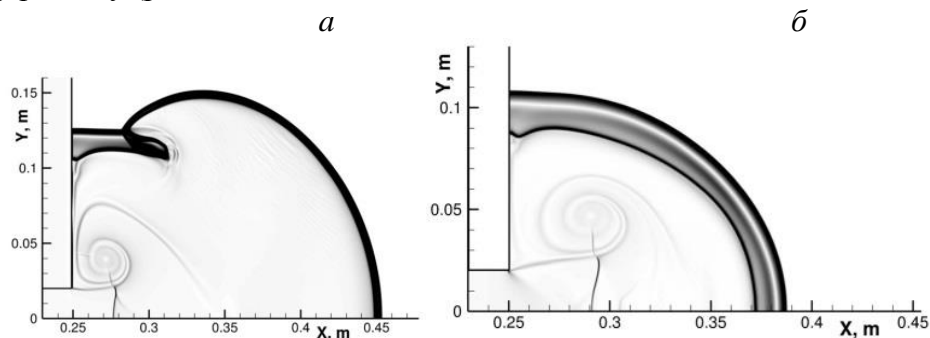


Рис. 2. Различные режимы детонации при $H_1=0.02$ м: критический в плоском канале (а); докритический в цилиндрическом (б); $t=0.26$ мс.

На рис. 3 показаны критические режимы. Для цилиндрического случая характерна вытянутая форма фронта (рис. 3,б, 3,г). Это обусловлено более значительным (в силу геометрии) торможением бокового участка, где произошло разделение на ослабляемую УВ и отстающий ФГ, а распространение центрального участка фронта вдоль оси продолжается со скоростью нормальной детонации. Последующее восстановление происходит (рис. 2,а, 3,а и 3,в) с некоторой задержкой во времени относительно случая плоской геометрии.

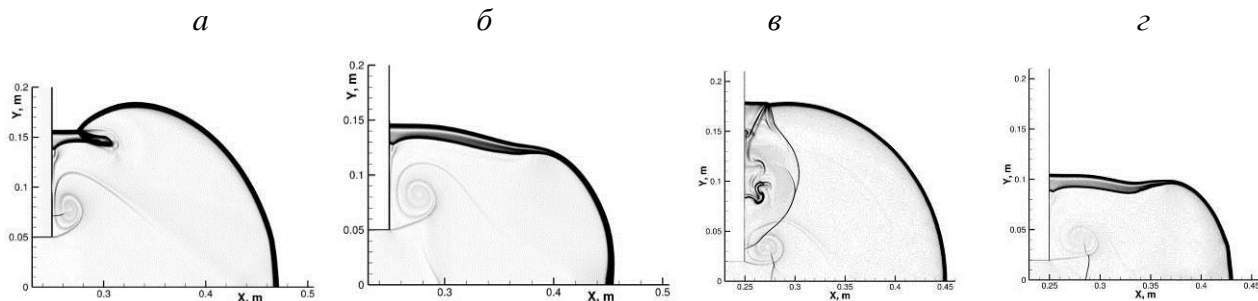


Рис. 3. Критические режимы распространения детонации в плоском (а, в) и цилиндрическом (б, г) каналах:
 $d=2$ мкм, $H_1=0.05$ м (а, б); $d=1.5$ мкм, $H_1=0.02$ (в, г).

На рис. 4 показаны огибающие максимального давления на оси (плоскости) симметрии для всех случаев на рис. 1-3, относящихся к $d=2$ мкм. Как видно, в одной и той же смеси для плоского канала переход от срыва детонации к распространению происходит при значительно меньшем

(более чем в 2 раза) значения ширины, чем соответствующее значение диаметра цилиндрической трубы.

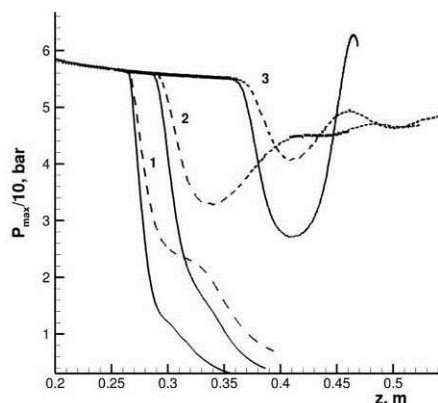
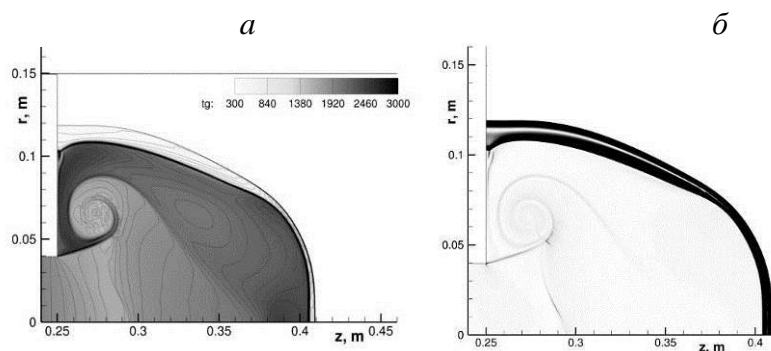


Рис. 4. Огибающие максимального давления на оси (плоскости) симметрии. Сплошные линии – цилиндрический канал, штриховые – плоский. $d=2$ мкм. $H_1=0.01$ м (1); 0.02 м (2); 0.05 м (3).

Пограничные критические режимы. Особенностью осесимметричных течений является кумулятивный характер взаимодействия волновых структур с осью симметрии. На стадии ослабления детонации разделение на УВ и отстающий ФГ происходит как в области за обратным уступом, так и в окрестности оси симметрии (рис. 5). В то же время, сформированный за уступом вихрь и порожденный им конус контактной поверхности «отжимает» зону горячего газа от оси симметрии, что способствует меньшему ослаблению детонации в средней части поверхности фронта, чем вблизи оси (рис. 5,а). Восстановление детонации в пограничных режимах начинается на среднем участке поверхности, отстоящем как от уступа, так и от оси симметрии, что приводит к искривлению и загибу фронта (рис. 5,б, рис. 3,б). Дальнейшее развитие характеризуется образованием «выпячивания» фронта в приосевой области. Отметим, что для плоской геометрии таких эффектов выявлено не было.

Области несгоревших частиц. На рис. 6 показано образование сложных волновых и вихревых структур вблизи боковой стенки при восстановлении детонации в поперечной волне. Первоначально вблизи боковой стенки происходит разделение ДВ на УВ и ФГ (рис. 6,а) и, как следствие, образование зоны несгоревших частиц и далее распространение по этой зоне поперечной ДВ (рис. 6,б). В это время на примыкающем участке детонационного фронта в силу ослабления (геометрический фактор) также происходит разделение на УВ и отстающий ФГ (рис. 6,б), восстановление детонации на котором происходит во вторичной поперечной волне (рис. 6,в). Данный процесс повторяется до тех пор, пока расширяющийся при дифракции фронт не станет полностью детонационным (рис.6,г). Этот процесс также прослеживается на картинах температур газа (рис. 7), где светлые зоны показывают области несгоревших частиц.



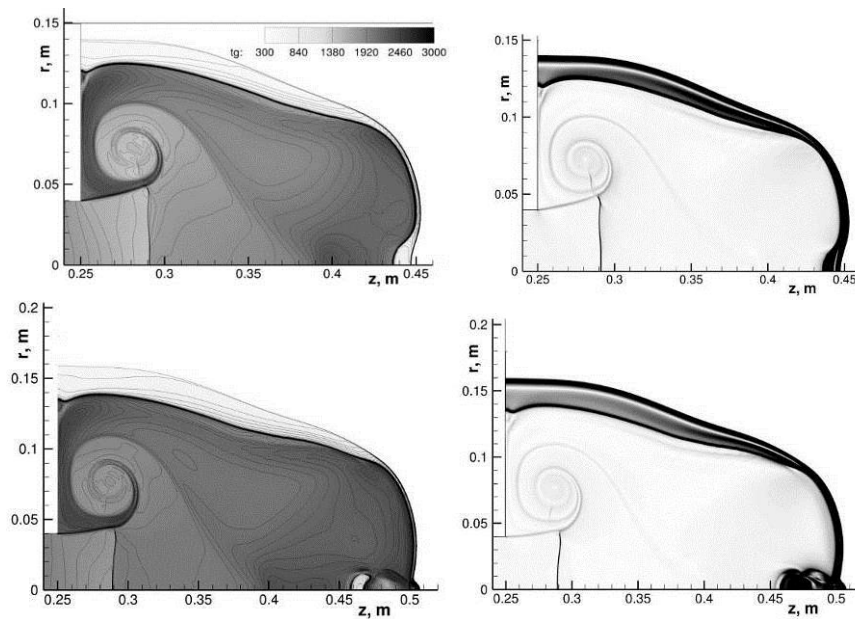


Рис. 5. Пограничный критический режим при выходе из круглой трубы. $D=2$ мкм, $H_1=0.04$ м, $\Delta t = 0.04$ мс.

На участке расширяющегося фронта, прилегающем к оси симметрии, можно видеть образование и рост возмущений, способствующих формированию поперечных волн (рис. 6,а, рис. 7,в,г). Аналогичное свойство для гетерогенной детонации в условиях плоской геометрии отмечалось в [7]. Со временем области непрореагировавших частиц деформируются, отстают от фронта и исчезают по мере сгорания частиц (рис. 7,г).

Бидисперсные смеси. Влияние полидисперсности на режимы распространения детонации исследовалось на модели бидисперсной взвеси частиц диаметром 1.5 мкм и 3.5 мкм с варьированием их долевого состава. Значение диаметра трубы (ширины канала) 0.03 м, при этом для обеих геометрий происходит срыв в монодисперсной взвеси крупных частиц и распространение в монодисперсной взвеси мелких частиц. В смеси частиц 1.5 мкм в цилиндрической геометрии процесс восстановления детонации аналогичен случаю $H_1=0.02$ м (рис. 3,г), а для плоского канала режим закритический (непрерывное распространение детонации). В монодисперсной смеси частиц 3.5 мкм в обоих случаях происходит срыв детонации. Расчеты показали существенное влияние доли мелких частиц на режимы детонации (Таблица 1). С увеличением этой доли происходит переход от режимов со срывом к режимам с распространением. Для плоского канала уже при 5% мелких частиц в смеси реализуется критический режим, а для круглой трубы при 50% мелких частиц еще происходит срыв детонации. Лишь при преобладании мелких частиц в пропорции 95% к 5% в цилиндрической конфигурации наблюдается переход к критическому режиму (рис. 8).

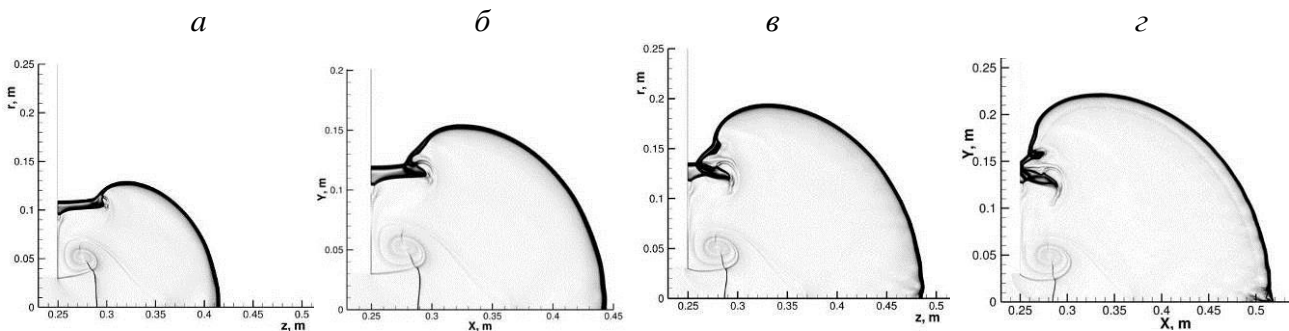


Рис. 6. Развитие течения при ре-иницировании (численные шлирен-изображения), $\Delta t=3 \cdot 10^{-4}$ с,,: плоская геометрия $H_1=0.025$ м(а); цилиндрическая геометрия $H_1=0.03$ м (б). (в), (г) поле течения на последующие моменты времени.

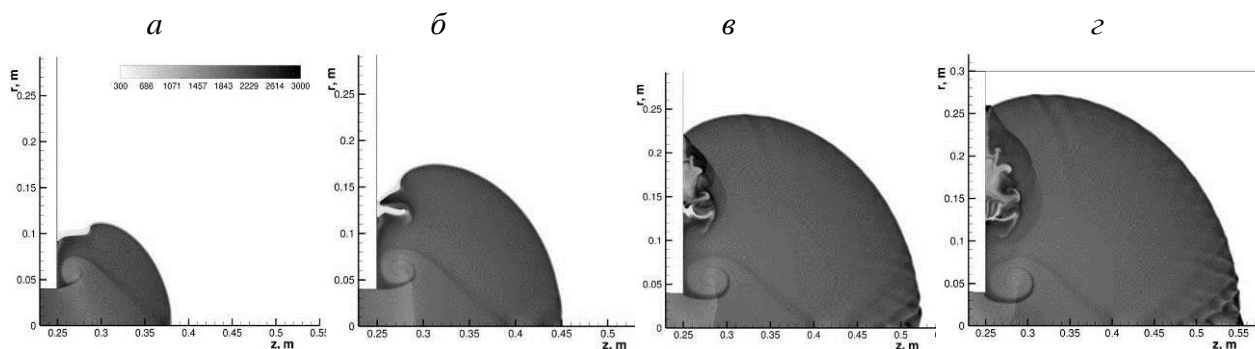


Рис. 7. Образование областей с несгоревшими частицами. Цилиндрический канал, $d=1.5$ мкм, $H_I=0.04$ м, $\Delta t=5 \cdot 10^{-5}$ с, $\Delta t=2 \cdot 10^{-5}$ с (между в и г)

Таблица 1. Зависимость детонационных режимов от состава бидисперсной смеси (1.5 мкм и 3.5 мкм) при $H_I=0.03$ м

Состав смеси	Плоский канал	Цилиндрическая труба
Монодисперсная смесь 3.5- μm	–	–
10% 1.5- μm – 90 % 3.5- μm	±	–
30% 1.5- μm – 70 % 3.5- μm	±	–
50% 1.5- μm – 50 % 3.5- μm	±	–
95% 1.5- μm – 5 % 3.5- μm	+	±
Монодисперсная смесь 1.5- μm	+	±

Обозначения: «+» - непрерывный режим распространения, «–» - срыв детонации, «±» - критический режим.

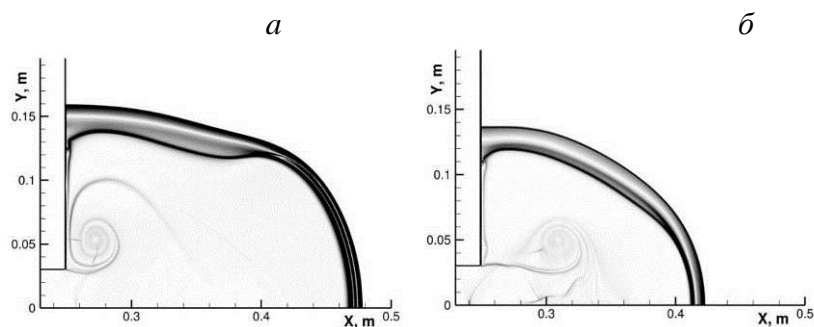


Рис. 8. Смена режима при переходе от канала к круглой трубе при $H_I=0.03$ м в бидисперсной смеси частиц размером 1.5 мкм (5%) и 3.5 мкм (95%): плоский канал (а); цилиндрический канал (б); $t=3 \cdot 10^{-4}$ с.

Критерии распространения детонации. На рис. 9 приведены карты решений для монодисперсных взвесей в плоскости: диаметр частиц – размер канала для плоских (рис. 9,а) и цилиндрических (рис. 9,б) конфигураций. Сравнение критических значений ширины плоского канала и диаметра круглой трубы для одной и той же взвеси показывает, что отношение указанных геометрических параметров составляет примерно 0.5. Это соотносится с приведенной в [5] и подтвержденной экспериментально формулой, связывающей критический диаметр трубы и критическую ширину плоского канала в газовой детонации $H_{pl} = \sqrt{\pi} H_{cyl} / 4 \approx 0.4 H_{cyl}$.

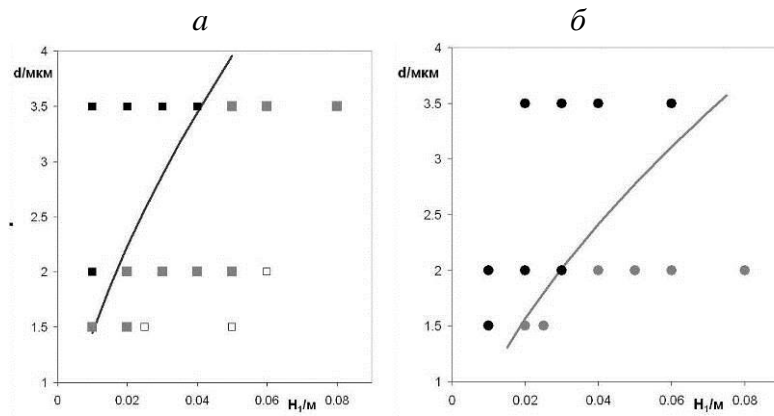


Рис. 9. Карты режимов распространения детонации при дифракции на обратном уступе: плоский канал (а); цилиндрическая труба (б). Светлые значки – закритические режимы, серые – критические, черные – срыв детонации, сплошные линии – аналитические критерии.

В газовой детонации критический диаметр трубы соотносится с размером детонационной ячейки. Теоретическое обоснование критического числа ячеек для газов получено в [1] на основе гипотезы о равенстве по порядку величины времени задержки воспламенения τ и его изменения за искривленным ударным фронтом $Td\tau/dT$. Это приводит к следующему соотношению на минимальное число поперечных волн в трубе

$$n < \left| \frac{d\tau}{dT} \right| \frac{4Tc}{\tau D}, \quad (3)$$

где c – скорость звука, D – скорость детонации. При аррениусовской зависимости времени индукции воспламенения от температуры $\tau = \tau_0 \exp(E/RT)$ условие затухания имеет вид $n < 4Ec/RTD$, что позволило в [1] для характерных для большинства газовых смесей значений E и D получить оценку $n \sim 10$. Проводя аналогичные рассуждения для газозвеси, отметим, что в отличие от газов, скорость нагрева частиц алюминия определяется конвективным теплообменом, характеризуемым высоким за счет относительного движения фаз числом Нуссельта

$$\frac{dT_2}{dt} = \frac{1}{\tau_T} (T_1 - T_2), \quad (4)$$

где T_1, T_2 — температуры газа и частиц, τ_T — время тепловой релаксации. В зоне скоростной неравновесности происходит дополнительное тепловыделение за счет работы сил трения, т.е. начальная стадия нагрева частицы характеризуется немонотонным поведением температуры газа [16], что связано с наличием двух противоположных процессов — тепловыделения при ускорении частиц в потоке и теплоотвода от газа к частицам. Температура газа на этой стадии варьируется в пределах порядка 1500 – 2000 К. В самом простом приближении $Nu = const$, $\tau_T = const$, $T = const$ (будут проверены оба крайние значения температур) решение (3) имеет вид $T_2 = T_1 - (T_1 - T_0) \exp(-t/\tau_T)$, а задержка воспламенения определяется $\tau = \tau_T \ln[(T_1 - T_0)/(T_1 - T_{ign})]$.

Механизм воспламенения частиц алюминия в ударных и детонационных волнах характеризуется тем, что динамика предварительного прогрева частицы в большей степени влияет на время задержки воспламенения, чем протекающая по аррениусовскому закону реакция поверхностного окисления частицы [16]. В [16] показано, что критическая температура воспламенения частиц порядка $T_{ign} = 900 \text{ K}$, т.к. в диапазоне 800 - 900 К происходит резкое ускорение скорости окисления, приводящее к очень быстрому срыву теплового равновесия. О принципиальных различиях в механизмах воспламенения частиц и газов за ударными волнами, указывается также в [19], где обсуждается один из возможных механизмов распространения расходящейся детонации в газозвеси унитарного топлива. Отметим, что расчеты с динамическим критерием воспламенения частиц [16] не выявили значимых различий в реализуемых режимах детонации в сравнении с расчетами при фиксированном значении температуры воспламенения.

Принимая $T_{ign} = const$, можно получить из (3) следующее условие затухания дифрагирующей волны сферической гетерогенной детонации

$$n < \frac{(T_{ign} - T_0)4T_1c_1}{(T_1 - T_0)(T_1 - T_{ign}) \ln[(T_1 - T_0) / (T_1 - T_{ign})]D} \quad (5)$$

Для параметров ДВ стехиометрической взвеси алюминия в кислороде $D = 1560$ м/с, $c_1 = \sqrt{\gamma RT_1}$, $T_0 = 300$ К, $T_{ign} = 900$ К формула (5) дает близкие критические значения 3.4 и 3.2 для $T_1 = 1500$ К и $T_1 = 2000$ К соответственно.

Сплошные кривые на рис. 9 построены для линейной зависимости ширины (диаметра) канала от размера ячейки и с учетом зависимости размера ячейки от диаметра частиц $\lambda = \lambda_0 (d / d_0)^{1.6}$, $d_0 = 10$ мкм, $\lambda_0 = 27$ см [15]. Согласование с данными численного моделирования имеет место при критическом числе ячеек 2.9 для круглой трубы и 1.36 для плоского канала. Соотношение между ними (2.13) несколько меньше оценочного отношения для газовой детонации (2.5). Также это критическое число (порядка 3) значительно меньше значений, определенных для большинства смесей в газовой детонации. Таким образом, оценки, полученные на основе критерия Митрофанова-Солоухина и известной из численных расчетов зависимости размера детонационной ячейки от диаметра частиц, подтверждаются результатами численного моделирования. Эти оценки и результаты расчетов показывают, что критические условия распространения гетерогенной детонации могут существенно отличаться от детонации газовых смесей, что обусловлено принципиальными отличиями в механизмах воспламенения и влиянием процессов межфазного взаимодействия (скоростной и тепловой релаксации).

Заключение. В данной части отчета:

- проведено численное моделирование процесса распространения гетерогенной детонации при выходе детонационной волны из круглой трубы в неограниченное полупространство. Исследование проводилось для монодисперсных и бидисперсных взвесей частиц алюминия в кислороде стехиометрического состава;

- проведен анализ течений для трех известных режимов: закритического (с непрерывным распространением детонации), критического (с частичным срывом и ре-иницированием детонации) и докритического (со срывом детонации). Выявлены общие свойства гетерогенной и газовой детонации и общие характеристики цилиндрического и плоского случаев: образование зон несгоревших частиц в критических режимах, формирование поперечных волн как результат усиления возмущений на фронте в закритических режимах. Выявлены особенности, присущие цилиндрической задаче: образование загиба фронта в приосевой области в сценариях ре-иницировании в пограничных режимах, связанное с тем, что восстановление детонации начинается на участках, отстоящих как от стенки обратного уступа, так и от оси симметрии;

- исследовано влияние состава бидисперсной смеси на режимы распространения детонации. Показано, что переход к восстановлению детонации при выходе из плоского канала происходит при существенно меньшем значении доли мелких частиц, чем при выходе из круглой трубы такого же диаметра;

- построены карты режимов детонации в плоскости параметров: диаметр трубы (ширина канала) - диаметр частиц. Показано, что геометрические критерии распространения гетерогенной детонации при выходе из плоского канала и круглых труб отличаются в 2-2.5 раза, что согласуется с данными о газовой детонации. Результаты численных расчетов согласуются с теоретическими кривыми, построенными на основе критерия Митрофанова-Солоухина и определенной ранее в [15] степенной зависимости размера детонационной ячейки от диаметра частиц. Значение критического числа ячеек оказалось в несколько раз меньше, чем в газовых смесях, что обусловлено принципиальными отличиями в механизмах воспламенения частиц в динамических условиях, обусловленных влиянием процессов скоростной и тепловой релаксации.

ЛИТЕРАТУРА

1. Митрофанов В.В., Солоухин Р.И. О дифракции многофронтной детонационной волны // Доклады академии наук СССР, 1964, Т. 159, № 5, с. 1003-1006.
2. Knystautas R, Lee JH, Guirao CM (1982) The critical tube diameter for detonation failure in hydrocarbon-air mixtures. Comb Flame 48:63-83.
3. Васильев А.А., Митрофанов В.В., Топчян М.Е. Детонационные волны в газах // ФГВ. 1987. Т. 23. № 5. С. 109-131.
4. Arienti M., Shepherd J. E. A numerical study of detonation diffraction // J. Fluid Mech., 2005. V. 529. P. 117 – 146.
5. Васильев А.А. Критические условия инициирования цилиндрической многофронтной детонации // ФГВ. 1998. Т. 34. №2. С.114-120.
6. Sochet I., Lamy T., Brossard J., Vaglio C., Cayzac R. Critical tube diameter for detonation transmission and critical initiation energy of spherical detonation // Shock Waves. 1999. V.9. № 2. P.113-123.
7. Кратова Ю.В., Федоров А.В., Хмель Т.А. Дифракция плоской детонационной волны на обратном уступе в газовзвеси // ФГВ, 2009, № 5, с. 95 – 107.
8. Fedorov A.V., Khmel T.A., Kratova Yu.V. Cellular detonation diffraction in gas - particle mixtures // Shock Waves. 2010. No.20. P. 509–519.
9. Федоров А.В., Хмель Т.А. Формирование и вырождение ячеистой детонации в бидисперсных газовзвесах частиц алюминия // ФГВ 2008. Т. 44, № 3. С. 109 – 120.
10. Кратова Ю.В., Федоров А.В., Хмель Т.А. Особенности ячеистой детонации в полидисперсных газовзвесах частиц алюминия», ФГВ, 2011, № 5, с. 85-94.
11. Федоров А.В., Хмель Т.А.. Структура и инициирование плоских волн детонации в бидисперсной газовзвеси частиц алюминия // ФГВ, 2008, № 2, с. 46-55
12. Briand A., Veysiere B., Khasainov B. Modelling of detonation cellular structure in aluminium suspensions // Shock Waves. 2010. No.20. P. 521–529.
13. Федоров А.В. Структура гетерогенной детонации частиц алюминия, диспергированных в кислороде // ФГВ. 1992. Т.28. №3. С.72-83.
14. Федоров А.В., Хмель Т.А. Численное моделирование инициирования детонации при вхождении ударной волны в облако частиц алюминия // ФГВ. 2002. Т.38. №1. С.114-122.
15. Федоров А.В., Хмель Т.А. Численное моделирование формирования ячеистой гетерогенной детонации частиц алюминия в кислороде // ФГВ. 2005. Т. 41, № 4. С. 84 – 98.
16. Федоров А.В., Хмель Т.А. Характеристики и критерии воспламенения взвесей частиц алюминия в детонационных процессах // ФГВ, 2012, № 2, с. 76-88.
17. Федоров А.В., Хмель Т.А. Численные технологии исследования гетерогенной детонации газовзвесей // Мат. моделирование, 2006, № 8, с. 49-63.
18. Хмель Т.А. Численное моделирование двумерных детонационных течений в газовзвеси реагирующих твердых частиц // Мат. моделирование. 2004. Т.16. №6. С.73-77.
19. Ждан С.А. Инициирование расходящейся детонации в вакууме с частицами унитарного топлива // ФГВ, 1993, т. 29, № 5, с. 66-71.

ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В РЕАГИРУЮЩИХ ГАЗАХ (ВОДОРОД/СИЛАН).

§ 1. Физико-математическое моделирование воспламенения силана в отраженных ударных волнах.

Физико-химическая математическая модель неравновесной газовой динамики.

Рассмотрим ударную трубу, заполненную смесью силана, кислорода и азота/аргона. Пусть по смеси распространяется ударная волна (УВ). При некоторых условиях на число Маха УВ параметры смеси могут превысить критические значения и произойдет воспламенение.

В одномерной нестационарной постановке динамика смеси описывается уравнениями неравновесной газовой динамики:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2 + p)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial [(\rho E + p)u]}{\partial x} &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где $E = e + \frac{u^2}{2}$ – полная энергия, ρ , u , p , e – плотность, скорость, давление и внутренняя энергия смеси соответственно. Внутренняя энергия реакционноспособной смеси определяется из соотношения

$$e = c_v(T)T + \sum_{\alpha=1}^{\mu} \xi_{\alpha} h_{0\alpha} - c_p(T)T_{00},$$

где c_p , c_v — удельные теплоемкости смеси при постоянном давлении и при постоянном объеме, ξ_{α} – относительная массовая концентрация компонента α , $c_v(T) = \sum_{\alpha=1}^N c_{v\alpha}(T) \xi_{\alpha}$, $h_{0\alpha}$ — энтальпия образования компонента α , N – количество компонент смеси, $T_{00} = 298.15$ К.

Данные по зависимостям теплоемкости от температуры взяты из NIST Chemistry WebBook [1], а также работы [2].

Система (1), дополненная уравнением состояния

$$p = \rho TR \sum_{\alpha=1}^N \frac{\xi_{\alpha}}{M_{\alpha}} \quad (2)$$

и кинетическими уравнениями детальной химической кинетики

$$\frac{d\xi_{\alpha}}{dt} = \frac{1}{\rho} M_{\alpha} \sum_{r=1}^l \rho^{m_r} (v'_{ar} - v_{ar}) \left[k_{fr} \prod_{\beta=1}^N \left(\frac{\xi_{\beta}}{M_{\beta}} \right)^{v_{\beta r}} - k_{br} \prod_{\beta=1}^N \left(\frac{\xi_{\beta}}{M_{\beta}} \right)^{v'_{\beta r}} \right] \quad (3)$$

позволяет после постановки соответствующей начально-краевой задачи рассчитать картину распространения ударной волны в канале, наполненном данной рабочей смесью. Здесь m – молярная масса смеси, k_{fr}, k_{br} – скорости прямых и обратных реакций, соответственно. Будем называть данную модель (1-3) нестационарной.

Кинетика воспламенения и горения реагирующей газовой смеси.

Силан-кислород-азот/аргон. Рассмотрим задачу о воспламенении силана в отраженной УВ в его смеси с воздухом вблизи торца ударной трубы. Для описания кинетики воспламенения и горения реагирующей смеси силана и воздуха используем детальную кинетическую схему [3], которая учитывает 140 прямых и обратных реакций двадцати пяти компонентов (H_2 , O_2 , H_2O , OH , O , H , HO_2 , H_2O_2 , SiH_4 , SiH_3 , SiH_2 , $HSiO$, SiH_2O , SiH_3O , SiH_3O_2 , $xSiH_3O_2$, SiH_3OH , SiH_3O_2H , SiH_2OH , $HSiOOH$, $SiOOH$, SiO , SiO_2 , N_2 , Ar). В [3] приведены константы скоростей прямых и обратных реакций. Обновленные данные по энергиям активации некоторых реакций ($SiH_3O_2 \rightleftharpoons SiH_2O + OH$, $HSiOOH + O_2 \rightleftharpoons SiOOH + HO_2$, $HSiOOH \rightleftharpoons SiOOH + H$) нами были взяты из работы [4]. Данные об энтальпиях образования компонент смеси взяты из NIST Chemistry WebBook [1].

Результаты численных расчетов.

Время задержки воспламенения. Верификация кинетической схемы. Остановимся на задаче о воспламенении смеси за фронтом отраженной УВ. Как известно, поток за отраженной УВ покоится, поэтому из системы (1) используем лишь уравнение энергии, которое преобразуется к такому виду, описывающему изменение температуры газовой смеси:

$$\frac{dT}{dt} = - \frac{1}{c_v(T)} \sum_{\alpha=1}^N (c_{v,\alpha}(T)T + h_{0\alpha} - c_p(T)T_{00}) \frac{d\xi_{\alpha}}{dt}. \quad (4)$$

Тем самым, процесс воспламенения смеси за отраженной УВ описывается системой уравнений (2)-(4) и начальными данными при $t = 0$: $u = 0$, $p = p_r$, $T = T_r$, $\xi_{\alpha} = \xi_{\alpha,0}$, где p_r , T_r - давление и температура смеси за отраженной УВ, $\xi_{\alpha,0}$ - концентрации компонент смеси за отраженной УВ.

Имеется несколько критериев определения времени задержки воспламенения. Рассмотрим данные, полученные с использованием некоторых из них.

Критерий 1. Время, в течение которого достигается максимум роста температуры смеси во времени – $\max\left(\frac{dT}{dt}\right)$.

На рис. 1 приведены зависимости времени задержки воспламенения смеси силан-водород-кислород-азот от температуры за отраженной УВ, рассчитанные по данной модели и полученные в эксперименте [5]. В экспериментах отличались составы смесей и параметры за отраженной УВ. Смесь 1: $\xi_{SiH_4} = 2.45 \cdot 10^{-2}$, $\xi_{H_2} = 6.12 \cdot 10^{-3}$, $\xi_{O_2} = 4.9 \cdot 10^{-2}$, $\xi_{N_2} = 0.92038$, $p_r = 1.26$ атм; Смесь 2: $\xi_{SiH_4} = 2.02 \cdot 10^{-2}$, $\xi_{H_2} = 5.055 \cdot 10^{-3}$, $\xi_{O_2} = 8.11 \cdot 10^{-2}$, $\xi_{N_2} = 0.893645$, $p_r = 1.36$ атм. Как видно из рис. 1, данная модель химической кинетики по критерию воспламенения 1 хорошо описывает экспериментально полученные времена задержки воспламенения.

Отметим, что в работе [4] уже проводилась верификация данной кинетической схемы по временам задержки воспламенения за отраженной УВ. Определение времени задержки воспламенения проводилось по времени, в течение которого температуры смеси возросла на 5% от всего увеличения температуры: $T_{ign} = 0.05(T_e - T_r)$, где T_e - температура в точке Чепмена-Жуге. Назовем его Критерий 2. Авторами этой работы было показано, что расчетные данные хорошо согласуются с экспериментальными.

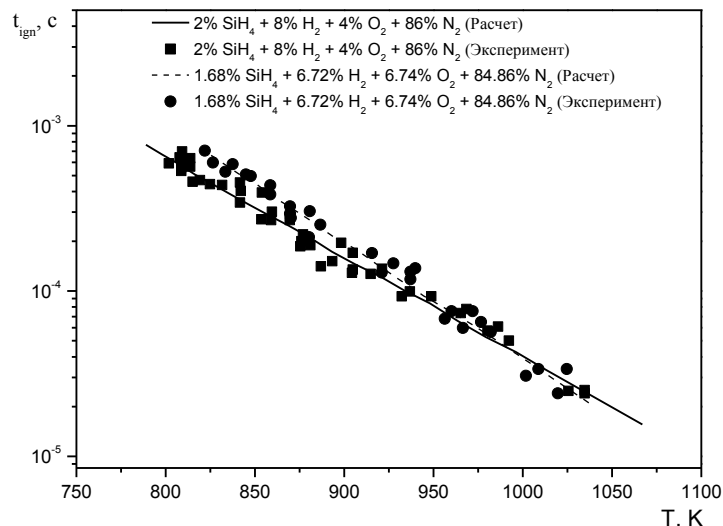


Рис. 1. Зависимость времени задержки воспламенения силана от температуры за отраженной УВ. Сравнение с экспериментами [5].

Критерий 3. Время, в течение которого происходит достижение максимума концентрации радикала OH также может служить одним из возможных критериев воспламенения. На рисунке 2

представлены расчетные зависимости времени достижения максимума концентрации радикала OH от температуры за отраженной УВ в смесях силан-водород-кислород-аргон, водород-кислород-аргон и силан-кислород-аргон, составы смесей и экспериментальные данные [6] по времени достижения максимума концентрации возбужденного радикала OH^* . Как видно, рассчитанные кривые лежат чуть ниже экспериментальных точек. Это связано, возможно, с тем, что в расчетах и экспериментах определяется время достижения максимума концентрации компоненты газовой смеси в различных состояниях – возбужденном и невозбужденном. Следует отметить, что в работе [7] были проведены подобные расчеты (исследовалось время достижения максимума концентрации OH), но для более сложной модели детальной кинетики: 69 компонент, 201 реакция. Удовлетворительное соответствие экспериментальным данным было получено только для смеси водород-кислород-аргон. Для остальных смесей было получено значительное расхождение с экспериментальными данными, вплоть до двух порядков. Таким образом, сравнительно простая модель химической кинетики [4], которую мы использовали, является более адекватной, нежели [7].

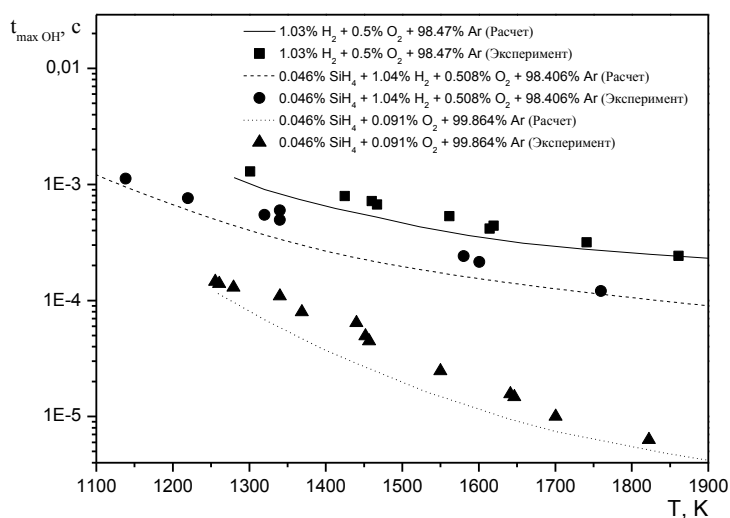


Рис. 2. Зависимость времени достижения максимума OH от температуры за отраженной УВ. Сравнение с экспериментом [6].

Аппроксимационная формула для времени задержки воспламенения силана. Расчеты с использованием детальных кинетических механизмов порой бывают обременительны с точки зрения вычислительных затрат, особенно для двумерных и трехмерных нестационарных течений. Поэтому целесообразно построить простую кинетическую модель, которая бы удовлетворительно описывала процессы химических превращений силана за проходящими и отраженными УВ в последующих многомерных расчетах.

Полный процесс химического превращения реагирующей смеси силана и окислителя в присутствии инертного газа разобьем стандартным образом на две стадии. Первая из них описывает период индукции с помощью уравнения:

$$\frac{d\beta}{dt} = -\frac{1}{t_{ign}}, \quad (5)$$

где β - параметр порядка, описывающий процесс задержки воспламенения. В начале зоны индукции $\beta = 1$, в конце $\beta = 0$.

Как всегда, для области задержки воспламенения необходимо знать зависимость $t_{ign} = t_{ign}(T, \xi_\alpha)$. Отметим, что в доступной нам литературе мы не встречали подобных аппроксимационных формул для силана. Кроме того, существующие экспериментальные данные по временам задержки воспламенения довольно скудны, все они были представлены нами выше, когда проводилась верификация детальной кинетической схемы окисления силана. Поэтому,

найдем зависимость $t_{ign} = t_{ign}(T, \xi_\alpha)$, аппроксимируя расчетные времена задержки воспламенения для смесей силана, кислорода и инертного газа.

Из анализа и аппроксимации многочисленных расчетных данных для смесей силан-кислород-азот/аргон при различных давлениях было получено следующее выражение для времени задержки воспламенения силана за отраженной УВ:

$$t_{ign} = 1.374 \cdot 10^{-10} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{-0.47} \xi_{SiH_4}^{-0.84} \xi_{O_2}^{-0.07} (1 - \xi_{Ar})^{0.004} e^{\frac{9695.45}{T}}, \quad (5)$$

где $p_0 = 1$ атм, p измеряется в атмосферах. На рис. 3 приведено сопоставление расчетных данных, полученных по детальной кинетике и по формуле (5), для стехиометрической смеси силан - воздух при давлениях за отраженной УВ от 1 до 10 атм. Видно, что аппроксимация (5) хорошо описывает расчетные данные в диапазоне давлений от 1 до 10 атм и температур от 1000 до 2200 К.

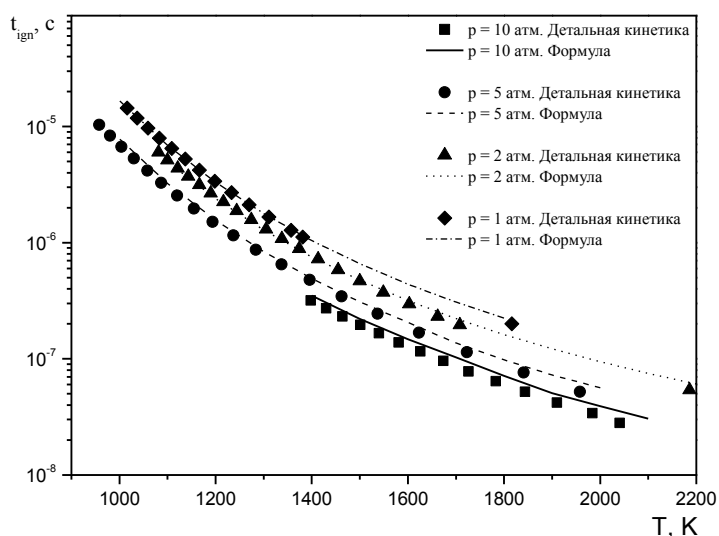


Рис. 3. Время задержки воспламенения силана от температуры за отраженной УВ в смеси силан-воздух. Сравнение с аппроксимационной формулой (5).

Выводы.

На основе детальной кинетической схемы [4] процессов химических превращений силана предложены физико-математическая модель и математическая технология для описания воспламенения силана в отраженных УВ, основанная на двух критериях воспламенения.

Показано, что эта модель удовлетворительно описывает экспериментальные данные по временам задержки воспламенения в диапазоне температур ($T \in [800, 1900]$ К), давлений ($p \in [1, 1.36]$ атм) и концентраций компонент смеси ($\xi_{SiH_4} \in [3 \cdot 10^{-4}, 0.02]$, $\xi_{O_2} \in [5 \cdot 10^{-4}, 0.1]$, $\xi_{H_2} \in [3 \cdot 10^{-4}, 6 \cdot 10^{-3}]$) по двум критериям воспламенения (максимум роста температуры смеси и достижение максимума радикала OH).

Найдены аналитические представления для зависимостей времен задержки воспламенения смесей силан – воздух и силан – кислород – аргон от концентраций компонент, температуры и давления смеси в диапазоне температур от 900 К до 2200 К и давлений от 1 атм до 10 атм.

Литература

1. NIST Chemistry WebBook, <http://webbook.nist.gov/>

- Rutz L.K., Bockhorn H. Theoretical Study of the Structure, Properties and Formation of SiO₂ Clusters // Proceedings of the European Combustion Meeting, 2007, p. 1-4.
- Britten J.A., Tong J., Westbrook C.K. A Numerical Study of Silane Combustion // Twenty-Third Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990, pp.195-202
- Kondo S., Tokuhashi K., Takahashi A., Kaise M. A Numerical Study of Low Temperature Silane Combustion // Combustion Science and Technology, 2000, V. 159, pp. 391-406
- McLain A.G., Jachimowski C.J., Rogers R.C. Ignition of SiH₄-H₂-O₂-N₂ behind reflected shock waves // NASA technical paper No. 2114 (1983)
- Petersen E.L., Crofton M.W. Ignition and Oxydation of Dilute Silane-Oxydizer Mixtures behind Reflected Shock Waves // AIAA Conference Paper 2002-3875, 2002.
- Miller T.A., Wooldridge M.S., Bozzelli J.W. Computational modeling of the SiH₃+O₂ reaction and silane combustion // Combustion and Flame, 2004, V. 137, pp. 73-92.

§ 2. Структура детонационной волны в силано-воздушной смеси.

Рассмотрим задачу о структуре ДВ в силано-воздушной смеси. Будем считать процесс распространения ДВ в ударной трубе стационарным и перейдем к новой пространственной переменной, связанной с фронтом ДВ $\zeta = x - Dt$, где D — скорость ДВ. Тогда система нестационарных уравнений механики сплошных сред сведется к трем алгебраическим законам сохранения:

$$\begin{aligned} \rho U &= \rho_0 U_0 = c_1, \\ p + c_1 U &= p_0 + c_1 U_0 = c_2, \\ e + \frac{p}{\rho} + \frac{U^2}{2} &= e + \frac{p_0}{\rho_0} + \frac{U_0^2}{2} = c_3. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь индексом "0" обозначено состояние перед фронтом ДВ. Замкнем эту систему уравнением для скорости смеси:

$$\frac{du}{d\zeta} = \frac{\frac{R}{c_V(T)M_{см}} \sum_{\alpha=1}^{\mu} \frac{d\xi_{\alpha}}{dt} (c_{v_{\alpha}}(T)T + h_{0_{\alpha}} - c_{p_{\alpha}}(T)T_{00}) - RT \sum_{\alpha=1}^{\mu} \frac{1}{M_{\alpha}} \frac{d\xi_{\alpha}}{dt}}{u^2 - c_f^2}, \quad (2)$$

где $M_{см}$ и c_f — молекулярный вес и замороженная скорость звука смеси. Дополнив уравнения (1) - (2) уравнениями химической кинетики

$$\frac{d\xi_{\alpha}}{dt} = \frac{1}{\rho} M_{\alpha} \sum_{r=1}^l \rho^{m_r} (v'_{ar} - v_{ar}) \left[k_{fr} \prod_{\beta=1}^N \left(\frac{\xi_{\beta}}{M_{\beta}} \right)^{v_{\beta r}} - k_{br} \prod_{\beta=1}^N \left(\frac{\xi_{\beta}}{M_{\beta}} \right)^{v'_{\beta r}} \right] \quad (3)$$

с учетом соотношения $\frac{d}{dt} = (u - D) \frac{d}{d\zeta}$, $U = u - D$, получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений, для которой ставится задача Коши с начальными условиями для массовых концентраций $\xi_{\alpha} \Big|_{\zeta=0} = \xi_{\alpha,0}$ и искомым начальным условием для скорости $u \Big|_{\zeta=0} = u_f$, где u_f — скорость за фронтом замороженной УВ, определяемая по начальной. Для описания кинетики воспламенения и горения реагирующей смеси силана и воздуха используем детальную кинетическую схему [2], которая учитывает 140 прямых и обратных реакций двадцати пяти компонентов (H₂, O₂, H₂O, OH, O, H, HO₂, H₂O₂, SiH₄, SiH₃, SiH₂, HSiO, SiH₂O, SiH₃O, SiH₃O₂, xSiH₃O₂, SiH₃OH, SiH₃O₂H, SiH₂OH, HSiOOH, SiOOH, SiO, SiO₂, N₂, Ar). Обновленные данные по кинетическим и термодинамическим константам данной кинетики нами были взяты из [3, 4].

На основе этой модели были рассчитаны равновесные параметры в силано-воздушной смеси. На рис. 1 приведены зависимости нормированных равновесных параметров (отнесенных к соответствующим значениям в стехиометрической смеси) силано-воздушной и метано-воздушной

(взяты из работы [1]) смесей при детонационном сгорании этих газов: а) скорость ДВ; б) давление в точке Чепмена-Жуге; в) температура в точке Чепмена-Жуге; от стехиометрического соотношения между топливом и окислителем - ϕ в области недостатка топлива. Значения равновесных параметров в стехиометрических смесях таковы: силан-воздух - $D_{st} = 1760$ м/с, $p_{e,st} = 17.5$ атм, $T_{e,st} = 2727$ К; метан-воздух - $D_{st} = 1816$ м/с, $p_{e,st} = 17.72$ атм, $T_{e,st} = 2828$ К. Как видно из рис. 1, уменьшение доли силана в такой смеси приводит к существенному уменьшению давления и температуры смеси (уменьшаются в полтора раза в рассматриваемом диапазоне ϕ), а также к уменьшению скорости ДВ (уменьшается на 16%). Кроме того, из рис. 1 видно, что параметры в смеси метан-воздух быстрее уменьшаются при уменьшении ϕ по сравнению с силано-воздушной смесью. Также на рис. 1а приведены зависимости нормированной скорости детонации в водородо-воздушной смеси. Видно, что эти зависимости практически в точности совпадают с зависимостями для силано-воздушной смеси.

Следует отметить, что в работе [2] были проведены расчеты по определению параметров взрыва в стехиометрической силано-воздушной смеси в присутствии частиц Al_2O_3 с использованием простой кинетики химических превращений в ДВ. Равновесные параметры, рассчитанные в работе [2] для чистой стехиометрической силано-воздушной смеси без частиц близки к значениям, полученным нами в расчетах с детальной кинетикой: 1830 м/с, 17,89 атм, 2973 К в работе [2] и 1760 м/с, 17,5 атм, 2727К в данной работе.

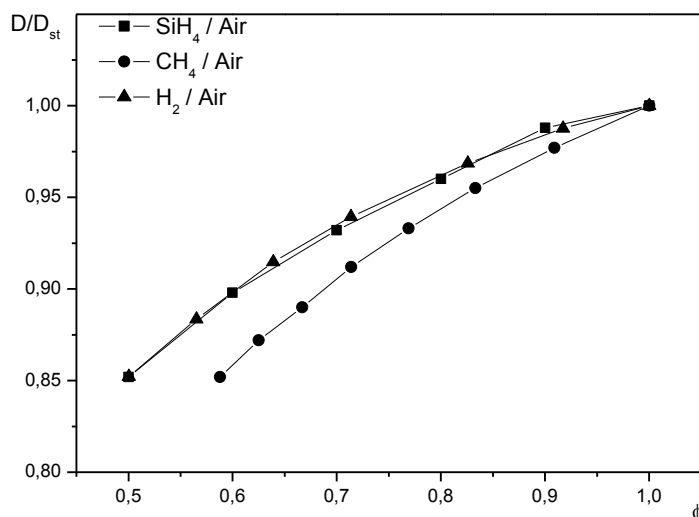


Рис. 1а. Зависимость нормированной скорости ДВ в силано-воздушной, метано-воздушной и водородо-воздушной смесях от стехиометрического соотношения между топливом и окислителем. Область обедненных смесей.

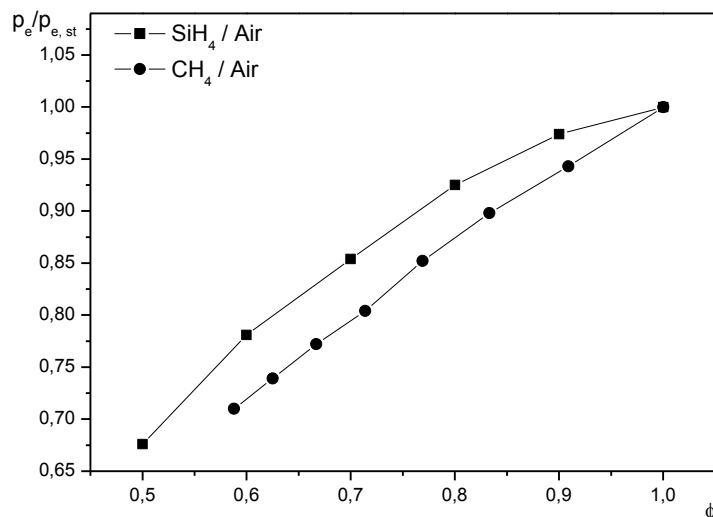


Рис. 16. Зависимость нормированного давления в силано-воздушной и метано-воздушной смесях в точке Чепмена-Жуге от стехиометрического соотношения между топливом и окислителем. Область обедненных смесей.

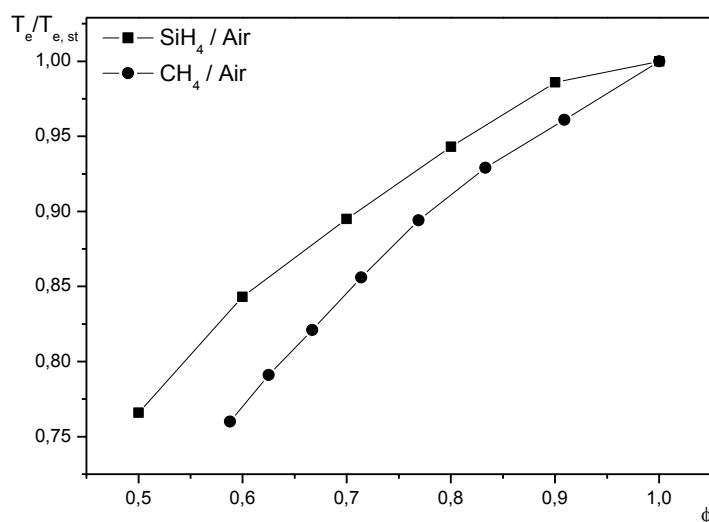


Рис. 17. Зависимость нормированной температуры в силано-воздушной и метано-воздушной смесях в точке Чепмена-Жуге от стехиометрического соотношения между топливом и окислителем. Область обедненных смесей.

Теперь рассмотрим, как ведут себя термодинамические параметры смеси в структуре ДВ. На рис 2а приведены распределения нормированных давления и температуры смеси в режимах Чепмена-Жуге и пересжатом. Значения этих параметров отнесены к их значениям на фронте ДВ. Значения на фронте таковы: при $U_0 = 1760$ м/с: $p = 30.32$ атм, $T = 1726$ К; при $U_0 = 2000$ м/с: $p = 39.2$ атм, $T = 2147$ К. На рисунке в точке ноль находится фронт ДВ, за ним идут зоны воспламенения и горения и в конечной точке достигается равновесное состояние. Видно, что за фронтом детонационной волны имеется некий всплеск термодинамических параметров. Затем идет небольшая область разгрузки, в которой температура уменьшается, давление растет, а после начинается обратное изменение этих параметров и в конечной точке наблюдается выход на равновесие.

На рис. 2б показано как ведет себя замороженное число Маха в этой небольшой области, где происходит всплеск термодинамических параметров. Видно, что в этой области в относительной системе координат происходит сначала ускорение потока, потом его замедление. Причем, как видно, чем больше скорость ДВ, тем тоньше эта зона и тем слабее ускоряется поток в этой зоне. Также отметим, что выход на конечное значение замороженного числа Маха M_f близкое к единице достигается при намного больших значениях пространственной координаты, чем приведены на рисунке.

Рассмотрим поведение основных компонентов газовой смеси в структуре ДВ. На рис. 2в представлены распределения концентраций основных компонент смеси (H_2 , O_2 , H_2O , OH , O , SiH_4 , SiO , SiO_2) в стехиометрической силано-воздушной смеси в режиме Чепмена-Жуге. Видно, что в малой зоне всплеска термодинамических параметров происходит практически полный распад реагентов - силана и кислорода, идет образование промежуточных компонент (OH , O , SiO) и начинается образование продуктов реакции - H_2O , SiO_2 . Кроме того, из рис. 2а и 2в видно, что в этой небольшой области заканчивается зона индукции, определяемый по всем трем критериям воспламенения, описанным выше, и начинается зона горения.

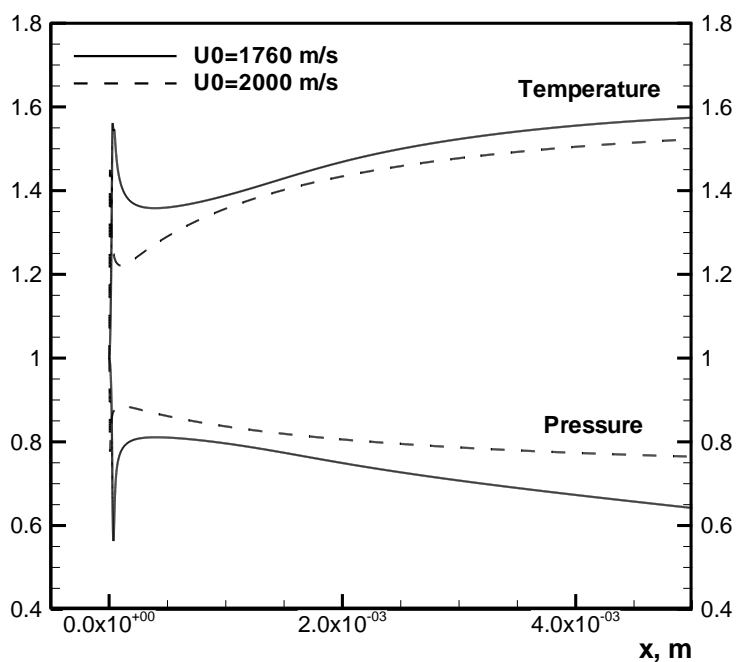


Рис. 2а. Распределение нормированных давления и температуры в стехиометрической силано-воздушной смеси в режимах Чепмена-Жуге и пересжатом.

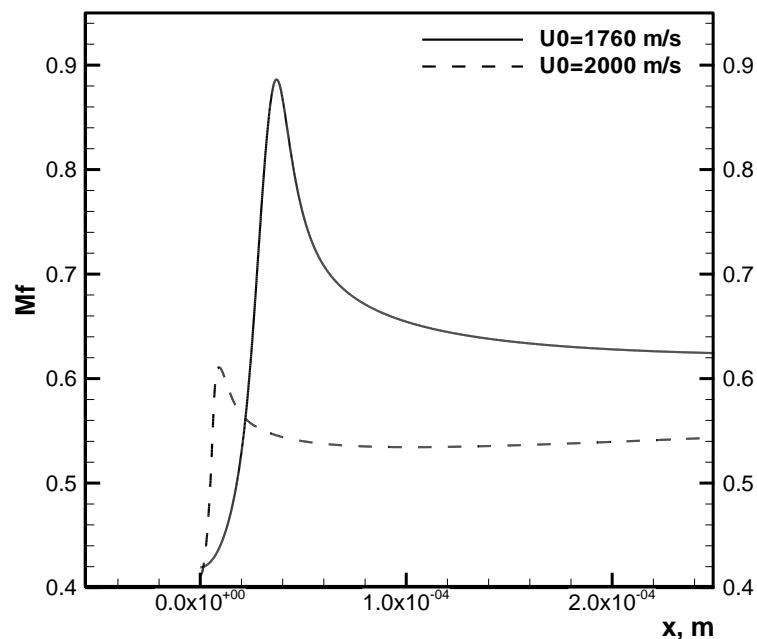


Рис. 2б. Распределение замороженного числа Маха в стехиометрической силано-воздушной смеси в режимах Чепмена-Жуге и пересжатом.

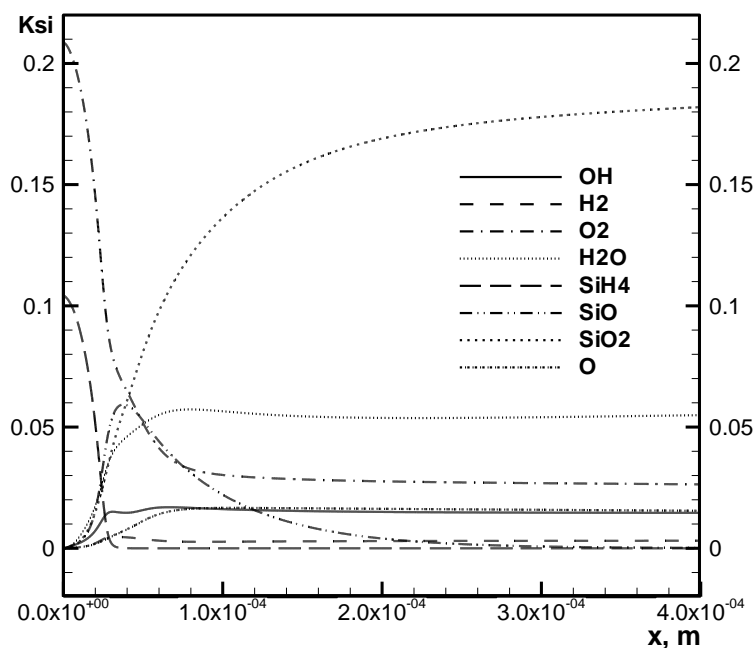


Рис. 2в. Распределение концентраций компонент смеси в стехиометрической силано-воздушной смеси в режиме Чепмена-Жуге.

Выводы.

На основе детальной кинетической схемы [2] процессов химических превращений силана предложены физико-математическая модель и математическая технология для описания структуры детонационной волны в силано-воздушной смеси.

Рассчитаны зависимости скорости детонационной волны и равновесных параметров смеси (давления, температуры) от стехиометрического соотношения между топливом и окислителем. Оказалось, что в переменных $(D / D_{st}, \phi)$ скорости детонационной волны совпадают для смесей силан-воздух и водород-воздух.

Литература

1. Федоров А.В., Фомин П.А., Тропин Д.А. Простая кинетика и структура детонационной волны в метановоздушной смеси // Физика горения и взрыва Т. 50, №1, 2014.
2. Britten J.A., Tong J., Westbrook C.K. A Numerical Study of Silane Combustion // Twenty-Third Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990, pp.195-202
3. NIST Chemistry WebBook, <http://webbook.nist.gov/>
4. Kondo S., Tokuhashi K., Takahashi A., Kaise M. A Numerical Study of Low Temperature Silane Combustion // Combustion Science and Technology, 2000, V. 159, pp. 391-406

§ 3. Пределы воспламенения смесей силан-кислород и силан-воздух.

Смесь силан - кислород при низких температурах.

Рассмотрим задачу о воспламенении смеси силана и кислорода ($30\% \text{SiH}_4 + 70\% \text{O}_2$; $\xi_{\text{SiH}_4} = 0.3$, $\xi_{\text{O}_2} = 0.7$) при низких давлениях ($p \in [0.2, 1]$ атм) и температурах ($T \in [350, 500]$ К).

Эта задача сводится к решению задачи Коши для системы кинетических уравнений Ч. Вестбрука. Для ее решения использовался решатель жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений RADAU5 [2]. Рассмотрим полученные данные. На рис. 1 представлены кривые в плоскости (p, T) , слева от которых нет воспламенения смеси, а справа воспламенение имеет место. Это так называемые "полуостровы воспламенения", которые получены по экспериментальным данным и расчетным путем различными авторами, в том числе и нами.

На рисунке представлены наши расчеты (кривая с круглыми маркерами), расчеты из работы Кондо С. [3] (штрихованная кривая) и расчеты из работы Бабушка В.И. [4]. А также экспериментальные данные Хартмана Дж. Р., взятые из работ [3] (квадратные маркеры, назовем их *серия экспериментов 1*) и [4] (треугольные маркеры, назовем их *серия экспериментов 2*). И, наконец, там же представлены экспериментальные данные Шантаровича Е. С. [6] (сплошная кривая).

Видно, что при давлениях менее 0.2 атм имеется значительное расхождение в экспериментальных данных Хартмана Дж. Р., взятые по [3] и [5] (сравните квадраты и треугольники). Отметим, что серии экспериментов 1 и 2 дают не близкие данные по параметрам полуострова воспламенения.

Кроме того, оказалось, что расчеты Кондо С. (штрихованная кривая) [3] удовлетворительно описывают экспериментальные данные Хартмана Дж. Р. [4] (треугольники, серия экспериментов 2) и расходятся с серией экспериментов 1 (квадраты). Такое расхождение авторы объясняют тем, что не учитывают в кинетике обрыв цепочек реакций на стенках, т.е. гибель радикалов. Отметим, что в работе Кондо С. не приводилось сопоставление с данными Хартмана Дж.Р. (эксперимент 2), которое безусловно более выигрышно.

Также видно, что расчеты по модели Бабушка В.И. [4] удовлетворительно описывают только серию экспериментов 2 и не описывают серию экспериментов 1. Кроме того, модель Бабушка описывает эксперименты 2 в диапазоне давлений [0.4, 0.6] атм, при остальных давлениях эта модель дает значительное расхождение с серией экспериментов 2.

Однако наши расчеты при низких давлениях (от 0.6 до 0.2 атм) и низких температурах (от 360 до 420 К) также удовлетворительно описывают серию экспериментов 2, а при более высоких параметрах (давление более 0.8 атм и температура более 420 К) приближаются к значениям из серии экспериментов 1. Тенденция сближения наших расчетных данных и данных эксперимента 1 начинается с давлений больших чем 0.6 атм. При давлениях менее 0.2 атм и температур меньших 360 К наши расчеты повторяют серию экспериментов 1. То есть общим свойством полученного расчетного полуострова является то, что при различных давлениях описываются нижняя и верхняя части данных эксперимента 1 Хартмана Дж.Р., а в промежуточной области имеется переход от данных эксперимента 2 к данным эксперимента 1. Тем самым можно высказать предположение о

возможном существовании верхнего полуострова в виде кривой BCD, и части АВ, соответствующей возможно второму полуострову. Этот нижний полуостров напоминает полуостров Шантаровича Е.С., различаясь количественно.

Кроме того, наклон кривой в наших расчетах соответствует наклону кривой в серии экспериментов 2 при давлениях выше 0.3 атм и ниже 0.2 атм. Таким образом кинетика удовлетворительно описывает две серии экспериментальных данных в диапазоне давлений [0.05, 1,1] атм и температур [350, 500] К и позволяет обнаружить соответствующие верхние и нижние пределы воспламенения.

Таким образом, каких-либо особых преимуществ в описании пределов воспламенения более массивными моделями [3, 4] (196 и 440 прямых и обратных реакций) нет. В различных диапазонах параметров модель Вестбрука вполне удовлетворительно справляется с описанием изучаемого процесса. В ее пользу говорит ее экономичность (140 прямых и обратных реакций).

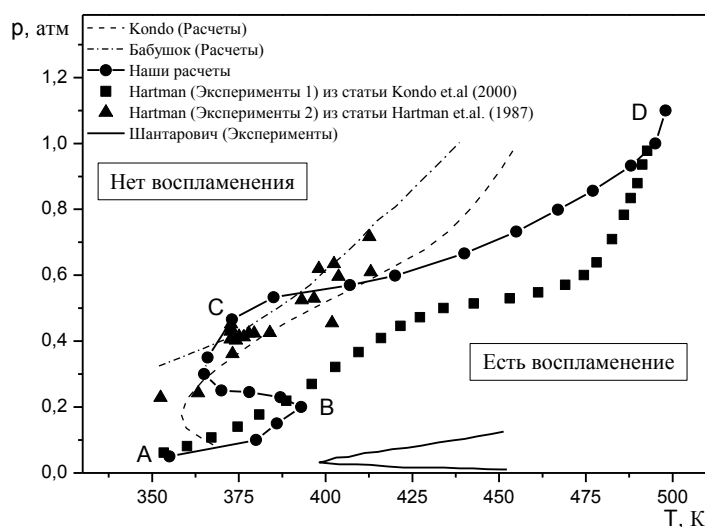


Рис. 1. Пределы воспламенения смеси 30% SiH₄ + 70% O₂.

Влияние обрыва цепей.

Рассмотрим, каким образом влияет обрыв цепей реакций (гибель радикалов) на стенках на пределы воспламенения смеси силана и кислорода 30% SiH₄ + 70% O₂ при давлении 0.75 атм. Будем учитывать только гибель радикала OH. Обрывом цепей вследствие исчезновения остальных радикалов пренебрежем из-за малости их концентраций в процессе химических превращений. Моделировать явление обрыва цепей реакций будем по аналогии с [7]. В этом случае в уравнение кинетики для радикала добавляется еще одна реакция гибели радикалов со

скоростью $k = AT^n e^{-\frac{E}{RT}}$ с соответствующим изменением уравнения сохранения плотности смеси в целом.

В таблице 1 представлены данные по воспламенению силана при различных значениях констант A , n , E . Видно, что учет обрыва цепей не слишком сильно влияет на значение предела воспламенения (температуры, при которой начинается воспламенение силана) при данном давлении. Кроме того, увеличение скорости реакции гибели радикала OH при изменении констант A (увеличение в 2 раза) и E (уменьшение в 2 раза) не влияет на положение предела воспламенения; воспламенение происходит при температуре $T_{crit} = 458$ К. Однако, увеличение константы A в 10 раз (до значения $A = 2400$ 1/с) при неизменной энергии активации ($E = 8000$ Дж/моль) приводит к тому, что предел воспламенения сдвигается в сторону высоких температур, воспламенение начинается при температуре $T = 462$ К. Дальнейшее уменьшение энергии активации в 2 раза (до значения $E = 4000$ Дж/моль) при постоянной A ($A = 2400$ 1/с) также сдвигает предел воспламенения в сторону высоких температур, воспламенение начинается при температуре $T = 463$ К. Увеличивая далее константу A в 2 раза (до значения $A = 4800$ 1/с)

при неизменной энергии активации ($E = 4000$ Дж/моль), получаем, что предел воспламенения опять сдвигается в сторону высоких температур, воспламенение начинается при температуре $T = 464$ К.

Кроме того, были проведены расчеты с нулевой энергией активации при значениях константы $A = 240$ 1/с и $A = 24000$ 1/с. Выбранные таким образом константы в скорости реакции гибели радикалов определяют диффузионную область обрыва цепей на стенке. Видно, что при данных параметрах смеси имеется незначительное смещение предела воспламенения (на 5 – 8 К).

Таблица 1. Пределы воспламенения силана при различных значениях скорости гибели радикала OH .

	$T = 456$ К	$T = 458$ К
$k = 0$	Нет воспламенения	Есть воспламенение
$k = 240\sqrt{T} e^{-\frac{8000}{RT}}$	Нет воспламенения	Есть воспламенение
$k = 480\sqrt{T} e^{-\frac{8000}{RT}}$	Нет воспламенения	Есть воспламенение
$k = 480\sqrt{T} e^{-\frac{4000}{RT}}$	Нет воспламенения	Есть воспламенение
$k = 2400\sqrt{T} e^{-\frac{8000}{RT}}$	Нет воспламенения	Нет воспламенения (Воспламеняется при $T = 462$ К)
$k = 2400\sqrt{T} e^{-\frac{4000}{RT}}$	Нет воспламенения	Нет воспламенения (Воспламеняется при $T = 463$ К)
$k = 4800\sqrt{T} e^{-\frac{4000}{RT}}$	Нет воспламенения	Нет воспламенения (Воспламеняется при $T = 464$ К)
$k = 48000\sqrt{T} e^{-\frac{4000}{RT}}$	Нет воспламенения	Нет воспламенения (Воспламеняется при $T = 467$ К)
$k = 240\sqrt{T}$	Нет воспламенения	Нет воспламенения (Воспламеняется при $T = 461$ К)
$k = 24000\sqrt{T}$	Нет воспламенения	Нет воспламенения (Воспламеняется при $T = 464$ К)

Выберем значения кинетических констант $A = 240$ 1/с, $n = 0.5$, $E = 8000$ Дж/моль и проанализируем, как изменятся пределы воспламенения при различных давлениях. В таблице 2 представлены критические температуры воспламенения силана при различных давлениях с учетом и без учета гибели радикалов. Видно, что разница в значениях между двумя сериями расчетов не превышает 1%. Таким образом, влияние гибели радикалов на стенке в данном диапазоне давлений незначительно.

Таблица 2. Пределы воспламенения силана при различных давлениях с учетом и без учета гибели радикалов OH .

p , атм	T_{crit} , К		Разница, %
	$k = 240\sqrt{T} e^{-\frac{8000}{RT}}$	$k = 0$	
0.4	367	369	-0.54
0.5	378	379	-0.26
0.6	424	420	0.95
0.7	448	449	-0.22
0.8	468	467	0.21
0.9	486	483	0.62
1.0	494	495	-0.2
1.1	497	498	-0.2

Смесь силан - воздух при низких температурах.

На рис. 2 представлены пределы воспламенения смесей силан-воздух (стехиометрическая и богатые смеси). Составы смесей представлены на рисунке и более подробно в таблице 3. На рисунке зависимости пронумерованы в порядке возрастания доли силана в смеси. Видно, что при атмосферном давлении ($p \sim 1$ атм) стехиометрическая силано-воздушная смесь воспламеняется при температуре порядка 600 К. Небольшое увеличение количества силана в смеси до $\xi_{SiH_4} = 0.189$ приводит к смещению предела воспламенения в сторону более высоких температур. Дальнейшее увеличение количества силана в смеси до $\xi_{SiH_4} = 0.317$ приводит к смещению предела воспламенения в область более низких температур и воспламенение при атмосферном давлении происходит при температуре около 560 К. Более богатые силаном смеси ($\xi_{SiH_4} > 0.317$) имеют пределы воспламенения при больших температурах ($T > 560$ К), т.е. предел в таких смесях сдвинут вправо относительно предела воспламенения смеси $2SiH_4 + Air$ ($\xi_{SiH_4} = 0.317$). Возможно, это вызвано тем, что концентрация кислорода становится весьма малой, из-за чего в процессе воспламенения возникает малое количество кислородсодержащих радикалов. Такие радикалы являются некими "катализаторами", возбуждающими распад и дальнейшее окисление силана. Так, в работе [3] было численно показано, что наличие водяного пара в смеси в количестве большем некоторого предельного значения побуждает воспламенение смеси силан-кислород. Позже в работе [8] в экспериментах по выдуву силана в воздух было показано, что добавление капли воды объемом 10 мкл приводит к быстрому воспламенению силано-воздушной смеси. Таким образом, при увеличении концентрации силана в смеси выше стехиометрии имеется немонотонное изменение пределов воспламенения (рис. 3): незначительное увеличение количества силана (до $\xi_{SiH_4} = 0.189$) приводит к увеличению предельных температур воспламенения, значительное увеличение приводит сначала к уменьшению предельных температур воспламенения (до $\xi_{SiH_4} = 0.317$), а затем к их увеличению ($\xi_{SiH_4} > 0.317$).

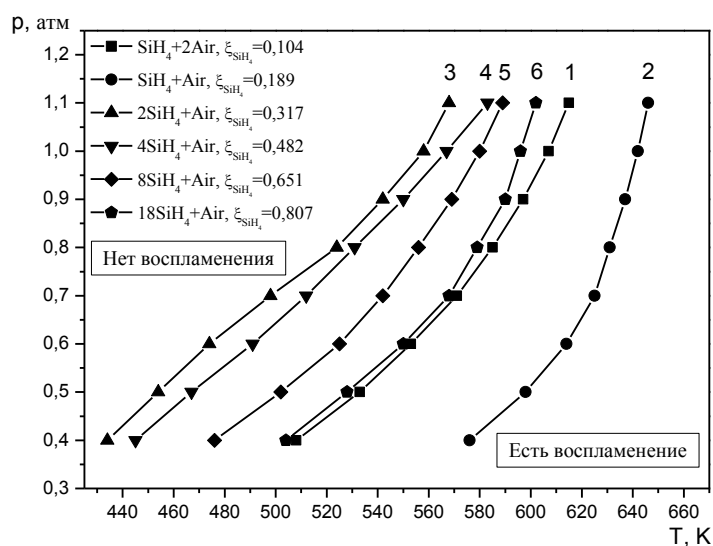


Рис. 2. Пределы воспламенения силано-воздушной смеси.

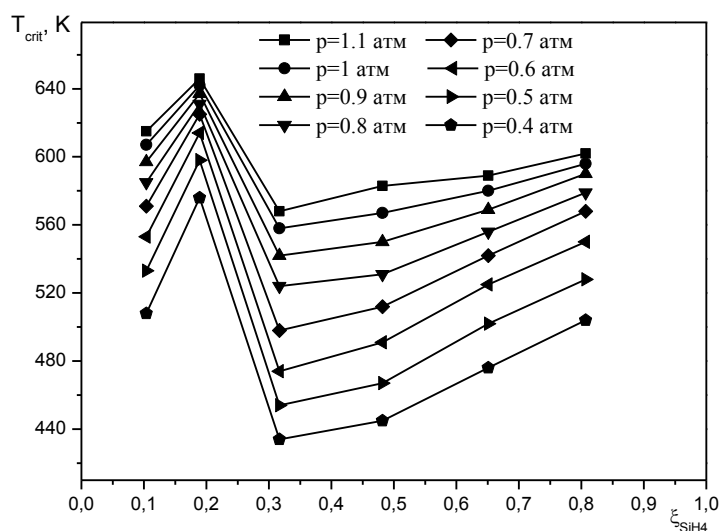


Рис. 3. Зависимость предельной температуры воспламенения от концентрации силана в силано-воздушной смеси при различных давлениях.

Таблица 3. Составы смесей силана и воздуха.

Состав смеси	ξ_{SiH_4}	ξ_{O_2}	ξ_{N_2}
$SiH_4 + 2 Air$ (Стехиометрия)	0,104	0,208	0,688
$SiH_4 + Air$ (Богатая смесь)	0,189	0,189	0,622
$2 SiH_4 + Air$ (Богатая смесь)	0,317	0,159	0,524
$4 SiH_4 + Air$ (Богатая смесь)	0,482	0,12	0,398
$8 SiH_4 + Air$ (Богатая смесь)	0,651	0,081	0,268
$18 SiH_4 + Air$ (Богатая смесь)	0,807	0,045	0,148

Выводы.

Найдены пределы (верхние и нижние) воспламенения в виде S – образной кривой ABCD в смеси силан - кислород при давлениях от 0.05 до 1.1 атм и температурах от 350 до 500 К на основе экономичной модели химической кинетики Ч. Вестбрука . Кроме того наши расчеты по данной модели более адекватно описывают эксперименты Хартмана I, по сравнению с более массивными расчетными моделями Бабушка В.И., Кондо С.

Показано слабое влияние на эти пределы (их устойчивость) процесса гибели радикалов OH в рамках Аррениусовской модели в диапазоне скоростей превращений [430, 373700] 1/с (при изменении предэкспонента от 240 до 48000 1/с и энергии активации от 4000 до 8000 Дж/кг). Определены пределы воспламенения силано - воздушной смеси в диапазоне давлений от 0.4 до 1.1 атм и температур от 430 до 640 К. Выявлено влияние состава смеси силан - воздух на пределы воспламенения. Показано, что при увеличении доли силана в такой смеси изменение предельных температур воспламенения немонотонное: сначала предельные температуры воспламенения

увеличиваются, затем до некоторого предельного значения концентрации силана уменьшаются, потом опять увеличиваются.

Литература

1. Britten J.A., Tong J., Westbrook C.K. A Numerical Study of Silane Combustion // Twenty-Third Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990, pp.195-202
2. <http://pitagora.dm.uniba.it/~testset/solvers/radau5.php>
3. Kondo S., Tokuhashi K., Takahashi A., Kaise M. A Numerical Study of Low Temperature Silane Combustion // Combustion Science and Technology, 2000, V. 159, pp. 391-406.
4. V.I. Babushok, W. Tsang, D.R. Burgess jr., M.R. Zachariah Numerical study of low- and high-temperature silane combustion // Twenty-seventh symposium (international) on combustion/the combustion institute, 1998/pp. 2431–2439.
5. Hartman J.R., Famil-Ghirriha J., Ring M.A., O'Neil H.E. Stoichiometry and Possible Mechanism of SiH₄-O₂ Explosions // Combustion and Flame, 1987, V. 68, pp. 43-56.
6. Shantarovich P.S. Acta Physicochim URSS 6:65 (1937).
7. Щетинков Е.С. Физика горения газов // изд.-во "Наука", Москва, 1965, 739 С.
8. Chen J.-R., Tsai H.-Y., Wang S.-W., Wu S.-Y., Ngai E.Y., Huang K. P.-P. Ignition Characteristics of Steady and Dynamic Release of Pure Silane into Air // Combustion, Explosion and Shock Waves, 2010, V. 46, No. 4, pp. 391-399.

§ 4. Воспламенение двухтопливной смеси водород/силан в воздухе.

Рассмотрим задачу о воспламенении смеси водород/силан/воздух за фронтом отраженной ударной волной (УВ). Поскольку поток за фронтом отраженной УВ покоится, то физико-математическая модель, описывающая данный процесс сводится к следующей: уравнение для температуры смеси (уравнение энергии), имеющее вид

$$\frac{dT}{dt} = - \frac{1}{c_v(T)} \sum_{\alpha=1}^N (c_{v,\alpha}(T)T + h_{0\alpha} - c_p(T)T_{00}) \frac{d\xi_{\alpha}}{dt}, \quad (1)$$

замыкаемое уравнением состояния для газовой смеси в целом

$$p = \rho TR \sum_{\alpha=1}^N \frac{\xi_{\alpha}}{M_{\alpha}} \quad (2)$$

и кинетическими уравнениями детальной химической кинетики

$$\frac{d\xi_{\alpha}}{dt} = \frac{1}{\rho} M_{\alpha} \sum_{r=1}^l \rho^{m_r} (v'_{\alpha r} - v_{\alpha r}) \left[k_{fr} \prod_{\beta=1}^N \left(\frac{\xi_{\beta}}{M_{\beta}} \right)^{v_{\beta r}} - k_{br} \prod_{\beta=1}^N \left(\frac{\xi_{\beta}}{M_{\beta}} \right)^{v'_{\beta r}} \right]. \quad (3)$$

Здесь c_p – удельная теплоемкость при постоянном давлении, Дж/К/кг; c_v – удельная теплоемкость при постоянном объеме, Дж/К/кг; $c_{v\alpha}$ – удельная теплоемкость при постоянном объеме компоненты α , Дж/К/кг; $h_{0\alpha}$ – энтальпия образования компонента α , Дж/кг; k_{fr}, k_{br} – скорости прямых и обратных реакций; l – количество реакций; m – порядок реакции; M_{α} – молярная масса компонента α , кг/моль; N – количество компонент в смеси; T_{00} – стандартная температура, К; ξ_{α} – концентрация компоненты смеси α ; $v_{\alpha r}, v_{\beta r}$ – стехиометрические коэффициенты, равные 1, если соответствующий компонент участвует в r -й реакции, и 0 в противоположном случае. Начальные данные при $t = 0$: $u = 0$, $p = p_r$, $T = T_r$, $\xi_{\alpha} = \xi_{\alpha,0}$, где p_r, T_r – давление и температура смеси за отраженной УВ, $\xi_{\alpha,0}$ – концентрации компонент смеси за отраженной УВ. Для описания кинетики воспламенения и горения реагирующей смеси силана и воздуха используем несколько модифицированную детальную кинетическую схему [1], которая учитывает 140 прямых и обратных реакций двадцати пяти компонентов.

Для определения времени задержки воспламенения существует несколько критериев воспламенения [2-4]. Ранее, нами в работах [2-4] было показано, что различные критерии воспламенения дают очень близкие друг к другу результаты как для смесей водород/кислород/аргон, так и для смесей силан/водород/кислород/азот/аргон. Поэтому в данной работе для определения времени задержки воспламенения выберем один из критериев, а именно: время, в течение которого достигается максимум роста температуры смеси во времени – $\max \left(\frac{dT}{dt} \right)$.

Результаты расчетов. Времена задержки воспламенения.

Как было показано в работах [5, 6], добавление небольшого количества силана (до 20% SiH_4) в водородо-воздушную смесь значительно снижает времена задержки воспламенения при низких температурах (до 1250 К). Мы же рассмотрим как влияет добавление силана на времена задержки воспламенения водородо-воздушной смеси в более широком диапазоне температур ($T \in [1200, 2500]$ К). На рис. 1 представлены зависимости времени задержки воспламенения смеси водород/силан/воздух от состава горючего (водорода и силана): на верхней оси абсцисс - отношение массовой концентрации водорода в смеси к массовой концентрации водорода в стехиометрической водородо-воздушной смеси, на нижней оси абсцисс - отношение массовой концентрации силана в смеси к массовой концентрации силана в стехиометрической силано-воздушной смеси. Видно, что для всех температур, введение небольшого количества силана в водородо-воздушную смесь приводит к значительному уменьшению времени задержки воспламенения смеси. Дальнейшее увеличение доли силана в смеси приводит к монотонному уменьшению времени задержки воспламенения вплоть до температур порядка 2200К, а при температурах более 2200К наблюдается выход данных зависимостей на асимптотическое значение, соответствующее времени задержки воспламенения стехиометрической силано-воздушной смеси. Таким образом, при высоких температурах (более 2200К) наличие водорода в смеси не влияет на времена задержки воспламенения, все определяется временем задержки воспламенения силана. Кроме того, добавление силана в концентрациях более 20%, так же как и в работе [5], но при более высоких температурах (от 1200 до 2500 К), приводит к незначительному снижению времен задержки воспламенения водородо-воздушной смеси.

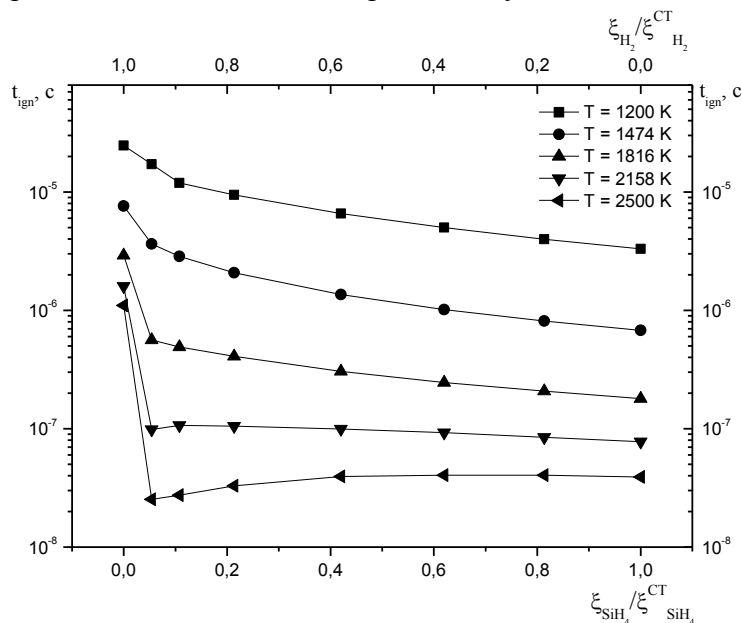


Рис. 1. Зависимости времени задержки воспламенения смесей водород/силан/воздух от концентраций топлива (водорода и силана) в смесях.

Известно, что зависимость времени задержки воспламенения однопаливной смеси от температуры может быть описано стандартной Аррениусовской формулой [2, 3, 7]: $t_{ign} = A e^{\frac{E}{RT}}$.

Таким образом в переменных $\left(\ln(t_{ign}), \frac{1}{T} \right)$ данные зависимости представляют из себя прямые:

$$\ln(t_{ign}) = A + \frac{E}{RT}. \quad (4)$$

В случае двухтопливных смесей подобные соотношения с постоянной энергией активации E могут не выполняться. Так, в работе [8] были построены подобные аппроксимационные формулы для смесей метан/водород/воздух в рамках Аррениусовской модели, но с предположением зависимостей энергии активации E от концентраций топлив в смеси ξ_{fuel} . Это позволило описать экспериментально наблюдаемые времена задержки воспламенения в рассматриваемых смесях. Поэтому представляется целесообразным построить зависимости логарифма времени задержки воспламенения $\ln(t_{ign})$ для смеси водород/силан/воздух от обратной температуры $\frac{1}{T}$. Такие

зависимости для смесей водород/силан/воздух, рассчитанные по предложенной выше модели детальной кинетики, представлены на рис. 2. Видно, что для стехиометрических смесей водород/воздух и силан/воздух данные зависимости представляют собой прямые и могут быть описаны формулой (4). Кроме того, видно, что при содержании силана в смеси от 0.2 до 0.4 ($0.2 SiH_4 - 0.4 SiH_4$) эти зависимости также являются прямыми, однако, для различного содержания силана они имеют различные углы наклона. Это говорит о том, что для этих смесей энергии активации различаются. Т.е. энергия активации в данном случае является функцией концентрации силана $E = E(\xi_{SiH_4})$, подобно тому, что наблюдалось в работе [8]. При незначительном содержании силана в смеси ($0.05 SiH_4 - 0.1 SiH_4$) зависимости, представленные на рис. 2, становятся нелинейными. Можно высказать предположение, что в данном случае энергии активации будут являться не только функциями концентрации силана, но и функциями температуры - $E = E(\xi_{SiH_4}, T)$. Более четко такую зависимость можно проследить из рис. 3, на котором представлены рассчитанные времена задержки воспламенения как функции концентрации силана и температуры $t_{ign} = t_{ign}(\xi_{SiH_4}, T)$. Из рис. 3 можно увидеть, что существует несколько областей воспламенения:

1. область высоких концентраций силана ($\xi_{SiH_4} / \xi_{SiH_4}^{CT} \in [0.6, 1]$), в которой энергия активации зависит только от концентрации силана,
2. область средних значений концентраций силана ($\xi_{SiH_4} / \xi_{SiH_4}^{CT} \in [0.2, 0.6]$), в которой энергия активации будет являться функцией и концентраций компонент смеси и температуры смеси,
3. область малых концентраций силана ($\xi_{SiH_4} / \xi_{SiH_4}^{CT} \in [0, 0.2]$), в которой очень значительно изменяются времена задержки воспламенения при высоких температурах (в 30 раз) и незначительно (в 2 раза) при низких температурах.

Таким образом, времена задержки воспламенения двухтопливной смеси водород/силан/воздух в пространстве $\left(\ln(t_{ign}), \frac{1}{T}, \frac{\xi_{SiH_4}}{\xi_{SiH_4}^{CT}} \right)$ будут представлять собой поверхность, описываемую, возможно, тремя различными зависимостями $t_{ign} = t_{ign}(\xi_{SiH_4}, T)$.

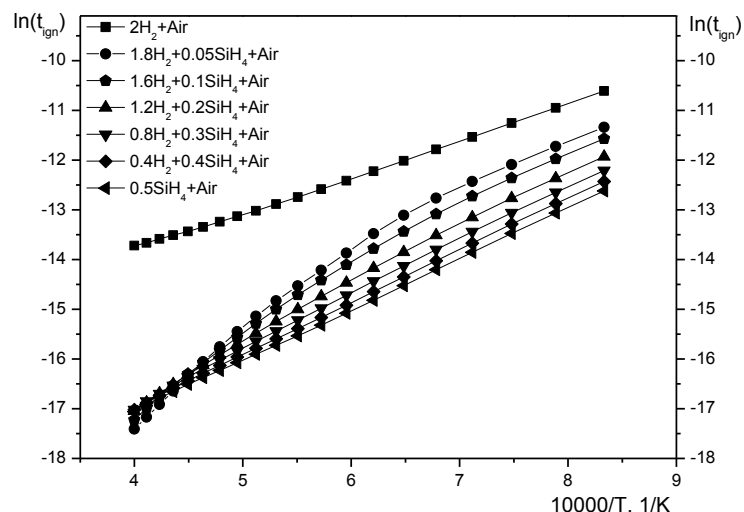


Рис. 2. Зависимости логарифма времени задержки воспламенения смеси водород/силан/воздух от обратной температуры.

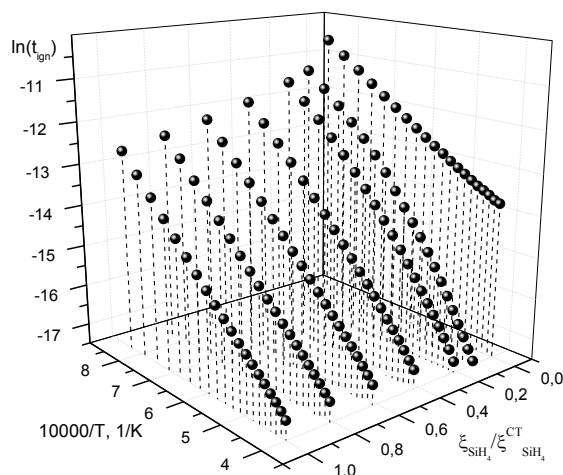


Рис. 3. Зависимости логарифма времени задержки воспламенения смеси водород/силан/воздух от обратной температуры и концентрации силана.

Выводы.

Рассчитаны времена задержки воспламенения двухтопливных смесей водород/силан/воздух на основе модифицированной ранее модели детальной кинетики [1].

Выявлено влияние на процесс воспламенения концентраций топлива. И по расчетным зависимостям времен задержки воспламенения двухтопливных смесей водород/силан/воздух от концентраций топлива (водорода и силана) при различных температурах определено:

- во всем рассматриваемом диапазоне температур (от 1200 до 2500 К), добавление небольшого количества силана (до 20%) в водородо-воздушную смесь приводит к значительному уменьшению времени задержки воспламенения смеси;
- добавление силана более 20% приводит к незначительному снижению времен задержки воспламенения водородо-воздушной смеси, т.е. наличие водорода в смеси не влияет на времена задержки воспламенения, все определяется временем задержки воспламенения силана.

Показано, что для двухтопливных смесей водород/силан/воздух существует три области воспламенения: 1. область, в которой энергия активации времени задержки воспламенения зависит только от концентрации силана (при концентрациях силана 60 – 100%); 2. область, в

которой энергия активации времени задержки воспламенения будет являться функцией и концентраций компонент смеси и температуры смеси (при концентрациях силана 20 – 60%); 3. область, в которой очень значительно изменяются времена задержки воспламенения при высоких температурах (в 30 раз) и незначительно (в 2 раза) при низких температурах (при концентрациях силана 0 – 20%).

Литература

1. Britten J.A., Tong J., Westbrook C.K. A Numerical Study of Silane Combustion // Twenty-Third Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990, pp.195-202
2. Тропин Д.А., Федоров А.В. Расчет пределов воспламенения смесей силан-кислород и силан-воздух // Физика горения и взрыва. 2016. Т. 52. № 1, с. 46-51.
3. Fedorov A.V., Fomin P.A., Fomin V.M., Tropin D.A., Chen J.-R. Mathematical Analysis of Detonation Suppression by Inert Particles : Kao Tech Publishing, Kaohsiung, Taiwan, 2012, 143 p, ISBN 978-986-88423-0-4.
4. Федоров А.В., Фомин П.А., Фомин В.М., Тропин Д.А., Чен Дж.-Р. Физико - математическое моделирование подавления детонации облаками мелких частиц : монография / Ин - т теорет. и прикл. механики СО РАН; НГАСУ (Сибстрин). -Новосибирск: НГАСУ (Сибстрин), 2011. -156 с.
5. Jachimowski C.J., McLain A.G. A Chemical Kinetic Mechanism for the Ignition of Silane/Hydrogen Mixtures // NASA Technical Paper 2129, 1983, 18 p.
6. McLain A.G., Jachimowski C.J., Rogers R.C. Ignition of SiH₄- H₂- O₂- N₂ Behind Reflected Shock Waves // NASA Technical Paper 2114, 1983.
7. Тропин Д.А., Федоров А.В. Физико-математическое моделирование воспламенения и горения силана в проходящих и отраженных ударных волнах // Физика горения и взрыва. 2015. Т.51, №4, с. 37-45.
8. Cheng R.K., Oppenheim A.K. Autoignition in methane-hydrogen mixtures//Combustion and Flame, 1984, V. 58, pp. 125-139.

ГЛАВА 3. МОЛЕКУЛЯРНО ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В НАНОЧАСТИЦАХ

1. КОМПЛЕКСНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАВЛЕНИЯ НАНОЧАСТИЦЫ АЛЮМИНИЯ

В настоящее время проявляется значительный интерес к изучению физических, химических и термодинамических свойств и процессов, протекающих в нанобъектах. Связано это с тем, что такие объекты обладают рядом свойств, которые зависят от их характерного размера, а их свойства отличаются в лучшую сторону от свойств материала в объемной фазе. Они проявляют также некоторые особенности и в поведении при воздействии на них полей различной природы. Это также обусловлено масштабным эффектом. В качестве частного примера мы остановимся на процессе плавления наночастицы алюминия. Можно ожидать, что он будет играть важную роль при описании явлений воспламенения и горения континуумов наночастиц. В работах [1, 2] нами была построена математическая модель плавления наночастиц, основанная на экспериментальном факте зависимости температуры плавления наночастиц от их размера. Решение данной проблемы свелось к численному решению неклассической задачи Стефана, в которой теплофизические параметры были взяты такими же, как и для микрочастиц (то есть частиц с характерным микронным масштабом). Нами была также построена точечная модель горения наночастиц алюминия в отраженной ударной волне [3, 4]. В этих работах использовались новые феноменологические модели для описания нагрева наночастиц в температурном поле, возникающем за отраженными ударными волнами. Были определены времена горения и плавления наночастиц при изменении давления и концентрации кислорода в окружающей смеси. В тоже время представляет интерес влияние на эти параметры зависимости теплофизических

величин (теплоемкости при постоянном давлении и объеме, теплопроводности) от размера наночастицы.

Одной из возможных физико-математических моделей, позволяющих получить эти параметры с той или иной степенью точности, является модель молекулярной динамики. В [14] было проведено молекулярно-динамическое моделирование плавления наноразмерных частиц алюминия с использованием ансамбля, предложенного Андерсеном [15]. Целями настоящей работы является: – разработка упрощенной полуэмпирической модели плавления наночастиц алюминия в рамках молекулярной динамики, – на ее основе расчет теплоемкости наночастиц, – и сопоставление времен плавления частицы по ММД - подходу и феноменологическому.

На рис. 1, 2 приведены зависимости параметров, отражающих изменения структурных свойств материала частиц с начальными размерами 3.25 и 6.25 нм, а именно, калорические кривые и параметры трансляционного порядка. Как видно, полная энергия по мере разогрева частицы возрастает до определенной величины, при которой наблюдается скачок энергии E_{on} (скачок) происходит при значении температуры, равном температуре плавления. Параметр трансляционного порядка напротив медленно уменьшается от значения близкого к 1. В момент фазового перехода он резко падает до величин порядка $10^{-2} - 10^{-3}$, как это изображено на рис. 3.

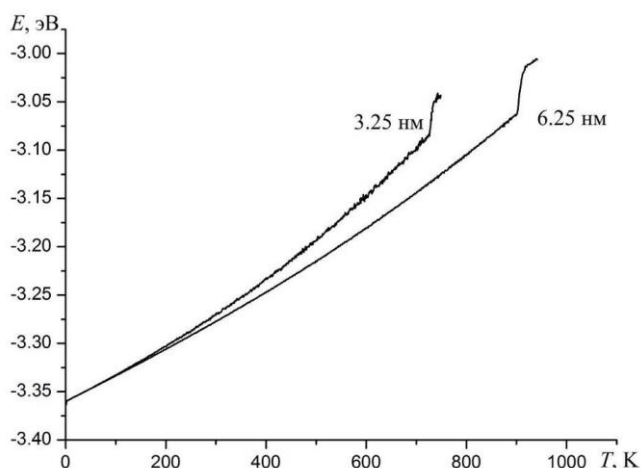


Рис. 1. Калорические кривые для наночастиц алюминия размером 3.25 и 6.25 нм.

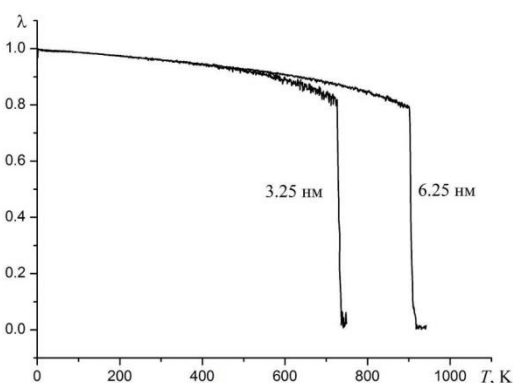


Рис. 2. Параметр трансляционного порядка для наночастиц алюминия размером 3.25 и 6.25 нм.

Выводы

Для описания процесса плавления наночастицы алюминия предложена и верифицирована полуэмпирическая модель молекулярной динамики, позволившая удовлетворительно описать тепловую историю частиц с размерами в интервале (2, 8) нм.

На ее основе определены зависимости теплоемкости частицы и тепло-ты фазового от размера частицы и температуры. Указано, что при увеличении размера частицы данная зависимость стремится к предельной функции, описывающей теплоемкость частицы в объемной фазе. Сопоставление расчетных характеристик плавления наночастицы алюминия, полученных по ММД и феноменологической модели показало их неплохое соответствие по времени плавления.

Литература

1. Федоров А.В., Шульгин А.В. Математическое моделирование плавления наноразмерных частиц металла // Физика горения и взрыва. 2011. Т.47, №. 2. С. 23–29.
2. Федоров А.В., Шульгин А.В. Математическое моделирование плавления и горения металлических наночастиц // Проблемы и достижения прикладной математики и механики: к 70-летию академика В.М. Фомина: сб. науч. тр. Новосибирск: Параллель, 2010. С. 586–600.
3. Федоров А.В., Фомин В.М., Шульгин А.В. Физико-математическое моделирование горения наночастиц алюминия вблизи торца ударной трубы // Доклады Академии наук. 2010. Т. 432, № 5. С. 616–619.
4. Федоров А.В., Шульгин А.В. Точечная модель горения наночастиц алюминия в отраженной ударной волне // Физика горения и взрыва. 2011. Т.47, № 3. С. 47–51.
5. Rapaport D.C. The art of molecular dynamics simulation. Cambridge University Press, 2004. 549 p.
6. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer simulation of liquids. Oxford University Press, 1991. 385 p.
7. Ercolessi F. A molecular dynamics primer. International School for Advanced Studies (SISSA-ISAS) Trieste, Italy, 1997. 52 p.
8. Ercolessi, F., Adams, J. B. Interatomic potentials from first-principles calculations: the force-matching method // Europhys. Lett. 1994. Vol. 26, № 8. P. 583–588.
9. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities and other defects in metals // Phys. Rev. B. 1984. Vol. 29, № 12. P. 6443–6453.
10. Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // Phys. Rev. B. 1986. Vol. 33, № 12. P. 7983–7991.
11. Finnis M.W., Sinclair J. E. A simple empirical N-body potential for transition metals // Philos. Mag. A. 1984. Vol. 50, № 1. P. 45–55.
12. Sutton A.P.; Chen J. Long-range Finnis–Sinclair potentials // Philos. Mag. Lett. 1990. Vol. 61, № 1. P. 139–164.
13. Streitz, F. H.; Mintmire, J. W. Electrostatic potentials for metal-oxide surfaces and interfaces // Phys. Rev. B. 1994, Vol. 50, № 16. P. 11996–12003.
14. Puri P., Yang V. Effect of Particle Size on Melting of Aluminum at Nano Scales // J. Phys. Chem. C. 2007, Vol. 111, № 32. P. 11776–11783.
15. Andersen H.C. Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature // J. Chem. Phys. 1980. Vol.72, № 4. P. 2384–2393.
16. Gezelter J.D., Rabani E., Berne B.J. Can imaginary instantaneous normal mode frequencies predict barriers to self-diffusion? // J. Chem. Phys. 1997. Vol. 107, № 12. P. 4618–4627.
17. Физические величины. Справочник // А.П. Бабичев, Н.А. Бабушкина, А.М. Братковский и др.; Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
18. Forsblom M., Grimvall G. Anharmonic effects in the heat capacity of Al // Physical Review B. 2004. Vol. 69. P. 165106.
19. Лихачев В.Н., Астахова Т.Ю., Виноградов Г.А., Алымов М.И. Аномальная теплоемкость наночастиц // Химическая физика. 2007. Т. 26, № 1. С. 89–93.
20. Lai S.L., Carlsson J.R.A., Allen L.H. Melting point depression of Al clusters generated during the early stages of film growth: Nanocalorimetry measurements // Applied physics letters. 1998. Vol. 72, № 9. P. 1098–1100

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ МИКРОЧАСТИЦ ЖЕЛЕЗА

Мелкодисперсные частицы металлов нашли широкое применение в различных областях промышленности. В настоящее время металлические порошки используются в качестве каталитических добавок, улучшающих эффективность сгорания обычных топлив и подавляющих образование вредных веществ в энергетических установках [1–3]. Кроме того, процесс сжигания металлических частиц рассматривается как возможный способ синтеза ультрадисперсных порошков оксидов металлов [4]. Изучение воспламенения и горения металлов представляет собой комплексную научную задачу, включающую различные аспекты неравновесных фазовых превращений и химических реакций. Эти механизмы отличаются большим разнообразием вследствие различий в физико-химических характеристиках исходных веществ. Многочисленные работы были посвящены исследованию взрывных характеристик взвешенной в среде окислителя металлической пыли [5–7]. В камере постоянного объема осуществлялось воспламенение облака пыли с помощью мощных искровых инициаторов, а также на ударных трубах, в которых пылевая взвесь создавалась при прохождении падающей ударной волны, а воспламенение происходило за отраженной волной. Информация, имеющаяся в этой области, ограничена в основном формальными кинетическими данными по скоростям горения. Другой немаловажной задачей является изучение воспламенения и горения частиц, свободнолежащих в виде тонкого слоя в среде нагретого окислителя. Локальное самовоспламенение может быстро распространиться и вызвать медленное тлеющее горение всего слоя. Моделирование данного процесса – это физико-химическая задача, объединяющая как кинетические процессы окисления отдельных частиц, так и процессы теплообмена в системах частица–частица и частица–газ. Поэтому для построения и проверки адекватности таких моделей необходимы исходные данные, в частности критические параметры газовой среды, при которых происходит самовоспламенение, их зависимость от материала и размера частиц. Как известно, проведение экспериментальных исследований в широких диапазонах начальных параметров системы зачастую представляется экономически затратным. Поэтому представляет интерес построение математических моделей, позволяющих дать прогноз поведения соответствующих засыпок металла в установку быстрого сжатия (УБС). В [8, 9] представлена физико-химическая математическая модель для описания явления самовоспламенения в рамках точечного подхода, описывающая некоторые критические параметры рассматриваемой системы.

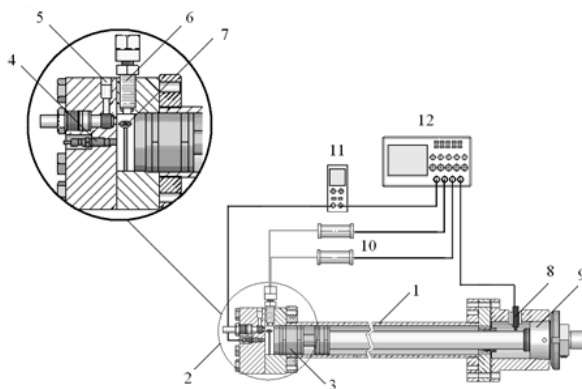


Рис. 1. Принципиальная схема измерений: 1 – цилиндр сжатия, 2 – тестовая камера, 3 – сжимающий поршень, 4 – датчик давления, 5 – клапан, 6 – кварцевое окно, 7 – керамическая чашка с образцом металлического порошка, 8 – оптический датчик отражения, 9 – конический фиксатор поршня в конечном положении, 10 – фотоумножители (или спектрометр и пирометр), 11 – усилитель заряда, 12 – цифровой осциллограф

В настоящей работе экспериментально исследованы критические условия и время самовоспламенения микрочастиц железа в кислороде, получены данные о температуре, развивающейся при горении. Для описания данного явления модифицирована полуэмпирическая

точечная модель, позволяющая описать тепловую историю системы частиц, подвергающуюся воздействию в устройстве быстрого сжатия.

Экспериментальная установка

Для создания нагретой окислительной среды с температурой 500–1100 К и давлением 0.5–28 МПа использовалась УБС, цилиндр сжатия которой схематично изображен на рис. 1. В тестовую камеру вмонтированы высокотемпературный пьезоэлектрический датчик давления Kistler 6031U18 (4), соединенный с усилителем заряда Kistler 5015A (11), клапан для вакуумирования и напуска кислорода (5) и кварцевое окно (6). Для регистрации светового излучения использовались два фотоэлектронных умножителя (ФЭУ), соединенные с окном при помощи сдвоенного оптоволоконного кабеля. Перед фотокатодом одного из ФЭУ был установлен нейтральный светофильтр (оптическая плотность $D = 3.74$). Это позволило одновременно регистрировать слабое свечение при локальном самовоспламенении с помощью ФЭУ без фильтра, и свечение всего горящего порошка с помощью ФЭУ с фильтром. Для регистрации положения поршня в ходе такта сжатия, т. е. значения текущего объема, использовался оптический датчик отражения, реагирующий на отметки, нанесенные на штоке через каждые 5 мм. Все сигналы записывались на цифровой осциллограф с временным разрешением 0.8 мкс. Температура сжатого кислорода рассчитывалась по уравнению адиабатического сжатия с учетом измеренного увеличения давления, начальной температуры и полиномиальной зависимости теплоемкости от температуры. Изучались два мелкодисперсных порошка железа, основная фракция которых состояла из частиц размером 1–3 и 1–5 мкм соответственно. Кроме того, в работе были использованы порошки, разделенные с помощью сит с размерами ячеек 45, 56, 63, 80 и 125 мкм. Для уточнения диапазона размеров частиц в полученных порошках и определения размеров основной фракции проведен гранулометрический анализ с помощью сертифицированного сканера изображения “Mini-Magiscan”. Результаты анализа приведены в табл. 1. Порошки помещались в керамическую чашку 7, установленную в тестовую камеру. Масса образца во всех экспериментах была 0,05 г.

Результаты

В ходе экспериментов были определены критические условия самовоспламенения микропорошков железа (рис. 2). Параметры газовой фазы, при которых наблюдалось самовоспламенение частиц железа, нанесены зачерненными символами, незачерненными отмечены условия, при которых воспламенение не было зарегистрировано. Для наглядности точки, соответствующие минимальным (критическим) параметрам самовоспламенения, соединены линиями. Установлено, что порошок железа, состоящий из частиц размером до сотен микрометров, способен легко самовоспламениться в кислородной среде с температурой ниже температуры плавления железа.

Таблица 1

Результаты гранулометрического анализа порошков железа

Порошок	Диапазон размеров (min–max), мкм	Основная фракция		Средний размер	
		по количеству частиц (горизонтальная / вертикальная проекции), мкм	по массе, мкм	по количеству частиц (длина/ширина), мкм	по массе, мкм
Мелкодисперсные порошки железа	0,2–9,2	1–3/1–3	2–4	2,59/2,16	3,4
	0,2–16,4	1–5/1–3	4–5	4,01/3,08	4,7
Порошки, разделенные с помощью сит с размером ячеек, мкм 45 56 и 63 80 и 125	9,0–98,1	20–40/30–40	30–60	42,92/30,56	43,8
	6,7–180,3	60–90/70–90	70–90	82,76/59,01	80,6
	32,8–268,1	110–140/100–110	130–160	155,48/114,8	140,2
		0			

Причем, самовоспламенение порошка микрочастиц железа сильно зависит как от давления, так и от температуры кислорода. Характер этой зависимости существенно изменяется с уменьшением размера частиц. Так, порошок, состоящий из частиц размером 1–3 мкм, воспламеняется при температуре кислорода ниже 620 К и давлении выше 10 МПа.

Зависимость предельного давления кислорода P_{lim} от предельной температуры кислорода T_{lim} в плоскости (T, P) определяет границу области воспламенения. Эта зависимость может быть аппроксимирована выражением вида

$$T_{lim} = c \exp\left(-\frac{d}{P_{lim}}\right). \quad (1)$$

Значения c и d , полученные в результате аппроксимации экспериментальных данных приведены в табл. 2, а соответствующие кривые — на рис. 2. Для частиц 20–40 мкм аппроксимация разбита на два интервала по предельному давлению и температуре в виду того, что она имеет два участка: один со слабым изменением предельного давления от температуры, второй – с резким.

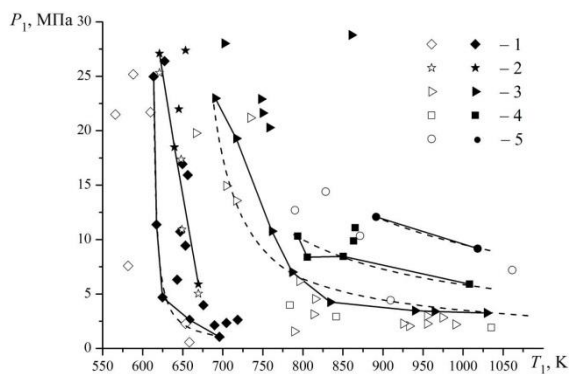


Рис. 2. Давление и температура кислорода при наличии (зачерненные символы) и отсутствии (незачерненные символы) самовоспламенения порошков железа. Размеры частиц основной фракции: 1 – 1–3 мкм; 2 – 1–5; 3 – 20–40; 4 – 60–90; 5 – 100–140. Штриховые линии — аппроксимации по формуле (1)

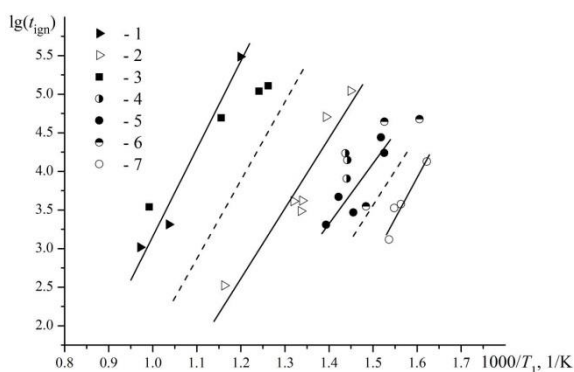


Рис. 3. Зависимость времени самовоспламенения порошков железа от температуры и давления кислорода. Точки – экспериментальные данные для порошков: 1 – 20–40 мкм при давлении 3,2–4,2 МПа, 2 – 20–40 мкм при 19,4–28,8 МПа, 3 – 60–90 мкм при 5,8–10,4 МПа, 4 – 1–3 мкм при 1–1,2 МПа, 5 – 1–3 мкм при 2–2,9 МПа, 6 – 1–3 мкм при 3,5–4,7 МПа, 7 – 1–3 мкм при 6,3–11,3 МПа; сплошные линии – линейные аппроксимации экспериментальных данных для порошка 20–40 мкм (точки 1 и 2) и для порошка 1–3 мкм (точки 5 и 7), штриховые — аппроксимации для промежуточных значений давления

Кроме информации, касающейся условий самовоспламенения частиц железа в окислительной среде, для ряда практических приложений необходимы данные о характерных временах таких процессов. Воспламенение порошка, состоящего из частиц различного размера, представляет собой случайный процесс. Как обнаружено, мелкие частицы способны воспламеняться при более низких температурах и давлениях кислорода, поэтому следует ожидать, что первыми будут воспламеняться самые мелкие частицы в порошке. Возможность и время воспламенения всего порошка будут зависеть от количества этих более мелких частиц, а также от условий теплоотвода из зоны реакции. Так как условия теплоотвода в камере сгорания установки быстрого сжатия всегда примерно одинаковы, следует ожидать повторяемости времени воспламенения порошка и, как следствие, возможности получения зависимости длительности индукционного периода от температуры и давления кислорода. Для проверки этого предположения были собраны экспериментальные данные по каждому порошку железа примерно для одинаковых давлений кислорода. Путем обработки сигнала фотоэлектронного умножителя, с установленным перед фотокатодом нейтральным фильтром, были измерены интервалы времени от окончания такта сжатия до появления свечения определенной интенсивности в камере. Результаты данных измерений представлены на рис 3 в виде зависимости логарифма измеренного времени задержки самовоспламенения от обратной температуры кислорода. Как и ожидалось, время воспламенения сильно зависит от размера частиц в порошке, а также от температуры и давления кислорода.

Сплошными линиями на рис. 3 представлены линейные аппроксимации результатов измерений для порошков 20–40 и 1–3 мкм, полученных для различных диапазонов давлений кислорода. Поскольку угол наклона линий для каждого порошка примерно одинаков, влияние давления кислорода на время воспламенения порошка железа можно найти с помощью сдвига линии вдоль оси температур на определенную величину. В качестве примера на рис. 3 приведены штриховые линии для промежуточных значений давления 13.9 МПа (порошок 20–40 мкм) и 5.625 МПа (порошок 1–3 мкм), которые получены линейной интерполяцией по соответствующим крайним значениям температуры и давления. Такой подход позволяет грубо прогнозировать время воспламенения порошка для других начальных условий.

Физико-математическая модель

Процесс воспламенения порошка железа, находящегося в керамической чашке УБС, будем моделировать воспламенением “приведенного” сферического объема – частицы, которую получим путем осреднения по массе всех частиц, засыпанных в данную чашку. В результате для насыпки массой 0.05 г имеем такую оценку радиуса “приведенной” частицы $r_p = 1.148 \cdot 10^{-3}$ м. Поскольку масса насыпки во всех экспериментах одинакова, то радиус “приведенной частицы” также будет одинаков для всех экспериментов. Различие будет в количестве частиц n_p в насыпке. Так, для насыпки из частиц размером 20–40 мкм или в среднем 30 мкм $n_p \approx 56150$, а для 1–3 мкм или в среднем 2 мкм $n_p \approx 1.8 \cdot 10^8$. Уравнения математической модели для описания процесса воспламенения “приведенной” частицы в рамках точечного подхода были предложены в [8, 9] и

Таблица 2

Значения параметров c и d для аппроксимации (1)

Радиус частиц, мкм	c	d
1–3	610.3383651	-0.1390938854
20–40	651.1730614,	-1.427623342,
	690 < T ≤ 835, 4 < P ≤ 30	690 < T ≤ 835, 4 < P ≤ 30
	471.7423449,	-2.429618523,
	835 < T ≤ 1030, 3.1 ≤ P ≤ 4	835 < T ≤ 1030, 3.1 ≤ P ≤ 4
60–90	582.9068176	-3.157251589
100–140	577.7477786	-5.233353630

могут быть записаны в следующем виде

$$\frac{d\bar{T}_p}{d\bar{t}} = -\frac{3}{2} \text{Nu} (\bar{T}_p - \bar{T}_1) + 3 \frac{q\rho_3}{\lambda_1 T_n} \frac{K}{h} (\bar{T}_b - \bar{T}_p) \exp\left(-\frac{\bar{E}}{\bar{T}_p}\right), \quad (2)$$

$$\frac{d\bar{h}}{d\bar{t}} = \frac{\rho_2 c_2}{\lambda_1} \frac{K}{h} \exp\left(-\frac{\bar{E}}{\bar{T}_p}\right), \quad \bar{T}_p(0) = 1, \quad \bar{h}(0) = \bar{h}_0, \quad (3)$$

где

$$\bar{t} = t / t_0, \quad \bar{T}_p = T_p / T_n, \quad \bar{h} = h / r_p, \quad \bar{E} = E / (RT_n),$$

T_p, T_1, T_b, T_n — температуры “приведенной” частицы, кислорода, кипения железа, нормальная, соответственно, Nu — число Нуссельта, q — тепловой эффект реакции, отнесенный к массе оксида, ρ_2, ρ_3 — плотности железа и окисной пленки, h — толщина оксидной пленки, λ_1 — теплопроводность кислорода, c_2 — теплоемкость железа, E — энергия активации, K — предэкспоненциальный множитель, R — универсальная газовая постоянная, $t_0 = \rho_2 c_2 r_p^2 / \lambda_1$ — временной масштаб. Энергия активации была взята равной $E = 3.1 \cdot 10^6$ Дж/кг [8, 9], величина теплового эффекта реакции задавалась равной $q = 3 \cdot 10^6$ Дж/кг [13].

Задача (2), (3) решалась численно методом, реализующим формулы обратного дифференцирования, с переменными шагом и порядком, предназначенным для решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка [14].

Будем считать, что предэкспоненциальный множитель K является функцией температуры кислорода T_1 , отражающей опосредованно его зависимость от плотности кислорода. Эта функция является неизвестной и определяется на основе экспериментальных данных путем решения последовательности прямых задач, дающих близкие к экспериментальным значения времени задержки воспламенения t_{ign} в зависимости от температуры окружающей среды.

Экспериментальные значения времен задержки воспламенения получены на основе линейной аппроксимации зависимостей логарифма времени задержки воспламенения от температуры окружающей среды (рис. 3).

Определение параметров математической модели

Экспериментальные и полученные в результате расчета времена задержки воспламенения t_{ign} , значения предэкспонента K в зависимости от температуры кислорода T_1 приведены в таблице 3. Таким образом, в результате численных расчетов получены значения функции $K(T_1)$ при фиксированных значениях радиуса частиц и давлениях в УБС, при которых экспериментальные и расчетные данные по временам задержки воспламенения совпадают с высокой точностью.

Для проведения численных расчетов соответствующих задач Коши в промежуточных точках по температуре кислорода найдем аналитическое представление предэкспонента от температуры кислорода в виде

$$K = a_K \exp\left(-\frac{b_K}{T_1}\right) \quad (4)$$

Здесь величины a_K и b_K являются искомыми и определяются по предельным значениям функции K и ее аргумента на основе данных табл. 2 и они приведены в табл. 4.

Аппроксимация (4) позволяет экспоненциальный член в уравнении (2) представить в виде

$$a_K \exp\left[-\left(\frac{b_K}{T_1} + \frac{E}{RT_p}\right)\right], \quad (5)$$

Значения коэффициентов a_K, b_K в аппроксимации предэкспонента (4)

частицы, мкм; давление, МПа	a_K	b_K
20–40; 3.2–4.2	$0.1178315524 \cdot 10^{16}$	24201.24516
20–40; 19.4–28.8	$0.8630520001 \cdot 10^{15}$	18890.19191
1–3; 2–2.9	$0.1102057198 \cdot 10^{19}$	20311.21190
1–3; 6.3–11.3	$0.1026538333 \cdot 10^{15}$	15690.52785

что удобно при численной реализации. Результат аппроксимации численных значений K представлен на рис. 4. Как видим использование данной формулы дает удовлетворительное описание численных значений $K(T_1)$.

Были проведены расчеты времени задержки воспламенения с численным (табл. 3) и аппроксимированной экспоненциальной функцией (4) предэкспонентом. Оказалось, что в крайних точках температурных интервалов значения t_{ign} совпадают полностью (что и должно быть, поскольку по этим точкам и строилась аппроксимация (4)), а в промежуточных точках незначительно отличаются при различных значениях давления окружающей среды.

Следующий шаг в разработке модели заключается во внесении в зависимость $K(T_1)$ давления окружающей среды. Приведем пример этого для значений давления 5.625 и 13.9 МПа.

Проводя численный расчет, находим значения предэкспонента $K(T_1)$, соответствующие временам задержки воспламенения при промежуточных значениях давления (см. рис. 3). Затем находим аппроксимацию (4) для полученных значений предэкспонента: для насыпки из частиц 20–40 мкм при давлении 13.9 МПа $b_K = 21241.57995$, $a_K = 0.942161303610^{15}$, а для частиц 1–3 мкм при давлении 5.625 МПа $b_K = 17434.27789$, $a_K = 0.3939796530 \cdot 10^{16}$. Как видно, вновь найденные постоянные примерно соответствуют среднеарифметическому значению от базовых (см. табл. 4). Соответствующие зависимости приведены на рис. 4.

Таким образом, используя линейную интерполяцию зависимости логарифма времени задержки воспламенения от температуры окружающей среды и предельные значения давления можно найти зависимость предэкспонента от текущей температуры окружающей среды, то есть полностью определить параметры полуэмпирической математической модели. При этом зависимость от

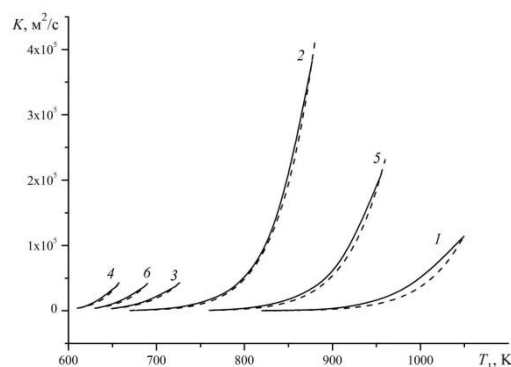


Рис. 4. Вычисленные и аппроксимирующие значения предэкспонента. Сплошные линии – результаты расчета (см. табл. 1), штриховая – экспоненциальная аппроксимация (3). 1 – радиус 20–40 мкм при давлении 3.2–4.2 МПа, 2 – 20–40 мкм при 19.4–28.8 МПа, 3 – 1–3 мкм при 2–2.9 МПа, 4 – 1–3 мкм при 6.3–11.3 МПа, 5 – 20–40 мкм при 13.9 МПа, 6 – 1–3 мкм при 5.625 МПа

давления является параметрической.

На основе зависимости (1) модифицируем выражение для предэкспоненциального множителя следующим образом [15]

$$K(T_1, P_1) = \begin{cases} K(T_1), & T_1 \geq T_{lim} \\ 0, & T_1 < T_{lim} \end{cases} \quad (6)$$

Здесь $K(T_1)$ это экспоненциальная зависимость (4), приведенная выше для различных значений параметра P_1 . Таким образом, если при фиксированном значении давления кислорода его температура T_1 меньше, чем предельная температура воспламенения $T_{lim}(P_1)$, то химическая реакция окисления не существенна и не принимается во внимание в математической модели. То есть вклад тепловыделения от химической реакции не приводит систему к воспламенению. Условно можно полагать, что толщина окисной пленки не изменяется, разогрев частицы осуществляется только за счет конвективного теплообмена с окружающей средой и в пределе температура совокупности частиц стремится к температуре окружающей среды T_1 . То есть в этом случае воспламенения частицы не происходит.

Привлекательным является построение аналитической зависимости предэкспонента от (T_1, P_1) . Нами предлагается следующий алгоритм построения предэкспонента в случае нелинейной зависимости (1). Фиксируется предельное давление, определяется по формуле (1) соответствующая предельная температура и в плоскости $(1000/T_1, \log(t_{ign}))$ проводится прямая воспламенения. А затем можно определить и вид $K(T_1)$. В табл. 5 приведены как результаты расчета по модифицированной модели, так и полученные выше данные (без корректировки (6)) для частиц с радиусом в диапазоне 20–40 мкм. При значениях температуры среды, близких к предельному, времена задержки воспламенения на порядки выше по сравнению с более высокими значениями температуры кислорода.

Выше с использованием линейной интерполяции были определены предельные температуры воспламенения для промежуточных значений давления. Теперь найдем эти предельные

Таблица 5

Зависимость времени задержки воспламенения от температуры окружающей среды для различных давлений

P, МПа	T_{lim} , К	T_1 , К	t_{ign} , мкс	
			расчет	эксперимент
24	691	650	—	—
		700	50939	49930
		710	30188	30196
		740	10007	10000
		750	7708	7632
		770	3311	3312
		795	1237	1231
		800	1065	1064
		840	372	372
		850	228	236
		875	116	115
4	865	850	—	—
		870	99490	99508
		895	26019	26033
		900	25012	24914
		940	7850	7851
		950	5514	5564
		990	1709	1708
		1000	1324	1326
		1050	388	385

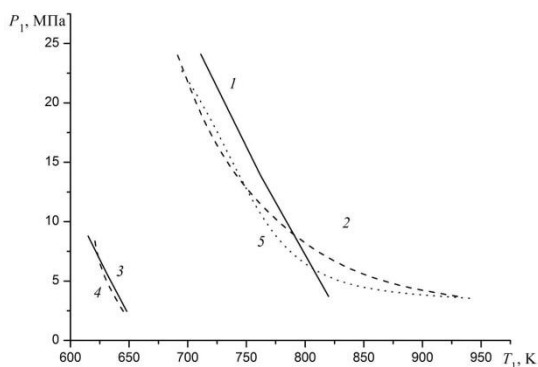


Рис. 5. Зависимость предельной температуры от давления окружающей среды. Сплошные линии (1, 3) – линейная интерполяция, штриховые (2, 4) – экспоненциальная интерполяция по формуле (5). 1, 2 – 30 мкм, 3, 4 – 2 мкм, 5 – экспериментальные данные

температуры на основе аппроксимации экспериментальных данных по формуле (1). Они приведены на рис. 5. На рис. 5 приведены также экспериментальные предельные кривые воспламенения для частиц 20–40 мкм. Как видим, для более мелких частиц оба подхода аппроксимации близки, а для крупных частиц линейная аппроксимация не является удовлетворительной. Поэтому расчеты нами были проведены по экспоненциальной зависимости.

Выводы

Таким образом, в работе определены критические условия, для самовоспламенения микропорошков железа в устройстве быстрого сжатия. Установлено, что порошок железа, с размером до сотен микрон способен легко самовоспламениться в кислородной среде с температурой ниже температуры плавления железа. С увеличением давления среды температура самовоспламенения существенно снижается. Определена длительность задержки воспламенения при различных давлениях и температурах кислорода. Показано, что максимальная температура при горении ограничена, по всей видимости, температурами кипения железа и разложения оксидов.

Полученная экспериментальная информация важна для оценки безопасности технологических процессов, при которых могут образовываться мелкодисперсные частицы железа, и производств, использующих кислород высокого давления.

Предложена и верифицирована с использованием этих данных полуэмпирическая физико-химическая точечная математическая модель для описания процесса воспламенения насыпки железных частиц, принимающая во внимание зависимость предельных температур воспламенения от давления при изменении давлений в диапазоне 2–25 МПа и температур 600–1100 К и удовлетворительно описывающая времена задержки воспламенения.

Литература

1. Allen C.M., Lee T. Energetic-nanoparticle enhanced combustion of liquid fuels in a rapid compression machine // Proc. 47th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition. – 2009. – AIAA 2009-227.
2. Trunov M.A., Schoenitz M., Dreizin E.L. Ignition of aluminum powders under different experimental conditions // Propellants, Explosives, Pyrotechnics. – 2005. – Vol. 30. – P. 36–43.
3. Lissianski V.V., Maly P.M., Zamansky V.M., Gardiner W.C. Utilization of iron additives for advanced control of NO_x emissions from stationary combustion sources // Ind. Eng. Chem. Res. – 2001. – Vol. 20, No.15. – P. 3287–3293.

4. Золотко А.Н., Вовчук Я.И., Полетаев Н.И., Фролко А.В., Альтман И.С. Синтез наноксидов в двухфазных ламинарных пламенах // Физика горения и взрыва. – 1996. – Т. 32, № 3. – С. 24–34.
 5. Cashdollar K.L., Zlochower I.A. Explosion temperatures and pressures of metals and other elemental dust clouds // Journal of Loss Prevention in the Process Industries. – 2007. – Vol. 20. – P. 337–348.
 6. Boiko V.M., Papyrin A.N., Wolinski M., Wolanski P. Dynamics of dispersion and ignition of dust layers by a shock wave // Progress in Astronautics and Aeronautics. – 1984. – Vol. 94. – P. 293–301.
 7. Borisov A.A., Gel'fand B.E., Timofeev E.I., Tsyganov S.A., Khomic S.V. Ignition of dust suspensions behind shock waves // Progress in Astronautics and Aeronautics. – 1984. – Vol. 94. – P. 332–339.
 8. Baranyshyn Y.A., Belaziorava L.I., Kasparov K.N., Penyazkov O.G. Photoemission measurements of soot particles temperature at pyrolysis of ethylene // Nonequilibrium Phenomena: Plasma, Combustion, Atmosphere. – Moscow: Torus Press Ltd, 2009. – P. 87–93.
 9. Ryabinin Yu.N., Sobolev N.N., Markevich A.M., Tamm I.I. Optical properties of gases at ultra high pressures // Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 1952. – Vol. 23, No. 5. – P. 564–575.
 10. Альтман И.С. Об определении температуры частиц по спектру излучения // Физика горения и взрыва. – 2004. – Т. 40, № 1. – С. 75–77.
 11. Федоров А.В., Шульгин А.В. О воспламенении железной насыпки в устройстве быстрого сжатия // Физика горения и взрыва. – 2011. – Т. 47, № 6. – С. 98–100.
 12. Лещевич В.В., Пенязьков О.Г., Федоров А.В., Шульгин А.В., Ростен Ж.-К. Условия и время задержки самовоспламенения микрочастиц железа в кислороде // Инженерно-физический журнал. – 2012. – Т. 85, № 1. – С. 139–144.
 13. Болобов В.И., Подлевских Н.А. Расчетный анализ условий воспламенения металлических компактных образцов и фольги в кислороде // Физика горения и взрыва. – 2001. – Т. 37, № 6. – С. 46–55.
 14. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / Под ред. Холла Дж., Уатта Дж. – М.: Мир, 1979. – 312 с.
- Федоров А.В., Харламова Ю.В. Воспламенение частицы алюминия // Физика горения и взрыва. – 2003. – Т. 39, № 5. – С. 65–68.

3. РАСЧЕТ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В СМЕСИ МЕТАН - ЖЕЛЕЗНЫЕ ЧАСТИЦЫ

Вопросы воспламенения и горения воздушно-метановых смесей в настоящее время являются актуальными с точки зрения взрыво- и пожаробезопасности, например, в угледобывающей отрасли. Кроме того, процессы химических превращений в этих смесях, дополняемых мелкими частицами различных металлов позволяют контролировать явления воспламенения и горения. При этом частицы выступают как параметры управления этими процессами. Поэтому тема данного исследования представляет как теоретический, так и практический интерес.

В [1] были приведены результаты ряда экспериментов по воспламенению стехиометрических метано-воздушных смесей в установке быстрого сжатия. В экспериментах было зарегистрировано образование ярких точек сразу после окончания такта сжатия, однако воспламенение метано-воздушной смеси начиналось только через 4-5 мс. Предположительно, эти яркие точки вызваны воспламенением мелких частиц. Для объяснения этого явления нами было проведено физико-математическое моделирование воспламенения смесей метан-кислород-азот в присутствии мелких металлических частиц на основе модели механики гетерогенных сред, учитывающей детальные кинетические механизмы химических превращений реагирующей газовой смеси и упрощенный приведенный кинетический механизм окисления железных частиц.

В настоящей работе на основе ранее разработанной модели [1] предлагается уточненная модель воспламенения смеси газов и реагирующих твердых металлических частиц, учитывающая гетерогенную химическую реакцию окисления и классическую кинетику нарастания окисной пленки частиц железа.

Физико-математическая постановка задачи

Рассмотрим область, заполненную в начальный момент времени смесью газов метан-кислород-азот и продуктами их горения при высоких давлениях (10–12 атм), температуре (900–1400 К) и распределенными мелкодисперсными частицами железа. Температуры газа и частиц в точечном приближении определяются следующими уравнениями [1–3]:

$$\frac{dT_1}{dt} = -\frac{1}{c_{V_1}} \left[\frac{1}{1-\zeta} \left((e_2 - e_1) \dot{\zeta} + c_{p_2} \zeta \dot{T}_2 \right) + \sum_{i=1}^{15} \left(c_{V_{1,i}} T_1 + h_{0,i} - c_{p_{1,i}} T_0 \right) \dot{\xi}_i \right], \quad (1)$$

$$\frac{dT_2}{dt} = \frac{6\lambda_1 Nu}{c_{p_2} \rho_{22} (2r)^2} (T_1 - T_2) + \frac{J \alpha_1 Q}{\rho_2 c_{p_2}}, \quad (2)$$

где источниковый член, описывающий окисление частиц, взят в виде, соответствующем учету наличия оксидной пленки на частицах железа

$$J = -\frac{3}{r} \frac{\rho_{22}}{\nu_2} \frac{T_k - T_2}{T_0} \frac{dr}{dt}, \quad \rho_2 = m_2 \rho_{22} = \frac{4}{3} \pi r^3 n \rho_{22}. \quad (3)$$

Подставляя (3) в (2), получаем уравнение энергии частиц в виде:

$$\frac{dT_2}{dt} = \frac{6\lambda_1 Nu}{c_{p_2} \rho_{22} (2r)^2} (T_1 - T_2) - \frac{9}{4\pi} \frac{\alpha_1 Q}{\nu_2 r^4 n c_{p_2}} \frac{T_k - T_2}{T_0} \frac{dr}{dt}. \quad (4)$$

Здесь T_1 , T_2 — температуры газа и частиц, $c_{V_{1,i}}$, $c_{p_{1,i}}$ — теплоемкости компонент газовой смеси при постоянном объеме и постоянном давлении, c_{V_1} , c_{p_1} — теплоемкости газовой смеси при постоянном объеме и постоянном давлении, c_{p_2} — теплоемкость частиц, ξ_i — массовые концентрации компонент газовой смеси, λ_1 — теплопроводность газовой смеси, ζ — массовая концентрация частиц, m_2 — объемная концентрация частиц, ρ_{22} — истинная плотность частиц, r — радиус частиц, $T_0 = 298.15$ К, $Nu = 2 + 0.6 Re^{1/2} Pr^{1/3}$ — число Нуссельта, $e_1 = c_{V_1} T_1 + \sum_{i=1}^{15} \xi_i h_{0,i} - c_{p_1} T_0$ — внутренняя энергия газовой смеси, $e_2 = c_{p_2} T_2 + Q$ — внутренняя энергия частиц, Q — тепловыделение за счет горения частиц, T_k — некоторая предельная температура – параметр модели воспламенения частиц, n — количество частиц в единице объема газозвеси, $\nu_2 = 4$ — стехиометрический коэффициент в реакции окисления железа $4Fe + 3O_2 \rightarrow 2Fe_2O_3$, $h_{0,i}$ — энтальпия образования, $\alpha_1 \in [0, 1]$ — параметр, определяющий количество тепла, выделившегося в частицах.

Массовые концентрации компонент газовой смеси определяются уравнениями детальной кинетики [4]

$$\frac{d\xi_i}{dt} = \frac{1}{\rho_1} M_i \sum_{r=1}^l \rho_1^{m_r} (v'_{ir} - v_{ir}) \left[k_{fr} \prod_{\beta=1}^{15} \left(\frac{\xi_\beta}{M_\beta} \right)^{\nu_{\beta r}} - k_{br} \prod_{\beta=1}^{15} \left(\frac{\xi_\beta}{M_\beta} \right)^{\nu'_{ir}} \right], \quad i \in [1, 15], \quad (5)$$

где m_r — порядок r -й реакции, v'_{ir} , v_{ir} — стехиометрические коэффициенты обратной и прямой реакций, k_{fr} , k_{br} — константы скоростей прямых и обратных реакций, M_i — молекулярные

массы, ρ — средняя плотность газозвеси, $\rho_1 = (1 - \zeta) \rho$, $\rho_2 = \zeta \rho$, $\rho_1 = \frac{1 - \zeta}{\zeta} \rho_2 = \frac{1 - \zeta}{\zeta} \frac{4}{3} \pi r^3 n \rho_{22}$.

Изменения массовой концентрации частиц описывается уравнением приведенной кинетики для роста оксидной пленки. Выведем это уравнение. Используя выражение для массовой концентрации частиц

$$\zeta = \frac{\rho_2}{\rho} = \frac{m_2 \rho_{22}}{(1 - m_2) \rho_{11} + m_2 \rho_{22}}$$

найдем

$$\frac{d\zeta}{dt} = \frac{\rho_1 \rho_{22}}{(1 - m_2)(\rho_1 + \rho_2)^2} \frac{dm_2}{dt}, \quad (6)$$

где $m_2 = \frac{4}{3} \pi n r^3$. Тогда $\frac{dm_2}{dt} = 4 \pi n r^2 \frac{dr}{dt}$. Как отмечено в [2], в процессе химических превращений в предвоспламенительный период толщина окисной пленки h частиц изменяется слабо, т.е. $h/r \ll 1$ и имеется связь между изменением радиуса частицы и толщиной окисной пленки $R^2 - R_0^2 = a(r - r_0)$, $R = r + h$. Это обстоятельство, с учетом эмпирического уравнения для скорости роста окисной пленки частицы, позволяет в асимптотическом приближении получить следующее выражение для изменения радиуса частиц

$$\frac{dr}{dt} = \frac{K}{a - 1} \exp\left(-\frac{E}{RT_2}\right), \quad (7)$$

где $a = 1 - \frac{v_{\text{Fe}_2\text{O}_3} \rho_{\text{Fe}}}{v_{\text{Fe}} \rho_{\text{Fe}_2\text{O}_3}} = 0.249$, E — энергия активации, K — предэкспонент, $R = 8.3144$

Дж/(К·моль) — универсальная газовая постоянная. Величина a регулирует количество окислителя, потребляемого частицей, и может быть переменной эмпирической константой.

Таким образом, из (4), (6), (7) окончательно получаем:

$$\frac{dT_2}{dt} = \frac{6\lambda_1 \text{Nu}}{c_{p_2} \rho_{22} (2r)^2} (T_1 - T_2) - \frac{9}{4\pi v_2 r^4 n c_{p_2}} \frac{T_k - T_2}{T_0} \frac{K}{a - 1} \exp\left(-\frac{E}{RT_2}\right), \quad (8)$$

$$\frac{d\zeta}{dt} = 4\pi n r^2 \frac{\rho_1 \rho_{22}}{(1 - m_2)(\rho_1 + m_2 \rho_{22})^2} \frac{K}{a - 1} \exp\left(-\frac{E}{RT_2}\right). \quad (9)$$

Система уравнений (1), (5), (7)–(9), дополненная уравнением состояния для газовой смеси в целом

$$p = \rho_{11} T_1 R \sum_{i=1}^{15} \frac{\xi_i}{M_i} \quad (10)$$

позволяет после постановки соответствующей начальной задачи воспламенения и горения реагирующей газовой смеси и твердых металлических частиц рассчитать тепловую историю такой смеси. Начальная задача для указанной системы обыкновенных дифференциальных уравнений решалась неявным методом BDF, предназначенным для решения жестких задач Коши [5].

Параметрическое исследование

Проведем сравнение времен задержки воспламенения по предложенной в настоящей работе математической модели и модели [1] изучаемого явления. Число частиц железа в газозвеси задавалось по формуле

$$n = \frac{3\zeta_0}{4\pi r_0^3 \rho_{22}},$$

где ζ_0 , r_0 — начальные массовая концентрация частиц и их радиус.

Энергия активации для всех расчетов равнялась $E = 2.25 \cdot 10^5$ Дж/кг, а предэкспонент зависел от начального размера частиц (см. табл. 1).

Таблица 1.

Зависимость предэкспонента от начального радиуса частиц.

r_0 , МКМ	K , М/с
-------------	-----------

5	$2 \cdot 10^{-4}$
10	$5 \cdot 10^{-4}$
15	$8.5 \cdot 10^{-4}$

Можно получить аппроксимационную формулу зависимости $K = K(r_0)$ в виде

$$K(r_0) = \frac{a \exp(br_0)}{[1 + c \exp(br_0)]^2},$$

где

$$a = 0.179, b = -0.233, c = 50.35.$$

Оценим влияние тепловыделения за счет горения частиц на время задержки воспламенения. На рис. 1 приведены данные расчетов времени задержки воспламенения t_{ign} стехиометрической смеси метан-воздух ($9.51\% \text{CH}_4 + 19.01\% \text{O}_2 + 71.48\% \text{N}_2$) и стехиометрических смесей метан-воздух с частицами железа радиусом 5, 10, 15 мкм от начальной температуры смеси T_{10} по модели [1] и по настоящей модели для значений параметра α_1 , равного 0 (рис. 1,а) и $2 \cdot 10^{-5}$ (рис. 1,б). Начальное давление смеси составляло 10 атм. Кривые, расположенные левее соответствуют расчетам по модели [1], правее и несколько выше — по модели настоящей работы. Сплошными линиями обозначены результаты расчетов для частиц с начальным радиусом 5 мкм, штриховыми — 10 мкм, точечными — 15 мкм. Квадратными символами показаны результаты расчетов для метано-воздушной смеси без реагирующих частиц железа.

Видно, что с увеличением значения α_1 , т.е. с увеличением количества теплоты, выделяемого в частицах, при более низких начальных значениях температуры смеси время задержки воспламенения уменьшается, а при более высоких — увеличивается. Так же, как и в случае модели [1], зависимость $t_{ign} = t_{ign}(T_{10})$ можно разделить на две области. Область 1, в которой частицы уменьшают время задержки воспламенения метано-воздушной смеси без частиц (при низких температурах смеси, $T < 1150$ К по модели [1]) и область 2, в которой они это время увеличивают (при высоких температурах смеси, $T > 1150$ К по модели [1]). При этом увеличение радиуса частиц в первой области приводит к уменьшению времени задержки воспламенения, а во второй к обратному эффекту — увеличению времени задержки воспламенения. Однако граница раздела этих областей по настоящей модели находится при более низких температурах смеси, нежели по модели [1], $T \sim 1050$ К.

Также отметим, что из сопоставления данных рис. 1,а и 1,б следует, что в то время как расчет по модели [1] показывает слабое влияние радиусов частиц на значения времен задержки воспламенения, предложенная в настоящей работе модель выявила более существенное влияние размера частиц на этот параметр, особенно в области 1 относительно низких начальных температур газовой среды.

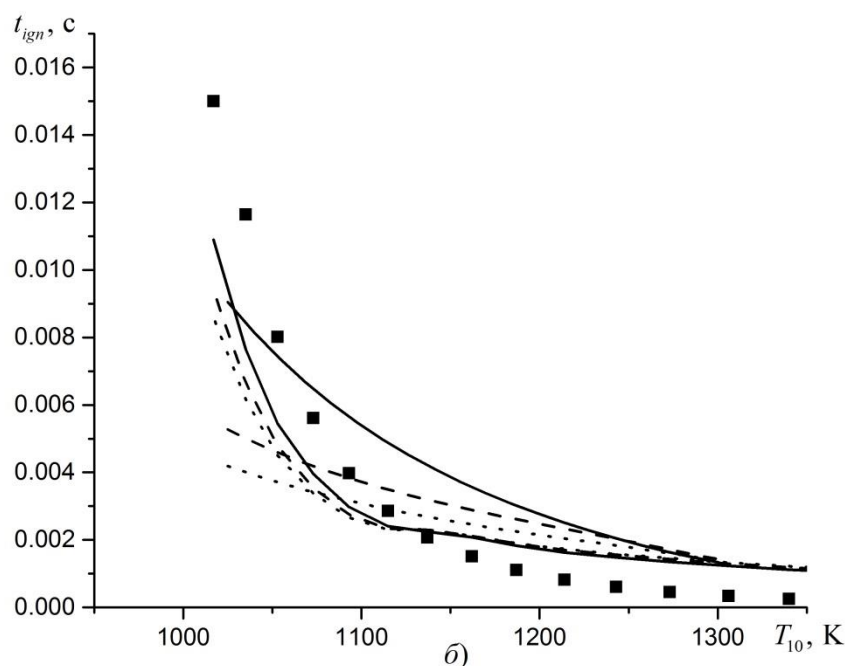


Рис. 1. Зависимости времени задержки воспламенения смеси метан-воздух-реагирующие частицы от начальной температуры смеси.

Проведем сопоставление расчетных и экспериментальных [1] данных времен задержки воспламенения t_{ign} в зависимости от начальных значений температуры смеси T_{10} и давления P_0 по модели упрощенной кинетики [1] и модели (1), (5), (7)–(10) для значений начального радиуса частиц r_0 равного 10 и 15 мкм. В табл. 2 представлено сравнение расчетных и экспериментальных данных по временам задержки воспламенения смесей метан-воздух и метан-воздух-частицы. Два последних столбца соответствуют расчетам по модифицированной математической модели.

Таблица 2.

Расчетные и экспериментальные данные времени задержки воспламенения смесей метан-воздух и метан-воздух-частицы.

№	T_{10} , К	P_0 , атм	t_{ign} , мс				
			Эксперимент [1]	Расчет (газ) [1]	Расчет (газ+частицы) [1]	$r_0 = 10$ мкм	$r_0 = 15$ мкм
1	930	16.99	6	13.6	9	9.4	6.8
2	994	10.29	6.15	8.25	6.54	7.3	6.2
3	1083	10.58	2.5	4.88	3.5	4.0	3.2
4	1107	9.82	1.35	3.63	1.78	3.6	2.8
5	1214	11.38	1.6	0.813	1.65	2.1	1.8

Из табл. 2 видно разделение на описанные выше две области воспламенения: область, в которой частицы ускоряют воспламенение газовой смеси, и область, в которой замедляют. Так, для экспериментальных данных 1 – 4 расчетные времена задержки воспламенения чистого (без частиц) газа больше, чем экспериментальные и добавление реагирующих частиц в чистую газовую смесь в расчетах приводит к уменьшению времен задержек воспламенения газовой смеси (область 1). Однако, в эксперименте 5 наблюдается обратная картина: расчетные времена задержки воспламенения чистого (без частиц) газа меньше, чем экспериментальные и добавление

реагирующих частиц в чистую газовую смесь в расчетах приводит к увеличению времен задержек воспламенения газовой смеси (область 2). Таким образом, добавление частиц в реагирующую газовую смесь с такими термодинамическими параметрами может приводить как к уменьшению, так и к увеличению времен задержки воспламенения реагирующей газовой смеси. Отметим, что расчеты, проведенные по предложенной в настоящей работе модели, при низких значениях начальной температуры смеси (менее 1100 К) дают более близкие к экспериментальным значения времен задержки воспламенения по сравнению с моделью [1], однако при высоких температурах (более 1100 К) модель [1] дает более близкие к экспериментальным времена задержки воспламенения.

Выводы

1. Предложена физико-математическая модель воспламенения смесей метан-воздух в присутствии мелких металлических частиц, учитывающая детальные кинетические механизмы химических превращений реагирующей газовой смеси и гетерогенную химическую реакцию окисления и кинетику нарастания окисной пленки частиц.
2. Выявлено влияние температуры и давления смеси метан-воздух на времена задержки воспламенения. Показано, что в зависимостях времени задержки воспламенения от температуры смеси существует две области воспламенения: область 1, в которой частицы ускоряют воспламенение газовой смеси (при низких температурах смеси, менее 1050 К); область 2, в которой частицы замедляют воспламенение газовой смеси (при высоких температурах смеси, более 1050 К).
3. Сопоставление данных по временам задержки воспламенения в смесях метан-воздух-частицы, полученных в расчетах по данной модели, по используемой нами ранее модели, и в экспериментах в установке быстрого сжатия, показало их удовлетворительное соответствие в области изменения температур 900–1200 К и давлений 1–1.2 МПа. Выявлено, что расчеты, проведенные по предложенной в настоящей работе модели, при низких значениях начальной температуры смеси (менее 1100 К) дают более близкие к экспериментальным значения времен задержки воспламенения по сравнению с используемой нами ранее моделью [1], однако при высоких температурах (более 1100 К) модель [1] дает более близкие к экспериментальным времена задержки воспламенения.

Список литературы

1. Тропин Д.А., Федоров А.В., Пенязьков О.Г., Лецевич В.В. Времена задержки воспламенения в метано-воздушной смеси в присутствии частиц железа // Физика горения и взрыва. 2014. Т.50, № 6.
2. Федоров А.В. Воспламенение газовзвесей в режиме взаимодействующих континуумов // Физика горения и взрыва. 1998, Т. 34, №4. С. 57–64.
3. Лецевич В.В., Пенязьков О.Г., Федоров А.В., Шульгин А.В., Ростен Ж.К. Условия и время задержки воспламенения микрочастиц железа в кислороде // Инженерно-физический журнал. 2012. Т.85, № 1. С. 139–144.
4. Тропин Д.А., Федоров А.В. Физико-математическое моделирование подавления детонации инертными частицами в смесях метан-кислород и метан-водород-кислород // Физика горения и взрыва. 2014. Т.50, № 5. С. 48–52.
5. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / Под ред. Холла Дж., Уатта Дж.; Пер. с англ. Пospelова В.В., Герасимова Б.П.; Под ред. Горбунова А.Д. М.: Мир, 1979. 312 с.

4. ПОЛУЭМПИРИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ВОЛНЫ ГОРЕНИЯ В ГАЗОВЗВЕСИ МАГНИЯ

Проблема физико-математического описания волны горения (ВГ) в газовзвесах представляет значительный интерес с точки зрения пожаробезопасности промышленных пылей. В частности,

одним из критериев, характеризующих пожароопасность газозвесей, является, наряду со временем задержки воспламенения, скорость распространения этого объекта – ВГ – по смеси. Или, в более широком смысле, зависимость данных параметров от начальных параметров смеси: давления, объемной концентрации частиц, их радиуса и возможно других. В наших работах [1, 2] была предложена дискретно-континуальная модель для описания ВГ в смеси магниевых частиц в атмосфере газового окислителя с учетом процесса предпламенного окисления. В данной математической модели источники тепла (частицы) дискретны и имеют малые, но конечные размеры. То есть радиус частицы является входным параметром. При этом глобальная кинетическая схема окисления одиночной частицы позволяет удовлетворительно описать некоторые характеристики пламени в ансамбле частиц. На ее основе было показано, что учет реакции предпламенного окисления расширяет область применимости дискретно-континуальной модели пламени для аэрозвесей частиц магния. В частности, получено удовлетворительное совпадение расчетных и опытных данных по зависимости скорости пламени от размера и начальной массовой концентрации частиц. Однако следует заметить, что эта модель, описывая эксперименты [3] в некотором диапазоне начальных параметров смеси, является довольно сложной в реализации, поскольку представляется в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений для температуры n частиц. Это означает, что при больших значениях этой величины возникают затруднения с экономичностью расчетной модели. Причем для описания температуры газа использовалась тепловая распределенная (одномерная нестационарная) математическая модель с соответствующими сопряженными граничными условиями, что еще более увеличивает расчетное время. Здесь следует отметить и преимущество данной модели, которая гарантирует устойчивость получаемой волны горения в виде предельного решения при расчетах на больших временах и при некоторых разумных значениях параметров проблемы.

Представляется полезным построить простую феноменологическую модель изучаемого явления, позволяющую определить стационарную структуру волны горения, основанную на экспериментальных данных и проводить расчеты в расширенном диапазоне параметров смеси по сравнению с экспериментальными исследованиями.

ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ И НЕКОТОРЫЕ ОЦЕНКИ ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ И ПРЕДЭКСПОНЕНТА

Рассмотрим мелкую частицу магния, находящуюся в атмосфере окислителя с температурой T_c . Уравнение, описывающее воспламенение в модели теплового взрыва Семенова имеет вид (см., например, [4])

$$m c_p \frac{dT}{dt} = -Sk(T - T_c) + S \rho_{ox} q K f(T_m, T) \exp\left(-\frac{E}{RT}\right). \quad (1)$$

Здесь $m = \frac{4}{3} \pi r_p^3 \rho_p$, c_p , T — масса, теплоемкость, температура частицы, соответственно,

$k = \frac{\lambda_1 Nu}{2 r_p}$ — коэффициент теплопередачи, λ_1 — теплопроводность газа, r_p — радиус частицы,

Nu — число Нуссельта, $S = 4 \pi r_p^2$ — площадь поверхности частицы, ρ_{ox} — плотность окисной пленки, $q = 4.9 \cdot 10^7$ Дж/кг — тепловой эффект реакции, отнесенный к массе оксида [1], T_m — некоторая предельная температура, K — предэкспонент (кинетическая константа), E — энергия активации, $R = 8.3144$ Дж/(моль·К) — универсальная газовая постоянная. Функция $f(T_m, T)$ в случае учета теплового торможения реакции окисления при высоких температурах равна $(T_m - T) / T_0$ (модель 1) и 1 — в противном случае (модель 2), T_0 — начальная температура частицы

$$T(0) = T_0. \quad (2)$$

Таким образом, определение тепловой динамики частицы, нагреваемой в газе с температурой $T_c > T_0$, сводится к решению задачи Коши (1), (2).

Определение кинетических констант. Из экспериментов известна зависимость предельной температуры среды (т.е. минимальной температуры, при которой происходит воспламенение) от радиуса частицы. Эти данные, взятые из работ [5–8], приведены в табл. 1.

Из (9), на пределе воспламенения, можно получить следующее приближенное выражение для значения критической температуры T^-

$$T^- = L(1 + h\varepsilon), \quad (12)$$

где

$$L = \frac{bg}{2}, \quad h = \frac{a}{g} \left(\frac{2c}{b^2 \sqrt{d}} - g \right), \quad a = T_m - T_c, \quad b = T_m + T_c, \quad c = T_m T_c, \quad d = 1 - \frac{4c}{b^2},$$

$$g = 1 - \sqrt{d}, \quad \varepsilon = \frac{1}{E} \ll 1.$$

Используя (12) из (10) находим выражение для α^-

$$\alpha^- = \frac{a - T_c h \varepsilon}{T_c h \varepsilon} \exp\left(-\frac{E}{L}\right) \exp\left(\frac{h}{L}\right) \quad (13)$$

и с учетом (5) получаем соотношение на пределе воспламенения

$$\frac{\lambda_1 \text{Nu} T_0}{2\rho_{ox} r_p q K} = \frac{a - T_c h \varepsilon}{T_c h \varepsilon} \exp\left(-\frac{E}{L}\right) \exp\left(\frac{h}{L}\right). \quad (14)$$

Используя экспериментальную зависимость $T_c(r_p)$ запишем (14) в двух точках (r_{pi}, T_{ci}) , $i = 1, 2$, в результате получим следующую формулу для оценки значения энергии активации

$$E = \frac{1}{L_2^{-1} - L_1^{-1}} \ln \left[\frac{T_{c1} h_1 a_2 r_{p2} \exp\left(\frac{h_1}{L_2}\right)}{T_{c2} h_2 a_1 r_{p1} \exp\left(\frac{h_1}{L_1}\right)} \right]. \quad (15)$$

После чего из (14) найдем оценку для значения предэкспоненциального множителя

$$K = \frac{\lambda_1 \text{Nu} T_0}{2\rho_{ox} r_{p1} q} \frac{T_{c1} h_1 \varepsilon}{a_1 - T_{c1} h_1 \varepsilon} \exp\left(\frac{E}{L_1}\right) \exp\left(-\frac{h_1}{L_1}\right). \quad (16)$$

В соответствии с данными табл. 1 положим $T_{c1} = 1053$ К, $r_{p1} = 7.5$ мкм, $T_{c2} = 912$ К, $r_{p2} = 35$ мкм и найдем из двух полученных таким образом уравнений величины E , K . Значения оценки E , K , полученные по формулам (15), (16), и значения E_{\min} в соответствии с (11) при разных $T_m = nT_c$, $n > 1$ для малых частиц магния приведены в таблице 2. Видно, что при $n > 3$ нарушается требование $E > E_{\min}$. Таким образом, полученная приближенная оценка справедлива при $n \leq 3$.

В [4] в рамках модели 2 были получены следующие оценки кинетических параметров: $E = 4.3 \cdot 10^6$ Дж/кг, $K = 0.103$ м/с. Таким образом, как видно из данных табл. 2, например, при $n = 1.75$ найденная оценка энергии активации для модели 1 отличается от ранее полученной оценки для модели 2 незначительно (порядка 6 %), а оценки предэкспонента отличаются на 20 %. Отметим, что после того, как найдены значения констант E и K , выражение (14) может рассматриваться как выражение, определяющее зависимость предельной температуры воспламенения T_c от радиуса частицы r_p . На рис. 1 приведены экспериментальные данные для такой зависимости из работ [5–10] и вычисленные аппроксимационные значения в соответствии с приближенной формулой (14) при различных значениях параметра n . Видно, что экспериментальные данные имеют, как всегда, определенный разброс, а приближенная зависимость (14) при $n = 2$ хорошо описывает данные экспериментов [5–9]. Разброс в экспериментальных данных может быть обусловлен физико-химическими свойствами частиц и другими случайными причинами. Для нас сейчас важно описать какой-либо наблюдаемый параметр, в частности эту зависимость предельной температуры от радиуса.

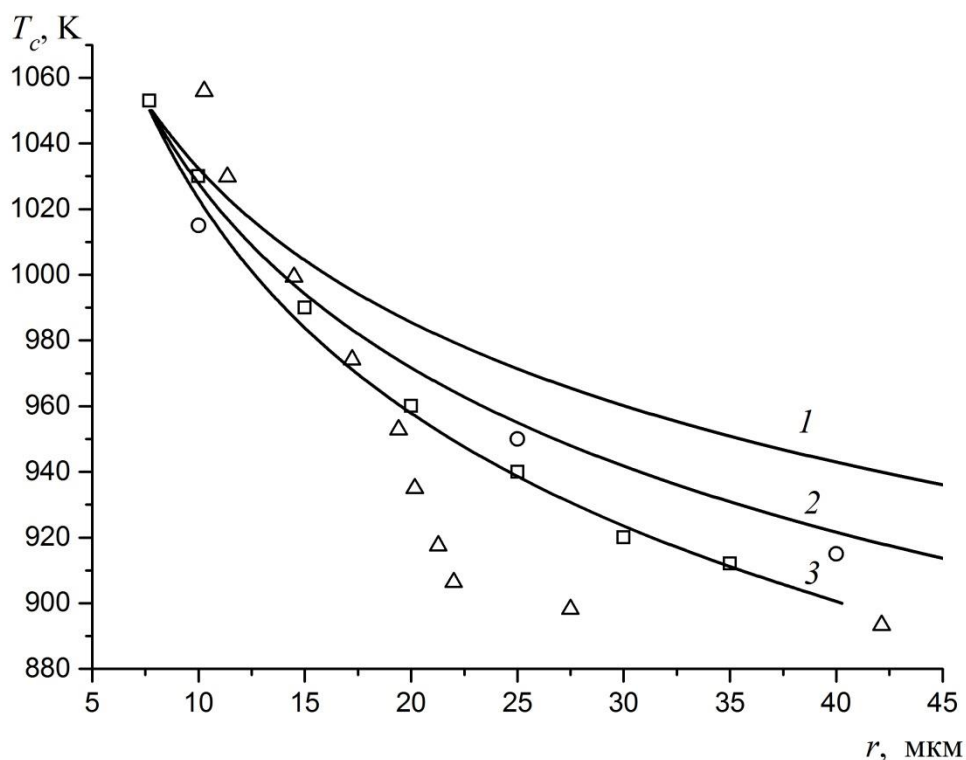


Рис. 1. Зависимость предельной температуры воспламенения от радиуса частицы. Экспериментальные данные: \square — [5–8], \circ — [9], Δ — [10], линии — аппроксимации по формуле (14), 1 — 2 — 3 —

Время задержки воспламенения. Основываясь на данных табл. 2 положим Дж/кг, м/с, и исследуем зависимость времени задержки воспламенения от температуры окружающей среды и числа Нуссельта при фиксированном радиусе частицы мкм. На рис. 2 приведены результаты расчета по модели 1 настоящей работы (сплошные линии) и данные [4], полученные по модели 2 (штриховые линии) для значений ν и K . Как видно, качественно результаты совпадают, с ростом температуры окружающей среды времена задержки воспламенения, рассчитанные по двум моделям, сближаются. Также на рис. 2 приведены расчетные зависимости времени индукции частицы магния такого же размера в воздухе от температуры среды, полученные в работе [11] при значении ν (точечная линия). Отметим, что имеется определенное различие по временам задержки воспламенения, полученным по моделям в [4, 11] и в настоящей работе, особенно при относительно невысоких температурах (ср. кривые 1, 3, 5). При этом значения времен задержки воспламенения, полученной в настоящей работе при новой оценке кинетических параметров, занимают промежуточное положение между данными, полученными в [4, 11]. В дальнейшем исследовании будем пользоваться найденными выше величинами.

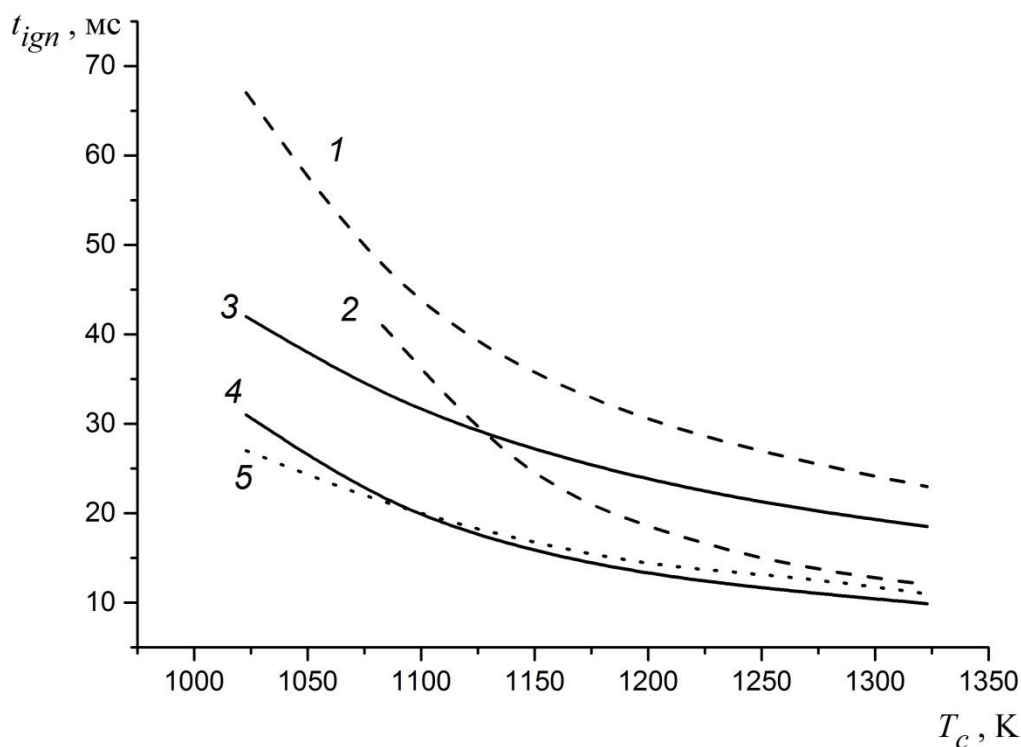


Рис. 2. Зависимость времени задержки воспламенения от температуры окружающей среды и числа Нуссельта для частицы радиуса 22 мкм. $Nu = 2$ (кривые 1, 3), $Nu = 5$ (кривые 2, 4), $Nu = 2.1$ (кривая 5), 1, 2 — данные [4] по модели 2, 3, 4 — результаты настоящей работы по модели 1, 5 — данные [11].

ВОЛНА ВОСПЛАМЕНЕНИЯ - ГОРЕНИЯ

Описание стадии воспламенения в структуре волны. Уравнения, описывающие химические превращения облака частиц в волне воспламенения и горения примем в виде уравнений сохранения энергии газовой и конденсированной фаз. Заметим, что при осреднении по

объему уравнение энергии для частиц имеет в качестве множителя при каждом слагаемом N — количество частиц в единице объема смеси. При этом после сокращения на этот множитель мы получаем стандартное уравнение теории теплового взрыва единичной частицы. Далее, пренебрежем в уравнении энергии газа членом, описывающим теплообмен между фазами, и теплом, возможно выделяющимся в газовой фазе за счет химических превращений в частице. Объемную концентрацию частиц будем считать малой и это позволяет обосновать в некоторой степени высказанные предположения. Задачу рассмотрим в системе координат, движущейся с волной горения. Введем автомодельную переменную $\eta = x - Dt$, где $D > 0$ — скорость распространения волны и запишем уравнение для температуры атмосферы T_1 [12]

$$\lambda_1 \frac{d^2 T_1}{d\eta^2} + \rho_1 c_1 D \frac{dT_1}{d\eta} = 0, \quad (17)$$

где λ_1, ρ_1, c_1 — теплопроводность, плотность и теплоемкость газа, соответственно. Решение уравнения (17), удовлетворяющее условиям

$$T_1(\infty) = T_0, \quad T_1(\eta_{ign}) = T_{1ign},$$

где T_0 — начальная равновесная температура смеси, T_{1ign} — некоторая (условная) промежуточная температура, имеет вид

$$T_1 = T_0 + (T_{1ign} - T_0) \exp \left[-\frac{\rho_1 c_1 D}{\lambda_1} (\eta - \eta_{ign}) \right]. \quad (18)$$

Переходя к безразмерным переменным

$$\bar{\eta} = \bar{x} - \bar{D} \bar{t}, \quad \bar{x} = \frac{x}{r_p}, \quad \bar{\eta} = \frac{\eta}{r_p}, \quad \bar{D} = \frac{D t_0}{r_p}, \quad \bar{t} = \frac{t}{t_0}$$

и переобозначая в уравнении (4) $T = T_2$, $T_c = T_1$, получаем уравнение энергии частиц на стадии воспламенения в виде

$$\frac{dT_2}{d\eta} = -\frac{3\xi q}{D} \left[-\alpha (T_2 - T_1) + (T_m - T_2) \exp \left(-\frac{E}{T_2} \right) \right], \quad (19)$$

где с учетом (18)

$$T_1 = 1 + (T_{1ign} - 1) \exp \left[A_1 (\eta - \eta_{ign}) \right], \quad A_1 = -\frac{\rho_1 c_1 D r_p}{\lambda_1}. \quad (20)$$

Уравнение (19) представляет собой неавтономное уравнение модифицированной теории теплового взрыва Семенова, за счет наличия в нем члена, зависящего от автомодельной переменной η . Вообще говоря, это позволяет ожидать более сложного поведения решений

соответствующей задачи Коши для (19), чем при постоянном значении температуры окружающей частицы среды и требует дополнительного аналитического исследования.

При численном расчете задачи Коши для (19), являющейся математической моделью процесса воспламенения в ВГ, бесконечно удаленная точка сносится в конечную точку η_0 , которая определяется согласно (20) из условия $T_1(\eta_0) = 1 + \varepsilon$, ε — некоторое малое число:

$$\eta_0 = \frac{1}{A_1} \ln \frac{\varepsilon}{T_{ign} - 1} + \eta_{ign}, \quad (21)$$

а η_{ign} определяется из решения задачи (4) по определению времени задержки воспламенения частиц.

Описание стадии горения в структуре волны. Для описания стадии горения используем структурный вид ранее разработанной нами модели [13, 14] для описания горения частицы металла. Уравнения сохранения энергии и выгорания частиц примут следующий вид

$$\frac{N}{V} \cdot m_p c_2 \frac{dT_2}{dt} = -\frac{N}{V} \cdot Sk (T_2 - T_1) + \frac{N}{V} \cdot S \delta q_b \rho_3 \frac{T_b - T_2}{T_0} \left| \frac{dr_p}{dt} \right|, \quad (22)$$

$$\frac{dr_p}{dt} = -\frac{1}{r_p} \frac{K_1}{\tau_b} \exp\left(-\frac{E}{RT_2}\right). \quad (23)$$

В уравнениях (22), (23) имеются в виду лагранжевы переменные. И кроме того здесь N — количество частиц, $V = V_1 + V_2 = 1$ единичный объем смеси, V_1 — объем газа, V_2 — объем частиц, K_1 — предэкспонент (отличный от ранее использовавшегося в (1)), τ_b — время релаксации выгорания частиц, $T_b > T_m$ — температура горения частиц, $0 < \delta \leq 1$ — параметр, характеризующий долю тепла идущего в частицу. После перехода к автомодельной переменной и безразмерным величинам после некоторых преобразований получаем уравнения (24), (25)

$$\frac{dT_2}{d\eta} = \frac{3}{2} Nu \frac{(T_2 - T_1)}{Dr_p^2} - \frac{3}{2} Nu \frac{\delta}{\beta_1} \frac{(T_b - T_2)}{Dr_p^2} \exp\left(-\frac{E}{T_2}\right), \quad (24)$$

$$\frac{dr_p}{d\eta} = \frac{Nu}{2} \frac{\rho_2 c_2 T_0}{\rho_3 q_b \beta_1} \frac{1}{Dr_p} \exp\left(-\frac{E}{T_2}\right). \quad (25)$$

где

$$\beta_1 = \frac{Nu}{2} \frac{\lambda_1 T_0 \tau_b}{\rho_3 q_b K_1} \quad (26)$$

Уравнение (17), описывающее изменение температуры газа на стадии горения запишем в этой области с учетом теплообмена между фазами, то есть в виде

$$\lambda_1 \frac{d^2 T_1}{d\eta^2} + \rho_1 c_1 D \frac{dT_1}{d\eta} = Sk \frac{N}{V} (T_2 - T_1) + (1 - \delta) \frac{N}{V} \cdot Sq_b \rho_3 \frac{T_b - T_2}{T_0} \left| \frac{dr_p}{dt} \right|, \quad (27)$$

которое с учетом того, что $S \frac{N}{V} = \frac{3m_2}{r_p}$, где $m_2 = \frac{4}{3} \pi r_p^3 N \frac{1}{V}$ — объемная концентрация частиц,

в безразмерных величинах преобразуется к виду

$$\frac{d^2 T_1}{d\eta^2} - A_1 \frac{dT_1}{d\eta} = \frac{3}{2} Nu m_{20} r_p \left[(T_2 - T_1) - (1 - \delta)(T_b - T_2) \frac{1}{D\beta_1} \exp\left(-\frac{E}{T_2}\right) \right] \quad (28)$$

где $m_{20} = \frac{4}{3} \pi r_{p0}^3 N \frac{1}{V}$ — начальная объемная концентрация частиц, r_{p0} — начальный радиус частиц.

Система уравнений (24), (25) и (28) с внутренними граничными условиями

$$\eta = \eta_{ign} : T_1 = T_{1ign}, T_2 = T_{2ign}, \frac{dT_1}{d\eta} = A_1 (T_{1ign} - 1), r_p = 1 \quad (29)$$

описывает стадию горения облака частиц. Значения искомых функций в условиях (29) берутся с границы области воспламенения, т.е. полученные в результате решения задачи (19), (20) на интервале $[\eta_0, \eta_{ign}]$. Третье условие в (29) соответствует равенству потоков тепла из области горения в область воспламенения.

Расчет задачи (24), (25), (28), (29) ведется до выполнения условий $T_1 \approx T_2 \approx T_b$ и $\lim r_p \rightarrow r_{pk}$, где r_{pk} — значение радиуса частицы в конце зоны горения, некоторая малая величина. При этом переопределенная, вообще говоря, данная краевая задача корректно решается как задача на собственные значения. Таковыми является неизвестная скорость волны горения D и длина зоны выгорания, в конце которой наступает тепловое равновесие и выгорание частиц.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ РАСЧЕТОВ ВОЛНЫ ГОРЕНИЯ.

Сопоставление с экспериментом. В работе [3] представлены экспериментальные данные по скорости горения пылевого облака магния в зависимости от размера частиц для $r_p = 7.5$ и 35 мкм и их объемной концентрации m_{20} в воздухе. Для получения соответствия наших численных данных этим экспериментам зависимость бифуркационного параметра $\beta_1 = \beta_1(r_p, m_{20})$ была выбрана в виде

$$\beta_1 = a \cosh \frac{\pi(r_p - x_c)}{w_x} \cosh \frac{\pi(m_{20} - y_c)}{w_y} + b, \quad (30)$$

где

$$a = 2.1647 \cdot 10^{-6}, \quad x_c = 10.0908, \quad w_x = 52.1217,$$

$$y_c = 2.5518 \cdot 10^{-4}, \quad w_y = 2.2952 \cdot 10^{-4}, \quad b = 1.1249 \cdot 10^{-6}.$$

Результаты расчета структуры волны горения с использованием (30) приведены на рис. 3, где показаны зависимости скорости ВГ от радиуса и объемной концентрации частиц в газозвеси. Как видно, выбор предэкспонента K_1 на основе (30) удовлетворительно описывает экспериментальные данные [3] (кривые 1, 4) и разумным образом предсказывает скорость горения для промежуточных значений радиуса частиц (кривые 2 и 3).

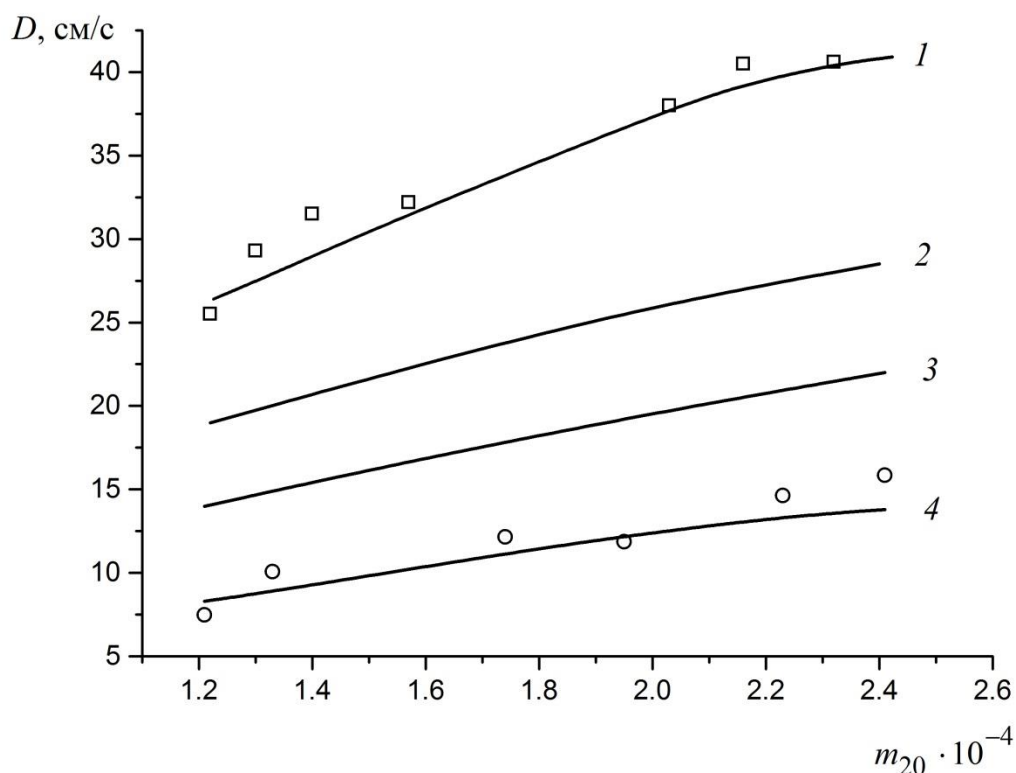


Рис. 3. Зависимость скорости горения от размера частиц и объемной концентрации. □ и ○ — экспериментальные данные [3] для частиц радиусом 7.5 и 35 мкм, соответственно; кривая 1 — расчет с использованием аппроксимации (30) для частиц с радиусом 7.5, 2 — 15, 3 — 22, 4 — 35 мкм, соответственно.

Распределение температур фаз по пространственной переменной. После верификации данной полуэмпирической модели мы можем определить пространственное распределение температур фаз в аэрозвеси, которое представлено на рис. 4. Структура волны горения такова. На тепловом фоне прогретого газа, получающего тепло за счет теплопроводности из зоны горения, частицы магния воспламеняются. При этом они имеют температуру, близкую к температуре газовой фазы. Это обусловлено быстрым временем тепловой релаксации частиц. После подключения процесса высокотемпературного окисления частиц в зоне горения температура частиц быстро релаксирует до температуры T_p и в этой области газ уже получает энергию тепловыделения от горения. До тех пор, пока температуры не сравниваются для газа и частиц. Реализуется характерный профиль температур, представленный типичным плавным нарастанием температуры частиц в зоне воспламенения с последующим срывом до некоторого конечного значения, после которого происходит ее (температуры) дальнейшее резкое возрастание и горение с постоянной

температурой горения. Для устойчивого распространения этого режима горения необходимо на левой границе иметь тепловой «поршень», на котором поддерживается соответствующее граничное условие.

Отметим также, что основная протяженность структуры волны горения и воспламенения обусловлена медленным нарастанием температуры частиц в зоне воспламенения, процесс горения является более быстрым в данной математической модели и занимает в несколько раз меньшую зону.

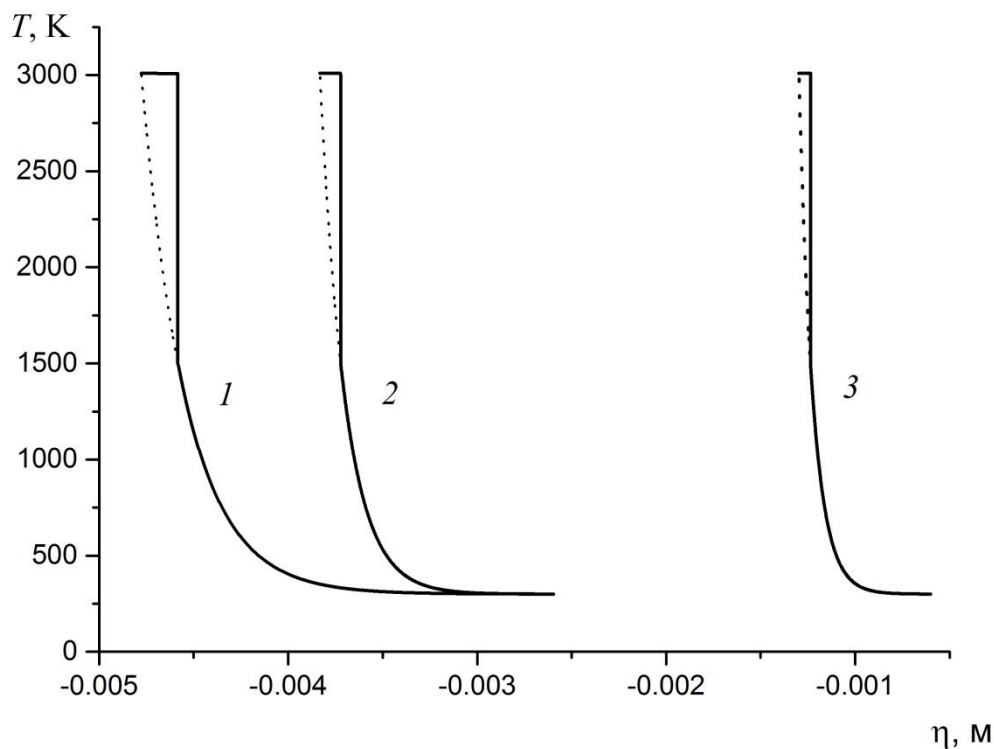


Рис. 4. Распределение температур фаз вдоль фронта волны горения. Сплошная линия — частицы, точечная — газ. Кривая 1 — частицы радиусом 35, 2 — 22, 3 — 7.5 мкм.

ВЫВОДЫ

Для описания структуры волны горения в газозвеси частиц магния в окислительной атмосфере предложена простая физико-математическая модель механики гетерогенных реагирующих сред. Модель верифицирована по зависимостям: – предельной температуры воспламенения, – скорости волны горения от радиуса и объемной концентрации частиц и гарантировано справедлива в диапазоне радиусов (7.5, 35) мкм и объемных концентраций частиц $(1.2, 2.4) \cdot 10^{-4}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гостеев Ю.А., Федоров А.В. Дискретно-континуальная модель распространения пламени в газозвеси металлических частиц. I. Одномерное приближение // Физика горения и взрыва. 2005. Т. 41, № 2. С. 81–93.
2. Гостеев Ю.А., Федоров А.В., Шульгин А.В. Дискретно-континуальная модель распространения пламени в газозвеси металлических частиц. II. Учет реакции предпламенного окисления // Физика горения и взрыва. 2005. Т. 41, № 2. С. 94–97.
3. Ballal D.R. Flame propagation through dust clouds of carbon, coal, aluminium and magnesium in an environment of zero gravity // Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences. 1983. Vol. 385, No. 1788. P. 21–51.

4. Федоров А.В., Фомин В.М., Гостеев Ю.А. Динамика и воспламенение газозвесей. Новосибирск: Изд-во НГТУ. 2006. 344 с.
5. Хайкин В.И., Блошенко В.И., Мержанов А.Г. О воспламенении частиц металлов // Физика горения и взрыва. 1970. №4. С. 474-488.
6. Блошенко В.И., Мержанов А.Г., Хайкин В.И. К вопросу об определении кинетических параметров высокотемпературного окисления // Физика горения и взрыва. 1976. № 5. С .682-688.
7. Ежовский Г.К., Мочалова А.С., Озеров Е.С. и др. Воспламенение и горение частицы магния // Горение и взрыв. М.: Недра, 1972. С. 234–240.
8. Ежовский Г.К., Озеров Е.С. Воспламенение порошкообразного магния // Физика горения и взрыва. 1977. № 6. С.845–851.
9. Cassel H.M., Liebman I. Combustion of Magnesium Particles II — Ignition Temperatures and Thermal Conductivities of Ambient Atmospheres // Combustion and Flame. 1963. Vol. 7, No. 1. P. 79–81.
10. Валов А.Е., Гусаченко Е.И., Шевцов В.И. Влияние давления окислительной среды и концентрации кислорода на воспламенение одиночных частиц магния // Физика горения и взрыва. 1991. № 4. С. 3–7.
11. Гуревич М.А., Степанов А.М. Воспламенение металлической частицы // Физика горения и взрыва. 1968. № 3. С. 334–342.
12. Михельсон В.А. О нормальной скорости воспламенения гремучих газовых смесей // Ученые записки императорского Московского университета. Отдел Физико-математический. Выпуск десятый. Москва. 1893. С. 1–92.
13. Федоров А.В., Фомин В.М., Шульгин А.В. Физико-математическое моделирование горения наночастиц алюминия вблизи торца ударной трубы // Доклады АН. 2010. Т. 432, No.5. С. 616–619.
14. Федоров А.В., Шульгин А.В. Точечная модель горения наночастиц алюминия в отраженной ударной волне // Физика горения и взрыва. 2011. Т. 47, № 3. С. 47–51.
15. Шевчук В.Г., Безродных А.К., Бойчук Л.В., Кондратьев Е.Н. О механизме ламинарного пламени в аэрозвесах металлических частиц // Физика горения и взрыва. 1988. Е. 24, № 2. С. 85–89.

5. Молекулярно-динамическое моделирование плавления наночастиц алюминия методом внедренного атома

Известно, что термодинамические свойства наноразмерных и массивных объектов существенно отличаются. В частности, температура плавления металлических наноразмерных частиц значительно меньше температуры плавления массивного образца металла. В работе [1] была предложена и верифицирована полуэмпирическая модель молекулярной динамики с использованием склеивающего потенциала [2], позволившая определить тепловую историю нагрева наночастицы алюминия, в том числе и зависимость температуры плавления алюминия от

размера частиц, полученную экспериментальным путем. Эта модель основывалась на использовании естественного предположения о зависимости плотности частицы от температуры в виде $\rho = aT^m + b$, $\rho_l \leq \rho \leq \rho_s$, $T_{init} \leq T \leq T_{fin}$, $m = 1/2, 1, 2$. Здесь ρ_l , ρ_s — плотности жидкой и твердой фазы, принимаемые при нормальной T_{init} и некоторой конечной температуре T_{fin} , а m — эмпирический параметр. Нами было показано, что с помощью входящих в эту зависимость произвольных констант можно удовлетворительно описать экспериментальные данные зависимости температуры плавления алюминия от размера частиц [1]. В настоящей работе моделирование плавления наночастиц алюминия проводится в рамках полной модели молекулярной динамики, не использующей аналитической зависимости плотности от температуры. Тем самым обосновывается предложенная нами ранее полуэмпирическая модель молекулярной динамики плавления частицы [1].

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Итак, рассмотрим нано-кристалл алюминия, нагревающийся в некотором тепловом поле. Кристалл помещается в термостат с целью получения средней температуры системы, близкой к требуемой. В этом случае классические уравнения движения молекулярной динамики модифицируются, и система уже не является микроканоническим ансамблем. Получаемые в результате решения таких модифицированных уравнений движения характеристики будут близки к каноническим средним NVT ансамбля или отличаться на величину порядка $O(1/N)$, где N — число атомов в системе.[3]. В настоящей работе использовался термостат Эванса, в котором уравнения движения записываются в виде [4]

$$\frac{d\vec{r}_i(t)}{dt} = \vec{v}_i(t), \quad \frac{d\vec{v}_i(t)}{dt} = \frac{f_i(t)}{m_i} - \chi(t)\vec{v}_i(t), \quad i = 1, \dots, N,$$

где

$$\chi(t) = \frac{\sum_i \vec{v}_i(t) \cdot f_i(t)}{\sum_i m_i v_i^2}$$

Здесь m_i — масса i -го атома, $\vec{r}_i = (r_{ix}, r_{iy}, r_{iz})$ — его радиус-вектор, \vec{v}_i — скорость движения i

-го атома, $\vec{f}_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N \vec{f}_{ij}$ — сила, действующая на этот атом. Сила взаимодействия двух атомов

\vec{f}_{ij} , находящихся на расстоянии r_{ij} , определяется соотношением

$$\vec{f}_{ij}(r_{ij}) = -\frac{dU(r_{ij})}{dr_{ij}},$$

где $U(r_{ij})$ — потенциал взаимодействия, $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j| = \sqrt{r_{ijx}^2 + r_{ijy}^2 + r_{ijz}^2}$,
 $r_{ijx} = r_{ix} - r_{jx}$, $r_{ijy} = r_{iy} - r_{jy}$, $r_{ijz} = r_{iz} - r_{jz}$.

В качестве потенциала взаимодействия в настоящей работе использовался полуэмпирический потенциал внедренного атома [5], который состоит из двух слагаемых — энергии парного взаимодействия атомов и энергии взаимодействия каждого атома с электронной плотностью, создаваемой другими атомами и в общем виде записывается как

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N V(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N F(\rho_i).$$

Здесь $V(r_{ij})$ — парный потенциал, $F(\rho_i)$ — функция “погружения” i -го атома, описывающая вклад в энергию произвольно расположенных ядер от взаимодействия с электронами, ρ_i — суммарная электронная плотность для i -го атома, создаваемая сферически симметричными функциями одноэлектронной плотности $\rho_{ij}(r_{ij})$ других атомов:

$$\rho_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N \rho_{ij}(r_{ij}).$$

Явного математического выражения для потенциала погруженного атома не существует, он задается таблично во входном файле TABLEAM пакета DL_POLY Classic [6], с использованием которого осуществлялось молекулярно-динамическое моделирование.

ПРОЦЕДУРА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Перед началом расчета строится начальная равновесная кристаллическая гранецентрированная решетка, а именно совокупность атомов, находящихся на известном заданном расстоянии. Для алюминия при $P = T = 0$ это расстояние равно 4.032 Å [2, 7]. Начальный размер частицы определяется в соответствии с числом атомов, привлекаемых для моделирования. Границы частицы являются свободными, сама частица считается неподвижной, испарение атомов с поверхности не учитывается, поскольку в наших численных экспериментах температура частицы не очень высока.

Для моделирования плавления наночастицы были подвергнуты процессу нагревания, который состоит из ряда моделирований при постоянной температуре, начиная с начальной температуры T_0 . Каждый шаг моделирования при текущей температуре T включает в себя две стадии: стадию уравнивания и стадию накопления статистических данных. На первой стадии применяется известная процедура масштабирования скоростей [3, 8], на второй она не

используется. После завершения моделирования при температуре T запускается новый расчет с возрастающей температурой $T + \Delta T$. Для автоматического перезапуска расчета при новой температуре была написана управляющая программа (скрипт). Такой подход позволяет лучше моделировать уравнивание при каждой температуре и медленный нагрев по сравнению со случаем, когда температура постоянно меняется в пределах одного запуска моделирования [9].

Шаг интегрирования по времени задавался равным $\Delta t = 1$ фс (10^{-15} с), а температура системы изменялась с шагом $\Delta T = 0.01$ К. При каждой температуре наночастица уравнивалась по температуре в течении 10 пс и еще 10 пс были использованы для накопления статистических данных. Т.е. для каждого ΔT производилось 10 000+10 000 шагов интегрирования. Таким

образом, скорость нагрева $v_h = \frac{\Delta T}{\Delta t \cdot N_{eq}}$ составляла 10^9 К/с, N_{eq} — число шагов

уравнивания. Как отмечено в [9], такая скорость высока по сравнению с экспериментальными скоростями нагрева, однако в результате значение температуры плавления хорошо согласуется с экспериментом.

Для определения момента фазового перехода в процессе счета строилась калорическая кривая, а именно зависимость полной энергии от температуры $E(T)$. Полная энергия по мере разогрева частицы возрастает до определенной величины, при которой наблюдается скачок энергии. Он (скачок) происходит при значении температуры, равном температуре плавления. Это является одним из способов отслеживания наличия фазовых переходов (например, плавления).

РЕЗУЛЬТАТЫ

На рис. 1 представлены расчетные (сплошные символы) и экспериментальные (пустые символы) данные зависимостей температуры плавления частиц алюминия от их размера в диапазоне 2 – 120 нм, а на рис. 2 — более детальная картина этих же зависимостей для частиц малых размеров в диапазоне 2 – 10 нм [6, 10–16]. Как видно из данных рис. 1 имеется несоответствие экспериментальных данных между собой, особенно в диапазоне 10 – 20 нм. Отметим, что в доступной авторам литературе экспериментальных данных по зависимости температуры плавления частиц алюминия от размера (меньше 10 нм) практически нет.

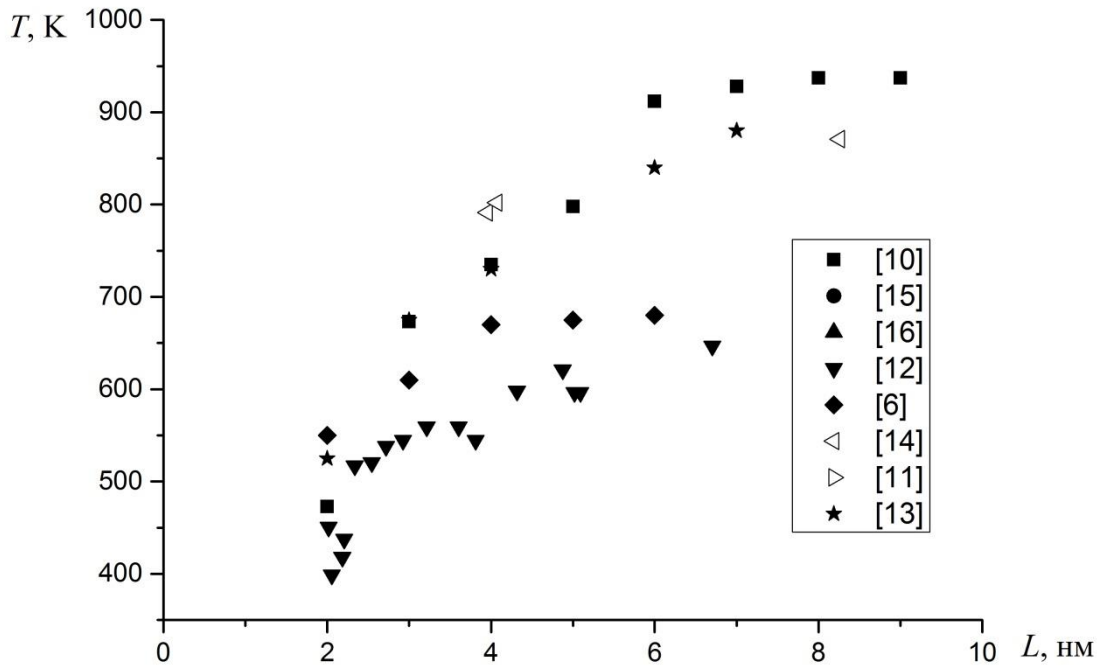


Рис. 2. Зависимость температуры плавления частиц алюминия от их размера. Расчетные (сплошные символы) и экспериментальные (пустые символы) данные. Диапазон 2 – 10 нм.

Проведенные расчеты с потенциалом погруженного атома показывают, что, как и в случае, ранее предложенной модели со склеивающим потенциалом [1], величины полной энергии и энтальпии практически совпадают, поэтому величины теплоемкостей при постоянном объеме и давлении также практически не отличаются. Температурная область [0, 1000] К разбивалась на интервалы. на каждом интервале зависимость аппроксимировалась прямой линией и за значение теплоемкости на этом интервале принималось значение. Далее по полученной совокупности точек строилась аппроксимация В-сплайном, которая и определяла приближенную зависимость теплоемкости от температуры. Такие зависимости были построены для и они практически совпадают. Действительно, изображения этих трех кривых на рисунке имеют неразличимые отличия, поэтому мы не приводим этот рисунок в статье.

На рис. 3 приведены зависимости теплоемкости от температуры для частиц размером 3 и 6 нм (кривые 3, 4, соответственно), полученные с использованием потенциала погруженного атома. Для сравнения на рис. 3 также представлены ранее полученные кривые теплоемкости с использованием склеивающего потенциала и полиномиальной аппроксимации [1] для частиц размером 3.25 и 6.25 нм (кривые 1, 2, соответственно). Кривая 5 показывает теплоёмкость объемного алюминия. Как видно, основной результат, заключающийся в том, что теплоемкость наночастиц больше теплоемкости макроскопических частиц из того же материала, причем теплоемкость увеличивается с уменьшением размеров наночастиц остается справедливым и в рамках точной рациональной модели. Определенное различие результатов настоящей работы и [1] обусловлено различиями моделей, и полученными на ее основе данными (см. рис. 2).

На рис. 3 приведено также сопоставление данных по теплоемкости алюминиевой частицы с результатами работы [18], в которой объектом исследования была частица размером 2.5 нм (штриховая линия). Отметим, что в то время как, величины теплоемкостей, полученной в настоящей работе и [18] близки, особенно в твердой фазе, температура плавления в [18], которая соответствует пику в зависимости теплоемкости от температуры, вызывает сомнение, поскольку она больше у частицы меньшего размера. Это вступает в противоречие с экспериментальной

зависимостью температуры плавления от радиуса. По экспериментальной кривой в этом случае К [10], а расчеты по данным из [18] дают иное значение около 800 К.

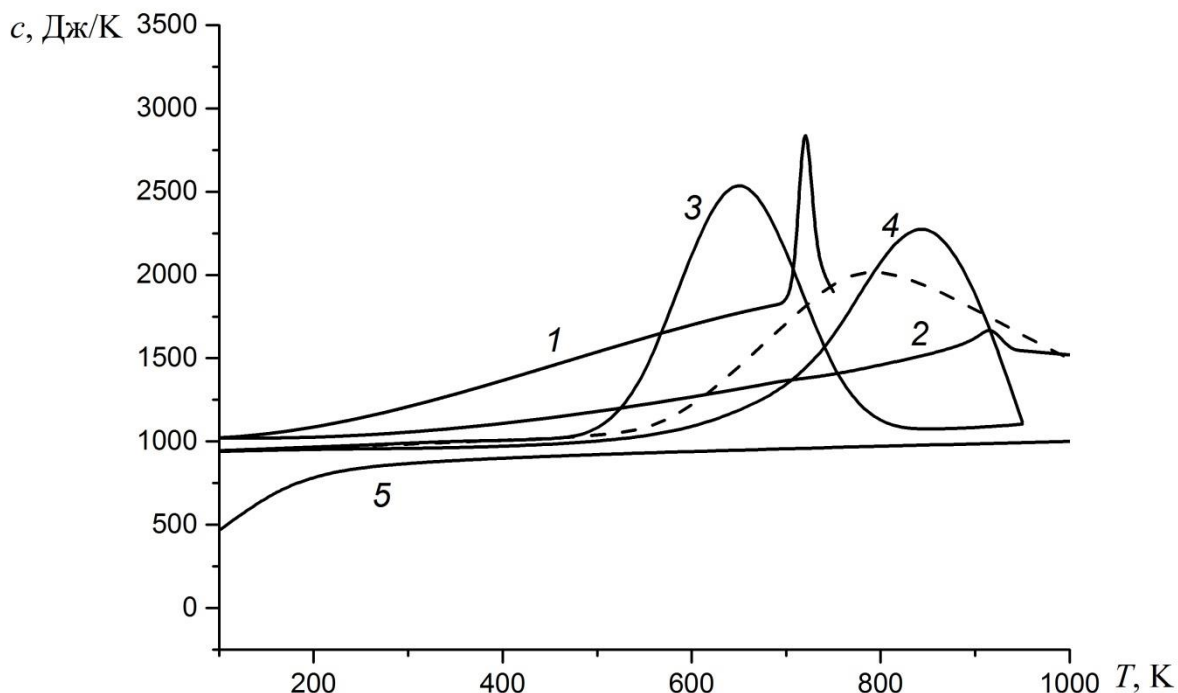


Рис. 3. Зависимость теплоемкости от температуры. Кривые 1, 2 результаты работы [1] для частиц размером 3.25 и 6.25 нм, соответственно; 3, 4 — результаты настоящей работы для частиц размером 3 и 6 нм, соответственно; 5 — теплоемкость объемного алюминия [19]; штриховая линия — результаты работы [18] для частицы размера 2.5 нм.

ВЫВОДЫ

В работе дан расчет процесса плавления нано-кристалла алюминия с размерами ребра 2–7 нм в рамках метода молекулярной динамики, с использованием ансамбля NVT, потенциала внедренного атома DL POLY и в параметризации [13].

Расчеты позволили обосновать предложенную нами ранее полуэмпирическую модель МД для описания зависимости температуры плавления кристалла от его размера. Найденные теплоемкости качественно верно передают их зависимость от температуры и размера ребра кристалла.

ЛИТЕРАТУРА

1. Федоров А.В., Шульгин А.В. Комплексное моделирование плавления наночастицы алюминия // Физика горения и взрыва. 2013. Т.49, №4. С. 68–75.
2. Ercolessi, F., Adams, J. B. Interatomic potentials from first-principles calculations: the force-matching method // Europhys. Lett. 1994. Vol. 26, № 8. P. 583–588.
3. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer simulation of liquids. Oxford University Press, 1991. 385 p.
4. Evans D.J., Morriss G.P. Non-Newtonian molecular dynamics // Computer Physics Reports. 1984. Vol. 1, No. 5. P. 297–343.
5. Finnis M.W., Sinclair J.E. A simple empirical N-body potential for transition metals // Philosophical Magazine A. 1984. Vol. 50, No. 1. P. 45–66.
6. Smith W., Forester T.R. DL_POLY_2.0: A general-purpose parallel molecular dynamics simulation package // J. Mol. Graphics. 1996. Vol.14. P. 136–141.
7. Ercolessi F. A molecular dynamics primer. International School for Advanced Studies (SISSA-ISAS) Trieste, Italy, 1997. 52 p.

8. Rapaport D.C. The art of molecular dynamics simulation. Cambridge University Press, 2004. 549 p.
9. Alavi S., Thompson D.L. Simulations of melting of polyatomic solids and nanoparticles // *Molecular Simulation*, Vol. 32, No. 12–13, 15 October–15 November 2006, 999–1015.
10. Puri P., Yang V. Effect of Particle Size on Melting of Aluminum at Nano Scales // *J. Phys. Chem. C*. 2007. Vol. 111. P. 11776–11783.
11. Eckert J., Holzer J.C., Ahn C.C., Fu Z., Johnson W.L. Melting behavior of nanocrystalline aluminum powders // *Nanostructured Materials*. 1993. Vol. 2, Issue 4. P. 407–413.
12. Alavi S., Thompson D.L. Molecular Dynamics Simulations of the Melting of Aluminum Nanoparticles // *J. Phys. Chem. A*. 2006. Vol. 110. P. 1518-1523.
13. <https://sites.google.com/site/eampotentials/Home>
14. Lai S.L., Carlsson J.R.A., Allen L.H. Melting point depression of Al clusters generated during the early stages of film growth: Nanocalorimetry measurements // *Applied Physics Letters*. 1998. Vol. 72, No. 9. P. 1098–1100.
15. Chauhan G. Influence of alumina shell on nano aluminum melting temperature depression // A thesis in mechanical engineering. Texas Tech University, 2007. 66 p.
16. Zhu Y.F., Lian J.S., Jiang Q. Modeling of the Melting Point, Debye Temperature, Thermal Expansion Coefficient, and the Specific Heat of Nanostructured Materials // *J. Phys. Chem. C*. 2009. Vol. 113. P. 16896–16900.
17. Andersen H.C. Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature // *J. Chem. Phys.* 1980. Vol.72, № 4. P. 2384–2393.
18. Forsblom M., Grimvall G. Anharmonic effects in the heat capacity of Al // *Physical Review B*. 2004. Vol. 69. P. 165106.
19. Физические величины. Справочник // А.П. Бабичев, Н.А. Бабушкина, А.М. Братковский и др.; Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.

6. ОПИСАНИЕ ПЛАВЛЕНИЯ НАНОРАЗМЕРНЫХ ОБРАЗЦОВ АЛЮМИНИЯ

Проблемы определения тепловой истории наночастиц реагирующих металлов представляют интерес для производств, в которых используются такие объекты. Так, для создания современных типов топлив, основанных на использовании наночастиц алюминия, магния, бора и других металлов, важное значение имеет вопрос протекания химических превращений подобных композитных смесей. Этой проблеме в литературе посвящено к настоящему времени огромное число публикаций, как экспериментальных, так и теоретических. При этом, в том числе, становится важным и вопрос определения входящих в феноменологические модели поведения наночастиц в условиях теплового нагружения, параметров различной природы, некоторых характерных точек в пространстве состояний. Например, точки, поверхности фазового перехода представляют интерес в их зависимости от размера наночастиц. Экспериментально и теоретически многочисленными исследователями показано снижение температуры плавления и увеличение теплоемкости, уменьшение коэффициента теплопроводности при уменьшении радиуса частиц. Отметим, что при стремлении размера частиц к некоторому характерному для рассматриваемого материала значению, эти свойства количественно определяются своими значениями, присущими объемной фазе (объемная фаза – состояние материала, в котором параметры определены для макроскопических частиц, то есть характерный размер, которых измеряется, например, в микронах). Это связано с существенным увеличением относительного числа слабо ограниченных атомов на поверхности по сравнению с теми, что присутствует в объеме наночастицы.

Отметим, что уменьшение температуры плавления с размером частиц металла может отражаться на их химической активности. В наших работах [1–4] мы останавливались на молекулярно динамическом и феноменологическом описании процесса плавления наночастиц алюминия. При этом пользовались утверждением, что с позиций термодинамики, переход твердое – жидкое состояния с ростом температуры начинается с появления на поверхности наночастицы весьма тонкого жидкого слоя. Однако, ядро частицы считается в этих условиях твердым. Возможен также и гетерогенный механизм плавления, когда в твердом ядре возникают зародыши

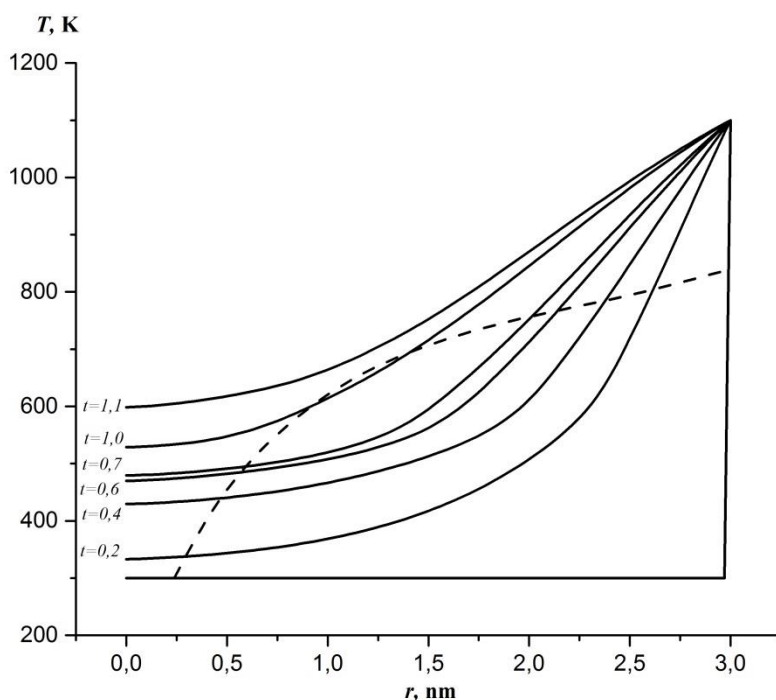
жидкой фазы, которые со временем разрастаются, так что возникает жидкая фаза в виде гомогенного образования. Однако, наличие масштабного эффекта, то есть зависимость параметров нанодисперсных систем от их размера, как показано в [4] в плоской геометрии образца, может приводить, и приводит при некоторых условиях к возникновению двухфронтовых режимов плавления.

Эти режимы характеризуются тем, что при нагреве частицы с поверхности от нее распространяется внутрь частицы первый фронт плавления. Второй фронт плавления, идущий навстречу первому, двигается от центра симметрии к поверхности частицы. Его образование обусловлено тем, что по мере прогрева тела частицы температура в некоторой точке достигает температуры плавления. Ее значение в данной точке невелико и определяется кривой плавления (зависимостью температуры плавления от размера частицы), что и приводит к наблюдаемому оригинальному явлению, механизм которого можно назвать механизмом «слоеного пирога». Ниже мы представим результаты численного моделирования задачи о плавлении [4] в цилиндрической и сферической постановках.

ОБСУЖДЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Тестовые расчеты в задаче были проведены ранее в [4]. Поэтому ниже опишем полученные результаты для образцов со сферической и цилиндрической симметрией.

Динамика поля температуры. Термограммы. Итак, рассмотрим плавление сферического и цилиндрического образцов алюминия диаметром 6 нм при различных температурах. Пусть T_0 . На рис.1,а и 1.б приведены термограммы процесса в виде зависимостей температуры от пространственной переменной на различные (безразмерные) моменты времени t . Прежде всего, можно отметить, что термограммы вблизи от внешней границы частицы имеют линейное распределение по пространству, а во второй подобласти образца распределение температуры по пространственной переменной уже нелинейно, поскольку необходимо удовлетворить граничному условию в центре частицы. Здесь же нанесена кривая плавления T_m . Видно, что эта кривая пересекается с термограммами в двух точках. Первая точка пересечения расположена вблизи от оси симметрии и обусловлена тем, что при малых размерах частиц температура плавления меньше, чем для частицы больших размеров.



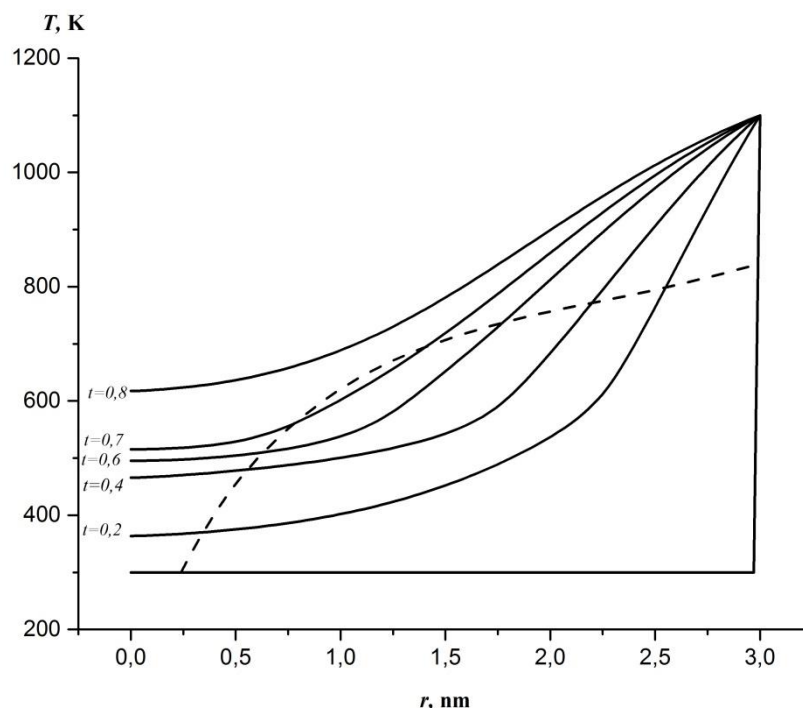


Рис. 1. Плавление частицы при температуре 1100 К: а) – цилиндрическая частица; б) – сферическая частица.

Будем определять границу фронта фазового перехода, как точку, в которой термограммы пересекается с кривой плавления. Вторая точка, расположена вблизи от внешней поверхности частицы и определяет второй фронт плавления, аналогично тому, как это наблюдалось для одномерного случая с плоской симметрией [4]. Таким образом, и в данных случаях симметрии в образце наблюдаются два фронта плавления, которые распространяются навстречу друг другу, а затем сливаются. После этого происходит нагрев уже жидкой капли, вплоть до температуры, равной температуре теплового воздействия на частицу. Безразмерные времена плавления для сферического и цилиндрического образцов равны 0.72 и 1 соответственно.

Можно отметить, что скорость нагрева в сферическом образце выше, чем образцах другой симметрии, рис. 2 (вкладка). Это можно увидеть по тому, что на данном рисунке термограмма сферической частицы является верхней границей для термограммы нити цилиндрической симметрии, которая в свою очередь расположена выше термограммы пластины на моменты времени t_1 и t_2 . При этом к моменту времени t_2 сферическая частица уже полностью расплавлена, и термограмма соответствует ее жидкому состоянию. Очевидно, что это обусловлено большим потоком тепла в случаях сферической и цилиндрической, цилиндрической и плоской симметрий соответственно. Разница в температурах частиц различной симметрии может достигать до 100 К в центре частицы. Аналогичная ситуация наблюдается и при воздействии других температур окружающей среды.

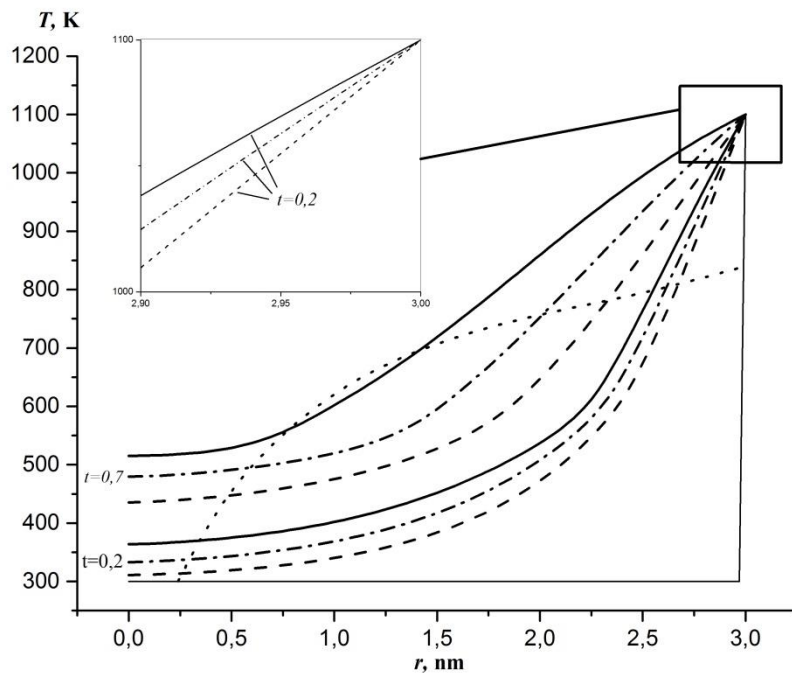
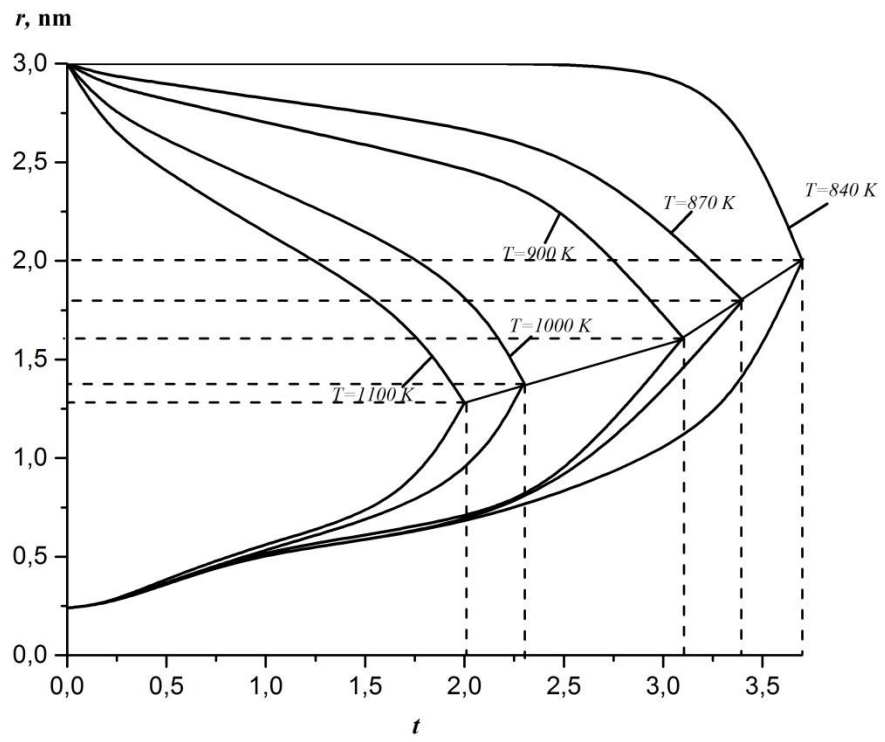
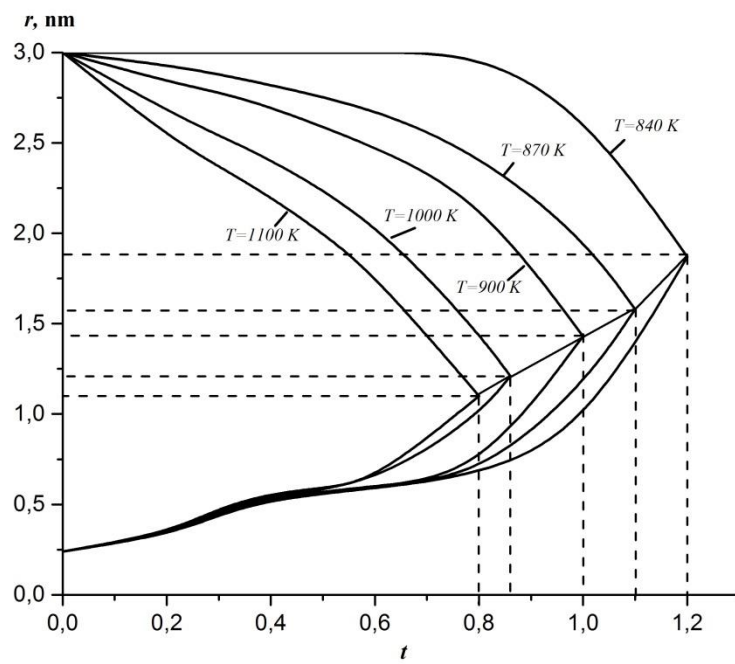


Рис. 2. Термограммы плавления частиц алюминия. Сплошная линия – пла-стина, штрих пунктирная линия – цилиндр, пунктирная линия – сфера. Диаметр частицы 6 нм, температура воздействия 1100 К. Три нижние кривые – термограммы на момент времени $t=0,2$, $t=0,7$, $t=1,0$, верхние – $t=0,2$, $t=0,7$, $t=1,0$. Во вкладке термограммы в окрестности правой границы частицы.

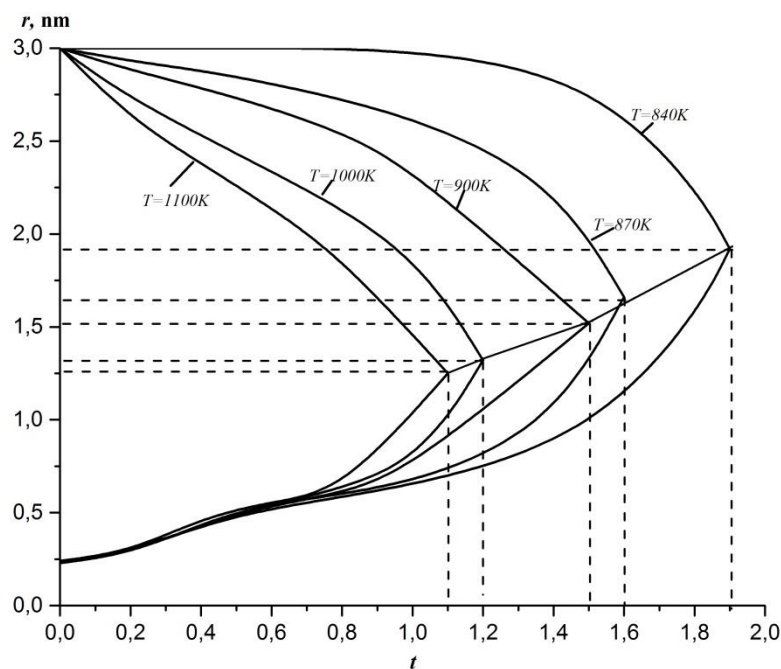
О двух границах фазового перехода. Рассмотрим поведения траекторий границ фазового перехода, см. рис. 3. Здесь верхние пять кривых соответствуют первой границе фазового перехода, идущей с внешней границы образцов, для различных температур воздействия. Можно отметить, что при невысоких температурах воздействия движение границы переход жидкость – твердое вещество осуществляется некоторое время с невысокой постоянной скоростью. Имеет место своеобразный инкубационный период, когда плавление происходит в весьма узкой области частицы. Его длительность равна примерно 3. По прошествии этого времени скорость резко увеличивается и за оставшийся короткий промежуток времени, занимающий чуть более 10% от длительности периода индукции, первая точка фазового перехода достигает вторую, идущую изнутри частицы. Подобное поведение обусловлено близостью температуры воздействия к температуре плавления образца. Следует отметить также, что вторая граница, идущая из центра образца, характеризуется для всех температур воздействия примерно одинаковой скоростью на первом этапе плавления. В последующем за ним временным этапом плавления происходит гладкий переход к точке слияния обеих границ фазового перехода. Из рисунка видно, что до некоторых моментов времени распространение фронта происходит по одинаковому сценарию. Траектории фронта фазового перехода до этого момента сливаются, и только затем кривые начинают различаться. Причем прогрев снаружи частицы более интенсивен.



a)



b)



в)

Рис. 3. Линии фазового перехода. Нижние кривые соответствуют внутренней границе фазового перехода. Верхние – фронту плавления, идущему с внешней границы образца. Размер частицы 6 нм. (функция аппроксимации): а) – пластина, б) – цилиндр; в) – сфера.

ВЫВОДЫ

Предложена новая физико-математическая модель для описания плавления наноразмерных частиц металла в рамках математической постановки, учитывающей экспериментально установленный факт уменьшения температуры плавления с уменьшением радиуса частиц.

Для тепловых полей пластины, нити и сферы определены двухфронтовые режимы плавления, являющиеся следствием масштабного фактора в зависимости температуры плавления от размера частицы.

Найдена упорядоченность времени плавления от симметрии образца и получены соответствующие аппроксимационные степенные зависимости этого параметра от размера частицы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Федоров А.В., Шульгин А.В. Математическое моделирование плавления наноразмерных частиц металла // Физика горения и взрыва. 2011. Т. 47, № 2. С. 23–29.
2. Федоров А.В., Шульгин А.В. Комплексное моделирование плавления наночастицы алюминия // Физика горения и взрыва. 2013. Т. 49, № 4. С. 68–75.
3. Федоров А.В., Шульгин А.В. Молекулярно-динамическое моделирование плавления наночастиц алюминия методом внедренного атома // Физика горения и взрыва. 2015. Т.51, № 3. С. 55–59.
4. Федоров А.В., Шульгин А.В. Молекулярно динамическое и феноменологическое моделирование нагрева нанообъекта алюминия // ФГВ (в печати)
5. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений, т. II. ГИФМЛ М. 1959. 620 с.
6. Wu B., McCue S.W., Tillman P., Hill J.M. Single phase limit for melting nanoparticles // Applied Mathematical Modelling, 2009. Vol. 33. P. 2349–2367.
7. Федоров А.В., Шульгин А.В. Моделирование горения частицы магния (задача Стефана) // Физика горения и взрыва. 2009. Т. 45, № 6. С. 20 – 25.

ГЛАВА 4. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВЗРЫВНЫХ ВОЛН И ИХ ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ОБЪЕКТЫ

В первом параграфе представлены результаты моделирования задачи о распространении ударной волны, образовавшейся в результате взрыва сферического заряда ВВ, в полубесконечном пространстве, ограниченном плоской подложкой. Исследованы задачи о воздействии ударной волны на жестко закрепленные на подложке объекты (одиночную призму и комплекс призм, имитирующих городскую застройку). Расчеты выполнены в трехмерной невязкой постановке с использованием модуля AUTODYN программного комплекса ANSYS. Результаты расчетов сопоставлены с экспериментальными данными о распределении статического давления в датчиках, расположенных на стенках призм. Продемонстрирована возможность корректного описания нестационарной волновой картины, реализующейся в окрестности установленных на подложке препятствий. На основе данных моделирования выполнена оценка интенсивности воздействия на различные объекты.

Во втором параграфе представлены результаты численного моделирования двунаправленного взаимодействия твердого деформируемого тела и жидкости/газа. Расчеты выполнены в двух- и трехмерной на основе полных моделей механики сплошной среды с использованием технологии двунаправленного сопряжения (2FSI), реализованной в ANSYS Workbench.

4.1. Моделирование распространения взрывных волн

Защита гражданских сооружений от угрозы террористических взрывов или техногенных катастроф, сопровождающихся взрывными явлениями, – одна из наиболее актуальных задач современной инженерии. Для обеспечения безопасности зданий и сооружений необходимо повышать их способность противостоять взрывным воздействиям. С этой целью нужно, прежде всего, уметь предсказывать параметры взрывного воздействия в зависимости от конкретной геометрии и силы взрыва, а также оценивать степень возможных разрушений сооружений при таком воздействии.

В России и других странах проводится активная деятельность по разработке методов оценки динамических/взрывных воздействий на сооружения. Эти методы положены в основу государственных норм, регулирующих проектирование и эксплуатацию зданий и сооружений. Как правило, они основаны на полуэмпирических теориях и представляют собой набор формул, которые следует применять в той или другой ситуации.

Смотри, например, регламенты нормативно-технических документов [1–5], аналогичные документы существуют и за рубежом [6–9].

В [1, 5] расчет зданий и сооружений по предельным состояниям рекомендуется выполнять с учетом неблагоприятных сочетаний нагрузок при взрывных воздействиях. Проектирование промышленных зданий со взрывоопасными технологиями осуществляется в соответствии с рекомендациями СП 20.13330.2011 [2].

Однако нормативная база позволяет определять параметры ударно-волновых воздействий на строительные объекты только в простейших случаях. Упрощенная методика не может выполнить оценку с учетом сложной ударно-волновой картины течения, реализующейся при взрыве зарядов взрывчатого вещества (ВВ) вблизи нескольких объектов. В силу многопараметричности и сложности задачи разработка универсальных инженерных

формул, способных описать указанное явление с достаточной степенью точности, представляется весьма затруднительной задачей.

Быстрый рост мощностей современных ЭВМ, совершенствование алгоритмов расчета и развитие современных программных комплексов позволяют проводить численное моделирование распространения детонационных и ударных волн в окружающей среде с учетом их взаимодействия с поверхностью земли и расположенными на ней объектами, а также деформациями и разрушением конструкций. В общем случае расчеты устойчивости зданий под воздействием ударно-волновых нагрузок подразумевают решение сопряженной задачи, включающей расчет реализующегося при взрыве внешнего течения совместно с определением отклика конструкции на внешнее динамическое воздействие.

Для моделирования этих явлений используются оригинальные и коммерческие программные комплексы инженерного анализа (CAE), такие как ANSYS CFD, ANSYS AUTODYN, LS-DYNA и др., позволяющие решать широкий спектр прикладных задач газовой динамики, механики деформируемого твердого тела, а также проводить сопряженные расчеты взаимодействия потоков со структурами (FSI).

В предыдущих работах авторов разработана расчетная технология для решения задач о распространении ударных волн и взрывном воздействии на строительные конструкции, основанная на использовании достаточно адекватных математических моделей и современных программных средств компьютерной инженерии, а также выполнено моделирование ударно-волновых [10–12] воздействий на конструкции.

В данной статье представлены результаты расчета распространения ударных волн, образовавшихся в результате детонации конденсированного ВВ в окрестности призм (**Задача 1**) и комплекса призм, имитирующих городскую застройку (**Задача 2**). Для расчета используется модуль AUTODYN ANSYS, который предназначен для моделирования быстропротекающих процессов в сплошной среде и позволяет провести исследование сложной ударно-волновой структуры течения, сформировавшейся в результате отражения ударной волны (УВ) от подложки и стен зданий, дифракции УВ на элементах застройки и интерференции многочисленных УВ.

Физическая постановка задачи. Рассмотрим **Задачу 1** о воздействии воздушного взрыва заряда конденсированного ВВ на призму прямоугольного сечения, установленную на поверхности земли на некотором расстоянии от эпицентра взрыва. Моделирование проведено в условиях экспериментальных данных [13].

Размеры призмы составляют $0.061 \times 0.183 \times 0.183$ м. Взрыв ВВ Demex массой 23,7 г (тротилловый эквивалент $M_{\text{TNT}} = 27,26$ г) происходит на расстоянии $L = 1.5$ м от фронтальной поверхности призмы на высоте $H_{\text{ВВ}} = 0.1$ м над поверхностью земли.

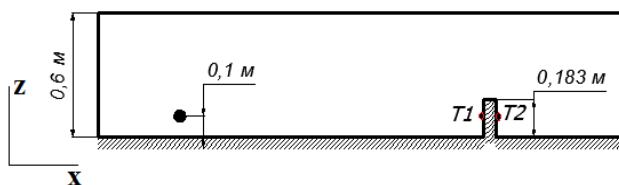
На рис. 4.1 представлена схема расчетной области **Задачи 1** в разрезе (*a*), плане (*b*) и в изометрии (*в*). С целью сокращения расчетных ресурсов задача решена в симметричной постановке относительно плоскости *XZ*.

На рис. 4.2, *a* показана схема расчетной области **Задачи 2**, включающей уже семь призм различного сечения и высоты. Максимальная высота призм (призмы *A* и *G*) состав-

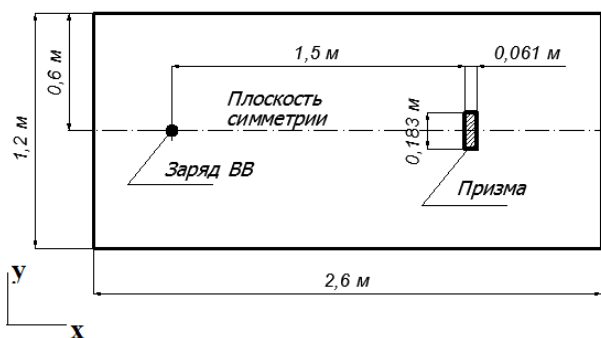
ляет $H_{\max} = 0.45$ м, в то время как наиболее низкие объекты D и F имеют высоту $H_{\min} = 0.3$ м. Расстояние между соседними объектами меньше или сопоставимо по линейному масштабу с поперечными размерами обтекаемых объектов, что характеризует данную конфигурацию застройки как плотную. В отличие от Задачи 1 моделирование ударно-волнового течения в окрестности данной конфигурации тел не может быть проведено в симметричной постановке и требует построения полной 3D-расчетной области. Заряд ВВ массой $m_{\text{вт}} = 0.016$ кг находится в точке C с координатами (0.478; 0.35; 0.04 м). Постановка задачи выбрана в соответствии с данными эксперимента [14], в котором произведены замеры давления в зависимости от времени в ряде точек, расположенных на стенках призм. Координаты датчиков давления приведены в Таблице 1. Расположение этих датчиков также показано на рис.4.2, а.

Основные уравнения и граничные условия. Воздушная среда и заряд конденсированного ВВ моделируются на основе единого гидродинамического подхода. Для расчетов использован модуль AUTODYN программного комплекса ANSYS, предназначенный для моделирования быстротекающих процессов механики сплошной среды. Используется эйлеров решатель, основанный на методах конечных разностей повышенного порядка аппроксимации, хорошо зарекомендовавших себя в задачах с высокими градиентами и разрывами.

а)



б)



в)

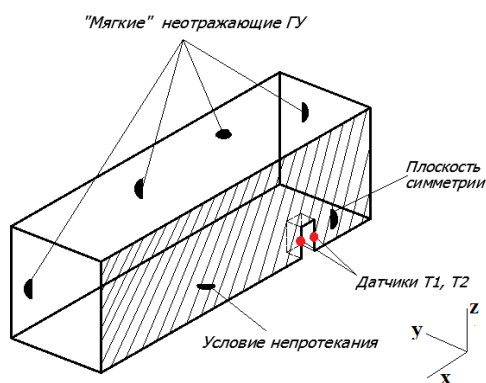


Рис. 4.1. Схема расчетной области Задачи 1 в разрезе (а), плане (б) и изометрии (в)

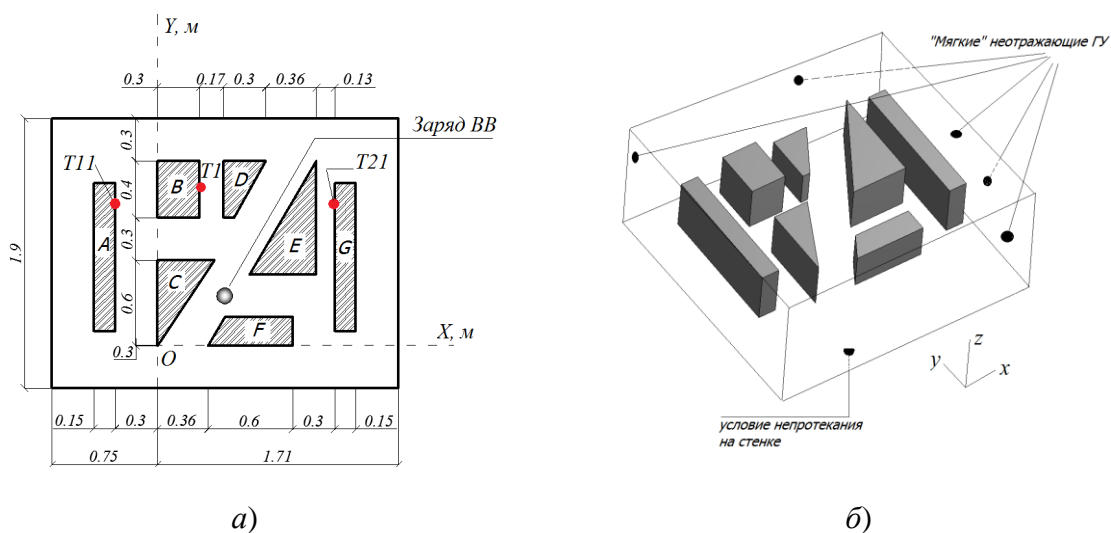


Рис. 4.2. Схема расчетной области Задачи 2 в плане (а) и в 3D (б)

Таблица 4.1. Координаты точек замеров давления

Датчик	Координаты, м		
	x	y	z
T1	0.3	1.1	0.105
T11	-0.3	1.0	0.075
T21	1.26	1.0	0.075

Моделирование выполнено в невязкой постановке. Движение воздушной среды описывается системой 3D уравнений Эйлера, дополненной уравнением состояния газа. Течение расширяющихся продуктов детонации ВВ описывается с помощью гидродинамической модели материала с использованием уравнения состояния Джона – Вилкинса – Ли (JWL):

$$P = A \left(1 - \frac{\lambda \eta}{R_1} \right) e^{-\frac{R_1}{\eta}} + B \left(1 - \frac{\lambda \eta}{R_2} \right) e^{-\frac{R_2}{\eta}} + \lambda \rho e, \quad (4.1)$$

где A, B, R_1, R_2, \square – эмпирические константы, значения которых приведены в Таблице 2; там же показаны значения e – удельной внутренней энергии и $\eta = \square/\square_0$ – относительной удельной плотности.

Таблица 4.2. Эмпирические константы уравнения (4.1)

Константа	A , кПа	B , кПа	R_1	R_2	\square	e , кДж/м ³	\square_0 , кг/м ³
Значение	$3.737 \cdot 10^8$	$3.747 \cdot 10^6$	4.15	0.9	0.35	$6.0 \cdot 10^6$	1630

Подложка и закрепленные на ней призмы предполагаются абсолютно жесткими. На твердых границах заданы условия непротекания, т.е. равенство нулю нормальной к границе компоненты скорости. На внешних границах расчетной области применены «мягкие» экстраполирующие граничные условия, обеспечивающие выход возмущений за границы области. Начальное распределение параметров воздушной среды соответствует нормальным атмосферным условиям: плотность $\rho_B = 1,225$ кг/м³, температура $T = 298,15$ К, статическое давление $P = 101325$ Па, теплоемкость $C_p = 1004$ Дж/кг·К.

Решение нестационарных 3D уравнений Эйлера выполнено с помощью метода конечных разностей. Интегрирование уравнений по времени осуществлялось с помощью явной схемы первого порядка с соблюдением условия устойчивости схемы по числу Куранта. Для аппроксимации уравнений использованы модифицированный метод Годунова [15, 16] и метод коррекции потоков FCT [17] второго порядка точности по пространству.

Поскольку на начальной стадии процесс детонации ВВ в открытом пространстве развивается симметрично, до того момента, как фронт УВ достигает поверхности ближайшей призмы, задача решается в двумерном осесимметричном приближении. Затем данные, полученные в двумерной задаче, интерполируются на трехмерную расчетную область, и моделируется распространение сформировавшейся воздушной УВ и ее взаимодействие с подложкой и призмами.

Результаты решения Задачи 1. На первом этапе была выполнена серия расчетов на равномерных сетках различного разрешения, параметры которых показаны в Таблице 4.3. Самая грубая из использованных расчетная сетка имела характерный масштаб $d = 0.01$ м и включала порядка 1 млн ячеек. Наиболее подробная расчетная сетка имела характерный масштаб ячейки $d = 0.005$ м во всех направлениях и включала около 7.5 млн ячеек.

Таблица 4.3. Данные о расчетных сетках для Задачи 1

№	d_x , см	d_y , см	d_z , см	N_x	N_y	N_z	$N_x \times N_y \times N_z$
1	1	1	1	260	60	60	9.36E + 05

2	0.5	1	1	520	60	60	1.872E + 06
3	0.25	1	1	1040	60	60	3.744E + 06
4	0.5	0.5	0.5	520	120	120	7.488E + 06

На рис. 4.3 показаны графики статического давления в точке T1, расположенной на наветренной стороне призмы, полученные на различных сетках в расчетах с использованием модификации схемы Годунова второго порядка точности и в эксперименте [13]. Точка T1 расположена на наветренной стороне призмы на высоте $h = 0.0915$ м от поверхности земли, что соответствует расположению датчика в эксперименте. Как видно из рис. 4.3, время прихода первичной УВ для решений на различных сетках существенно не отличается, однако решение, полученное на сетке 4, имеет наиболее близкие к экспериментальным значения пикового давления. Результаты, представленные в этом параграфе, получены на наиболее подробной сетке 4.

Полученный в расчетах режим распространения УВ согласуется с описанными в литературе. При распространении взрывная волна отражается от подложки и препятствий, что приводит к ее усилению. Поскольку взрыв произошел на некоторой высоте над поверхностью земли, при достижении земли взрывной ударной волной происходит отражение фронта сферической УВ. По мере распространения УВ угол, под которым волна подходит к поверхности, возрастает. В некоторый момент времени регулярный режим отражения изменяется на нерегулярный с образованием ножки Маха и тройной точки. Известно, что давление за прямым скачком (ножкой Маха) существенно выше, чем за косой ударной волной. Отраженные волны интерферируют между собой и движутся в направлении эпицентра, где в некоторый момент времени происходит «схлопывание» волн. В результате образуется фронт новой более слабой УВ, распространяющейся во внешнюю среду от эпицентра (второй фронт).

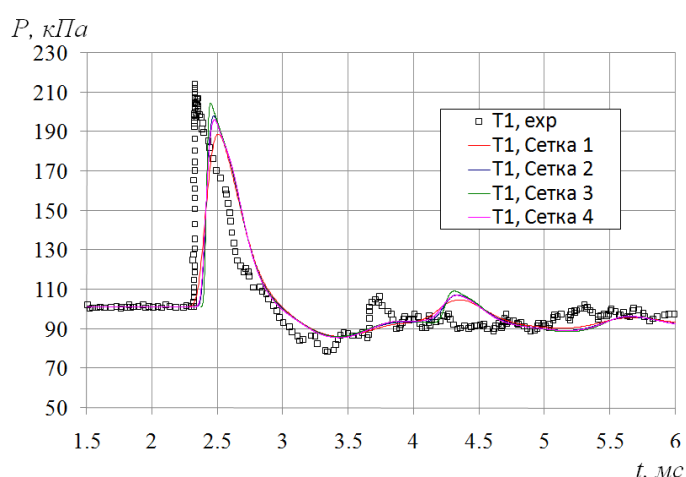


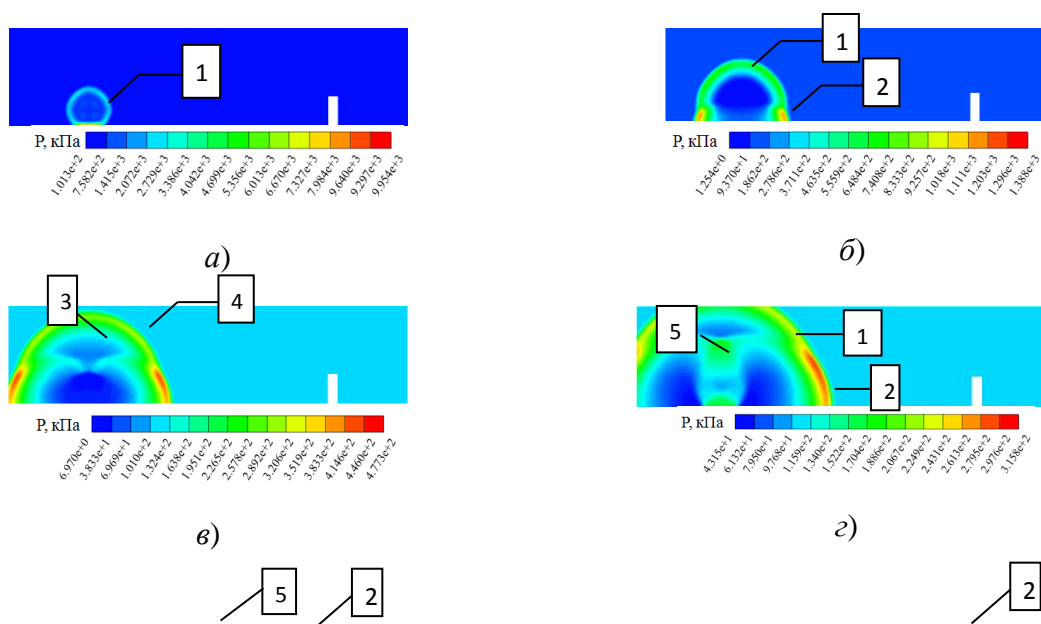
Рис. 4.3 Зависимости статического давления в точке T1 от времени, полученные в эксперименте [18] и в расчетах на различных сетках с использованием схемы Годунова второго порядка точности

Волновая картина взрывного воздействия осложняется многочисленными интерференционными явлениями между первичными, вторичными и отраженными фронтами, дифракцией и отражением УВ от подложки и призмы, что приводит к образованию вторичных пиков давления.

На рис. 4.4 приведены полученные в расчетах поля статического давления в плоскости симметрии в некоторые характерные моменты времени. Как видно из рис. 4.4, *а*, соответствующего моменту времени $t = 0.018$ мс, фронт первичной УВ (1) отражается от поверхности земли регулярным образом.

На рис. 4.4, *б* режим отражения УВ от подложки изменился на нерегулярный с образованием ножки Маха (2). Фронт волны, состоящий из участков первичной волны (1) и ножки Маха (2), распространяется в воздушной среде от эпицентра по направлению к призме. В это же время отраженные волны (3) и (4), исходящие из тройной точки маховской конфигурации, движутся к эпицентру (рис. 4.4, *в*), где после их взаимодействия (рис. 4.4, *г*) образуется фронт вторичной волны (5). На рис. 4.4, *д* показано распределение давления на более поздний момент времени, когда отраженная ударная волна приходит на стенку призмы.

В момент времени $t = 2.45$ мс (рис. 4.4, *е*) первичная УВ (2) приходит на фронтальную стенку призмы и отражается от нее ударной волной (6), что сопровождается резким увеличением статического давления. Далее давление на стенке призмы начинает падать и наступает «отрицательная» фаза, при которой статическое давление вблизи стенки опускается ниже 1 атм. Рис. 4.4, *ж*, *з* показывают дифракцию волны (2) на призме и распространение отраженной УВ (6) в направлении эпицентра. В дальнейшем отраженная УВ (6) и вторичная волна (5) интерферируют, что приводит к образованию новой системы ударных фронтов меньшей интенсивности, которая оказывает влияние на распределение давления на поверхности призмы.



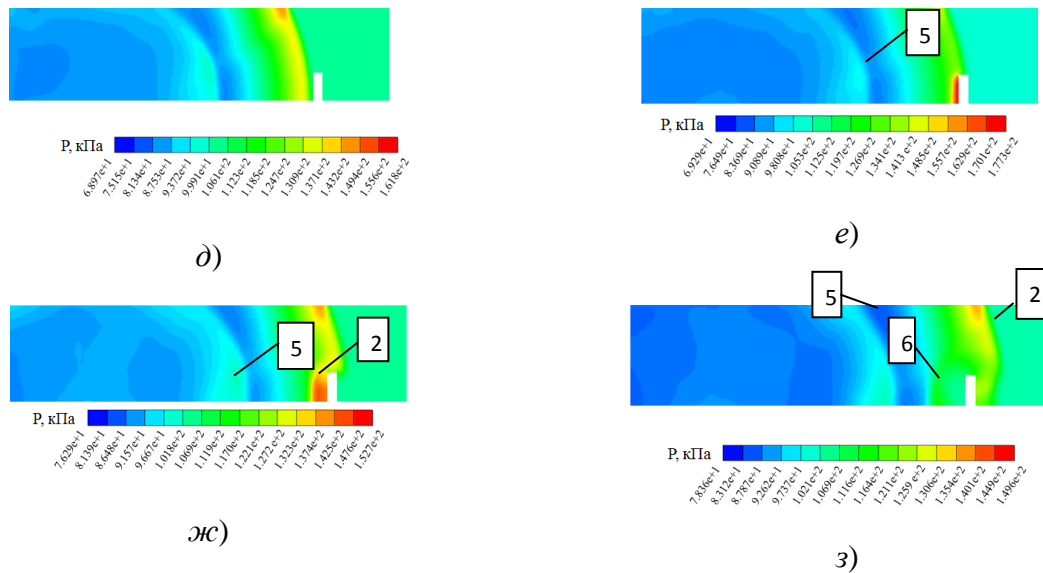


Рис. 4.4. Мгновенные поля статического давления в моменты времени: *a* – 0.018; *б* – 0.13; *в* – 0.36; *г* – 0.62; *д* – 2.32; *e* – 2.45; *ж* – 2.72 и *з* – 2.95 мс

Характер воздействия ударно-волновых структур на стенки призмы можно оценить по зависимости статического давления $P(t)$ и импульса $I(t)$. На рис. 4.5 показаны зависимости статического давления и импульса от времени в точках T1 и T2, полученные с использованием схемы Годунова второго порядка точности (1) и метода коррекции потоков FCT (2). На рис. 4.5 также представлены зависимости статического давления и эффективного импульса от времени для точек T1 и T2, полученные с помощью полуэмпирической функции CONWER, которая описывает зависимости параметров на ударной волне от времени и позволяет определить взрывную нагрузку на конструкцию. Однако функция CONWER не позволяет учитывать эффекты «затенения» ударной волны объектами, лежащими на пути ее распространения, и локальные эффекты ее отражения от элементов конструкции. Кроме того, область применения функции ограничена значениями приведенного расстояния Z (3.1): $0.178 < Z < 40.0$.

Как видно из рис. 4.5, *a*, на фронтальной поверхности призмы наблюдается несколько локальных максимумов давления. Первый пик $P_{\max} \approx 213$ кПа, обусловленный приходом основной УВ, наблюдается при $t \approx 2.45$ мс. Второй пик $P_{\max} \approx 115$ кПа при $t \approx 4.3$ мс обусловлен приходом УВ, образовавшейся в результате взаимодействия УВ 3 и 4 (см. рис. 4.4). Стоит заметить, что численные расчеты с использованием схемы Годунова несколько занижают пики давления на наветренной и подветренной сторонах призмы, а также дают задержку во времени прихода первого пика ударной волны на 0.13 мс в точках T1 и T2.

Зависимость статического давления от времени на подветренной стороне призмы изображена на рис. 4.5, *б*. Первый пик давления связан с воздействием обогнувшей призму первой УВ. Второй пик, обусловленный воздействием этой же УВ, отразившейся от подложки, количественно предсказывается обеими схемами с погрешностью. Следствием этого является небольшое занижение эффективного импульса в точке T2, при этом предсказание этого параметра в точке, расположенной на фронтальной поверхности, можно считать удовлетворительным. Сравнение графиков показывает, что расчет с использова-

нием метода коррекции потоков позволяет более точно предсказать пиковое давление и эффективный импульс по сравнению со схемой Годунова и позволяет с большей точностью разрешить вторичные максимумы давления. Расхождения с экспериментом связаны, в первую очередь, с диссипативными свойствами использованных разностных схем. Тем не менее, количественное сравнение расчетных и экспериментальных данных, приведенное в таблице 4.4, можно считать вполне удовлетворительным.

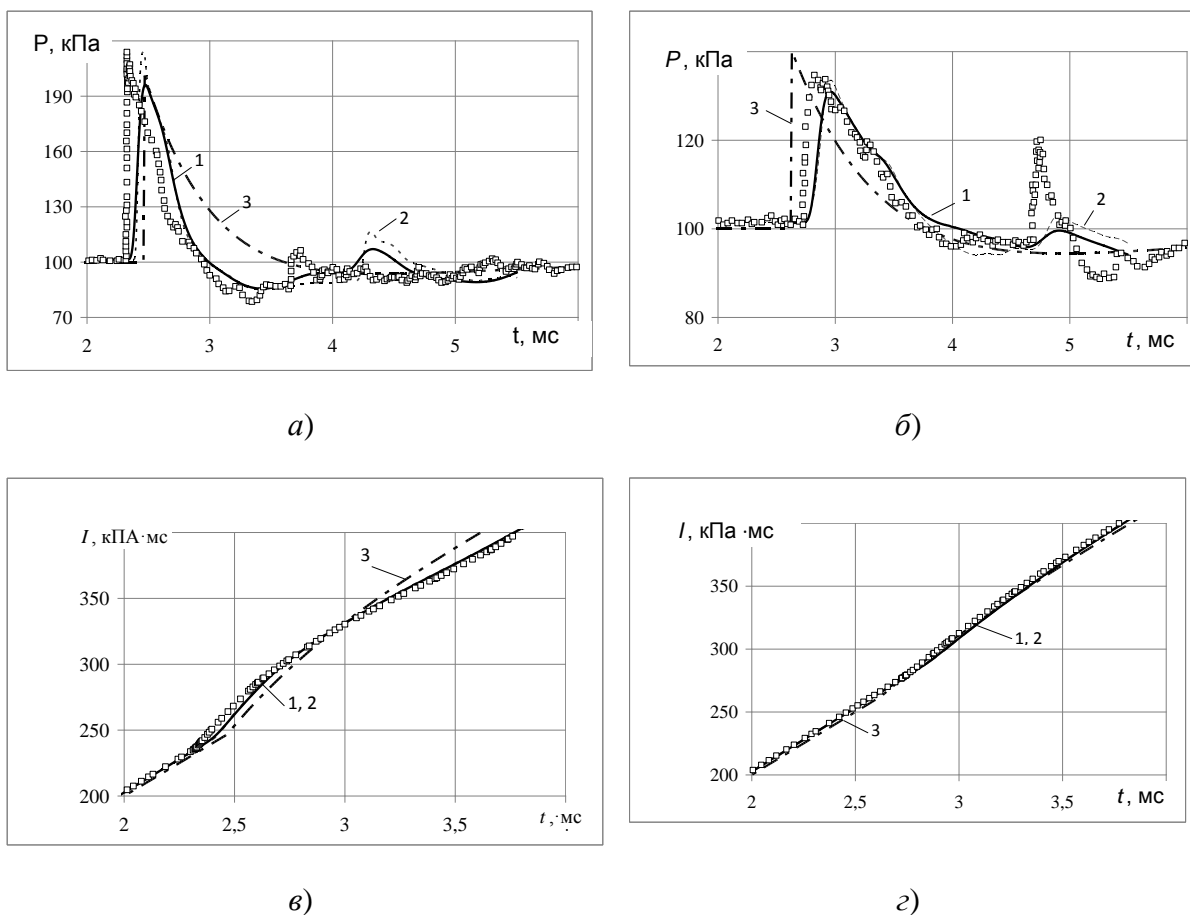


Рис. 4.5. Зависимости статического давления (а, б) и импульса (в, г) в точках Т1 (а, в) и Т2 (б, г), полученные в эксперименте (символы) и в расчете по схеме Годунова (1), схеме FCT (2) и с помощью функции CONWER (3)

Таблица 4.4. Времена прихода УВ и максимальные значения статического давления

	Т1		Т2	
	$P_{st,max}$, кПа	t_1 , мс	$P_{st,max}$, кПа	t_2 , мс
Эксперимент [22]	112	2.32	34	2.82
Схема Годунова	94	2.46	31	2.95
Метод FCT	113	2.45	34	2.95

CONWER	101	2.47	40	2.63
--------	-----	------	----	------

Результаты решения Задачи 2. Структура ударно-волнового течения в окрестности комплекса призм, восстановленная на основе мгновенных полей статического давления на характерные моменты времени показана на рис. 4.6, а зависимости статического давления от времени в характерных точках замеров T1, T11 и T21 – на рис. 4.7.

На рис. 4.6 (а–з) показаны мгновенные поля статического давления на характерные моменты времени t в горизонтальном сечении $h = 0.105$ м. Сферическая УВ1, сформированная в результате высвобождения энергии при детонации ВВ, распространяется в свободном пространстве. В момент времени $t \approx 0.1$ мс она приходит на угол призмы F и отражается от него. Максимальное давление во фронте УВ1 в момент отражения составляет ≈ 6 МПа. Через некоторое время УВ1 приходит на стенку призмы C и острый угол призмы E . Отражение УВ1 от стенок призм E и F носит нерегулярный характер, что приводит к формированию ножек Маха и тройных точек 3, 4 и 5 (рис. 4.6, б). При отражении УВ1 от стенки призмы C формируется УВ2, которая движется по направлению к эпицентру взрыва. Отраженная от стенок призмы F УВ6 (рис. 4.6, в) в момент времени $t \approx 0.4$ мс начинает взаимодействовать с отраженной УВ2 и образует ударно-волновую структуру 7 (рис. 4.6, з). При этом УВ2 огибает острый угол здания C , взаимодействуя с первичной УВ1 (рис. 4.6, в, з).

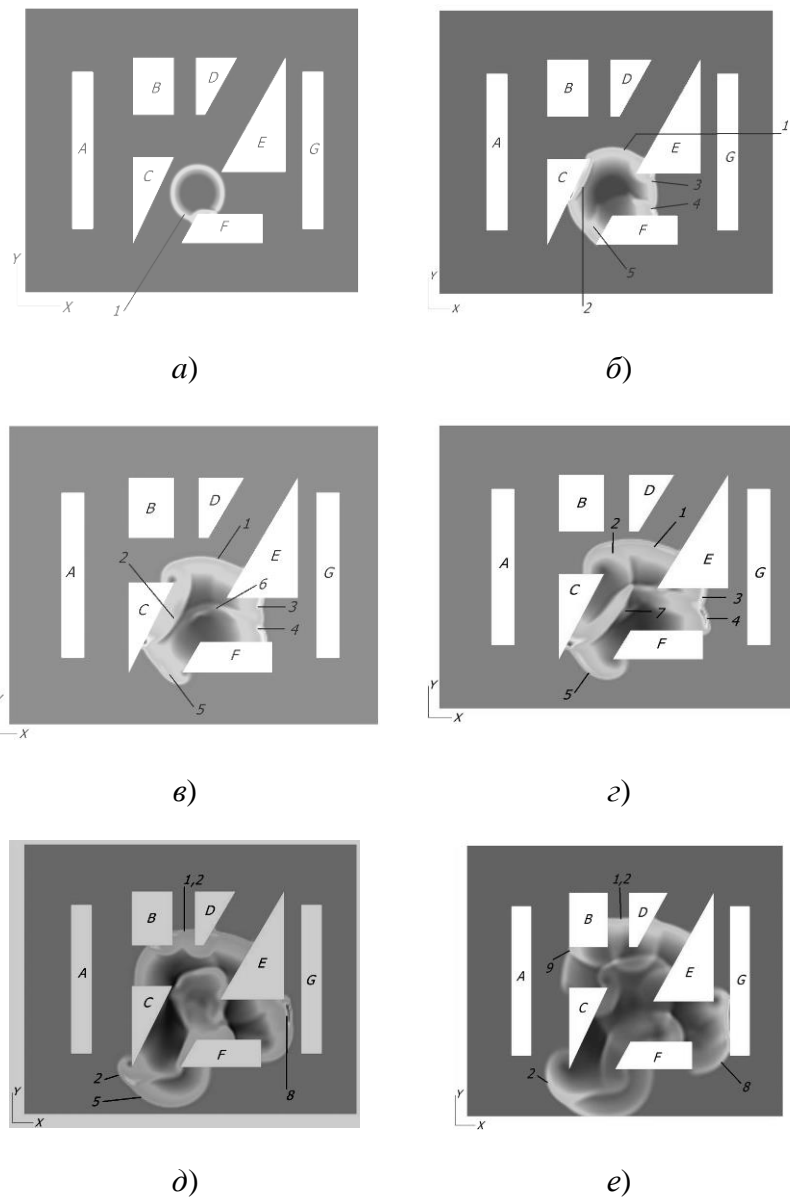
В относительно узком канале между призмами E и F в момент времени ≈ 0.4 мс начинается интерференция структур 3 и 4. УВ5 движется от эпицентра взрыва и огибает острую кромку призмы F (рис. 4.6, з). В момент времени $t \approx 0.5$ мс УВ (1, 2), образованная в результате взаимодействия УВ1 и УВ2, приходит на стенку призмы D и через некоторое время на стенку призмы B , в результате чего происходит формирование более мелких отраженных УВ, фронты которых движутся по направлению к эпицентру взрыва (рис. 4.6, д). Сформировавшийся в результате взаимодействия УВ3 и УВ4 фронт УВ8 движется по направлению к стенке призмы G .

С другой стороны, УВ2 после отражения от поверхности призмы C взаимодействует с УВ5. В эпицентре взрыва возникает сложная ударно-волновая структура, сформированная в результате взаимодействия УВ7 и УВ, сформировавшихся из тройных точек 3 и 4. В момент времени $t = 0.9$ мс ударно-волновая структура 1, 2 приходит в точку T1 (рис. 4.6, е) на призме B . УВ8 приходит на стенку призмы G и отражается от нее регулярным образом (рис. 4.6, е). В это же время УВ9, сформировавшаяся в результате нерегулярного отражения УВ2 от стенки призмы B , движется по направлению к стенке призмы A .

На рис. 4.6, ж показано мгновенное распределение относительного статического давления на момент времени $t \approx 1.3$ мс. Как видно из рисунка, при отражении от стенки призмы G УВ8 образуется УВ10, которая распространяется к эпицентру взрыва, где взаимодействует с более слабой вторичной волной 7. УВ8 распространяется между призмами E и G , многократно отражаясь от их стенок. Это обуславливает пики статического давления в точке T21, расположенной на стенке призмы G , в моменты времени $t = 2$ и 2.5 мс (рис. 4.6, д). При этом за УВ8 в этой зоне формируется зона разрежения с падением давления ниже одной атмосферы (до 43 кПа).

В момент времени $t = 1.7$ мс УВ9 приходит в точку Т11 на стенке призмы А, что сопровождается увеличением избыточного давления в этой точке до 165 кПа (рис. 4.6, з). В точку Т1 на стенке здания В в этот же момент времени приходит вторичная УВ11.

Серия небольших локальных пиков в точке Т1 (рис. 4.6, а) связана с приходом слабых вторичных УВ11, возникших в результате интерференции УВ7 и отраженных от стенок призм В и D слабых ударных волн (рис. 4.6, з). На более поздних этапах времени наблюдаются многократные переотражения, дифракции и интерференции ударных волн, что приводит к возникновению локальных пиков нагрузки на стенки призм и ряда локальных зон разрежения за фронтами ударных волн (рис. 4.6, и, к).



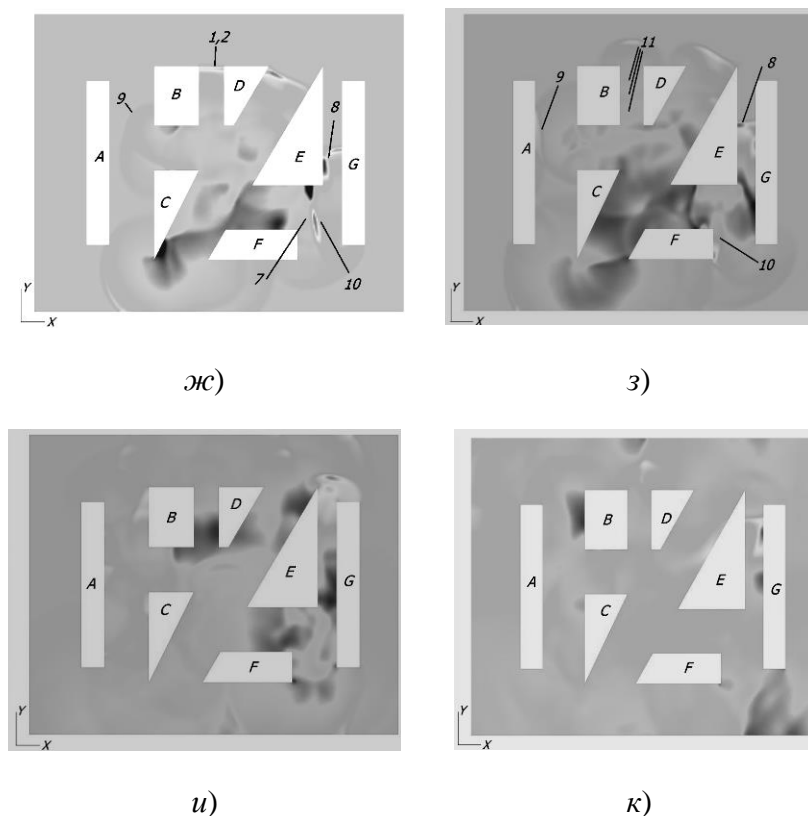


Рис. 4.6. Мгновенные поля статического давления в моменты времени: *a* – 0.1; *б* – 0.2; *в* – 0.3; *г* – 0.4; *д* – 0.7; *e* – 0.9, *ж* – 1.3; *з* – 1.7; *и* – 2.9; *к* – 4.9 мс

Далее проведено сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными [14] по зависимостям статического давления (рис. 4.7, *a*, *в*, *д*) и эффективного импульса (рис. 4.7, *б*, *г*, *e*) от времени для трех точек T1, T11, T21, расположенных на стенках призм B, A и G соответственно.

Символы на рис. 4.7 соответствуют данным эксперимента, линиями показаны результаты расчетов по схемам FCT и по схеме Годунова. Обе схемы позволяют качественно воспроизвести характер изменения ударно-волновой нагрузки на стенки призм, однако схема коррекции потоков, как и в предыдущих расчетах, существенно лучше предсказывает пиковые значения нагрузки. Для всех точек численные расчеты хорошо предсказывают фазу разрежения за фронтом ударных волн.

Как показывает рис. 4.7, *a*, на котором представлены распределения статического давления в T1, максимальные значения избыточного давления, полученные по схемам Годунова и FCT, составляют 200 и 260 кПа соответственно. Максимальное значение избыточного давления в эксперименте для этой точки равно примерно 300 кПа.

Для точек T1 и T21 фаза разрежения носит продолжительный характер (≈ 1.5 мс для T1 и ≈ 1.7 мс для T21). Для точки T21 амплитуда давления в отрицательной фазе существенна (≈ 60 кПа) и сопоставима с пиковым значением нагрузки (≈ 80 кПа), связанным с приходом УВ8 на стенку здания G (рис. 4.6, *з*). Наличие фазы разрежения с существенно

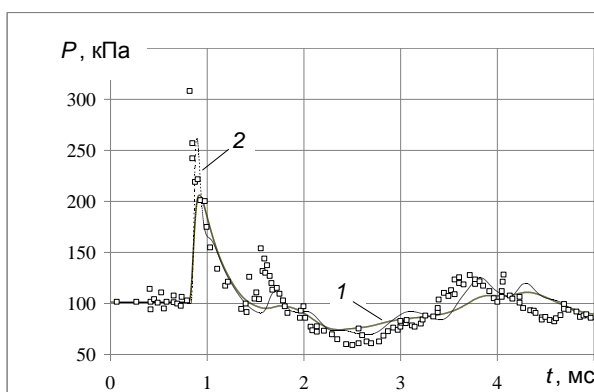
более низкими давлениями относительно 1 атм является неблагоприятным для строительного объекта и в ряде случаев может приводить к «выталкиванию» оконных и дверных проемов, срыву и разрушению кровли, опор.

Импульсная нагрузка, приходящаяся на стенки призм в рассматриваемых точках, показана на рис. 4.7, б, г, е. Интервалы эффективного действия на стенки призм А, В и G включают фазы сжатия и разрежения волн, приходящихся на стенки.

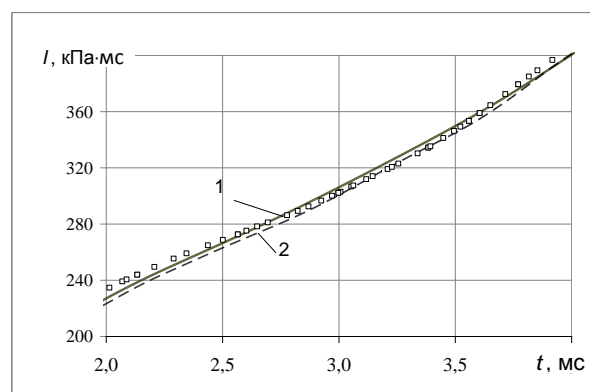
Таким образом, представленные результаты расчетов позволяют подробно проанализировать сложную волновую структуру течения, образовавшуюся в результате детонации заряда конденсированного ВВ. Результаты расчетов удовлетворительно совпадают с экспериментальными данными, что дает основание для использования описанных выше методов математического моделирования для прогнозирования ударно-волновых нагрузок на стенки зданий и сооружений в условиях плотной городской застройки.

Сопоставление расчетных данных для случаев 1 и 2 с Р-І диаграммой (рис. 4.8) показало, что графики $P(t)$, построенные для точки Т1 (случай 1) и Т21 (случай 2) захватывают области, соответствующие слабым и средним разрушениям конструкции. Графики, построенные для остальных точек, захватывают только область слабых разрушений.

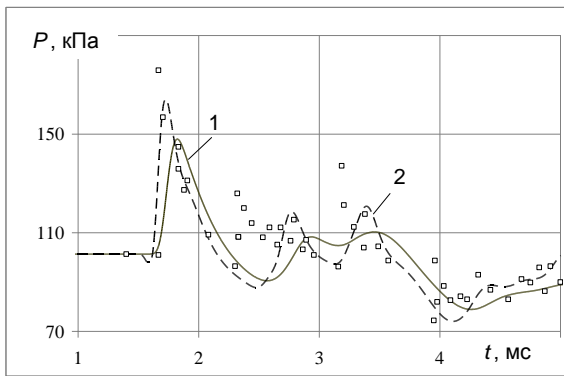
Выводы. Таким образом, оттестирована математическая технология решения задач о взрывном воздействии на окружающую среду, моделирующую городскую застройку. Выявлена газодинамическая структура интерференционных волн и проведено сопоставление полученных численно нагрузок на призмы с замеренными экспериментально, показавшее неплохое воспроизведение первого пика давления и некоторую погрешность в предсказании вторичных пиков. Показано, что эмпирическая функция *CONWEP* не воспроизводит «отрицательную» фазу воздействия, не учитывает эффекты затенения и некорректно предсказывает время прихода УВ на подветренную сторону призмы и вторые пиковые значения ударно-волновой нагрузки. Сопоставление расчетных данных с Р-І диаграммой позволяет определить области возможных разрушений объектов.



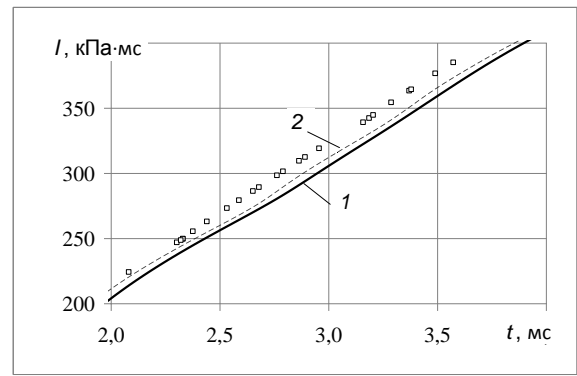
а)



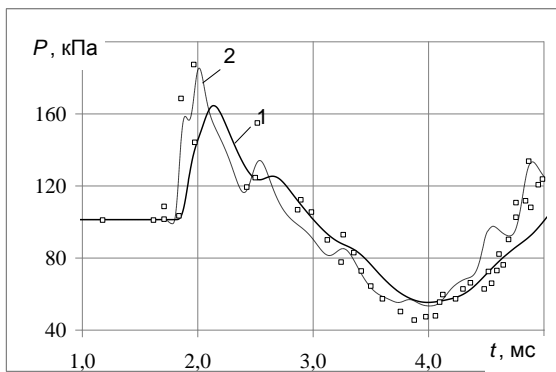
б)



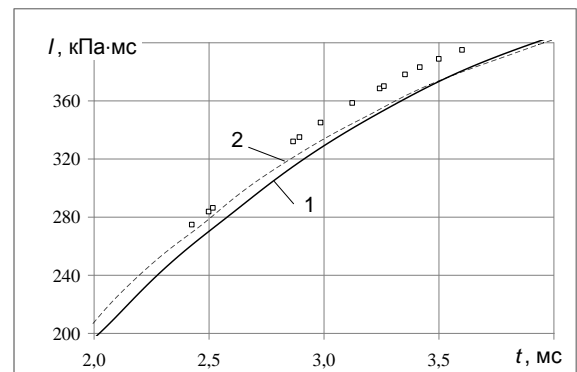
в)



з)



д)



е)

Рис. 4.7. Зависимости статического давления (а, в, д) и эффективного импульса (б, з, е) в точках Т1 (а, б), Т11 (в, з) и Т21 (д, е), полученные в эксперименте (символы), по схеме Годунова (1) и методу FCT (2)

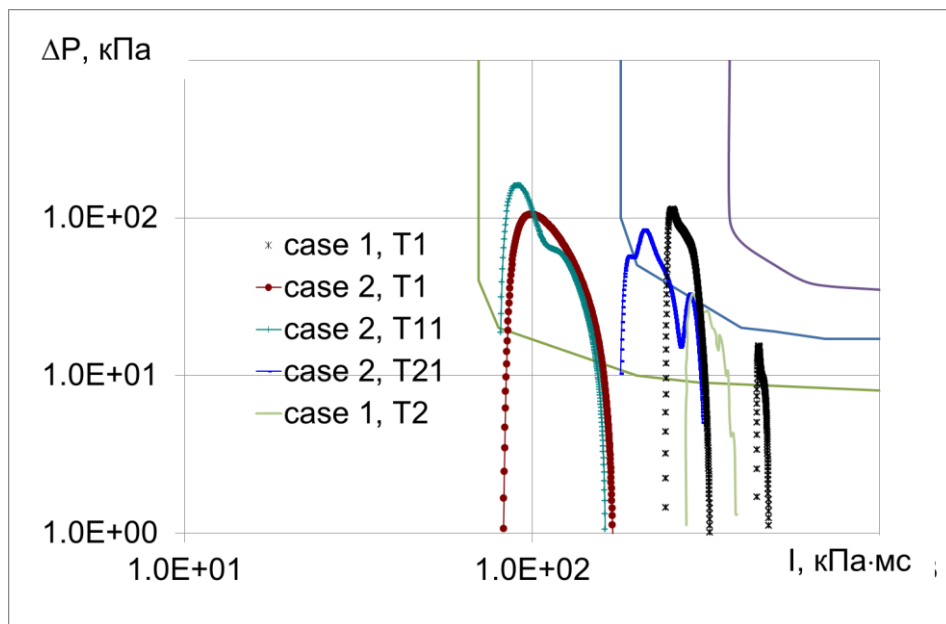


Рис. 4.8. P-I диаграмма нагрузок для различных точек случаев 1 и 2

4.2. Исследование проникновения и смешения пульсирующих струй в поперечном сверхзвуковом потоке

При моделировании сверхзвуковых камер сгорания важным этапом является исследование процессов смешения различных газов. В работе [1] было показано, что улучшение смешения может быть достигнуто при использовании пульсационного режима инъекции газов. Данная работа является продолжением совместных расчетных и экспериментальных исследований характеристик смешения при высоких скоростях [2].

В работе представлены результаты совместных расчетных и экспериментальных исследований нестационарной инъекции струи в сверхзвуковой поток. В качестве источника нестационарной струи использовались 2D и 3D модели генератора Гартмана. Основная цель исследований: оценка влияния геометрии генератора и внешних условий на структуру течения и частотные характеристики. 2D экспериментальная модель представляет собой плоскую пластину с острой передней кромкой шириной 100 мм. В центре пластины установлен генератор (рис.1, а). 3D модель генератора имела три круглых сопла и резонаторы круглого поперечного сечения (рис.1, б). Численное моделирование было проведено для различных величин полного давления (P_0), чисел Маха внешнего потока и с инъекцией различных газов.

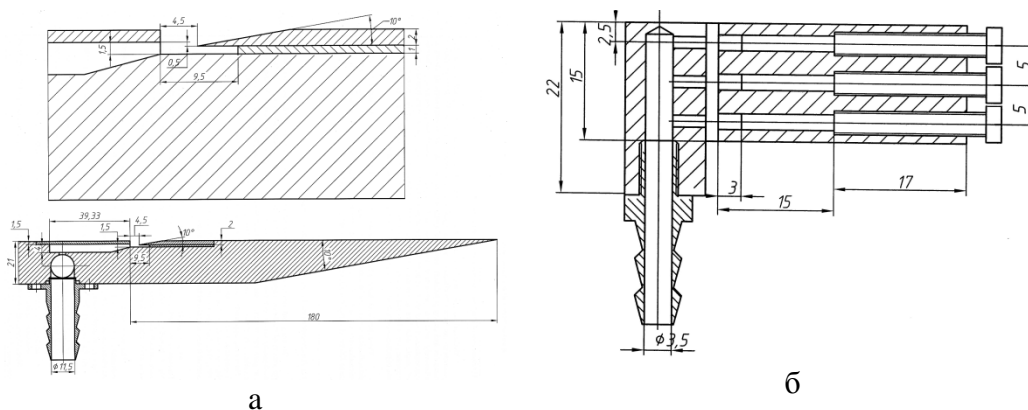


Рис. 1: 2D (а) и 3D (б) экспериментальные модели

Численное моделирование было проведено в программном комплексе ANSYS Fluent [3] на основе нестационарных осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса. Закрытие уравнений проводилось с помощью $k-\omega$ SST модели турбулентности. Для аппроксимации по времени используется неявная схема первого порядка, для пространственной аппроксимации конвективных членов применяется схема AUSM высокого порядка. На входе расчетной области задавались статическое давление, число Маха и статическая температура. На стенках использовались условия постоянства температуры ($T_w=300\text{K}$) и условия прилипания для скорости (рис. 2).

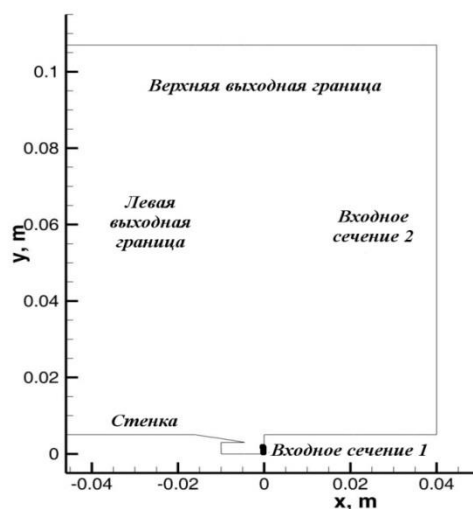


Рис.2. Расчетная область задачи

На начальном этапе было исследовано звуковое истечение струи воздуха в затопленное пространство. В этом случае нестационарное поведение струи внутри трубки Гартмана приводило к возникновению акустического поля. Быстрое преобразование Фурье сигнала массового расхода через выходные границы позволяло определить частотные характеристики процесса. Сравнение расчетных и экспериментальных результатов по частотным характеристикам показало хорошее соответствие (рис. 2).

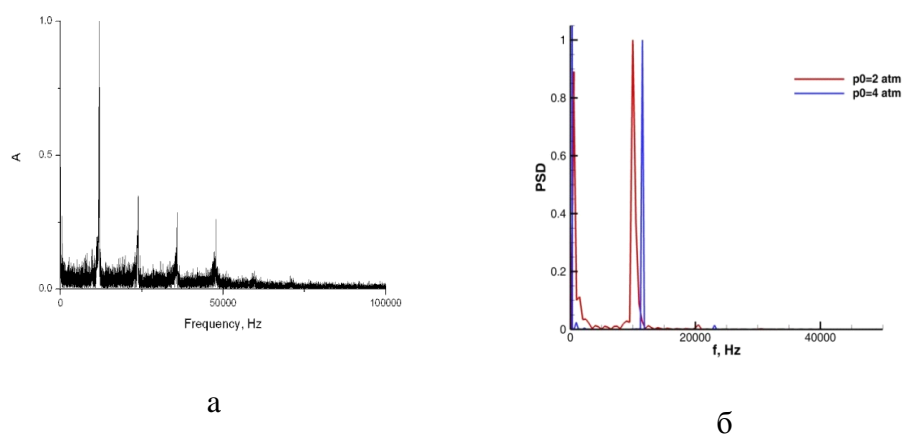


Рис. 2: Распределение спектральной плотности сигнала для дозвуковой затопленной струи воздуха: эксперимент (а), расчетные данные (б)

На рис. 3 представлены поля давления, отображающие эволюцию струи воздуха истекающей в затопленное пространство.

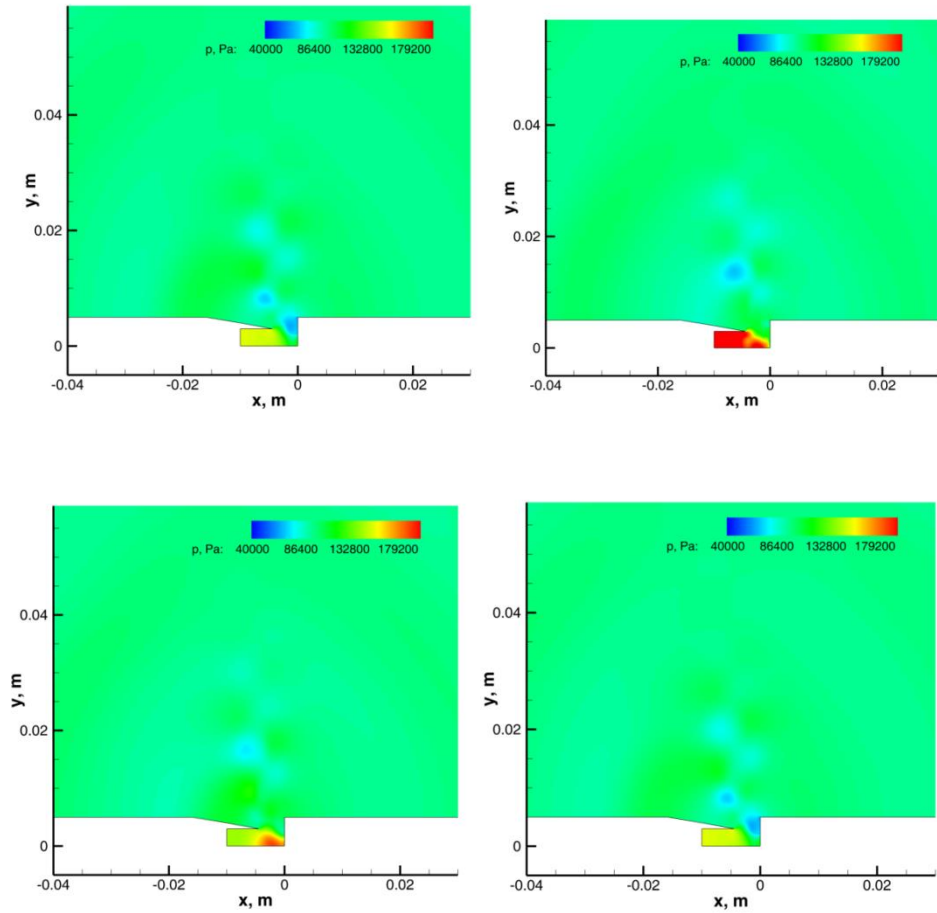


Рис. 3. Эволюция струи воздуха, истекающей в затопленное пространство, на примере полей давления

Численное и экспериментальное распределение спектральной плотности сигнала для звуковой струи, вдуваемой в сверхзвуковой ($M_\infty=3$) внешний поток показано на рис. 3. Частота основного течения в расчетах достигает 11 кГц (рис. 4, а). Результаты эксперимента демонстрируют две основные частоты в 9 и 16 кГц (рис. 4, б).

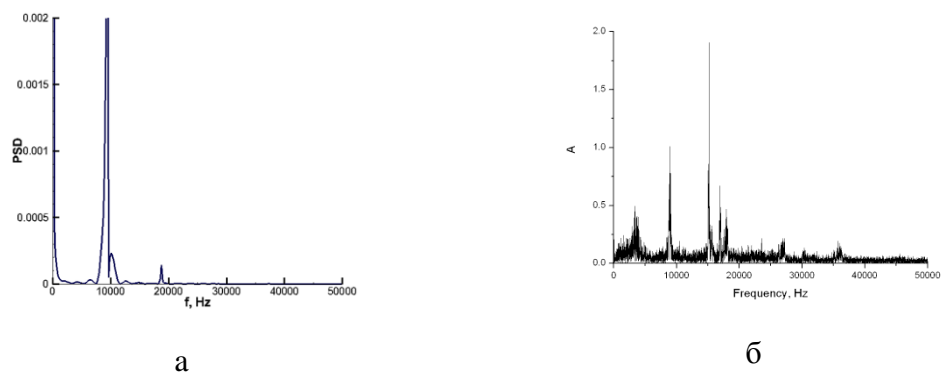


Рис.4: Распределение спектральной плотности сигнала для звуковой струи воздуха, инжектируемой во внешний сверхзвуковой поток: расчетные данные (а), эксперимент (б)

На рис.5 представлены результаты об эволюции струи гелия, истекающей в сверхзвуковой поток с числом Маха $M=1.1$

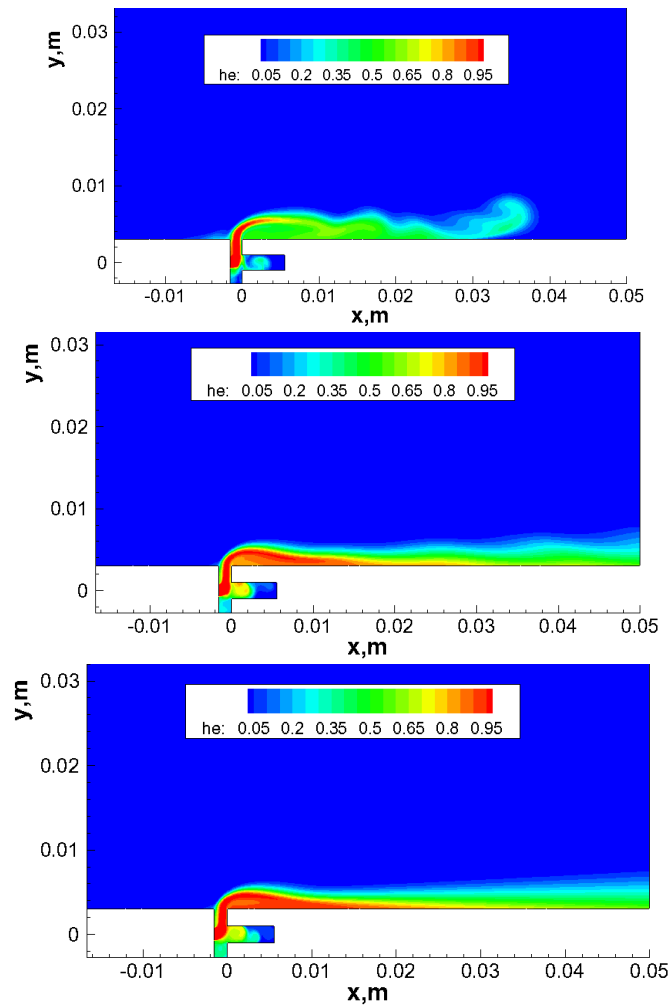


Рис. 5. Эволюция струи гелия, истекающей в сверхзвуковой поток с числом Маха $M=1.1$: массовая концентрация гелия для модели блочного генератора Гартмана с длиной резонатора $L=5.5$ мм

Выводы

Полученные в данной работе результаты позволяют оценить влияние пульсационного режима инъекции струи на эффективность смешения на различных расстояниях вниз по потоку от области инъекции. По результатам расчетов было показано, что наличие внешнего сверхзвукового течения не приводит к значительным изменениям частотных характеристик по сравнению со случаем инъекции в затопленное пространство. Показано, что использование блочного генератора Гартмана позволяет получить пульсации давления в диапазоне от 10 до 100 кГц.

Проведенные расчетные и экспериментальные исследования для различных длин резонатора с инъекцией струи воздуха в сверхзвуковой внешний поток показали, что изменение длины резонатора не приводит к значительным изменениям частотных характеристик. Основная частота составляла около 10 кГц. При инъекции струи гелия в сверхзвуковой поток происходит значительное увеличение частоты пульсаций давления до 40 кГц.

Для всех рассматриваемых случаев получено удовлетворительное согласование расчетных и экспериментальных данных по частоте пульсаций

Список литературы

1. A.D. Cutler, G.C. Harding, and G.S. Diskin, High Frequency Supersonic Pulsed Injection. *AIAA Paper* 2001-0517, January 2001.

2. M.A. Goldfeld, N.N. Fedorova, I.A. Fedorchenko, K.Yu. Timofeev, and Yu.V. Zhakharova Experimental and numerical study of pulsating transversal jets // 5th European Conference for Aeronautics and Space Sciences, Munich, Germany, 1-5 July 2013 Abstracts, DVD-R. ISBN 978-84-941531-0-5.
3. ANSYS www.ansys.com

4.3 Влияние конфигурации уступа на воспламенение подготовленной водородно-воздушной смеси в расширяющемся канале

В работе представлены результаты совместных экспериментальных и численных исследований высокоскоростных высокоэнтальпийных течений водородно - воздушной смеси в канале с резким расширением (уступом). Рассмотрено 3 конфигурации канала: прямой уступ (базовая), уступ с предварительным сжатием, уступ с предварительным расширением. Для различных конфигураций канала исследован процесс воспламенения подготовленной стехиометрической водородной смеси. Показано, что на воспламенение смеси оказывают существенное влияние конфигурация уступа и температурные условия на стенках канала. В частности, для условий «холодной» стенки, реализующихся в установках кратковременного действия, область воспламенения смещается вниз по потоку.

В эксперименте исследовались три конфигурации обратного уступа (рис. 6): 1 – без предварительного воздействия, 2 – с предварительным сжатием, 3 – с предварительным расширением, для следующих значений геометрических параметров: $h_1=16$ мм и $h_2=22$ мм, $h_3=10$ мм, $a=8^\circ$.

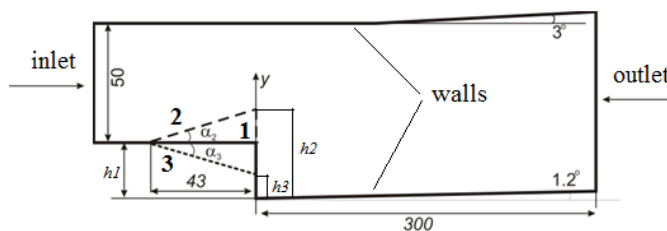


Рис. 6. Конфигурация уступа

Расчеты плоских течений были выполнены с помощью коммерческого пакета ANSYS CFD (Fluent). Использовались полные осредненные уравнения Навье-Стокса, дополненные SST $k-w$ моделью турбулентности.

Для исследования задачи воспламенения водорода в канале с уступом использовалась кинетическая схема [1] содержащая 38 реакций для 8 компонент: H_2 , O_2 , H_2O , OH , H , O , HO_2 , H_2O_2 . Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными показало, что данная кинетическая схема правильно предсказывает время задержки воспламенения в диапазоне температур $1000 < T < 2500K$.

Предварительно были проведены расчеты течений в рассматриваемых каналах без учета химических реакций, что позволило детально проанализировать волновую и вихревую структуры, а также оценить влияние параметров набегающего потока и характеристик турбулентного пограничного слоя. Полученные характеристики течений для трех конфигураций уступа были использованы для дальнейшего исследования процесса воспламенения предварительно перемешанной стехиометрической водородной смеси. Для трех конфигураций уступа с входной границы расчетной области осуществлялась инъекция водородно-воздушной смеси, и исследовался процесс воспламенения и распространения пламени по каналу. Температура стенок канала составляла $T_w=300$ К.

На рисунке 7 представлены концентрации воды для трех исследуемых конфигураций уступа. Из рисунков видно, что для прямого уступа (конфигурация 1) локальное воспламенение смеси происходит только на нижней стенке канала вблизи выходной границы

расчетной области (рис. 7, а). Для данной конфигурации уступа не удалось добиться распространение пламени вверх по потоку и по всей ширине канала.

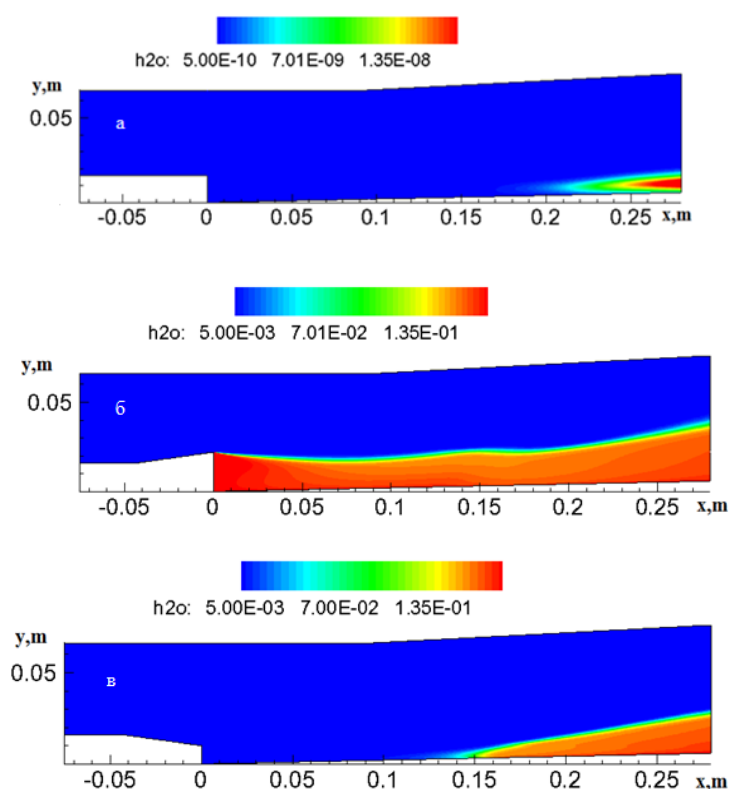


Рис. 7. Поля концентраций воды для трех конфигураций уступа

Для конфигурации 2 воспламенение смеси происходит вблизи выходной границы расчетной области на нижней стенке канала, а затем фронт пламени распространяется вверх по потоку и охватывает всю рециркуляционную область за уступом (рис. 7, б). При этом происходит увеличение статического давления (рис. 8, а) и статической температуры (рис. 9, а) на нижней стенке канала по сравнению со случаем без инъекции. Кроме того, для конфигурации 2 наблюдается существенное увеличение статического давления (рис. 8, б) и статической температуры (рис. 9, а) на верхней стенке канала в области $x \approx 0.05$, однако это не приводит к воспламенению смеси в данной области, что подтверждает распределение концентраций воды (рис. 7, б).

Для случая с предварительным расширением (конфигурация 3) воспламенение смеси осуществлялось на нижней стенке канала за областью замыкающего скачка $x > 0.15$ м (рис. 7 в). Однако в данном случае не наблюдалось распространение пламени по всей длине канала.

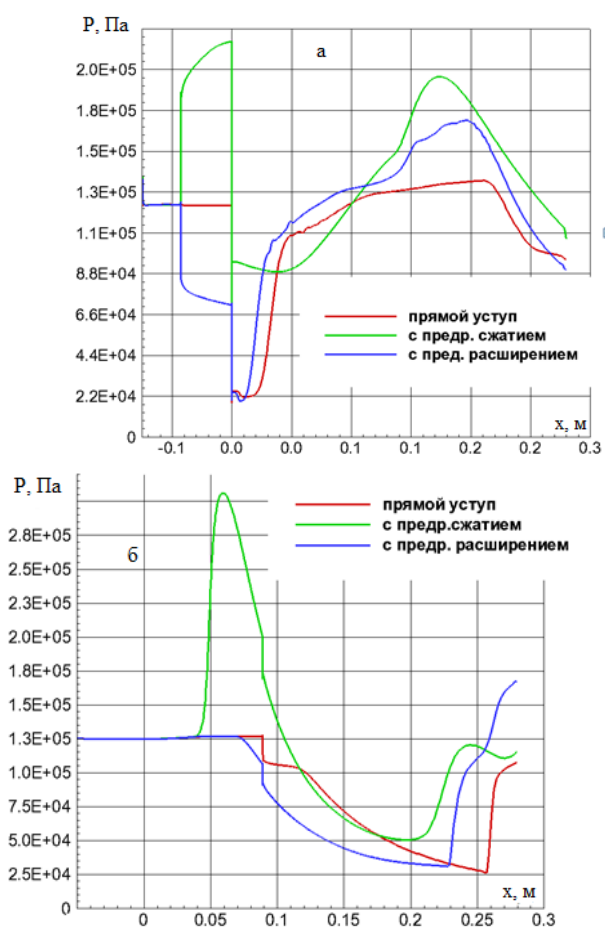


Рис. 8. Распределение статического давления на нижней (а) и верхней (б) стенках канала для 3-х конфигураций уступа с учетом массоподвода

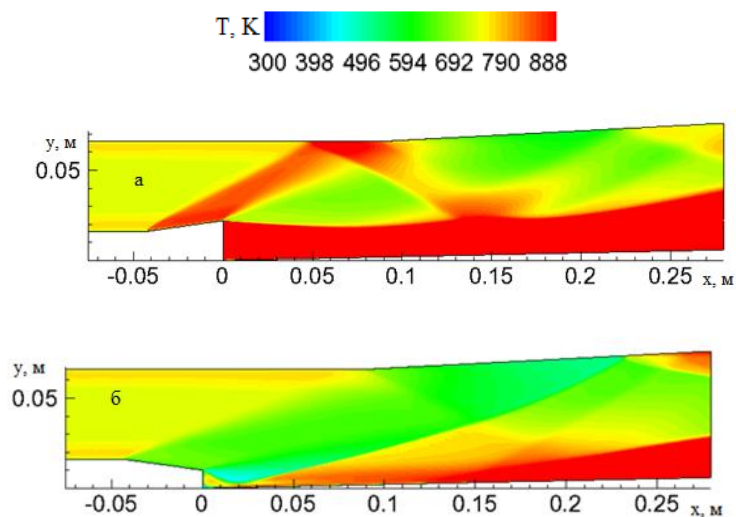


Рис. 9. Поля статической температуры для конфигураций 2 (а) и 3 (б) с учетом массоподвода

Результаты расчета показали, что для конфигурации уступа с предварительным сжатием (конфигурация 2) горение распространяется по всей длине канала. Для остальных

конфигураций были получены только локальные зоны воспламенения. Для рассматриваемых параметров внешнего потока не удалось получить устойчивое горение по всей длине и ширине канала, что может быть связано с условием холодной стенки. Для достижения воспламенения и устойчивого горения по всей ширине канала необходимо увеличивать статическую температуру в потоке.

Выводы

Численно продемонстрировано влияние конфигурации уступа на процесс смешения и воспламенения водородно-воздушной смеси в рассматриваемом канале.

Проведена детальная оценка начальных параметров воздушного потока, а также параметров струи на формирование ударно-волновой структуры в рассматриваемом канале.

На основе полученных результатов даны рекомендации по модификации конфигурации уступа с целью получения эффективного смешения и воспламенения.

Список литературы

1. Tien J. H., Stalker R. J. Release of Chemical Energy by Combustion in a Supersonic Mixing Layer of Hydrogen and Air // Combustion and Flame N 130, 2002, pp. 329-348.

4.4. Расчет истечения и воспламенения струи силана

В данном разделе представлены результаты по моделированию истечения в затопленное пространство и воспламенению струи силана. Расчетная область задачи, представленная на Рис.10. Задача решается в осесимметричной постановке. Линия осевой симметрии обозначена цифрой 2. На границе 1 задается скорость выдува силана, на границе 3 стенка, для получения распределения параметров. На выходной границе 4 задаются неотражающие условия. Скорости истечения силана и диаметр среза трубки варьируются в соответствии с экспериментальными значениями.

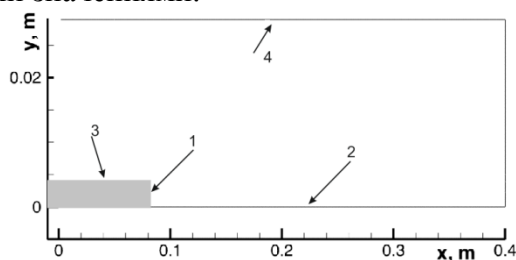


Рис. 10. Схема расчетной области

Для расчета истечения силана использовались полные уравнения Навье-Стокса без учета турбулентной составляющей, дополненные уравнением сохранения для массовой концентрации силана. Для верификационного расчета привлекалась модель турбулентности $k-\omega$ SST, замыкающая систему полных осредненных уравнений Навье-Стокса. Во всех расчетах применялось уравнение состояния идеального газа. Для вычислений использовался программный расчетный комплекс ANSYS FLUENT 14.5. Расчеты были проведены для диаметров инжектируемого отверстия $d=3.86$ и $d=4.32$ мм и скоростях выдува силана 1-6 м/с.

На рисунке 11 представлены поля скорости для случая $d=3.86$ для различных скоростей выдува силана. Из рисунков видно, что изменение скорости выдува струи приводит к существенному изменению вихревой структуры течения.

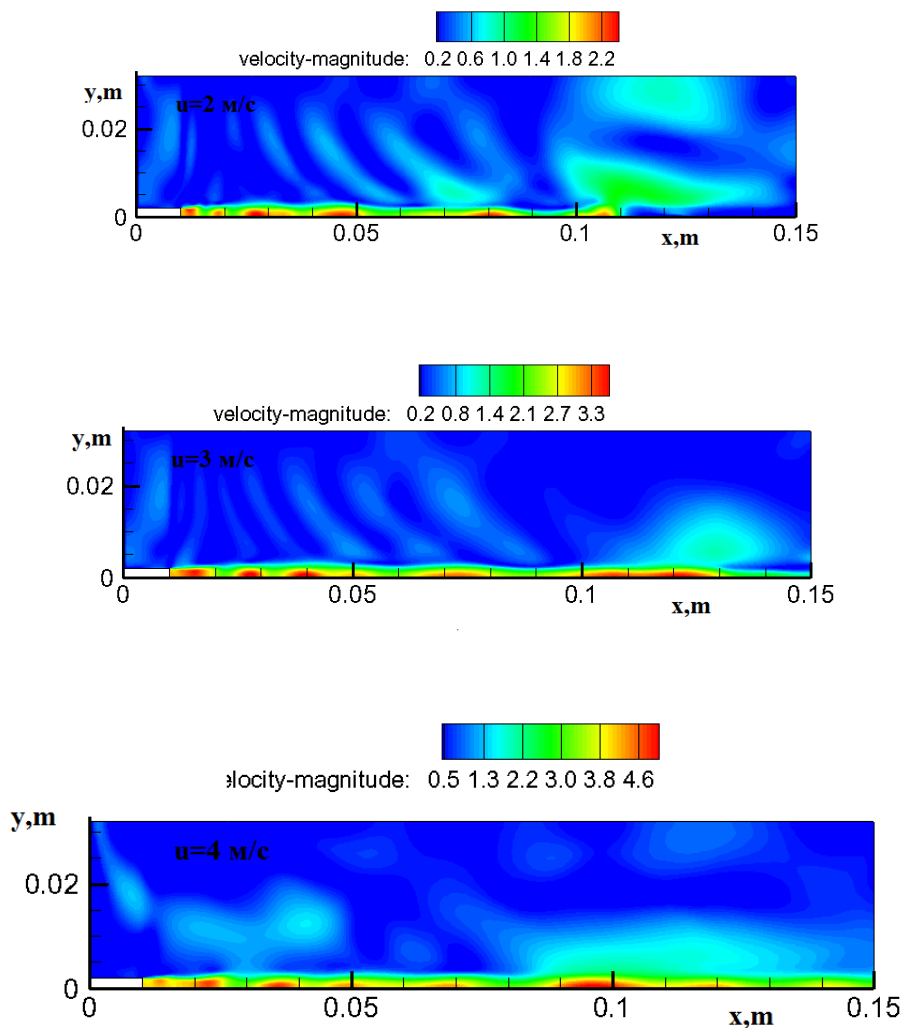


Рис. 11. Поля скоростей при различных скоростях выдува струи силана

По результатам расчетов была определена дальность струи. Дальность струи определялась как точка в струе где скорость падает на 90 % (рис. 12.). Для этого были построены графики скорости и давления в различных поперечных сечениях вниз по потоку. Колебательный профиль скорости (рис. 12) может быть обусловлен вихрями, срывающимися с контактной границы струи.

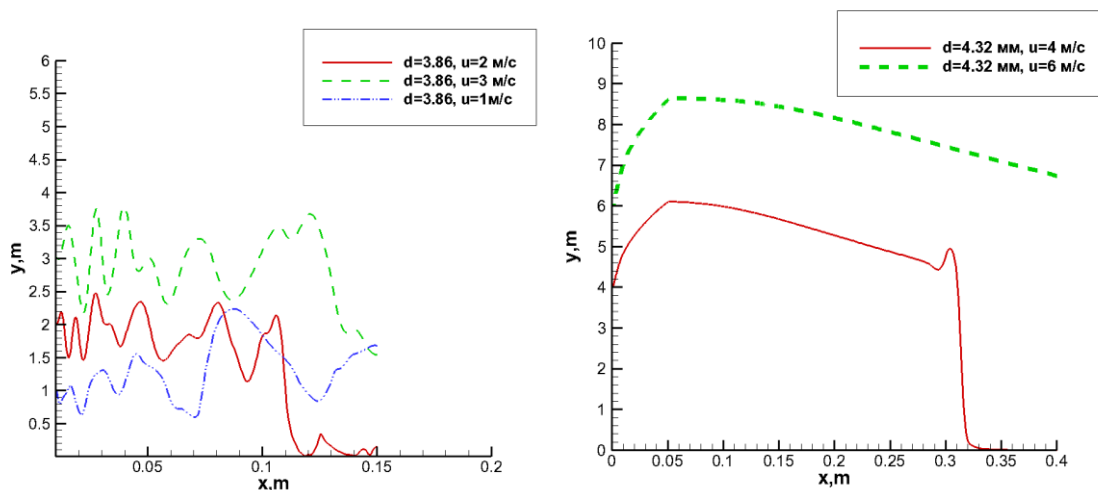


Рис. 12. Профили скорости струи в поперечном сечении для различных скоростей инжекции

В целом можно сказать, что для $d=3.86$ струя распространяется на расстояние примерно 150 мм, а дальше происходит ее затухание. При увеличении скорости и диаметра инжекции струи дальность существенно увеличивается. Результаты по дальности струи сведены в таблицу 1.

Таблица 1. Дальность струи

диаметр струи, мм	3.86				4.32	
Скорость струи, м/с	1	2	3	4	4	6
D (дальность струи, мм)	55-60	110	>130	>150	310	>400

По результатам расчетов была проведена оценка длины воспламенения от скорости выдува. Результаты расчетов были сопоставлены с экспериментальными данными (рис. 13.). Из рисунка видно, что результаты экспериментов (красные значки) дают существенный разброс данных, более того при одинаковых скоростях истечения не наблюдается повторяемости в экспериментальных результатах. Расчетные данные в целом удовлетворительно согласуются с данными эксперимента.

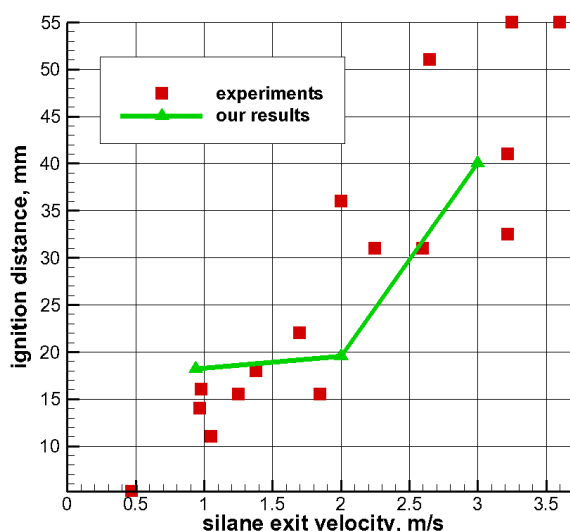


Рис. 13. Дистанция воспламенения силана в зависимости от скорости инжекции

На основании полученных данных была получена средняя концентрация силана для различных скоростей выдува. Результаты по средней концентрации силана для $d=3.86$ мм сведены в таблицу 2.

Таблица 2. Средняя концентрация силана

u, м/с	1	2	3	4
Ignition distance, мм	17	20	40	75
Средняя концентрация силана	0.72	0.87	0.63	0.66

Численное моделирование истечения и воспламенения струи силана проведено с помощью программного комплекса ANSYS Fluent, с применением детальной кинетики включающей 70 прямых и 70 обратных реакций. Расчеты проведены в двумерной постановке при условиях соответствующих экспериментальным (Чжен и др.). Расчеты воспламенения струи силана проводились при скорости истечения струи 1 м/с и диаметре инжектируемого отверстия 3.86 мм. Температура воздушной среды, а также струи силана составляли 300 К. На первом этапе исследовано возможность воспламенения струи силана

с применением детальной кинетики. Результаты расчета показали, что при температуре воздушной среды 300К истечение струи силана осуществляется без воспламенения (рис. 14.).

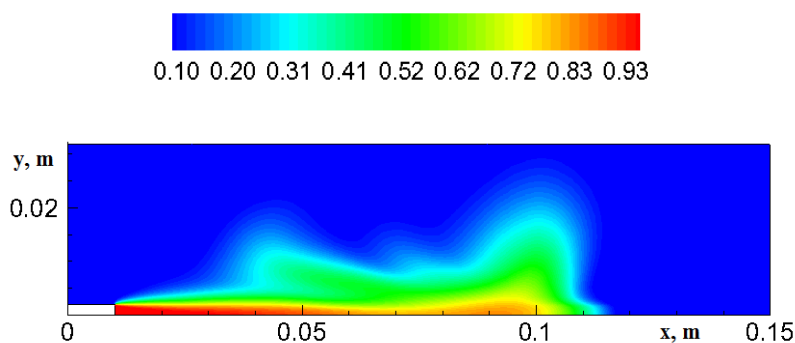


Рис. 14. Массовая концентрация силана

В дальнейшем было принято решение добавить в воздушную среду ОН радикалы, концентрация которых варьировалась: $1e^{-10}$, $1e^{-5}$. Полученные на данный момент результаты показали, что наличие во внешнем потоке ОН с концентрацией $1e^{-10}$ не способствует воспламенению силано-воздушной смеси (рис. 15). Более того, добавление радикалов ОН во внешнее течение приводит к существенному расширению струи вниз по потоку от области инжекции. Из рисунка 15 видно, что ядро струи сохраняется на расстоянии 0,05 м.

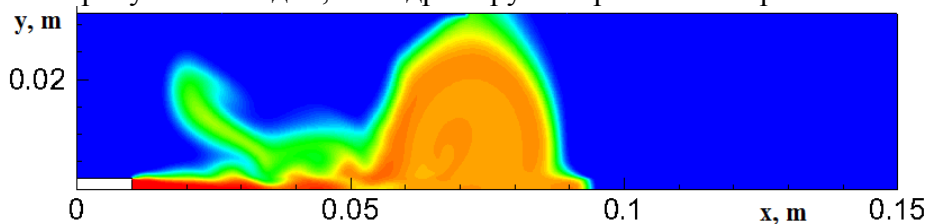


Рис. 15. Массовая концентрация силана с концентрацией ОН во внешнем потоке $1e^{-10}$

10

Кроме того, было сделано предположение о возможности увеличения температуры воздушной среды с целью обеспечения воспламенения силано-воздушной смеси. Получены данные для температуры воздушной среды 600 К (рис. 16). Получено, что истечение струи силана в воздушный поток с температурой 600 К происходит без воспламенения.

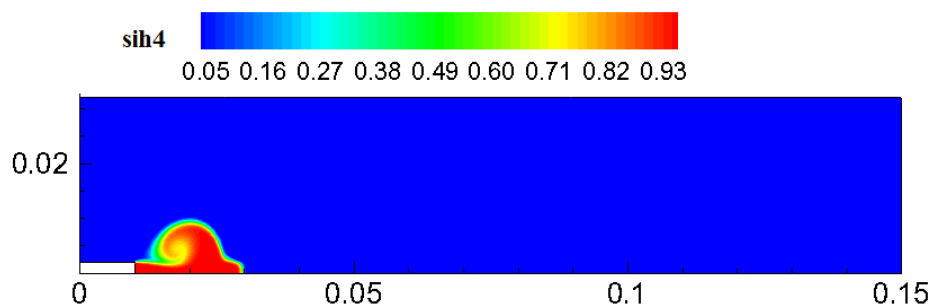


Рис. 16. Массовая концентрация силана при температуре воздушной среды 600 К

Выводы

Результаты расчетов дают информацию о детальном распределении концентраций силана в исследуемой области, характеристиках струи при различных параметрах (диаметре отверстия и скорости инъекции)

Получено удовлетворительное согласование с экспериментальными результатами по дистанции воспламенения силана.

4.5. Моделирование многоструйной инъекции водорода

Проведено численное моделирование инъекции и воспламенения струй водорода в канале с обратным уступом при сверхзвуковой скорости внешнего потока. Особенностью данной задачи является применение многоструйной инъекции водорода в канал, представляющий собой элемент камеры сгорания. Данный канал был исследован экспериментально на установке кратковременного действия ИТ-302М. Ширина экспериментального канала составляла 100 мм, на верхней и нижней стенке канала были расположены обратные уступы, высота которых была 25 мм. Отверстия для инъекции водорода располагались на нижней и верхней стенках канала, 4 отверстия по ширине канала. Эксперименты проведены при числе Маха набегающего потока $M=4$ и полной температуре $T_0=2000$ К. В ходе проведения эксперимента измерялись следующие параметры: полное давление в форкамере аэродинамической установки, статическое давление и тепловые потоки на стенках канала. Кроме того, в эксперименте проводилась визуализация течения высокоскоростной камерой, что позволило получить теневую картину волновой структуры течения в рассматриваемом канале.

Численное моделирование реализовано в 3D постановке, для условий, соответствующих экспериментальным. Схема расчетной области представлена на рис. 17. На входе расчетной области задавались параметры течения, соответствующие экспериментальным (число Маха, статическая температура и давление). На одной из боковых стенок канала и на верхней стенке задавались условия симметрии. На другой боковой стенке канала предполагалось наличие развитого турбулентного пограничного слоя. Толщина пограничного слоя во входном сечении составляла 10 мм. Выходное сечение расчетной области почти полностью, кроме узких пристенных зон, находилось в сверхзвуковой области течения. Температура стенок была фиксированной и составляла 300 К, что соответствовало экспериментальным условиям, проведенным в установке кратковременного действия. Параметры расчета представлены в Таблице 3.

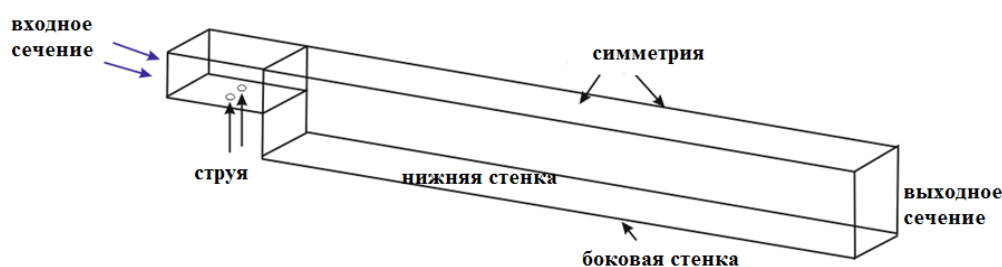


Рис. 17. Схема расчетной области

Таблица 3. Параметры расчета

Параметры	Внешнее течение	Струя водорода
Число Маха	4	1

Статическая температура, К	500	300
Статическое давление, bar	1.07	59

В расчетной области была построена структурированная сетка, пример которой представлен на рис. 18. Полное количество ячеек расчетной сетки составляло 1.5 млн. Сетка имела сгущение к стенкам канала. Параметр сгущения выбирался таким образом, чтобы безразмерное расстояние до стенки в первом расчетном узле $y_1^+ \sim 1$, а в ламинарный подслои попадало около 10 расчетных узлов, что обеспечивало достаточно точное разрешение турбулентного пограничного слоя в пристеночной области. В ходе расчета проводилась адаптация сетки по градиенту плотности и числу Маха.

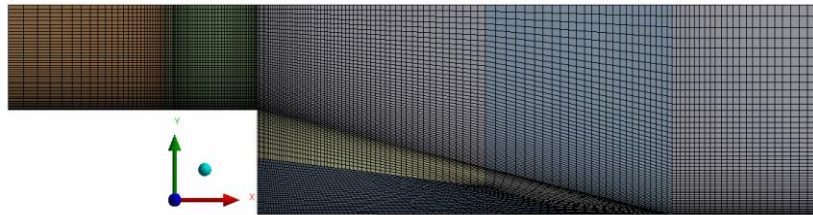


Рис. 18. Расчетная сетка

Численное моделирование течений в канале с уступом было выполнено в стационарной 3D постановке на основе осредненных по Фавру уравнений Навье-Стокса, дополненных $k-\epsilon$ SST моделью турбулентности. Расчеты выполнены с использованием коммерческого пакета ANSYS CFD (Fluent).

На рис. 19 представлено расчетное поле числа Маха в плоскости XY без инъекции струй водорода. Течение в данном канале характеризуется наличием пограничного слоя (ПС) на стенках канала, рециркуляционной зоны (РЗ), замыкающего скачка (ЗС), волн разрежения (ВР).

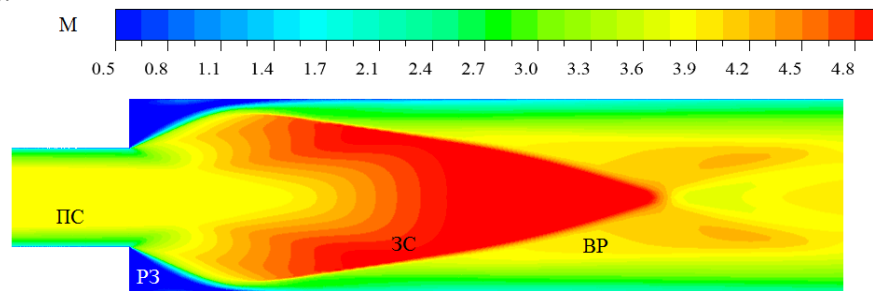


Рис. 19. Расчетное поле числа Маха

Полученное в расчетах поле статической температуры (рис. 20) показывает, что максимальная температура реализуется в рециркуляционной зоне за уступом. Наличие области с высокой статической температурой может способствовать воспламенению топливно-воздушной смеси. Из рисунка видно, что в ядре потока, вследствие его сильного расширения происходит понижение уровня статической температуры.

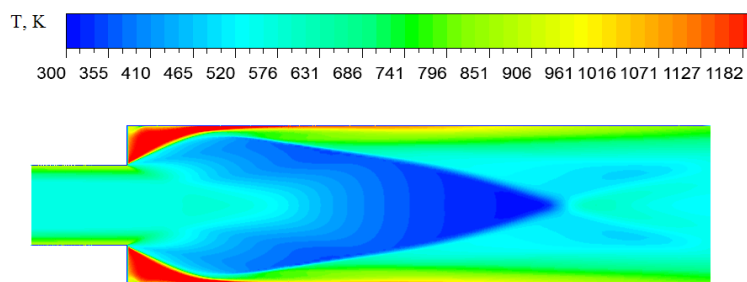


Рис. 20. Расчетное поле статической температуры

Сравнение расчетных и экспериментальных данных по распределению статического давления на нижней стенке канала, для случая течения без инъекции струй водорода показано на рис. 21. Из рисунка видно, что расчет хорошо воспроизводит уровень давления в донной области за уступом ($20 \leq x \leq 50$ мм), и падение давления за волной разрежения ($x \leq 200$ мм). В области замыкающего скачка ($x = 100$ мм) получено удовлетворительное согласование расчетных и экспериментальных данных.

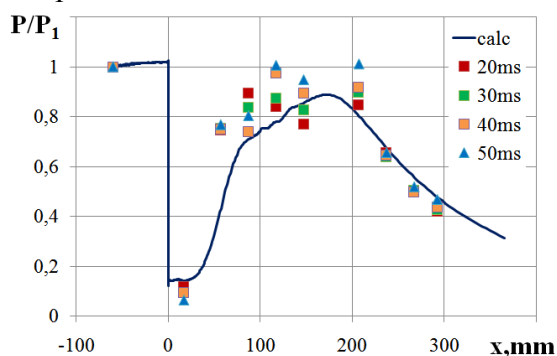


Рис. 21. Сравнение расчетных (линия) и экспериментальных (символы) данных по распределению статического давления на нижней стенке канала

Многоструйная инъекция водорода по нормали к сверхзвуковому потоку приводит к значительной перестройке волновой структуры течения в канале (рис. 22).

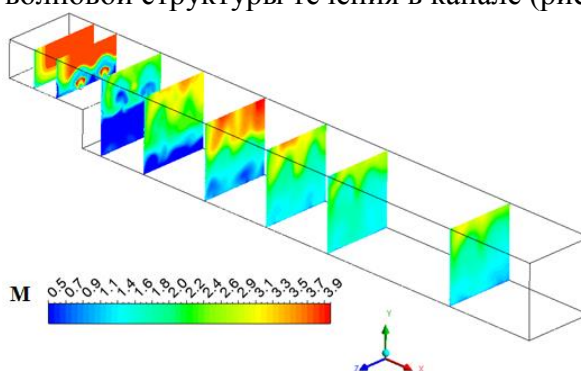


Рис. 22. Поле числа Маха в плоскости ZY

Из рисунка видно, что в области инъекции струй наблюдается образование бочки, что характерно для недорасширенных струй, и области с высоким числом Маха ($M \approx 7$). Пограничный слой на стенке канала существенно изменяется под действием больших гради-

ентов давления. Вблизи выходной границы расчетной области течение остается сверхзвуковым.

На рис. 23 представлено поле массовой концентрации H_2O в плоскости ZY (а) и плоскости симметрии (б). Из рисунка видно, что воспламенение водородно-воздушной смеси происходит сразу за областью инжекции. Далее зона горения распространяется вдоль стенок канала, охватывая слой смешения. Вблизи выходной границы расчетной области наблюдается устойчивое горение водородно-воздушной смеси по всему объему.

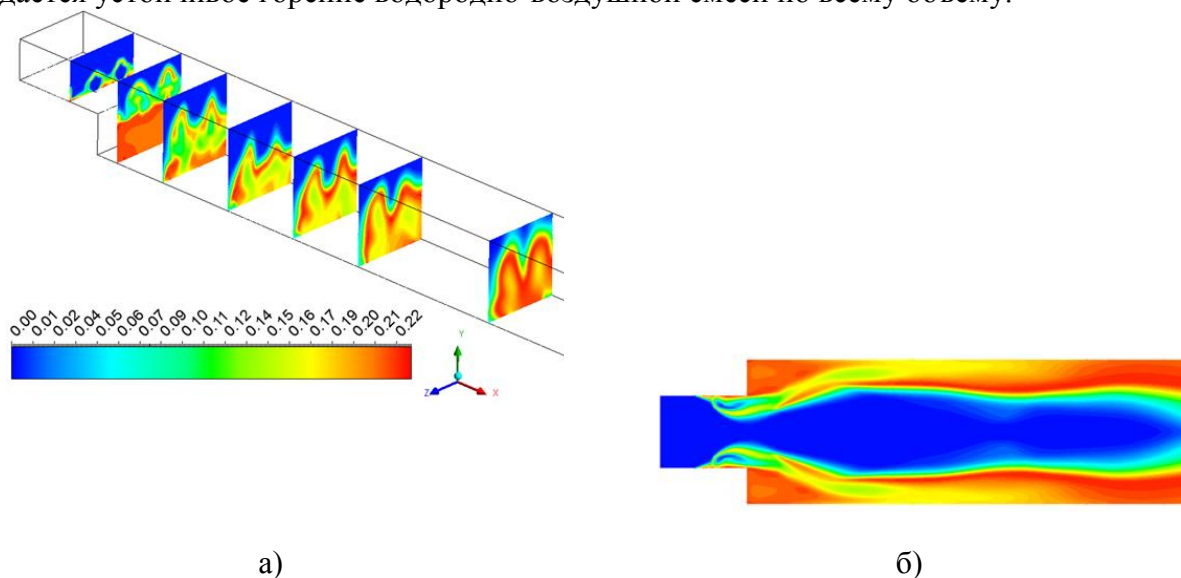


Рис. 23. Массовая доля H_2O в плоскости ZY (а) и плоскости симметрии (б)

Выводы

Полученные численные результаты позволили оценить влияние начальных параметров внешнего потока, а также параметров инжектируемой струи на процесс смешения и воспламенения водородно-воздушной смеси.

Получено хорошее согласование с результатами экспериментов по распределению давления по каналу, а также структуре течения.

4.6. 3D моделирование ударно-волнового течения в окрестности двух призм

Приведены результаты численного моделирования ударно-волнового течения в окрестности двух призм. Основной целью расчета являлась оценка ударно-волновой структуры, возникающей вследствие взрыва, а также получение распределения давления в контрольных точках на стенках призм. Задача моделировалась с использованием расчетного кода ANSYS AUTODYN на основе решения 3D уравнений Эйлера для многокомпонентной среды. Для расчетов использовалась схема FCT второго порядка точности. Размеры призмы 1 составляли $0.34\text{м} \times 0.34\text{м} \times 0.46\text{м}$ и призмы 2 $0.55\text{м} \times 0.56\text{м} \times 0.74\text{м}$ соответственно. Расстояние между призмами 0.3 м (рис. 1). В ходе расчета фиксировалось давление в контрольных точках, расположенных на передней (точки 1-5) и задней (точки 6-10) стенках призмы 1 и на задней стенке (точки 11 - 18) призмы 2. На расстоянии 0.5 м от первой призмы происходил наземный взрыв конденсированного взрывчатого вещества (TNT) массой 0.189 кг . Расчетная область задана размерами $1.4\text{м} \times 2.8\text{м} \times 1.4\text{м}$ включала 3.8 млн. ячеек с характерным размером ячейки 5 мм (рис. 1). На выходных границах расчетной области использовались неотражающие условия. Призмы рассматривались как абсолютно жесткое тело. На нижней границе расчетной области задавалось условие непротекания. Задача моделировалась в симметричной постановке.

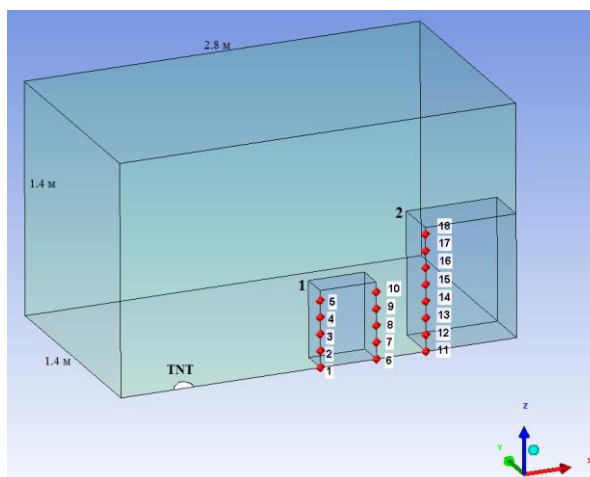


Рис.1. Расчетная область задачи

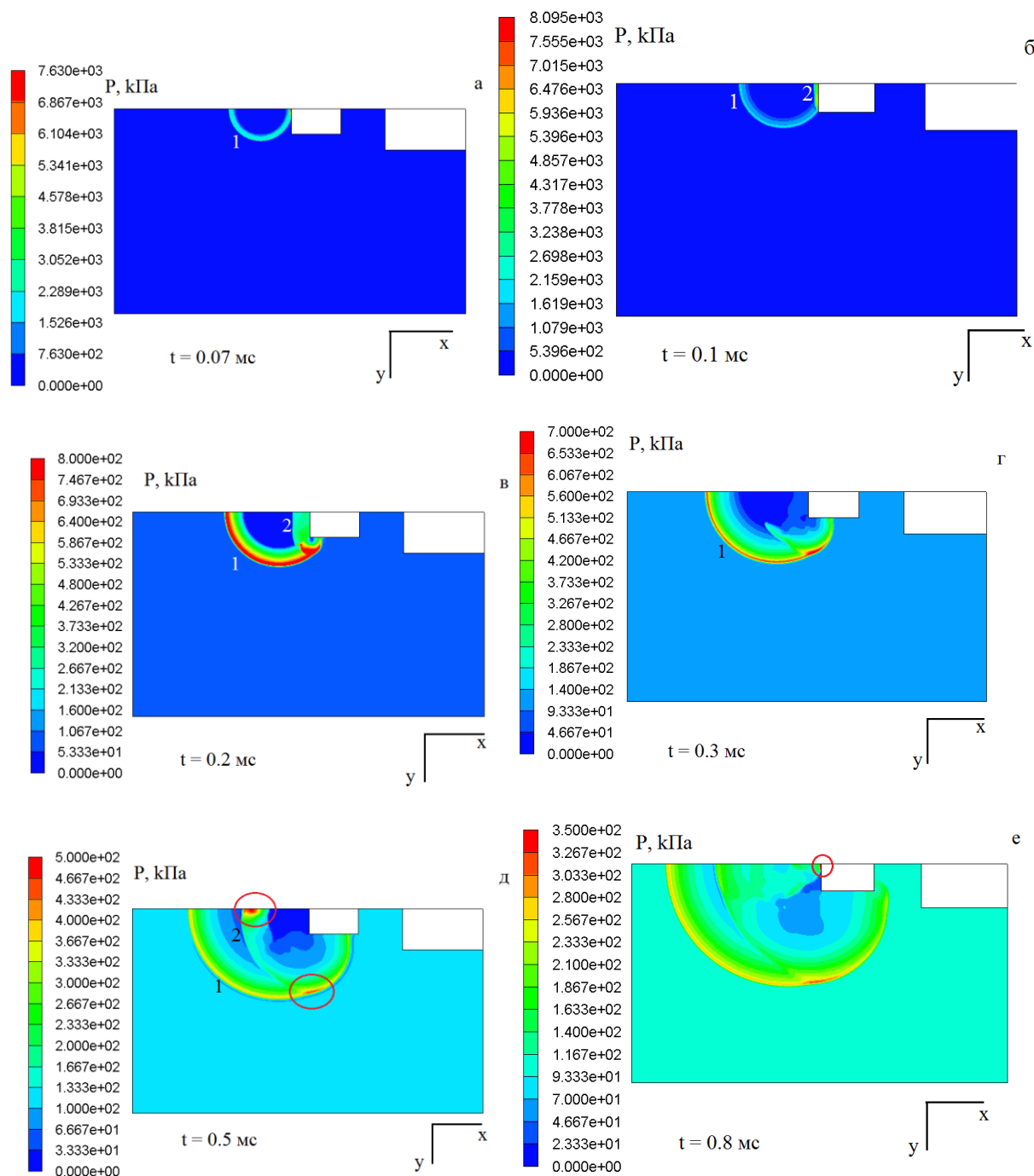
Для описания заряда TNT ($\rho=1630 \text{ кг/м}^3$) использовалось уравнение состояния Jones - Wilkins-Lee (JWL):

$$p = A \left(1 - \frac{\omega}{R_1 V}\right) e^{-R_1 V} + B \left(1 - \frac{\omega}{R_2 V}\right) e^{-R_2 V} + \frac{\omega E}{V},$$

где $V = \rho_0/\rho$; A , B , R_1 , R_2 , ω – эмпирические константы; E – внутренняя энергия в единице объема. Для воздуха ($\rho = 1.225 \text{ кг/м}^3$; $C_p = 1004 \text{ Дж/кг}\cdot\text{К}$; $C_v = 716 \text{ Дж/кг}\cdot\text{К}$.) было выбрано уравнение состояния идеального газа. Расчеты проводились при нормальных атмосферных условиях $P=101325 \text{ Па}$.

По результатам расчетов получены поля статического давления на различные моменты времени (рис. 2). Из рисунков видно, что в начальный момент времени ударная волна (1), возникшая в результате взрыва, распространяется сферически в обе стороны от источника взрыва и достигает фронтальной поверхности первой призмы (рис. 2, а). Из распределения давления в контрольных точках на фронтальной поверхности первой призмы получено, что максимальное давление возникает в момент времени $t=0.076 \text{ мс}$ в угловой точке 1, величина которого составляет $8.5e+3 \text{ кПа}$ (рис. 3, а). Отраженная от фронтальной стенки первой призмы ударная волна (2) движется в обратном направлении к источнику взрыва и вдоль фронтальной стенки, достигая верхней стенки призмы (рис. 2, б). При этом происходит уменьшение давления в контрольной точке 1 (рис. 3, а). За счет расширения потока вблизи угловой конфигурации первой призмы наблюдается появление локальной области с низким значением давления (рис. 2, в). Далее ударная волна движется вдоль верхней стенки первой призмы (рис. 2, г, д). На момент времени $t = 0.5 \text{ мс}$ (рис. 2, д) наблюдается появление двух локальных областей высокого давления, связанных с взаимодействием отраженной от фронтальной поверхности первой призмы волны (2) и волны (1). В окрестности фронтальной стенки во всех контрольных точках происходит понижение давления (рис. 2, д), особенно в точке 5, расположенной вблизи угловой конфигурации. В последующие моменты времени (рис. 2, е, ж) наблюдается повышение давления в окрестности контрольных точек 1 и 2, что подтверждается распределением давления (рис. 3, а, момент времени $t = 0.8 \text{ мс}$). Далее ударная волна приходит на фронтальную стенку второй призмы, вызывая повышение давления во всех контрольных точках (рис. 3, б). Необходимо отметить, что повышение давления в окрестности второй призмы незначительно, что говорит о том, что первая призма существенно подавляет интенсивность ударной волны. Отраженная от фронтальной стенки второй призмы ударная волна движется в задней стенке первой призмы, формируя область повышенного давления в зоне между призмами (рис. 2, з). В последующий момент времени ударная волна распространяется вдоль верхней стенки (рис. 2, и), при этом давление в окрестности первой

призмы снижается до атмосферного уровня. Из распределения давления на фронтальной стенке второй призмы (рис. 3, б), видно, что в момент времени $t = 3$ мс появляются повторные пики, связанные с приходом на стенку ударной волны, отраженной от задней стенки первой призмы. В последующие моменты времени давление в окрестности двух призм снижается до атмосферного.



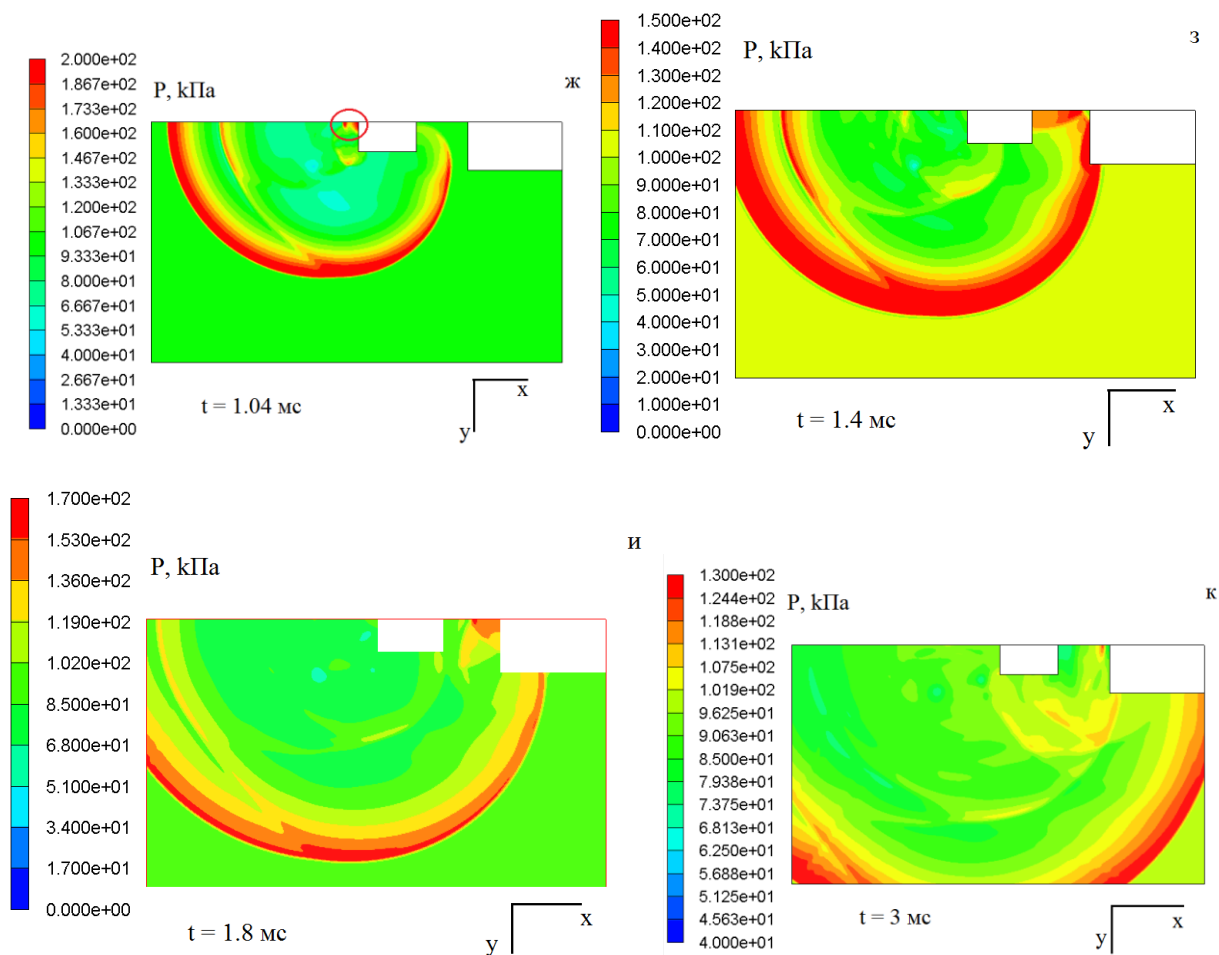


Рис.2. Поля статического давления на характерные моменты времени

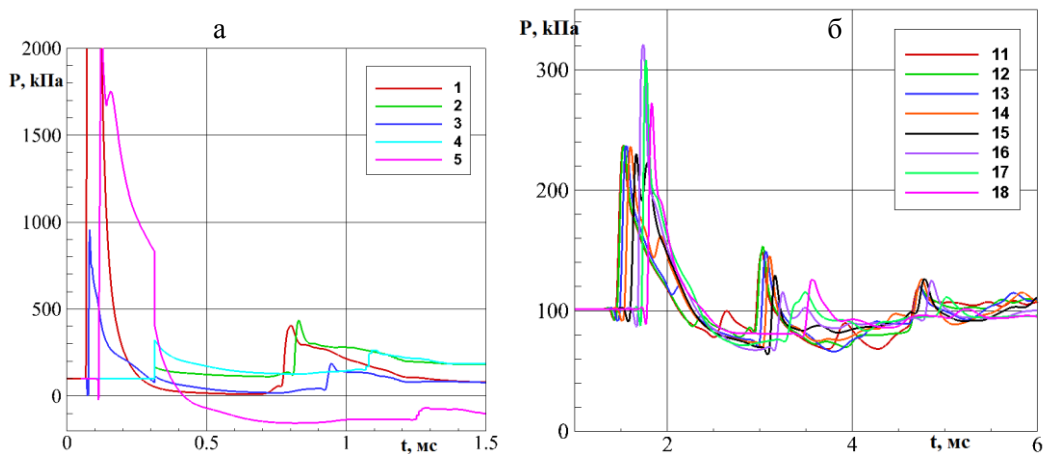


Рис.3. Распределение статического давления по времени в контрольных точках 1-5 на фронтальной поверхности первой призмы (а) и в контрольных точках 11-18 на фронтальной поверхности второй призмы (б)

Выводы

Полученные расчетные данные позволили провести анализ ударно-волнового течения в окрестности двух призм. Получено удовлетворительное согласование с экспериментальными данными [1]. Показано, что для рассматриваемой массы взрывчатого вещества

(TNT) интенсивность ударной волны при обтекании первой призмы значительно уменьшается.

Список литературы

1. Remennikov A.M., Rose T.A. Modelling blast loads on buildings in complex city geometries // Computers and Structures 83, No. 27 (2005): 2197-2205.

4.7 Моделирование взрывов внутри помещений различной конфигурации

В разделе представлены результаты численного моделирования взрыва заряда TNT внутри помещений различной конфигурации. Математическое моделирование проведено с использованием программного комплекса ANSYS AUTODYN. По результатам расчетов получены данные о величинах давлений, действующих на стенки помещений, исследована ударно-волновая структура течения, проведена оценка влияния массы взрывчатого вещества, а также наличия вентиляционных отверстий в исследуемых помещениях. Результаты расчетов сопоставлены с имеющимися в литературе экспериментальными данными.

В последние годы значительно увеличилось количество взрывов внутри промышленных помещений различного назначения, а также в зданиях жилой застройки. Возникновение подобных взрывов может быть спровоцировано аварийными ситуациями, связанными с утечкой взрывоопасных веществ или возгоранием электроприборов. Кроме того, взрывы внутри помещений возникают вследствие террористических актов, количество которых увеличивается с каждым годом. Взрыв внутри помещения может приводить к серьезным повреждениям структурных элементов, а также разрушению всего помещения. Предсказание последствий взрывного воздействия позволяет организовать защитные меры, уменьшающие разрушение помещений. При возникновении взрывов внутри помещений, избыточное давление не должно превосходить значений, превышающих несущую способность конструкции. Для снижения избыточного давления до безопасного уровня в помещениях используют оконные проемы и легко сбрасываемые конструкции.

Характер ударно – волнового воздействия, возникающего вследствие взрыва внутри закрытого помещения или помещения с ограниченной вентиляцией отличается от ударно-волновой структуры, которая образуется вследствие взрыва в открытом пространстве. Имеющиеся в литературе данные [1-4] об исследовании взрывов внутри помещений показывают, что при взрыве в замкнутом пространстве возникает сложная ударно-волновая структура и даже мелкие элементы внутри помещения оказывают существенное влияние на ее формирование. Степень разрушения помещения зависит от мощности взрывчатого вещества, взаимного расположения объектов внутри помещения и их удаленности от источника взрыва.

На сегодняшний день в литературе доступны экспериментальные и расчетные данные об исследованиях ударно-волновых структур, образующихся вследствие взрыва в открытом пространстве, рассмотрено влияние мощности взрывчатого вещества, проведены оценки распределения концентраций опасных веществ, образующихся вследствие взрыва. Однако вопросы, связанные с предсказанием последствий взрывов внутри помещений и разработка методов для минимизации ущербов в настоящее время до конца не изучены.

Исходя из выше сказанного, основными целями данной работы являлись:

- Численное моделирование взрыва заряда TNT внутри помещений различной конфигурации;
- Оценка величин давлений, действующих на стенки помещений;
- Исследование влияния массы взрывчатого вещества и его расположения внутри помещения;

Процессы разрушения и деформирования конструкций под действием динамических нагрузок на данном этапе не рассматривались.

Для детального исследования ударно-волновой структуры, образующейся в результате взрыва необходимо применять математические модели, правильно описывающие ди-

намику формирования взрывной нагрузки и позволяющие выявлять особенности рассматриваемых течений.

Численное моделирование проведено в программной среде ANSYS Workbench с использованием расчетного кода ANSYS AUTODYN, который позволяет моделировать крайне сложные быстропротекающие процессы механики сплошной среды, такие как моделирование взрыва и распространение ударных волн в среде, поведение и отклик конструкции на внешнее динамическое воздействие, а также разрушение материала. Описание воздушной среды проводилось с помощью системы уравнений Эйлера, дополненных уравнением состояния идеального газа с параметрами: $\rho = 1.225 \text{ кг/м}^3$; $C_p = 1004 \text{ Дж/кг}\cdot\text{К}$; $C_v = 716 \text{ Дж/кг}\cdot\text{К}$. Все расчеты выполнены при нормальных атмосферных условиях $P = 101325 \text{ Па}$. Для аппроксимации уравнений использована явная схема Годунова второго порядка точности.

Для описания заряда TNT в расчетах использовано уравнение состояния Jones-Wilkins-Lee (JWL):

$$p = A \left(1 - \frac{\omega}{R_1 V}\right) e^{-R_1 V} + B \left(1 - \frac{\omega}{R_2 V}\right) e^{-R_2 V} + \frac{\omega E}{V},$$

где $V = \rho_0/\rho$; A , B , R_1 , R_2 , ω – эмпирические константы; E – внутренняя энергия в единице объема.

На первом этапе было проведено 3D моделирование взрыва заряда TNT, расположенного в центре помещений размерами $300 \times 300 \times 300$ см в условиях отсутствия вентиляционных отверстий (полностью закрытое помещение). Масса взрывчатого вещества составляла 16 кг (рис. 4, а). В ходе расчета фиксировалось давление в контрольных точках, расположенных на одной из стенок помещения. Вся конструкция предполагалась недеформируемой и неподвижно закрепленной. Расчетная сетка для данной задачи содержала 343 000 ячеек. Характерный размер расчетной ячейки составлял 4 см.

Для анализа ударно-волновой структуры течения внутри помещения были построены поля статического давления на различные моменты времени (рис. 5). В начальный момент времени внутри помещения происходит взрыв, сопровождающийся значительным увеличением статического давления в центральной части помещения (рис. 5, а). Взрывная волна распространяется от центра помещения к стенкам и раньше всего приходит в центральную точку *б* (рис. 5, б), а затем распространяется вдоль стенки помещения, вызывая увеличение давления в контрольных точках *4* и *5* (рис. 4, б). По мере продвижения ударной волны от центра стены к углам, давление в центральной точке *б* уменьшается. При этом на момент времени $t = 1.5$ мс наблюдается повышение давления в контрольных точках *2* и *3* (рис. 4, б), вызванное приходом ударной волны на стенку помещения (рис. 5, б). Отраженная от стенок ударная волна распространяется в центр помещения (рис. 5, в), при этом происходит резкое увеличение статического давления в угловой точке *1* (рис. 4, б, момент времени $t = 1.7$ мс). Это увеличение давления связано с взаимодействием ударных волн, отраженных от нижней и боковой стенок помещения. По мере продвижения ударной волны в центр помещения в распределении давления наблюдаются повторные пики (рис. 4, б, точка *4*, момент времени $t = 1.97$ мс), (рис. 5, г). В последующие моменты времени происходит схлопывание ударных волн, движущихся к центру помещения, их переотражение и дальнейшее продвижение к стенкам помещения (рис. 5, д, е).

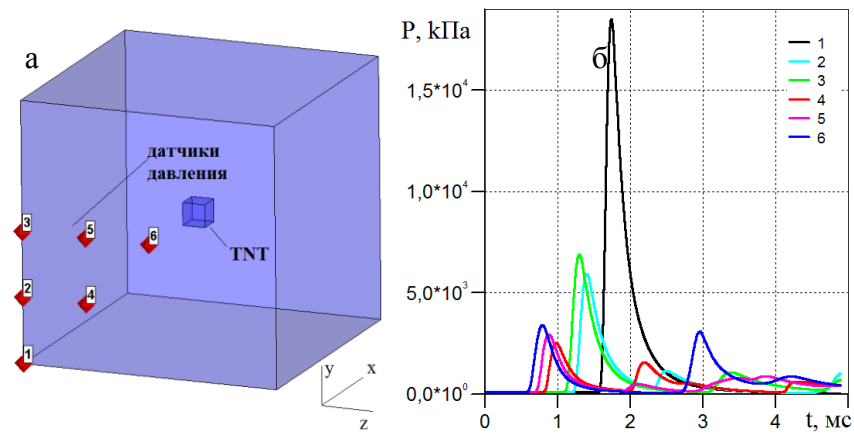
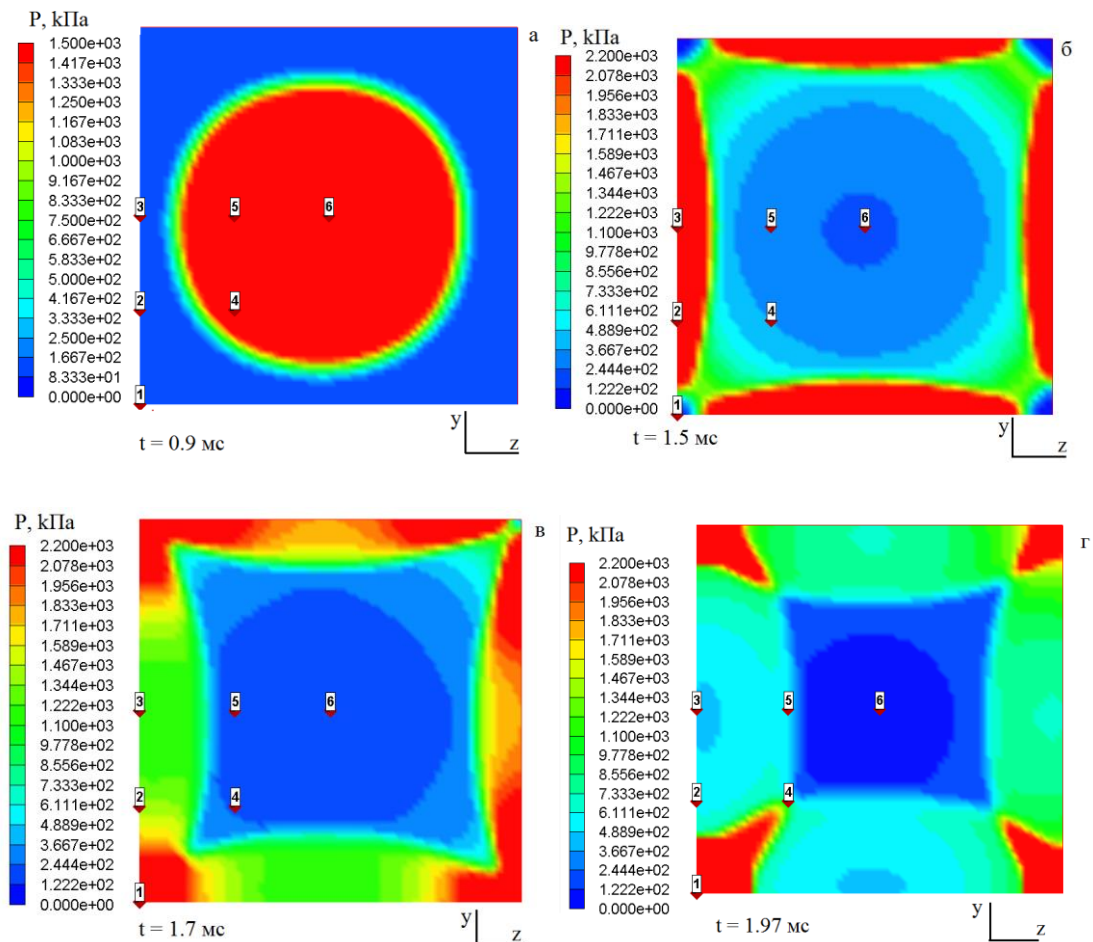


Рис. 4. Расчетная область задачи (а) и распределение давления по времени в контрольных точках (б) для случая полностью закрытого помещения

Из распределения статического давления (рис. 4, б) видно, что максимальное давление достигается в угловой точке 1 (1500 бар), величина которого в разы превосходит значение величин давлений полученных в остальных контрольных точках. В распределении давления по времени (рис. 4, б) наблюдаются повторные пики, отражающие процесс многочисленного переотражения ударных волн от стенок помещения.



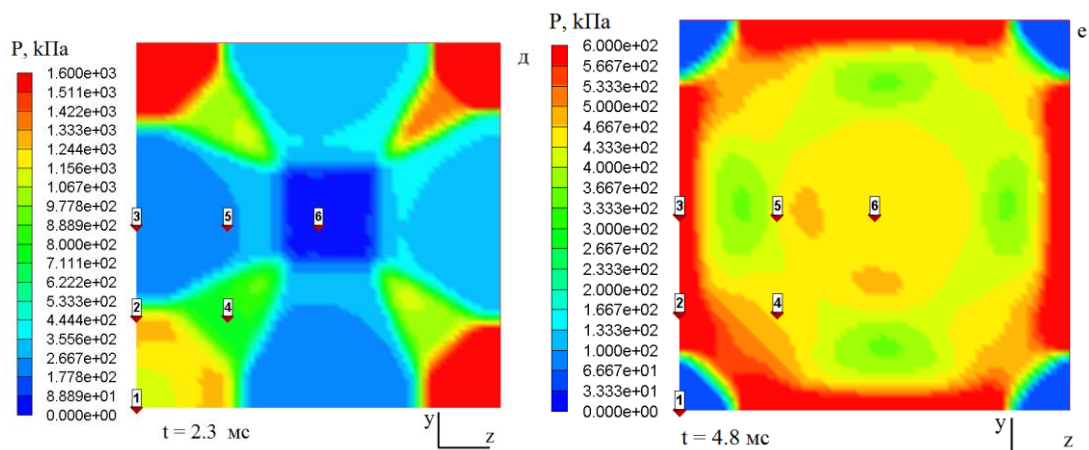


Рис. 5. Мгновенные поля статического давления на стенке помещения на различные моменты времени для случая полностью закрытого помещения

Расчетные исследования взрыва заряда TNT, расположенного внутри помещения с вентиляционным отверстием на крыше были выполнены для условий экспериментов работы [1]. Экспериментальная модель представляла собой помещение из высокопрочного бетона, усиленного стальными пластинами. Толщина стен составляла 35 см. Все внутренние углы помещения были скошены на 20 см. В центре помещения располагалось взрывчатое вещество. В ходе эксперимента измерялась величина давления в девяти датчиках, установленных на одной из стенок помещения. В экспериментах варьировалась масса и размеры взрывчатого вещества.

Расчетная область задачи представляла собой 3D модель помещения кубической формы и размерами 290×290×270 см (длина, ширина, высота соответственно). В центре помещения располагалось взрывчатое вещество с параметрами, представленными в Таблице 1. На крыше помещения имелось круглое вентиляционное отверстие диаметром 120 см. (рис. 6). Основной целью расчетных исследований являлось предсказание величин давлений, действующих на стенки помещения и влияние вентиляционного отверстия. Расчетная сетка для данной задачи содержала 2 млн. ячеек. Характерный размер расчетной ячейки составлял 2 см.

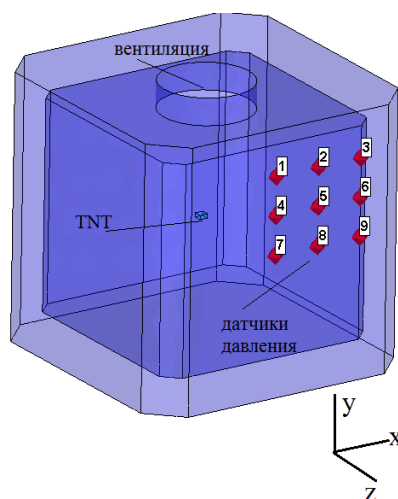
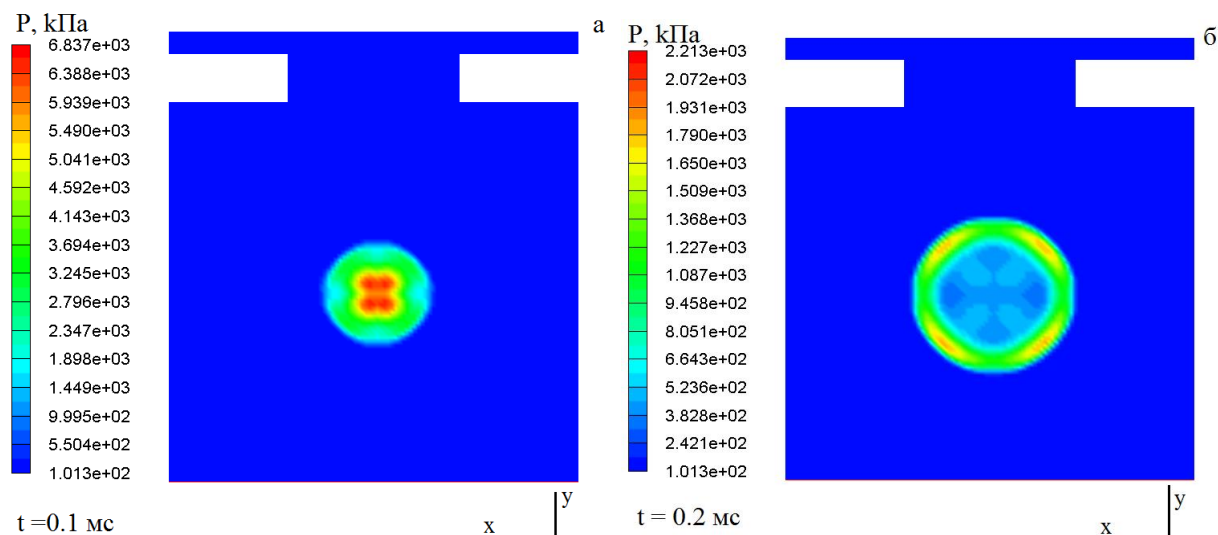


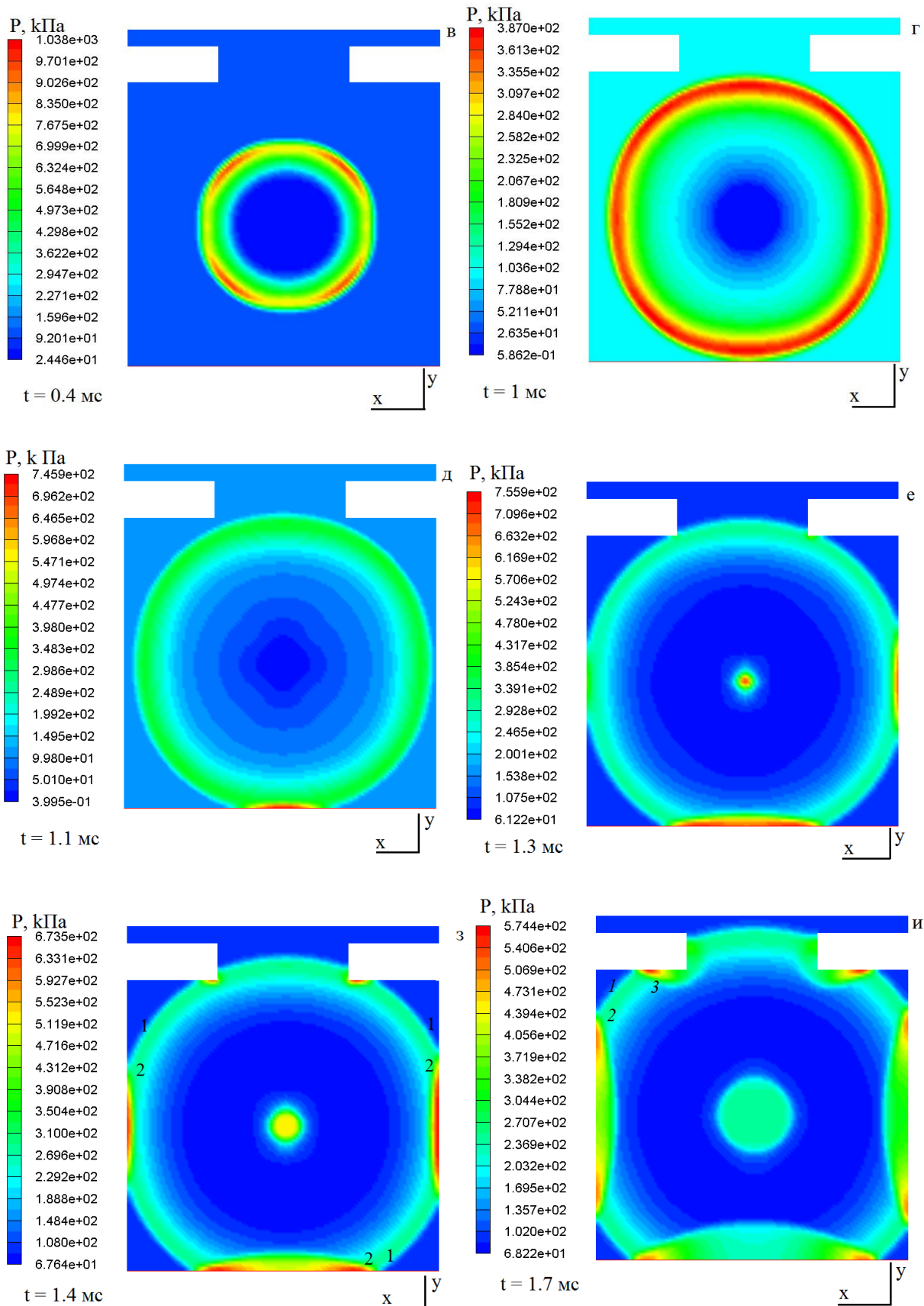
Рис. 6. Расчетная область задачи для случая помещения с вентиляционным отверстием на крыше

Таблица 1. Параметры заряда TNT

Масса заряда (m), кг	Размеры взрывчатого вещества, мм		
	L ₁	L ₂	L ₃
0.5	104	67	52
1	134	104	52
1.5	156	134	52

В начальный момент времени ($t = 0$) в точке детонации, расположенной на верхней стенке взрывчатого вещества происходит взрыв. Ударная волна, образовавшаяся вследствие взрыва, распространяется сферически от центра помещения к стенкам. При этом в начальный момент времени в центре помещения реализуется высокое давление (рис. 7, а), которое уменьшается по мере распространения ударной волны от центра помещения к стенкам (рис. 7, б - в). При приближении ударной волны к выходному вентиляционному отверстию наблюдается изменение ее формы, связанное с переходом из области высокого давления в область низкого давления (рис. 7, г). Из полей давлений видно (рис. 7, д), что взрывная волна раньше всего приходит на нижнюю стенку помещения, образуя локальную область высокого давления, а затем достигает боковых стенок помещения (рис. 7, е). Отраженная от стенок ударная волна движется в центр помещения (рис. 7, з, и). При этом происходит взаимодействие падающей (1) и отраженной (2) от стенки ударных волн, что приводит к образованию λ – конфигурации ударных волн на всех стенках помещения (рис. 7, з). Падающая на верхнюю стенку помещения ударная волна 1 отражается ударной волной 3, которая выходит через вентиляционное отверстие (рис. 7, и). На выходной границе вентиляционного отверстия наблюдается взаимодействие выходящей волны 1 и ударной волны 3. Отраженная от стенок помещения ударная волна 1 распространяется в центр помещения, вызывая при этом увеличение давления по всему сечению (рис. 7, л). На момент времени $t = 2.2$ мс наблюдается взаимодействие отраженной от нижней стенки ударной волны с ударными волнами, отраженными от боковых стенок помещения (рис. 7, м, н), что приводит к формированию областей высокого давления. Картины полей давлений, представленные на последующие моменты времени (рис. 7, о, п) показывают, что уровень давления внутри помещения значительно снижается вследствие выхода части ударной волны через вентиляционное отверстие.





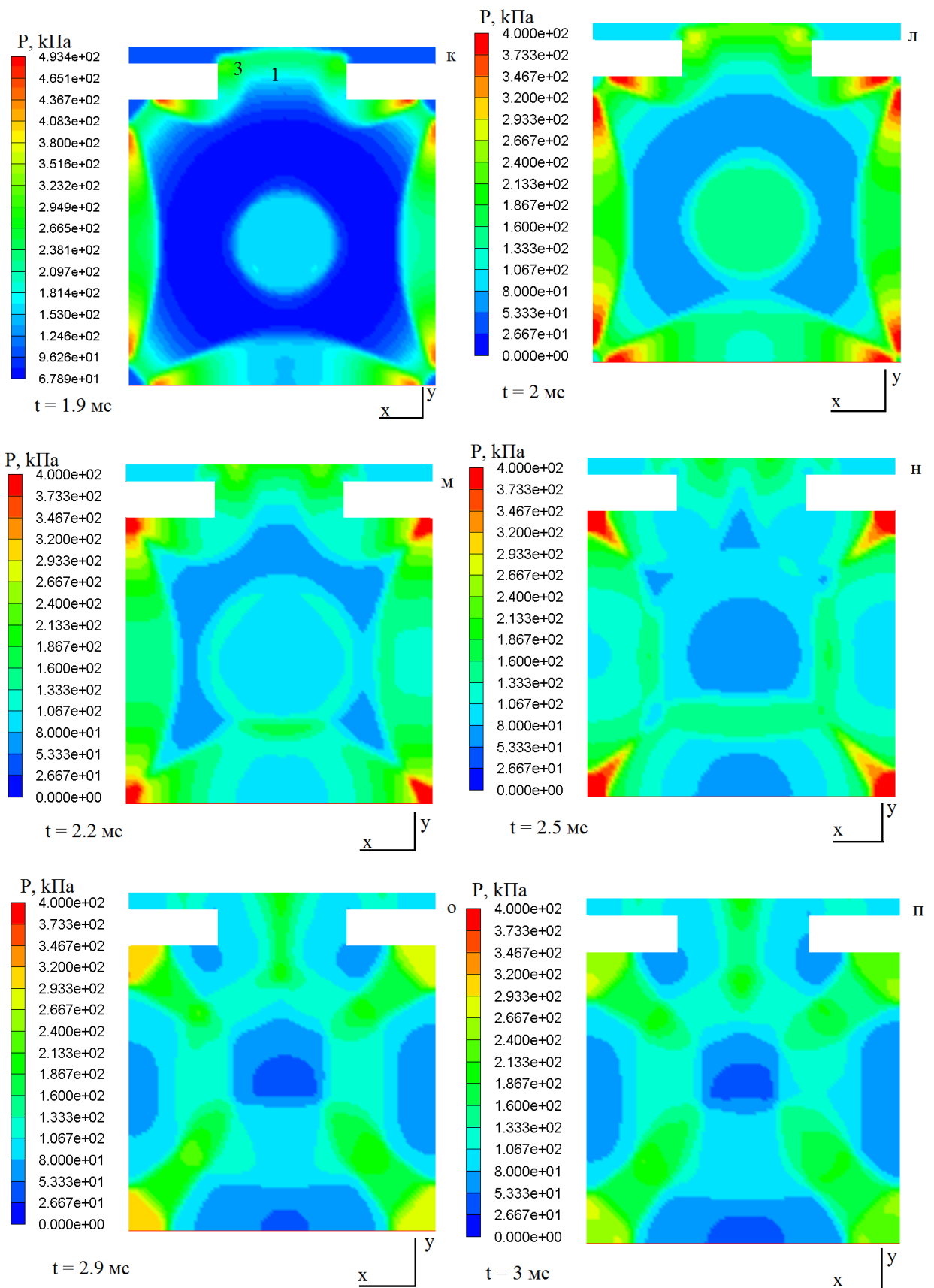


Рис. 7. Мгновенные поля статического давления в среднем сечении на различные моменты времени для массы взрывчатого вещества $m = 0.5$ кг

Из распределения статического давления по времени в контрольных точках видно (рис. 8, а), что первый пик давления возникает в точке 7 ($t = 1.1$ мс), расположенной в

средней части стены, величина которого составляет 648 кПа. Далее ударная волна распространяется сферически вдоль стенки помещения к точкам 4 и 8. В контрольную точку 3 ударная волна приходит в момент времени $t = 2.6$ мс. Отраженная от стенок ударная волна движется в центр помещения, при этом часть энергии выходит через открытое вентиляционное отверстие. В связи с высвобождением через вентиляционное отверстие некоторого количества энергии, величины повторных пиков давления уменьшаются практически во всех контрольных точках, исключая точку 7, в которой величина повторного пика давления превосходит величину первого пика. Это может быть результатом взаимодействия нескольких ударных волн с образованием мощной волны, падающей на стенку помещения.

Профили статического давления на стенке помещения в горизонтальном сечении $y = 120$ см (линия контрольных точек 7-9) представлены на рис. 8, б отражают процесс распространения ударной волны от центра помещения к стенкам. Из рисунка видно, что в начальный момент времени ($t = 1.2$ мс) в центральной части стены возникает высокое давление, вызванное приходом ударной волны. При этом давление на боковых кромках стены остается равным атмосферному ($t = 1.2$ мс). В следующий момент времени ($t = 2$ мс) давление в центральной части стены понижается, а у боковых кромок увеличивается, вследствие распространения ударной волны от центра к боковым стенкам помещения. На момент времени ($t = 3$ мс) наблюдается понижение давление по всему сечению, связанное с выходом ударной волны через вентиляционное отверстие.

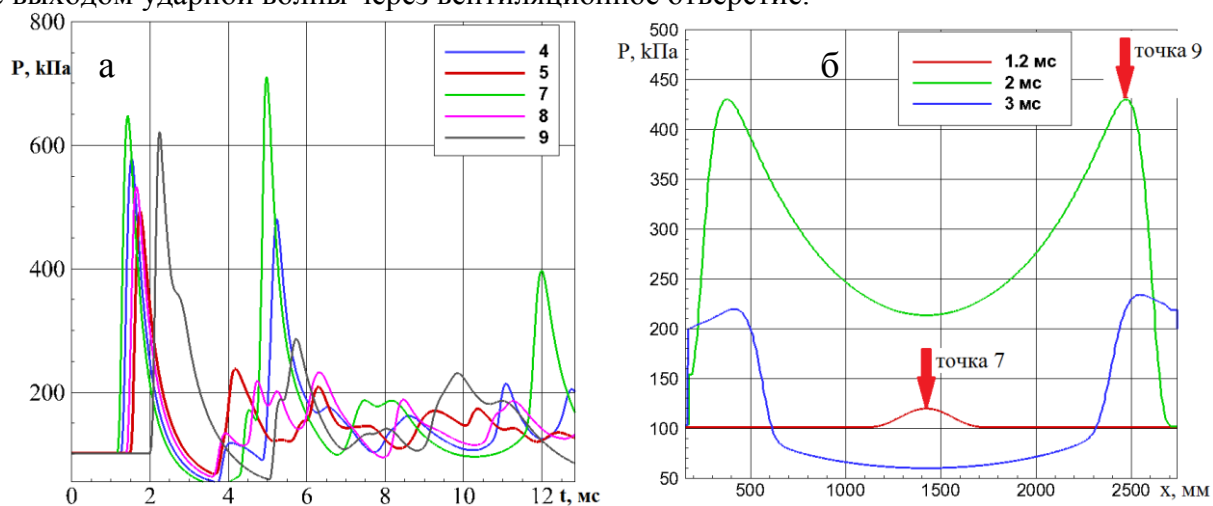


Рис. 8. Расчетное распределение статического давления по времени в контрольных точках (а), профили давления в сечении $y = 120$ см для массы взрывчатого вещества $m = 0.5$ кг

Полученные расчетные данные были сопоставлены с результатами эксперимента [1] по времени прихода ударной волны на стенку помещения и величине первого пика давления в контрольных точках (Таблица 2). В экспериментах получено высокое значение статического давления в контрольной точке 7, чего не удалось воспроизвести в расчетах. В целом расчетные данные удовлетворительно предсказывают экспериментальные результаты. Наибольшее совпадение расчетных и экспериментальных результатов получено в контрольных точках 2,5,6.

Таблица 2. Время прихода ударной волны и величина первого пика давления

$m=0.5$ кг, расчетная сетка 110*130*130				
датчики	эксперимент		расчет	
	t , ms	P , кПа	t ,	P , кПа

			ms	
1	1.73	611.86	1.85	456.4
2	1.97	575.73	2.08	404.2
3	2.45	665.09	2.64	482
4	1.15	723.63	1.51	576
5	1.51	491.68	1.74	492
6	2.14	507.06	2.32	587
7	0.65	1182.2	1.4	645
8	1.23	697.29	1.65	533
9	1.97	410.46	2.24	621

При увеличении массы взрывчатого вещества ($m = 1 \text{ кг}$) происходит возрастание пиков давлений, действующих на стенки помещения (рис. 9). Из рисунка видно, что максимальные пики давления наблюдаются в центральной части стены (точка 7) и вблизи угловой конфигурации (точка 3). Повторные пики, появляющиеся в распределении давления, характеризуют сложную волновую структуру, образующуюся внутри помещения. Для анализа ударно-волновой структуры были построены мгновенные картины полей давлений на различные моменты времени (рис. 1.24).

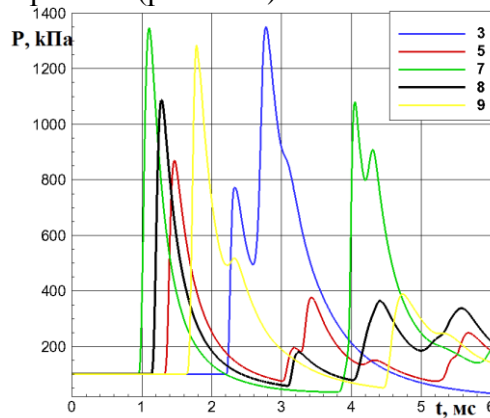


Рис. 9. Расчетное распределение статического давления по времени в контрольных точках для массы взрывчатого вещества $m = 1 \text{ кг}$

Процесс распространения ударной волны аналогичен тому, что был рассмотрен для $m = 0.5 \text{ кг}$. Ударная волна 1 распространяется сферически от центра помещения к стенкам (рис. 10, а) и раньше всего приходит на нижнюю стенку помещения в момент времени $t = 0.9 \text{ мс}$ (рис. 10, б). Отраженные от нижней стенки и боковых стенок помещения ударные волны 2 движутся в центр, при этом происходит их взаимодействие и образование локальных областей высокого давления (рис. 10, в, г). Часть отраженной от верхней стенки ударной волны 3 выходит через вентиляционное отверстие (рис. 10, г). На выходной границе наблюдается образование области высокого давления, связанное с взаимодействием ударных волн 1 и 3 (рис. 10, г). В последующий момент времени происходит схлопывание ударных волн, движущихся к центру помещения. На момент времени $t = 4 \text{ мс}$ от-

раженная от центра ударная волн приходит на стенки помещения (рис. 10, д), затем происходит повторное отражение ударной волны от стенок и ее продвижение к центру помещения (рис. 10, е).

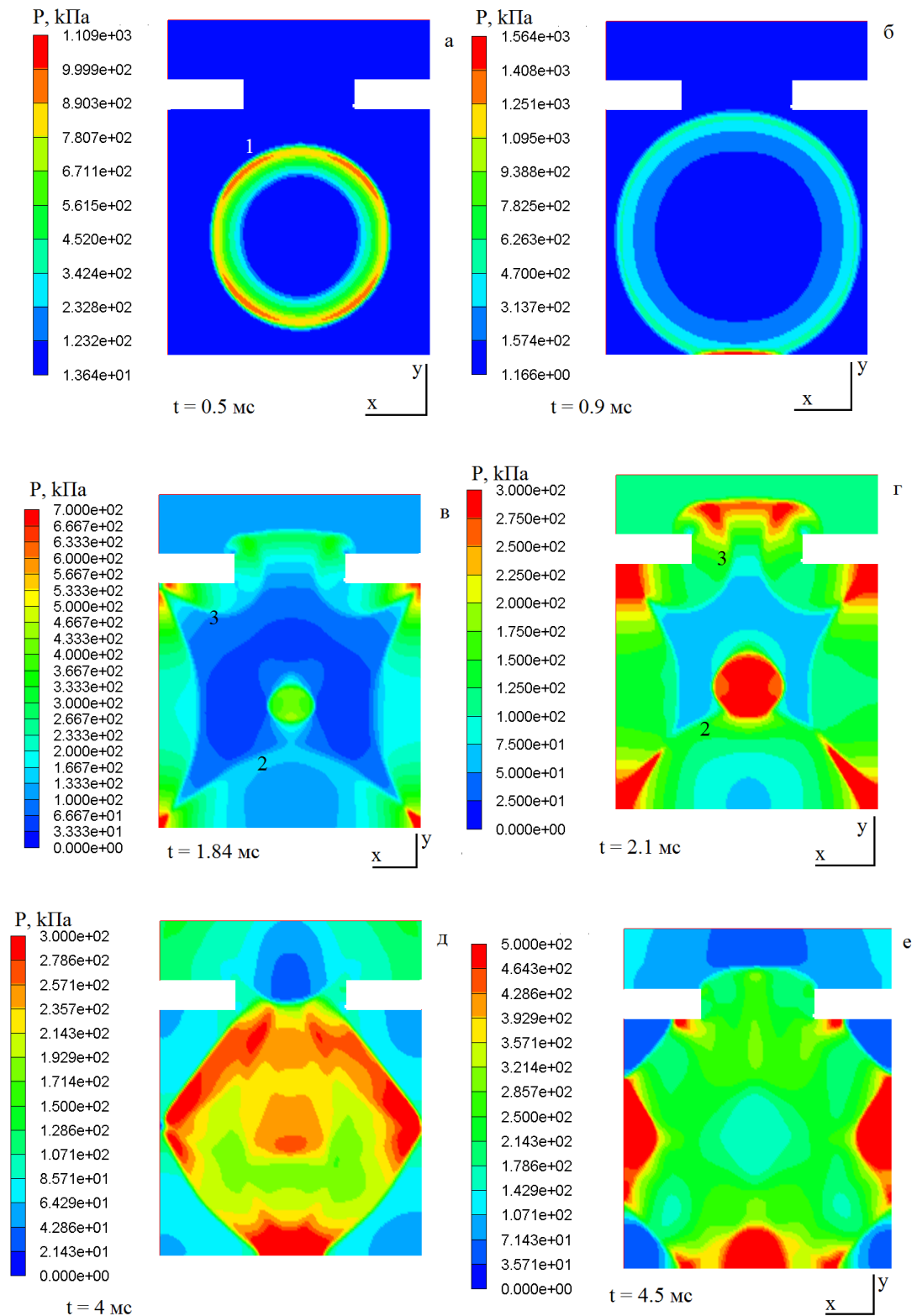


Рис. 10. Мгновенные поля статического давления на различные моменты времени для массы взрывчатого вещества $m = 1 \text{ кг}$

В Таблице 3 представлены расчетные и экспериментальные значения величин первых пиков давлений, действующих на стенку помещения, а также время прихода ударной вол-

ны. Наибольшее совпадение расчетных и экспериментальных результатов для массы взрывчатого вещества $m = 1$ кг получено в контрольных точках 3, 5, 8.

Таблица 3. Время прихода ударной волны и величина первого пика давления

m=1 кг, сетка 180*180*180				
да тчки	эксперимент		расчет	
	t,ms	P, kПа	t,ms	P, kПа
1	1.62	1444.5	1.66	700
2	1.84	1104.6	1.83	623
3	2.26	816.16	2.31	775
4	2.21	1422	1.27	1044
5	1.49	943.5	1.45	875
6	1.99	549	1.95	1074
7	0.89	2077	1.08	1364
8	1.22	798.7	1.26	1097
9	1.82	564.7	1.77	1292

Для анализа влияния вентиляционного отверстия было проведено моделирование взрыва в полностью закрытом помещении и помещении с вентиляционным отверстием на крыше. Масса взрывчатого вещества в обоих случаях составляла 2 кг. Расчетная сетка содержала 2 млн. ячеек. На рис. 11 представлены распределения давления в одной из контрольных точек (точка 8, рис. 8) для обоих рассматриваемых случаев. По результатам расчетов получено, что наличие круглого вентиляционного отверстия данных размеров, установленное на крыше помещения, не влияет на величину первого пика давления, однако снижает уровень давления в повторных пиках.

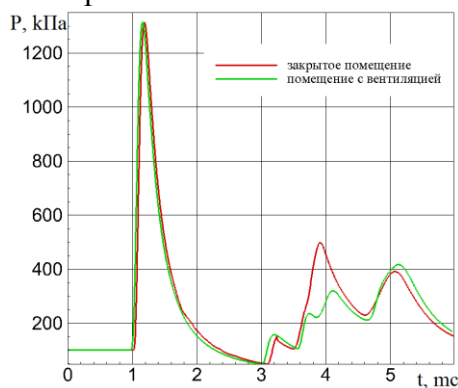


Рис. 11. Распределение статического давления в контрольной точке для случая полностью закрытой конструкции и конструкции с вентиляцией

По результатам расчетов была построена зависимость времени прихода ударной волны в контрольные точки от массы взрывчатого вещества (рис. 12). Получено, что с увеличением массы взрывчатого вещества время прихода ударной волны в контрольные точки сокращается. Для всех рассматриваемых масс, сформировавшаяся в результате взрыва ударная волна раньше всего приходит в центральную точку 7, а затем распространяется вдоль стенки к углам помещения.

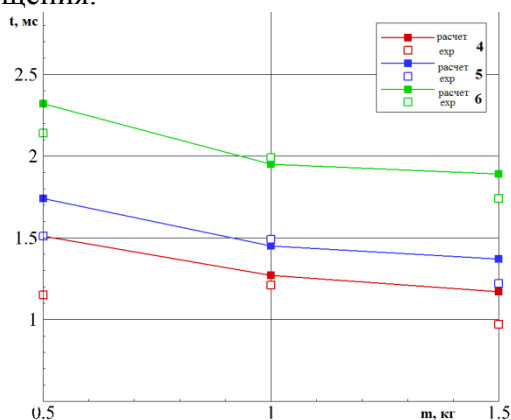


Рис. 12. Зависимость времени прихода ударной волны в контрольную точку от массы взрывчатого вещества

Выводы

С помощью программного комплекса ANSYS AUTODYN проведено численное моделирование взрыва заряда TNT внутри помещений различной конфигурации;

Показано влияние массы взрывчатого вещества на величины давлений действующих на стенки помещений;

Проведена детальная оценка ударно-волновой структуры внутри помещений;

Показано влияние вентиляционного отверстия на изменение ударно-волновой структуры внутри помещения и величин пиков давлений, действующих на стенки помещения.

Список литературы

1. I.Edri, Z.Savir, V.R.Feldgun, Y.S. Karinski, D.Z.Yankelevsky On blast pressure analysis due to a partially confined explosion. I. Experimental studies, *International Journal of Protective Structures* – V.2, N.1, 2011.
2. V.R. Feldgun, Y.S. Karinski, I. Edri, D. Tsemakh and, D.Z. Yankelevsky On blast pressure analysis due to a partially confined explosion. II. Numerical studies, *International Journal of Protective Structures* – V.3, N.1, 2012.
3. I. Edri, V.R. Feldgun, Y.S. Karinski, D.Z. Yankelevsky On blast pressure analysis due to a partially confined explosion. III. Afterburning effect, *International Journal of Protective Structures* – V.3, N.3, 2012.
4. V.R. Feldgun, Y.S. Karinski and D.Z. Yankelevsky. Some characteristics of an interior explosion within a room without venting, *Structural Engineering and Mechanics*, V.38, No.5 (2011), pp. 633-649.

ГЛАВА 5. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УДАРНЫХ ВОЛН С ИНЕРТНЫМИ ЧАСТИЦАМИ НА МАКРО- И МИКРОУРОВНЕ

§ 1.1. Динамика мелких частиц при натекании струй на тело с иглой.

Введение. Постановка задачи. В работе рассматривается проблема высокоскоростного ударного взаимодействия микро- и субмикронных частиц (движущихся в потоке газа, истекающего из сопла) с поверхностью преграды в присутствии иглы перед ней. Задача представляется актуальной для прогнозирования применимости метода холодного газодинамического напыления (ХГН) в область субмикронных частиц. Особенностью процесса ХГН [1] является то, что при формировании сплошного покрытия на подложку наносится несколько слоев частиц. Это в свою очередь означает, что характерная минимальная толщина будет иметь размер порядка нескольких диаметров частиц. В настоящее время в технологии метода ХГН используются порошки с характерным размером частиц порядка 30-50 мкм, таким образом, минимальная толщина сплошного покрытия будет составлять более 100 мкм. Однако в некоторых случаях требуется получение сплошных покрытий на порядок меньшей толщины (не более 10 мкм). Для этих целей необходимо использовать для напыления порошки с размером частиц менее 3 мкм. При использовании частиц такого размера существенное влияние на динамические характеристики частиц в районе преграды будет иметь газодинамика течения. Натекание сверхзвуковой струи на преграду приводит к образованию ударной волны перед ней. За ударной волной скорость газа становится дозвуковой и образуется сжатый слой газа, в котором частицы истекающей двухфазной струи теряют свою скорость. Потеря скорости тем больше, чем меньше размер частиц. Одно из основных условий ХГН заключается в том, что частицы должны иметь скорость удара выше некоторой критической величины, при которой начинается формирование покрытия [1]. Из-за торможения в сжатом слое частицам размером менее 3 мкм затруднительно придать необходимую для закрепления скорость удара. Данную проблему можно решить, уменьшая диаметр сопла, из которого истекает двухфазная струя. Однако это приведет к снижению производительности процесса ХГН. В этом заключается причина, ограничивающая возможности метода ХГН формировать покрытия из частиц размером 1—3 мкм и менее. Одним из возможных путей решения данной проблемы является трансформация прямой ударной волны в косую. Для такой трансформации можно использовать иглу, установленную навстречу сверхзвуковой струе на поверхности преграды. Такая постановка задачи сопряжена с необходимостью решения газодинамической задачи о натекании сверхзвуковой струи на тело с иглой и нахождении траекторий движения и динамических характеристик частиц двухфазной струи. Таким образом, достоверное определение параметров двухфазного потока связано с достаточным разрешением газодинамической структуры течения и наличием адекватной закономерности для закона сопротивления микро- и наночастиц. Использование методов компьютерного моделирования позволит сделать вывод о применимости данного подхода к процессу ХГН для частиц размером 1 - 3 мкм и менее.

Рассмотрим задачу о натекании струи, несущей твердые частицы на преграду с расположенной на ней иглой. Схема течения представлена на рис. 1. На рисунке D_c , $D_{иг}$ – диаметры сопла и иглы соответственно, L – расстояние от среза сопла до пластины, L_c – расстояние от критического сечения до среза сопла, $L_{иг}$ – длина иглы, $\alpha_{иг}$ – угол острия иглы.левой границе области соответствует либо критическое сечение сопла, либо срез сопла, где задается либо звуковое, либо сверхзвуковое течение газа. Отношение длины иглы и диаметра сопла выбиралось таким, чтобы реализовывался концевой отрыв с присоединенным скачком уплотнения, обеспечивающий квазистационарное обтекание тела с иглой. Расчет проводился в двумерной постановке в осесимметричной системе координат (x, r) , в рамках модели механики гетерогенных сред в режиме одиночных частиц. Как известно, при этом считается, что частицы не оказывают влияния на газ, в силу малости их объемной концентрации. Это позволяет после определения поля течения газа рассчитывать траектории частиц в рамках урав-

нений Ньютона. То есть расчет задачи разбивается на два этапа. В первом рассчитывается поле течения газа, во втором траектории частиц.

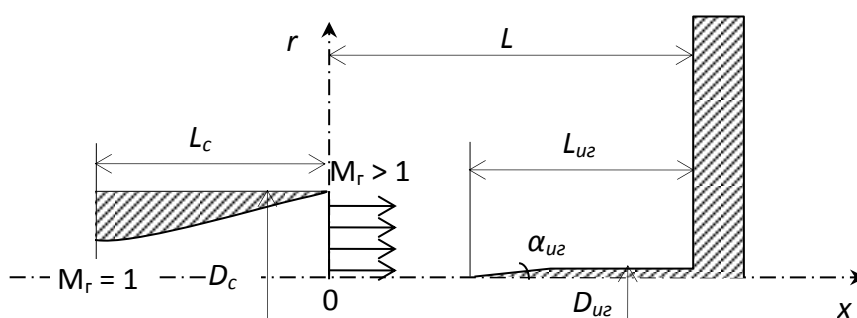


Рис. 1 Схема расчетной задачи

Газодинамика натекания струи на пластину с иглой. На первом этапе была определена картина течения чистого газа. Со среза сопла (рис. 1) истекает сверхзвуковой поток и набегаёт на тело с иглой. Расчеты выполнены в пакете ANSYS Fluent. Использовалась математическая модель осредненных по Фавру уравнений Навье-Стокса, дополненных различными моделями турбулентности (однопараметрическая модель Спаларда и двухпараметрической $k-\omega$ модель в стандартном варианте Уилкокса и SST модификации Ментора). Расчетная сетка исследуемой задачи содержала 400 и 250 узлов в направлении x и y соответственно. Сетка сгущалась к поверхности тела с иглой, чтобы обеспечить разрешение пограничных слоев. В численных расчетах турбулентных течений за разрешение ламинарного подслоя в пограничном слое на обтекаемых поверхностях отвечает параметр y^+ , рассчитанный по ближайшим к поверхностям тел узлам сетки. В наших расчетах на поверхности иглы и подложки этот параметр нигде не превышал значения 1, что опыту наших предыдущих исследований обеспечивает достаточное количество точек сетки, приходящихся на ламинарный подслой. Кроме того, для наилучшего разрешения волновой картины течения, производилась адаптация расчетной сетки по численному значению градиента плотности к газодинамическим особенностям течения (ударным волнам, контактными разрывам, волнам разрежения).

На рис. 2 представлено поле плотности для случая скорости истечения газа из сопла $M_2 = 3$, угла наклона кончика иглы $\alpha = 20^\circ$ и различных способов моделирования турбулентности: модель Спаларда (а), стандартная $k-\omega$ модель (б), SST $k-\omega$ (в). На рисунках показаны траектории частиц газа, а жирной линией обозначена звуковая линия. На рис. 2 хорошо виден комплекс ударных волн, во-первых, обусловленный взаимодействием сверхзвуковой струи с иглой, а во-вторых, являющийся результатом обтекания отрывной зоны над иглой. Обтекая иглу, струя набегаёт на преграду, разворачивается и движется вдоль подложки. При этом на поверхности подложки возникает зона высокой плотности, вызванная ударом еще сверхзвуковой струи о подложку. Видно, что волновая картина течения сходна для всех моделей турбулентности. Ударные волны, волн разрежения имеют идентичное расположение и углы наклона. Различия проявляются лишь в структуре вихревых зон в области отрыва. Для моделей Спаларда (рис. 3а) и SST (рис. 3в) наблюдается один вихрь в рециркуляционной зоне над поверхностью иглы. Для оригинальной модели Уилкокса $k-\omega$ (рис. 3б) в рециркуляционной зоне наблюдаются вторичные вихревые образования. Для моделирования турбулентности в дальнейших расчетах выбрана SST модификация $k-\omega$ модели.

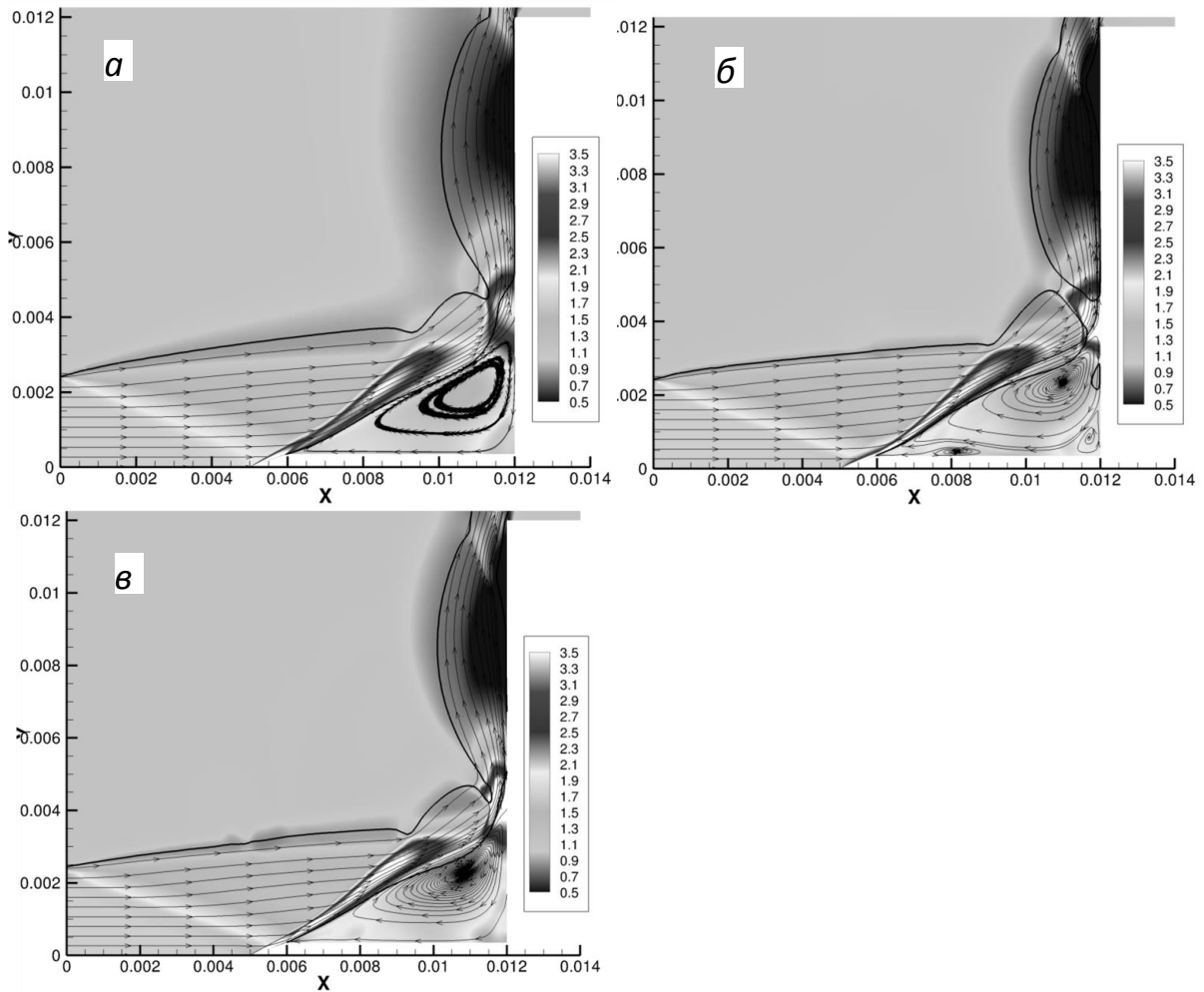


Рис. 2 Поле плотности при $M_\infty = 3$ (*a* – модель Спаларда, *б* – стандартная $k-\omega$ модель, *в* – SST $k-\omega$)

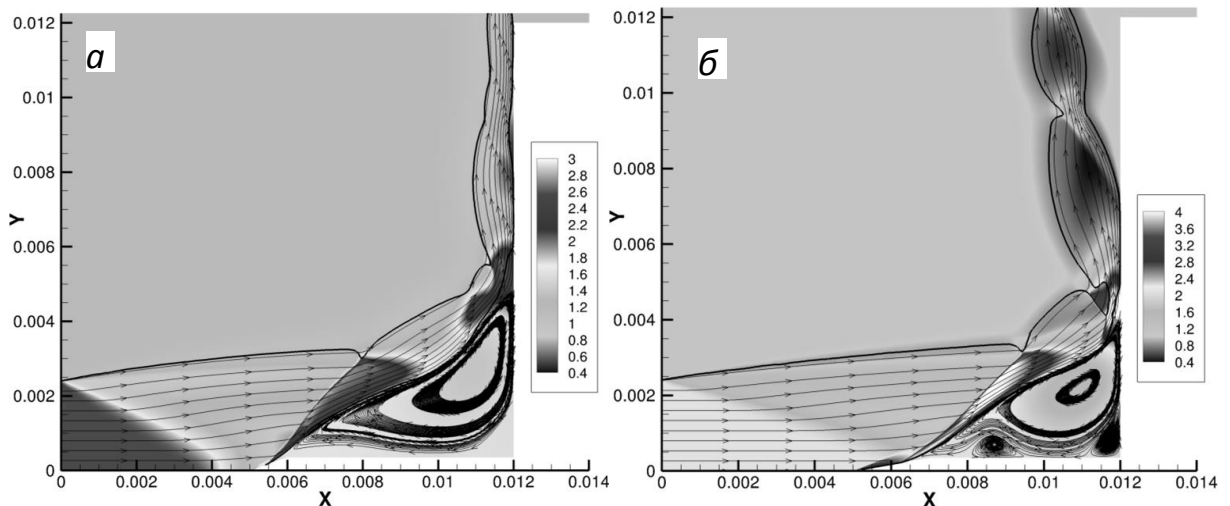


Рис. 3 Поле плотности для различных вариантов скорости истечения из сопла и геометрии кончика иглы: $M_\infty = 2$, $\alpha = 20^\circ$ (*a*), $M_\infty = 3$, $\alpha = 10^\circ$ (*б*)

На рис. 3 показаны картины поля плотности для различных вариантов скорости истечения из сопла и геометрии кончика иглы: $M_\infty = 2$, $\alpha = 20^\circ$ (*a*), $M_\infty = 3$, $\alpha = 10^\circ$ (*б*). При уменьшении числа Маха наблюдается менее интенсивная волновая структура при взаимодействии потока с иглой. Размер и структура вихревой зоны существенно не меняется. При уменьшении угла носика иглы наблюдаются более значительные изменения волновой и вихревой структур. Можно отметить более интенсивное отражение струи от стенки и характерную бочкообразную структуру в отраженной струе (рис. 3б).

Динамика частиц. Динамика частиц дисперсной фазы рассчитывалась на основе лагранжевой математической модели, используемой для описания движения материальной точки. Уравнения движения i -й частицы имеют известный вид

$$m_{p,i} \frac{du_{p,i}}{dt} = f_{x,i}, \quad m_{p,i} \frac{dv_{p,i}}{dt} = f_{y,i}, \quad \frac{dx_{p,i}}{dt} = u_{p,i}, \quad \frac{dy_{p,i}}{dt} = v_{p,i}, \quad (1)$$

где $x_{p,i}$, $y_{p,i}$ – координаты; $u_{p,i}$, $v_{p,i}$ – продольная и вертикальная компоненты скорости; $d_{p,i}$, $m_{p,i} = \rho_p \pi d_{p,i}^3 / 6$, ρ_p – диаметр, масса и плотность материала частицы соответственно. Компоненты главного вектора сил, действующих на частицу, имеют вид

$$f_{x,i} = \frac{\pi d_{p,i}^2}{4} C_{D,i} \frac{\rho_{g,i} (u_{g,i} - u_{p,i}) w_{pg,i}}{2},$$

$$f_{y,i} = \frac{\pi d_{p,i}^2}{4} C_{D,i} \frac{\rho_{g,i} (v_{g,i} - v_{p,i}) w_{pg,i}}{2},$$

Здесь $u_{g,i} = u(x_{p,i}, y_{p,i}, t)$, $v_{g,i} = v(x_{p,i}, y_{p,i}, t)$ – горизонтальная и вертикальная компоненты скорости, плотность, кинематическая вязкость и теплопроводность газа в точке, где находится частица; $w_{pg,i} = [(u_{g,i} - u_{p,i})^2 + (v_{g,i} - v_{p,i})^2]^{1/2}$ – скорость частицы относительно потока газа.

Ниже рассматриваются только слабозапыленные потоки, поэтому, как сказано выше, влияние частиц на движение несущей фазы не учитывалось. Также не принимается во внимание взаимодействие частиц со стенками. В случае, если частица приближается к твердой стенке на расстояние, меньшее радиуса, она считается выпавшей на стенку. Координаты такой частицы фиксировались, скорость принималась равной нулю, и частица исключалась из расчетного алгоритма.

В начальный момент времени частицы равномерно распределялись по срезу сопла, а скорость частиц равнялась скорости газа:

$$t = 0: \quad x_{p,i} = x_{p,i,0}, \quad y_{p,i} = y_{p,i,0}, \quad u_{p,i} = u_g, \quad v_{p,i} = v_g. \quad (2)$$

В начальных условиях (2) полагается, что скорость частиц на срезе сопла равна скорости газа в соответствующей точке потока. Расчеты конфигурации с соплом показали, что такое предположение справедливо, для сопел с достаточно длинной диффузорной частью и частиц размером менее 2 мкм. Скорость частиц размером 2 мкм на срезе диффузора длиной 90 мм менее, чем на 10 % меньше скорости газа, которая в данном случае достигает 750 м/с ($M=2.5$).

Для расчетов траекторий и скоростей частиц по формулам (1) необходимо знать коэффициент сопротивления C_D . Наиболее распространенными и общими из многочисленных зависимостей для коэффициента сопротивления, имеющих в литературе, являются, по видимому, соотношения Хендерсона [2]

$$C_D = \begin{cases} C_D^1, & 0 \leq M_p \leq 1, \\ C_D^1 (1, Re_p) + \frac{4}{3} (M_p - 1) [C_D^2 (1.75, Re_p) - C_D^1 (1, Re_p)], & 1 \leq M_p \leq 1.75, \\ C_D^2, & M_p \geq 1.75, \end{cases} \quad (3)$$

где

$$C_D^1 (M_p, Re_p) = \frac{24}{Re_p + s \left[4.33 + \frac{3.65 - 1.53 T_2 / T_1}{1 + 0.353 T_2 / T_1} \exp \left(-0.247 \frac{Re_p}{s} \right) \right]} +$$

$$\begin{aligned}
& + \exp\left(-0.5 \frac{M_p}{\sqrt{Re_p}}\right) \left[\frac{4.5 + 0.38(0.03 Re_p + 0.48 \sqrt{Re_p})}{1 + 0.03 Re_p + 0.48 \sqrt{Re_p}} + 0.1 M_p^2 + 0.2 M_p^8 \right] + \\
& + 0.6 s \left[1 - \exp\left(-\frac{M_p}{Re_p}\right) \right] \\
C_D^2(M, Re) = & 0.9 + \frac{0.34}{M^2} + 1.86 \sqrt{\frac{M}{Re}} \frac{2 + 2/s^2 + 1.058 \sqrt{T_2/T_1} / s - 1/s^4}{1 + 1.86 \sqrt{M/Re}}, \\
& s = M \sqrt{0.5 \gamma}
\end{aligned}$$

Система корреляционных соотношений (3) состоит из соотношений, описывающих дозвуковые режимы течения, сверхзвуковые режимы течения при $M_p > 1.75$ и линейного интерполяционного соотношения для промежуточных режимов течения. Формула (3) применима для чисел Маха $M_p < 6$, любых чисел Кнудсена и чисел Рейнольдса $0 < Re_p < 10^5$, приводя в пределе к решениям Стокса и Озеена.

На рис. 4 показаны траектории десяти частиц, которые в начальный момент времени равномерно распределены по срезу сопла и выдуваются со скоростью газа. Траектории и скорости частиц рассчитывались на фоне поля течения показанного на рис. 3в ($M_e = 3$, $\alpha = 20^\circ$). Диаметр частиц меняется от 0.2 мкм до 5 мкм. В качестве материала частиц использован никель. Нумерация частиц ведется от оси симметрии. На рис. 4 приведены траектории и скорости частиц разного диаметра. Видно, что скорость частиц диаметром 0.2 мкм при ударе о подложку составляет менее 200 м/с, что явно не достаточно для процесса ХГН. Для частиц большего диаметра скорость некоторых частиц превышает критическую скорость напыления, которая составляет примерно 500 м/с, однако о гарантированном напылении для данных газодинамических условий можно говорить только для 5 мкм частиц.

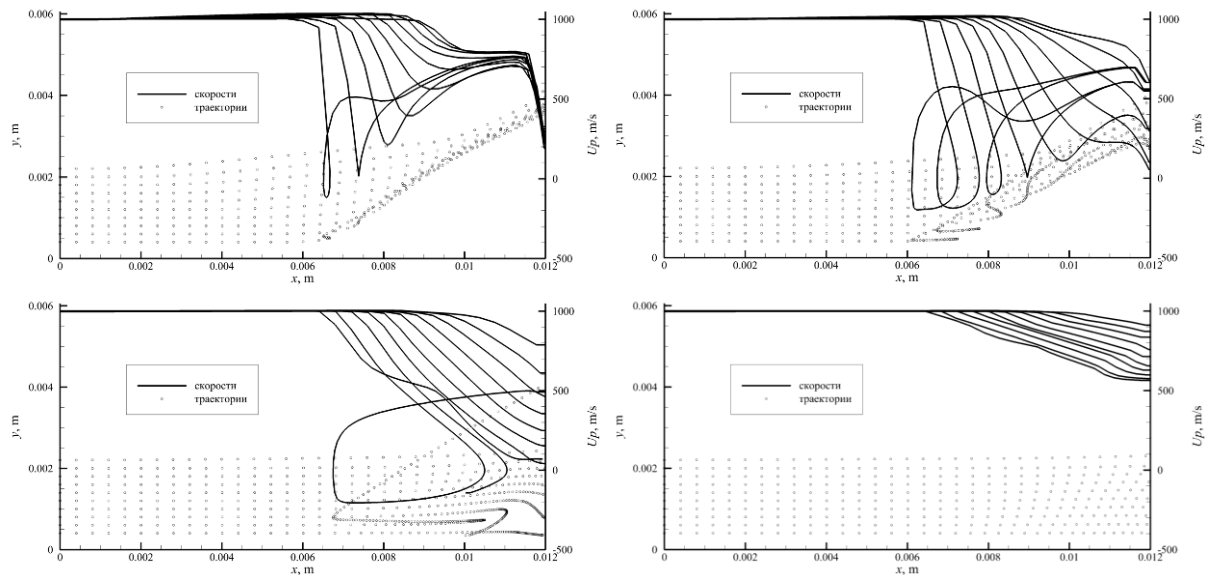


Рис. 4 Траектории и скорости частиц различного диаметра
(а – 0.2 мкм, б – 0.5 мкм, в – 2 мкм, г – 5 мкм)

Заключение. На базе пакета ANSYS Fluent создана математическая технология моделирования натекания струи двухфазной разреженной газозвеси частиц микро- и субмикронных размеров на тело с иглой при числах Маха 2-3.

На ее основе показано, что частицы, размер которых превышает 5 мкм, будут иметь практически прямолинейную траекторию и скорость достаточную для напыления, а частицы диаметром менее 0.2 мкм будут огибать отрывную зону, формирующуюся около иглы, и их скорость будет существенно меньше критической.

Литература.

1. Алхимов А. П., Клинков С. В., Косарев В. Ф., Фомин В. М. Холодное газодинамическое напыление. Теория и практика. — М. Физматлит, 2010, 536 с.
2. Хендерсон. Коэффициенты сопротивления сферы в течениях разреженного газа и сплошной среды // Ракетная техника и космонавтика. 1976. № 6. С. 5–7.

§ 1.2. Расчет волновой интерференции и релаксации частиц при прохождении ударной волны

Введение. При построении математических моделей реагирующих (инертных) гетерогенных сред представляет интерес информация о локальных характеристиках поля течения, возникающего при взаимодействии газовой фазы и мелких частиц дискретной фазы. При прохождении ударной волны через облако частиц характеристики процесса обтекания (сопротивление частицы, скорость ее теплообмена с окружающей средой, времена воспламенения и горения мелких частиц металлов и др.) зависят от режима обтекания. В свою очередь режим обтекания частиц зависит, во-первых от того, сформировался ли коллективный скачок перед облаком частиц или частицы обтекаются индивидуально [1, 2], а во-вторых, от того, находится ли частица в аэродинамической тени других частиц. В работе [1] сформулирован критерий существования коллективной волны перед совокупностью частиц в виде условия смыкания дозвуковых зон перед ними, а также приведены некоторые оценки этого явления, основанные на численных данных, полученных при решении задачи об обтекании тел несферической формы. В [3] экспериментально и теоретически исследовано распространение ударных волн в облаке частиц. В результате расчетов с использованием континуально-дискретной модели течения ламинарной смеси газа и частиц установлено, что происходит перестройка сверхзвукового потока за ударной волной в облаке частиц в диапазоне значений объемной доли дисперсной фазы $0,1 \div 3,0 \%$

В работе [4] для выявления режимов взаимодействия отошедших ударных волн перед телами численно решена задача об ударном обтекании перпендикулярно потоку, расположенного цилиндра и сферы. На рис. 1 приведены схемы возможных режимов взаимодействия ударных волн при обтекании частиц, расположенных перпендикулярно набегающему потоку. В [4] численно показано, что в зависимости от числа Маха сверхзвукового потока за ударной волной M_1 и расстояния между сферами $\lambda = l/d$ могут быть реализованы различные режимы обтекания частиц. На расстоянии, меньшем некоторого критического расстояния, перед телами может образовываться коллективная ударная волна (режим I на рис. 1, б). При увеличении расстояния происходит переход к режиму обтекания сначала с маховским взаимодействием ударных волн (режим II на рис. 1, б), а затем с регулярным (режим III на рис. 1, б). В [4] показано, что в случае малого расстояния между телами, при прохождении ударной волны происходит переход от режима регулярного отражения к режиму маховского взаимодействия ударных волн, а затем к режиму обтекания с коллективной ударной волной. На основе расчетных данных построена карта режимов обтекания системы поперечных цилиндров и системы сфер в зависимости от числа Маха и расстояния между телами.

Представляется целесообразным провести анализ влияния режима обтекания частицы на ее сопротивление и теплообмен в рамках модели турбулентного течения газа, рассматривая частицы расположенные не только перпендикулярно набегающей ударной волне, но и вдоль нее.

На рис. 2 показаны схемы режимов, возможных при обтекании двух частиц, расположенных вдоль набегающего потока. При горизонтальном положении частиц режим обтекания частицы, которая находится в аэродинамической тени, зависит от скорости сверхзвукового потока за ударной волной и расстояния между частицами. При расстоянии, меньшем критического расстояния перед второй частицей не образуется прямой скачок уплотнения, так как поток в следе за первой частицей остается дозвуковым (режим I на рис. 2). При превышении критического расстояния частицы обтекаются индивидуально (режим II на рис. 2). Целью настоящей работы является численное исследование характеристик взаимодействия

проходящей ударной волны с системой тел для определения влияния режима обтекания на коэффициент сопротивления, время тепловой и скоростной релаксации частиц.

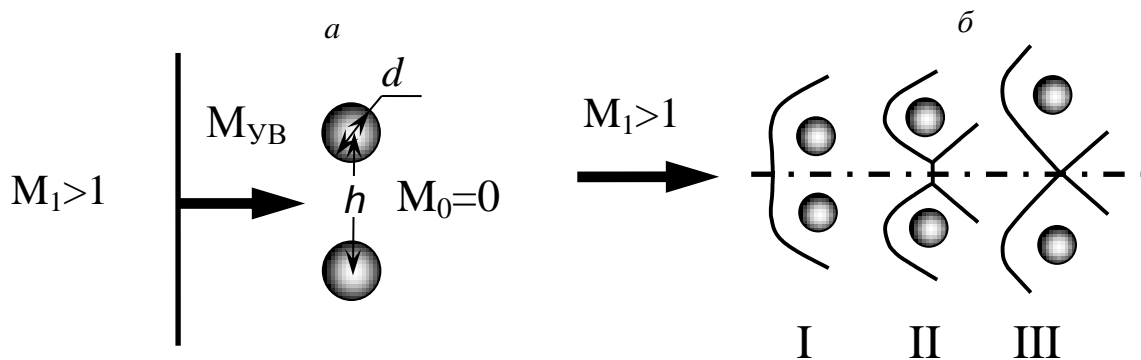


Рис. 1 Схема режимов взаимодействия ударных волн в случае частиц, расположенных перпендикулярно потоку:

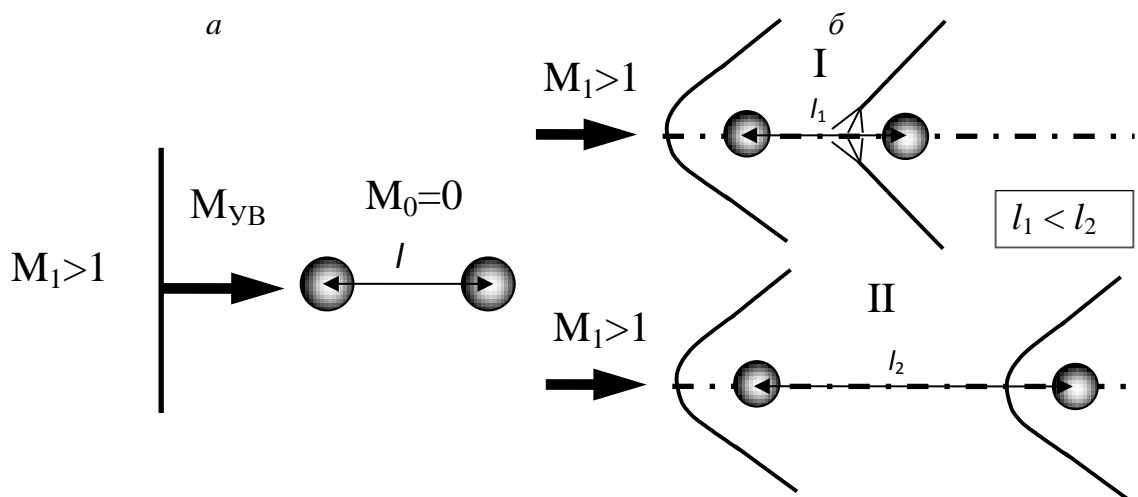


Рис. 2 Схема режимов течения в случае частиц, расположенных вдоль потока: *a* – момент времени, когда ударная волна не дошла до частиц, *б* – момент времени, когда частицы обтекаются стационарным сверхзвуковым потоком.

Математическая модель и численный алгоритм, используемые в расчетах. Моделирование выполнено в расчетном пакете ANSYS Fluent. В [4] проведено сравнение картин обтекания сферы вязким турбулентным и невязким газами. Показано, что в обоих случаях волновая картина течения практически одна и та же, но в случае невязкого обтекания в области расширения за сферой наблюдается большее разрежение. Существенные различия имели место в следе за сферой. В случае учета вязкости дозвуковая область вследствие диссипации быстро уменьшалась, а в случае невязкого обтекания зона низкоскоростного течения распространялась на значительно большее расстояние за сферой. Число Рейнольдса для рассматриваемых параметров течения превышает 10^3 . Таким образом, в данной задаче необходимо учитывать вязкость и турбулентность. В качестве математической модели использовались осредненные по Фавру нестационарные уравнения Навье–Стокса, дополненные SST ($k-\omega$)-моделью турбулентности и уравнением состояния идеального газа. Для аппроксимации по времени использовалась неявная схема второго порядка, а для аппроксимации по пространству невязких потоков — схема расщепления AUSM третьего порядка точности.

В двумерных нестационарных расчетах использовалась четырехугольная сетка, которая сгущалась в направлении к поверхности тела и динамически адаптировалась по градиенту плотности к газодинамическим особенностям течения (ударным волнам, контактными разрывам, волнам разрежения). При построении сетки контролировался параметр y^+ на поверхно-

сти частицы, который во всех расчетах не превышал единицы. В начальный момент времени до адаптации сетка имела 400 узлов в продольном направлении и 200 узлов в поперечном направлении. Нижняя граница расчетной области в данной задаче являлась линией симметрии. Верхняя граница в задаче о взаимодействии с частицами, расположенными перпендикулярно потоку (см. рис. 1), также была линией симметрии. В задаче об обтекании сфер, расположенных вдоль потока (см. рис. 2) на верхней границе задавались «мягкие» граничные условия. На левой границе ставились входные граничные условия, соответствующие параметрам за ударной волной, на правой границе — «мягкие» граничные условия. В качестве начальных данных задавалось поле параметров рассчитанных для ударной волны, распространяющейся с заданной скоростью. Перед ударной волной задавались давление $P_0 = 10^5$ Па и температура $T_0 = 300$ К.

Влияние режима обтекания на сопротивление частицы. Рассмотрим нестационарную задачу о падении ударной волны с числом Маха $M_{УВ}=3$ на систему частиц диаметром 100 мкм, расположенных перпендикулярно ей (см. рис. 1). На рис. 3 показана зависимость коэффициента сопротивления частицы от времени при режимах коллективного ($\lambda = 5$) и индивидуального ($\lambda = 20$) обтекания. Видно, что режим обтекания частиц оказывает незначительное влияние на коэффициент сопротивления. В случае режима коллективного обтекания в диапазоне $1 \text{ мкс} < t < 2 \text{ мкс}$ коэффициент сопротивления уменьшается, что обусловлено приходом отраженной от оси симметрии ударной волны в зону за частицей и соответствующим повышением давления в этой зоне.

Можно предположить, что наиболее существенное изменение сопротивления частицы имеет место в том случае, если она расположена в тени другой частицы.

Взаимодействие набегающей ударной волны с двумя сферами, расположенными вдоль нее. Рассмотрим нестационарную задачу о падении ударной волны на систему, состоящую из двух сферических частиц, расположенных вдоль нее (см. рис. 2). На рис. 4 показаны поля плотности для набегающей ударной волны с числом Маха $M_{УВ}=3$ в различные моменты времени. Относительное расстояние между центрами сфер $\kappa = l/d = 2$. На рис. 4 видно, что по мере прохождения ударной волны перед обеими сферами формируются скачки уплотнения (см. рис. 4, а-в). Однако со временем скачок уплотнения перед второй сферой начинает разрушаться (см. рис. 4, г, д) и исчезает вследствие развития дозвуковой зоны за первой сферой (см. рис. 4, е). С увеличением расстояния между частицами дозвуковая зона постепенно исчезает и перед второй частицей образуется ударная волна, размер дозвуковой зоны перед второй сферой уменьшается до минимального и ударная волна перед второй частицей перестает разрушаться.

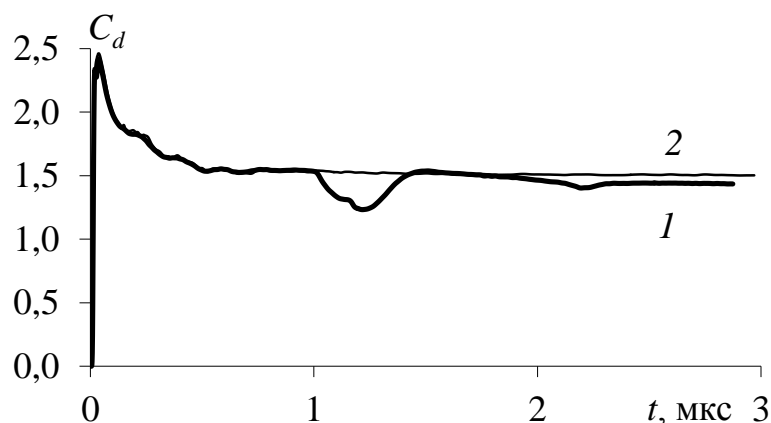


Рис. 3. Зависимость коэффициента сопротивления частицы от времени при режимах коллективного (1) и индивидуального (2) обтекания.

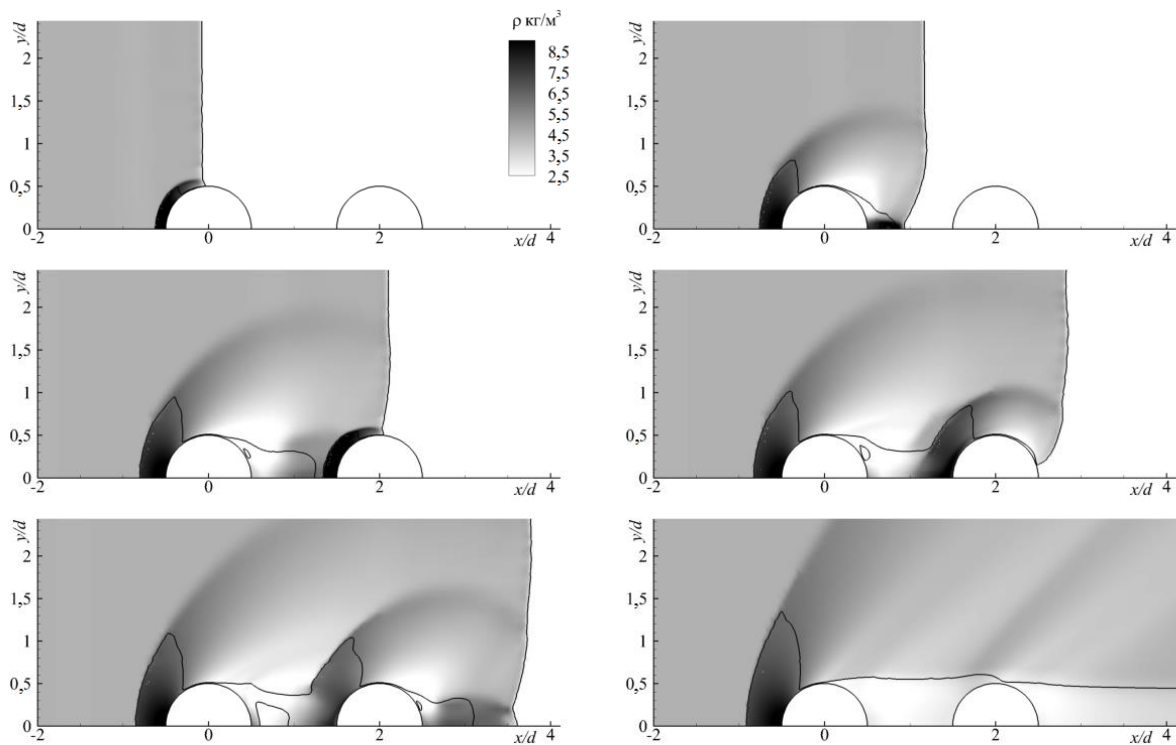


Рис. 4 Поля плотности при $M_{УВ}=3$, $\kappa = 2$ в различные моменты времени.
 $a - 0,28$ мкс, $b - 0,4$ мкс, $в - 0,49$ мкс, $г - 0,56$ мкс, $д - 0,65$ мкс, $e - 4$ мкс

Коэффициент сопротивления частиц. Проведено исследование влияния на коэффициент сопротивления расстояния между двумя частицами, в случае если одна из них располагается в аэродинамической тени другой. На рис. 5 показана зависимость коэффициента сопротивления от времени при различных расстояниях между частицами. Время нормировано на характерное время $t_0 = d/a$, (a – скорость звука за ударной волной). На рис. 5 видно, что на всех кривых имеется пик, соответствующий приходу ударной волны на частицу, причем в случае малого расстояния между частицами (кривая 2) значение C_d является максимальным. Кроме того, не только первая частица оказывает влияние на вторую. Коэффициент сопротивления первой частицы уменьшается, если расстояние между частицами $\kappa < 5$. Такое влияние обусловлено тем, что в случае малого расстояния между частицами в донной области первой частицы давление увеличивается (см. рис. 4, e) и частицы обтекаются как удлиненное тело. При увеличении расстояния влияние сфер на коэффициент сопротивления уменьшается и при $x > 10$ влияние изменение C_d не превышает 20 %.

На рис. 6 представлены зависимости коэффициента сопротивления от числа Маха потока для первой и второй частиц при $Re = 7500$ и различных расстояниях между частицами, полученные в двухмерных расчетах, а также зависимости, полученные по трем известным аппроксимационным формулам для коэффициента сопротивления [4-6]. Видно, что при $\kappa = 2$ коэффициент сопротивления первой частицы уменьшается. При $\kappa = 5, 10, 20$ вторая частица не оказывает влияние на первую. При $\kappa = 2$ значение коэффициента сопротивления для второй частицы существенно меньше, чем для первой, затем оно увеличивается. Однако даже при $\kappa \approx 20$ значение C_d меньше соответствующего значения для первой частицы. Следовательно, при увеличении расстояния между частицами сопротивление второй частицы стремится к сопротивлению первой, что соответствует независимому обтеканию частиц. Кроме того при увеличении расстояния между частицами сопротивление первой частицы стремится к предельному значению и становится равным сопротивлению одиночной частицы.

Таким образом, в результате решения задачи о взаимодействии ударной волны со сферическими частицами вычислены расстояния между частицами и значения объемной концентрации, при которых взаимное влияние частиц сохраняется. Расчеты, проведенные в [4],

показывают, что в случае расположения частиц перпендикулярно потоку переход от режима коллективного обтекания частиц к режиму индивидуального обтекания при $M_{УВ} = 2 \div 6$ происходит при значениях $\lambda = 2 \div 5$, т.е. при относительной объемной концентрации частиц $m_2 = 6 \cdot 10^{-2} \div 4 \cdot 10^{-3}$. При расположении одной частицы в следе другой влияние первой частицы на коэффициент сопротивления второй сохраняется вплоть до значения $\kappa = 20$, что соответствует значению $m_2 = 6 \cdot 10^{-5}$. В данном случае рассматривался вариант наиболее существенного воздействия первой частицы на вторую, когда они располагаются на одной оси. Также следует отметить, что в данной работе сферы считаются неподвижными, в то время как в действительности прохождение ударной волны вызывает перемещение частиц. Поэтому, для того чтобы выяснить при каких значениях m_2 газодинамическое взаимовлияние частиц сохраняется, необходимо провести моделирование задачи, в случае когда частицы не расположены на одной оси и движутся под действием ударной волны.

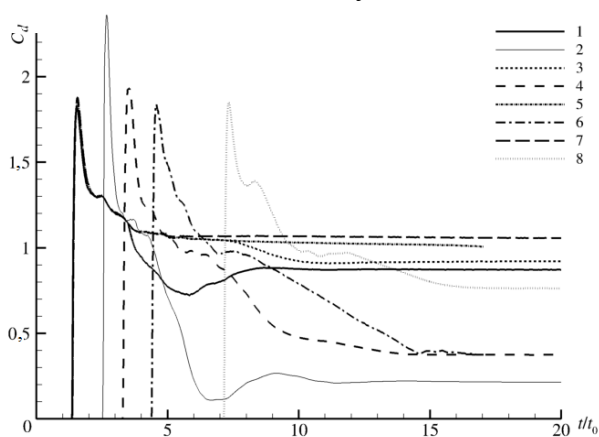


Рис. 5 Зависимость коэффициента сопротивления от времени: 1, 3, 5, 7 – первая частица (1 – $\kappa = 2$, 3 – $\kappa = 3$, 5 – $\kappa = 5$, 7 – $\kappa = 10$); 2, 4, 6, 8 – вторая частица (2 – $\kappa = 2$, 4 – $\kappa = 3$, 6 – $\kappa = 5$, 8 – $\kappa = 10$)

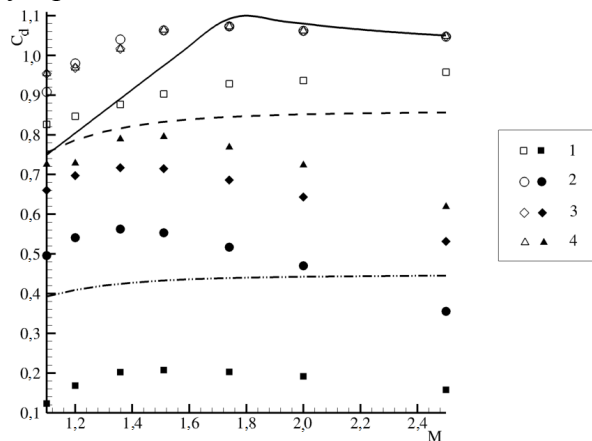


Рис. 6 Зависимость коэффициента сопротивления первой (светлые точки) и второй (темные точки) частиц от числа Маха потока за ударной волной: линии – результаты, полученные с использованием аппроксимационных формул.

Тепловая релаксация частиц в рамках сопряженного подхода. Решение данной задача заключается в определении температуры частиц, находящихся под действием высокотемпературного газа, нагретого проходящей ударной волной. Выполнены расчеты сопряженной задачи обтекания и теплообмена алюминиевых частиц различного размера (10 мкм \div 1 мм) для определения динамики тепловой релаксации частиц в зависимости от числа Рейнольдса. Ударная волна имела следующие параметры: $M_{УВ} = 3$, $U_1 = 771$ м/с, $T_1 = 803$ К.

На рис. 7 показано изменение во времени осредненных по объему температур первой (кривая 1) и второй (кривая 2) частиц диаметром 100 мкм при их расположении вдоль потока на расстоянии друг от друга, на равном 200 мкм. Видно, что температура первой частицы больше температуры второй (приблизительно на 70 К). Это объясняется изменением волновой картины обтекания второй частицы (см. рис. 4, e). В дозвуковом следе за первой частицей не образуется ударная волна перед второй частицей, что приводит к уменьшению параметров торможения и соответственно температуры газа. При увеличении расстояния между частицами различие их температур исчезает, что обусловлено режимом индивидуального обтекания.

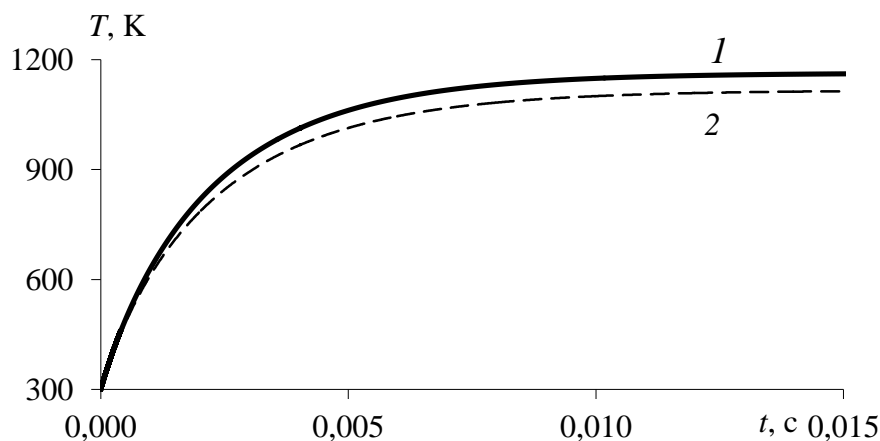


Рис. 7 Тепловая релаксация алюминиевых частиц:
1 – первая частица, 2 – вторая частица

Сравнение результатов, полученных в рамках приближенной модели релаксации и двумерной модели обтекания. Проведено сравнение времен тепловой релаксации для первой частицы, полученных при двумерном сопряженном расчете и расчете по приближенной модели с использованием системы двух обыкновенных дифференциальных уравнений для скорости и температуры частицы:

$$\frac{dU_p}{dt} = \frac{3}{4} \frac{C_d \rho_g}{\rho_p d_p} (U_g - U_p) |U_g - U_p| \quad (1)$$

$$\frac{dT_p}{dt} = 6 \frac{Nu \lambda_g}{\rho_p c_p d_p^2} (T_g - T_p) \quad (2)$$

В приближенной модели использованы аппроксимация [7] для коэффициента сопротивления C_d и эмпирическая зависимость для числа Нуссельта $Nu = 2 + 0.6 Re^{1/2} Pr^{1/3}$. На рис. 8 и в табл. 1 приведены зависимости релаксационных характеристик теплообмена частицы от ее диаметра (T – температура, к которой стремится средняя температура частицы при двумерном расчете; τ_{T1} – время, в течении которого происходит тепловая релаксация неподвижной частицы при двумерном расчете; τ_{T2} – время, в течении которого происходит тепловая релаксация частицы в соответствии с приближенной моделью без учета скоростной релаксации; τ_{T3} – время, в течении которого происходит тепловая релаксация в соответствии с приближенной моделью с учетом скоростной релаксации частицы; τ_U – время, в течении которого происходит скоростная релаксация в соответствии с приближенной моделью). На рис. 8 масштаб величин на осях является логарифмическим. При таком представлении все три графика практически линейные, что соответствует степенному закону зависимости времени релаксации от диаметра. При увеличении диаметра результаты расчетов по двумерной и приближенной моделям без учета скоростной релаксации сближаются. На рис. 8 видно, что учет скоростной релаксации существенно влияет на время тепловой релаксации (кривая 3). В последней графе табл. 1 приведено отношение времен скоростной и тепловой релаксации. Из табл. 1 следует, что время скоростной релаксации всегда меньше времени тепловой релаксации и для частицы диаметром 1 мм эти времена различаются в 10 раз.

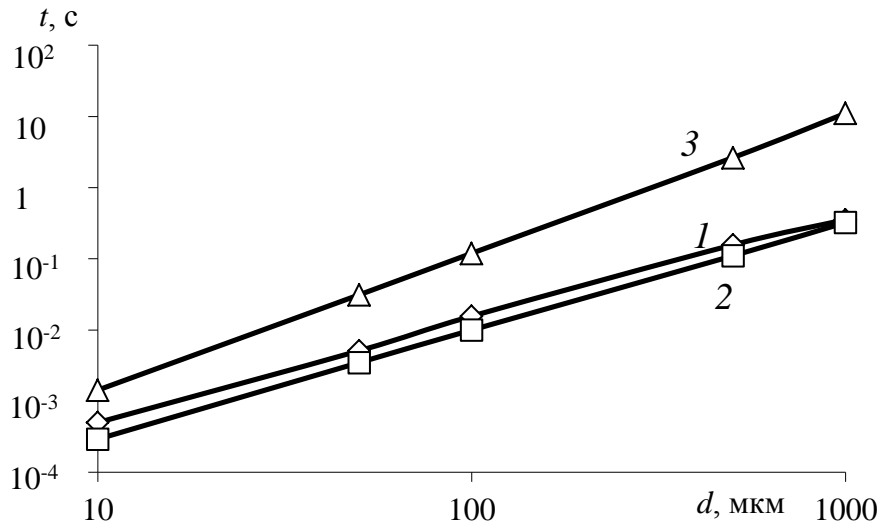


Рис. 8 Тепловая релаксация, вычисленная по двум моделям:
 1 – расчет по двумерной модели, 2, 3 – расчет по приближенной модели
 (2 – без учета скоростной релаксации, 3 – с учетом скоростной релаксации)

Таблица 1

Зависимость тепловой релаксации от диаметра частиц, полученная по двум моделям

d , мкм	T , К	τ_{T1} , с	τ_{T2} , с	τ_{T3} , с	τ_U , с	τ_U/τ_{T3}
10	1186	$5,0 \cdot 10^{-4}$	$2,92 \cdot 10^{-4}$	$1,43 \cdot 10^{-3}$	$9,49 \cdot 10^{-4}$	$6,64 \cdot 10^{-1}$
50	1182	$5,10 \cdot 10^{-3}$	$3,48 \cdot 10^{-3}$	$3,12 \cdot 10^{-2}$	$1,36 \cdot 10^{-2}$	$4,36 \cdot 10^{-1}$
100	1180	$1,56 \cdot 10^{-2}$	$9,98 \cdot 10^{-3}$	$1,20 \cdot 10^{-1}$	$4,03 \cdot 10^{-2}$	$3,37 \cdot 10^{-1}$
500	1179	$1,57 \cdot 10^{-1}$	$1,10 \cdot 10^{-1}$	2,65	$4,38 \cdot 10^{-1}$	$1,66 \cdot 10^{-1}$
1000	1175	$3,55 \cdot 10^{-1}$	$3,24 \cdot 10^{-1}$	11,1	1,12	$1,01 \cdot 10^{-1}$

Совместный расчет скоростной и тепловой релаксации частиц в рамках двумерной модели. Приведем результаты прямого моделирования скоростной и тепловой релаксации одиночной сферической частицы и проведем сравнение этих данных с результатами расчета по приближенной модели. Двумерные расчеты проведены для скорости частицы, при которой относительная скорость $U_g - U_p \leq a$.

На рис. 9 показана зависимость скорости частицы от времени при прохождении ударной волны для различных диаметров частиц. Число Маха ударной волны равно $M_{ув} = 3$. Параметры за ударной волной имеют значения: $U_1 = 771$ м/с, $T_1 = 803$ К. Скорость и время приведены в безразмерных координатах. На рис. 10 видно, что при таком представлении с увеличением диаметра кривые с ростом сближаются. Это вызвано тем, что ускорение частицы обратно пропорционально ее диаметру (см. (1)), а коэффициент сопротивления с увеличением диаметра, а значит, и числа Рейнольдса при постоянном числе Маха стремится к константе.

На рис. 10 приведены результаты двумерных расчетов скоростной релаксации и расчетов по приближенной модели. Очевидно, что прямой расчет дает несколько более быстрое ускорение частиц, чем расчет по приближенной модели.

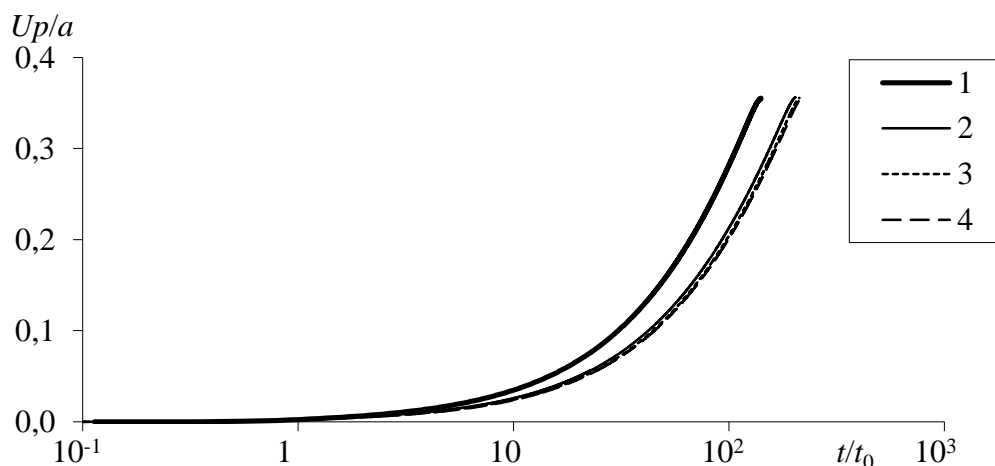


Рис. 9 Зависимость скорости частицы от времени при различных диаметрах частиц:
 1 – $d = 1$ мкм, 2 – $d = 10$ мкм, 3 – $d = 100$ мкм, 4 – $d = 1000$ мкм

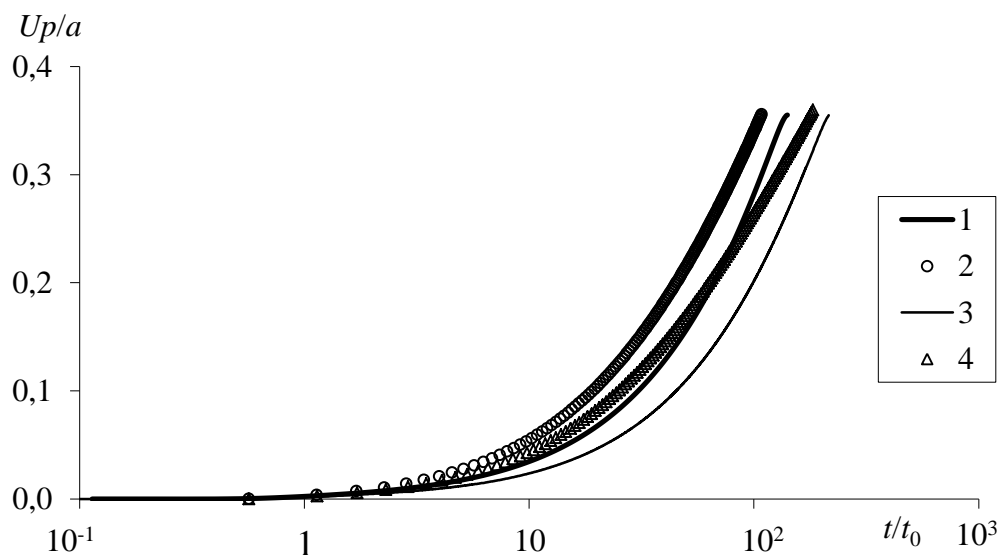


Рис. 10 Результаты расчетов скоростной релаксации по двумерной (1, 3) и приближенной (2, 4) моделям: 1, 2 – $d = 1$ мкм, 3, 4 – $d = 1000$ мкм

В табл. 2 и на рис. 11 приведены времена скоростной релаксации частиц, вычисленные по двум моделям при различных диаметрах частиц в диапазоне $1 \div 1000$ мкм (τ_{U1} – время, в течение которого происходит скоростная релаксация в соответствии с двумерной моделью; τ_{U2} – время, в течение которого происходит скоростная релаксация в соответствии с приближенной моделью). Времена, рассчитанные по двум моделям, различаются приблизительно на 20 %. В последней графе табл. 2 приведены средние значения температуры частицы, полученные по двумерной модели в случае, когда относительная скорость частицы равна скорости звука за ударной волной. Из табл. 2 следует, что даже для частицы диаметром 1 мкм температура в конце сверхзвукового участка не превышает начальную температуру частицы более чем на 100 К. Данные, приведенные в табл. 1, 2 позволяют сделать вывод, что в основном прогрев частицы происходит на дозвуковом участке и после окончания скоростной релаксации.

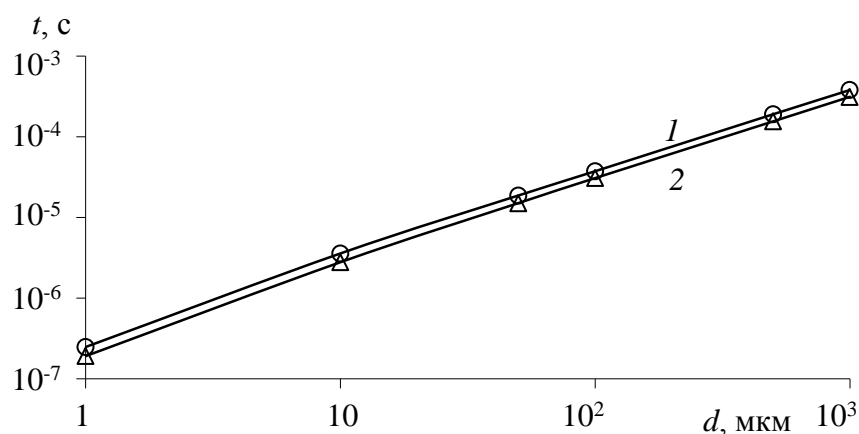


Рис. 11 Скоростная релаксация частиц, вычисленная по двум моделям
1 – двумерная модель, 2 – приближенная модель

Таблица. 2

Зависимость скоростной релаксации частиц от их диаметра, полученная по двум моделям

d , мкм	τ_{U1} , с	τ_{U2} , с	T , К
1	$2.48 \cdot 10^{-7}$	$1.91 \cdot 10^{-7}$	389
10	$3.58 \cdot 10^{-6}$	$2.79 \cdot 10^{-6}$	338
50	$1.87 \cdot 10^{-5}$	$1.51 \cdot 10^{-5}$	320
100	$3.74 \cdot 10^{-5}$	$3.07 \cdot 10^{-5}$	316
500	$1.90 \cdot 10^{-4}$	$1.55 \cdot 10^{-4}$	310
1000	$3.79 \cdot 10^{-4}$	$3.12 \cdot 10^{-4}$	308

Заключение. В работе с использованием численных методов решена задача об обтекании системы неподвижных частиц, расположенных вдоль потока и перпендикулярно ему. Получена волновая картина взаимодействия проходящей ударной волны с частицами, расположенными вдоль потока и перпендикулярно ему в различные моменты времени.

Показано, что в случае частиц, расположенных перпендикулярно потоку, режим обтекания оказывает незначительное влияние на коэффициент сопротивления, а в случае частиц, расположенных вдоль потока, их взаимное влияние сохраняется на большом расстоянии ($\square = 20$).

Оценки времени скоростной и тепловой релаксации алюминиевых частиц в зависимости от числа Рейнольдса показали, что в основном прогрев частицы происходит при дозвуковой относительной скорости и после окончания скоростной релаксации.

Литература

1. Благосклонов В.И., Кузнецов В.М., Минайлос А.Н., Стасенко А.Л., Чеховский В.Ф. О взаимодействии гиперзвуковых неадиабатических течений // ПМТФ. 1979. №5. С.59-67
2. Бойко В.М., Клинков К.В., Поплавский С.В. Коллективный головной скачок перед поперечной системой сфер в сверхзвуковом потоке за проходящей ударной волной // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. 2004. № 2. С.183-192.
3. Бойко В.М., Киселёв В.П., Киселев С.П и др. О взаимодействии ударной волны с облаком частиц // Физика горения и взрыва, 1996. Т. 32. № 2. С. 86-99.
4. Бедарев И.А., Федоров А.В., Фомин В.М. Численный анализ течения около системы тел за проходящей ударной волной // Физика горения и взрыва, 2012. Т 48. № 4. С. 83-92.
5. Бойко В.М., Фомин В.М., Киселев В.П. и др. О некоторых особенностях течения газа при взаимодействии ударной волны с облаком частиц // Докл. АН. 1995. Т. 340. № 2. С. 188-190.
6. Карлсон Д., Хоглунд Р. Сопротивление и теплоотдача частиц в соплах ракетных двигате-

лей // Ракетная техника и космонавтика. 1964. № 11. Т. 2, С. 104–109.

7. Хендерсон С.В. Коэффициент сопротивления сферы в течениях разреженного газа и сплошной среды // Ракетная техника и космонавтика, 1976. Т. 14, №6. С.5-7.

§ 1.3. Прямое моделирование релаксации нескольких частиц за проходящими ударными волнами

Введение. Построение математических моделей механики реагирующих/инертных гетерогенных сред требует точного представления о локальных параметрах поля течения, возникающего при взаимодействии газовой фазы и мелких частиц дискретной фазы [1]. При математическом моделировании прохождения ударной волны через облако частиц скоростная и тепловая релаксация единичной частицы определяется такими характеристиками как коэффициенты сопротивления и теплообмена, которые в свою очередь зависят от режима обтекания частиц в облаке.

Задача о взаимодействии ударных и детонационных волн с облаками инертных/реагирующих микрочастиц в основном исследуется в приближении континуальных или дискретно-континуальных моделей. Целью настоящей работы было численное изучение количественных характеристик взаимодействия проходящей ударной волны с системой подвижных сфер для определения влияния режима обтекания на коэффициент сопротивления, время скоростной релаксации частиц.

Математическая модель и численная реализация. В рамках пакета компьютерного газодинамического анализа ANSYS Fluent с применением решателя 6DOF для достижения поставленной цели была создана вычислительная технология прямого численного моделирования скоростной и тепловой динамики совокупности нескольких частиц. В качестве математической модели для описания течения газа в окрестности данной совокупности частиц использовались осредненные по Фавру нестационарные уравнения Навье-Стокса, дополненные SST модификацией $k-\omega$ модели турбулентности и уравнением состояния идеального газа. Для моделирования теплообмена между газом и частицами решалась сопряжённая задача теплопроводности. Расчеты выполнены в осесимметричной постановке. Для аппроксимации по времени использована неявная схема второго порядка, а для аппроксимации невязки потоков по пространственной переменной использована схема расщепления AUSM третьего порядка точности. Для учета столкновений между частицами использована модель их упругого взаимодействия. В расчетах применялась подвижная четырехугольная сетка, которая сгущалась к поверхности тела и динамически адаптировалась по градиенту плотности к газодинамическим особенностям течения (ударным волнам, контактными разрывам, волнам разрежения). В окрестности частиц, движущихся в газовой среде под действием распространяющейся ударной волны, сетка перемещалась вместе частицами по мере их движения в потоке газа, возникающем под воздействием ударной волны. При построении сетки контролировался параметр y^+ на поверхности частицы, который во всех расчетах не превышал единицы. На рис. 1 приведен пример такой расчетной сетки, адаптированной в процессе решения. Подобная расчетная методика была протестирована нами ранее в [13]. На рисунке ясно видно как расчетная сетка подстраивается к особенностям течения: головным и висящим ударным волнам, проходящей ударной волне, возникающим в течении в окрестности системы двух микротел.

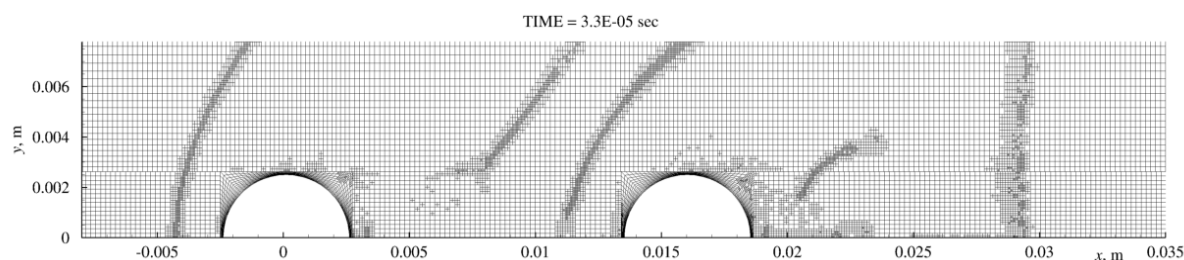


Рис. 1. Пример динамически адаптированной расчетной сетки

Результаты расчетов. Ранее в [13] нами была решена задача об обтекании системы неподвижных частиц при их продольном и поперечном взаимном расположении и одиночных частиц с учетом скоростной и тепловой релаксации. Рассчитана волновая картина взаимодействия проходящей ударной волны с поперечно и продольно расположенными частицами в различные моменты времени. Показано, что при поперечном расположении частиц режим обтекания слабо влияет на коэффициент сопротивления, а при продольном расположении взаимное влияние частиц сохраняется вплоть до 20 калибров, что соответствует объемной концентрации $m_2=6 \cdot 10^{-5}$. Оценки времени скоростной и тепловой релаксации частиц в зависимости от числа Рейнольдса показали, что основной прогрев частицы будет происходить на дозвуковом участке относительной скорости и после окончания этапа скоростной релаксации. Сделан вывод о необходимости **учета движения** под воздействием ударной волны массива частиц для выявления предельных положений взаимовлияния частиц. В данной работе исследуется аналогичный процесс взаимодействия проходящих ударных волн и системы уже незакрепленных частиц, которые двигаются под действием ударной волны. Моделируется движение двух и трех частиц диаметром 5 мм с учетом газодинамических сил и проведено сравнение с экспериментальными данными [14]. Параметры ударной волны соответствовали экспериментальным условиям: число Маха ударной волны $M_{yB} = 3$, давление $P_0 = 10^5$ Па и температура $T_0 = 295$ К, где индекс 0 обозначает параметры перед ударной волной.

На рис. 2 представлены данные о динамике двух частиц при прохождении ударной волны. Здесь приведены экспериментальные теневые снимки [14] и расчетные поля плотности в различные моменты времени. Рис. 2 позволяет проследить за изменением газодинамической картины обтекания частиц по мере продвижения ударной волны и сближения частиц. Видно, что в начале и перед первой, и перед второй частицами образуется головной скачок уплотнения (рис. 2 момент времени $t = 2.3 \cdot 10^{-5}$ с), что свидетельствует о сверхзвуковом режиме их обтекания. Однако, по мере развития дозвукового следа за первой сферой, ударная волна перед второй начинает разрушаться с образованием хвостового скачка и λ -структуры (рис. 2 моменты времени $t = 5.3 \cdot 10^{-5}$ и $8.3 \cdot 10^{-5}$ с). В дальнейшем за счет большей скорости первой частицы, сферы начинают сближаться, и вторая частица оказывается целиком в дозвуковом следе первой частицы. Это обусловлено большей силой сопротивления, действующей на первую частицу. Обтекание второй частицы происходит в дозвуковом режиме с меньшей силой сопротивления (рис. 2 моменты времени $t = 17.3 \cdot 10^{-5}$ и $36.3 \cdot 10^{-5}$ с).

На рис. 3 показана динамика трех частиц при прохождении ударной волны с числом Маха 3. Вновь представлены экспериментальные теневые снимки [14] и расчетные поля плотности и изолинии давления в различные моменты времени. Сравнение расчетных и экспериментальных картин показывает неплохое согласование результатов по динамике трех частиц до соударения первых двух.

Убедиться в этом позволяют результаты, отраженные на рис. 4, где представлены экспериментальные (кривые 1, 2) и расчетные (кривые 3, 4) траекторные характеристики частиц. На рис 4, а показано изменение расстояния между двумя сферами, в начальный момент расположенными на расстоянии между центрами $1,56 d$ (d – диаметр частицы) (кривые 1, 3) и $3,2 d$ (кривые 2, 4). На рисунке видны моменты соударения частиц. Можно отметить, что в эксперименте для случая расстояния между центрами $1,56 d$ при столкновении наблюдается, по-видимому, деформация частиц, так как центры частиц сближаются на расстояние меньше единицы. В эксперименте использовались полые сферы и их деформация вполне предсказуема. В данном расчете соударение считалось абсолютно упругим, поэтому дальнейшая динамика частиц в расчете и эксперименте заметно отличается. Этот факт – диссипация энергии требует дальнейшего исследования.

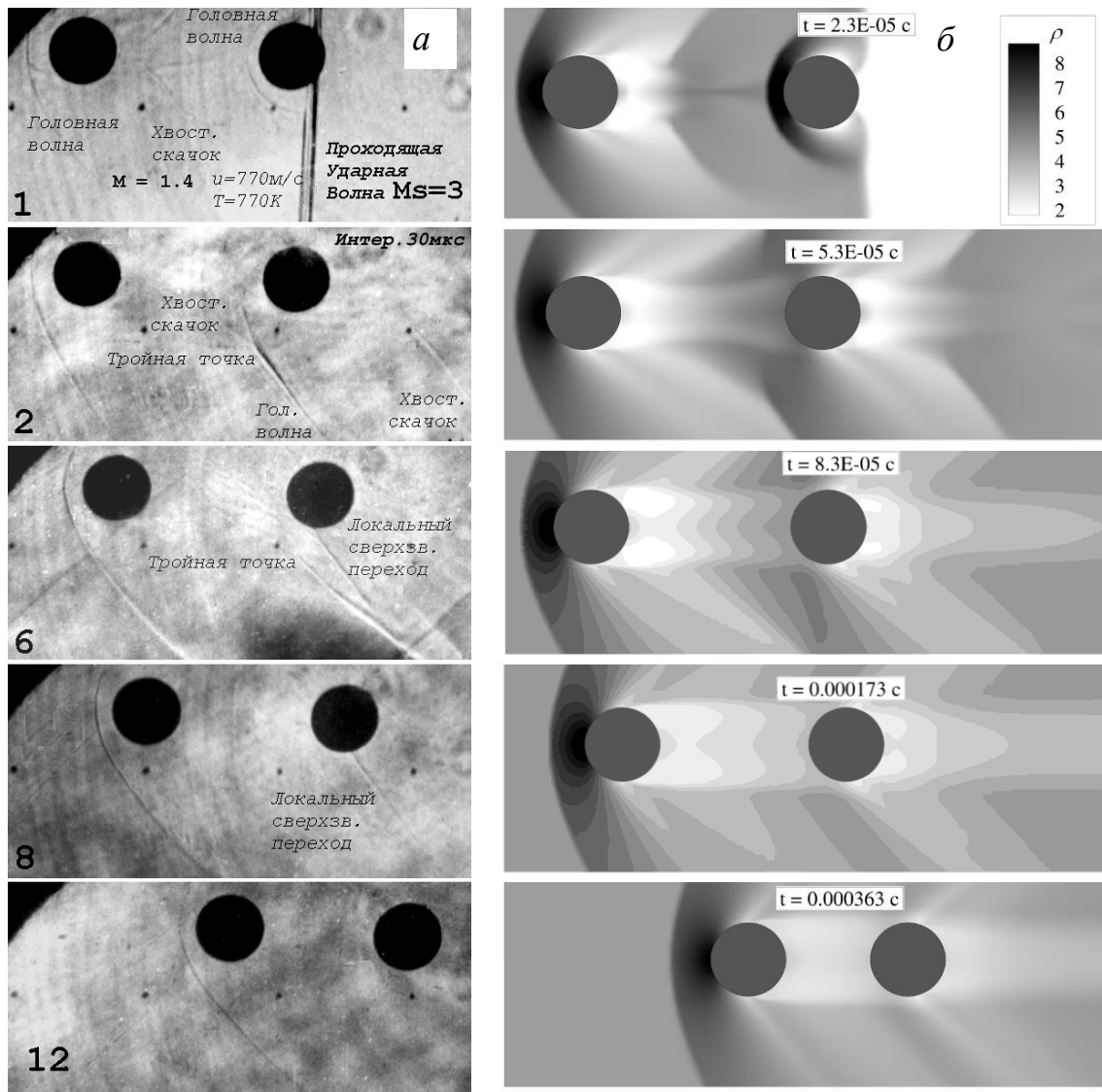


Рис. 2 Сравнение экспериментальных полей течения (а) и расчетных полей плотности (б) в различные моменты времени.

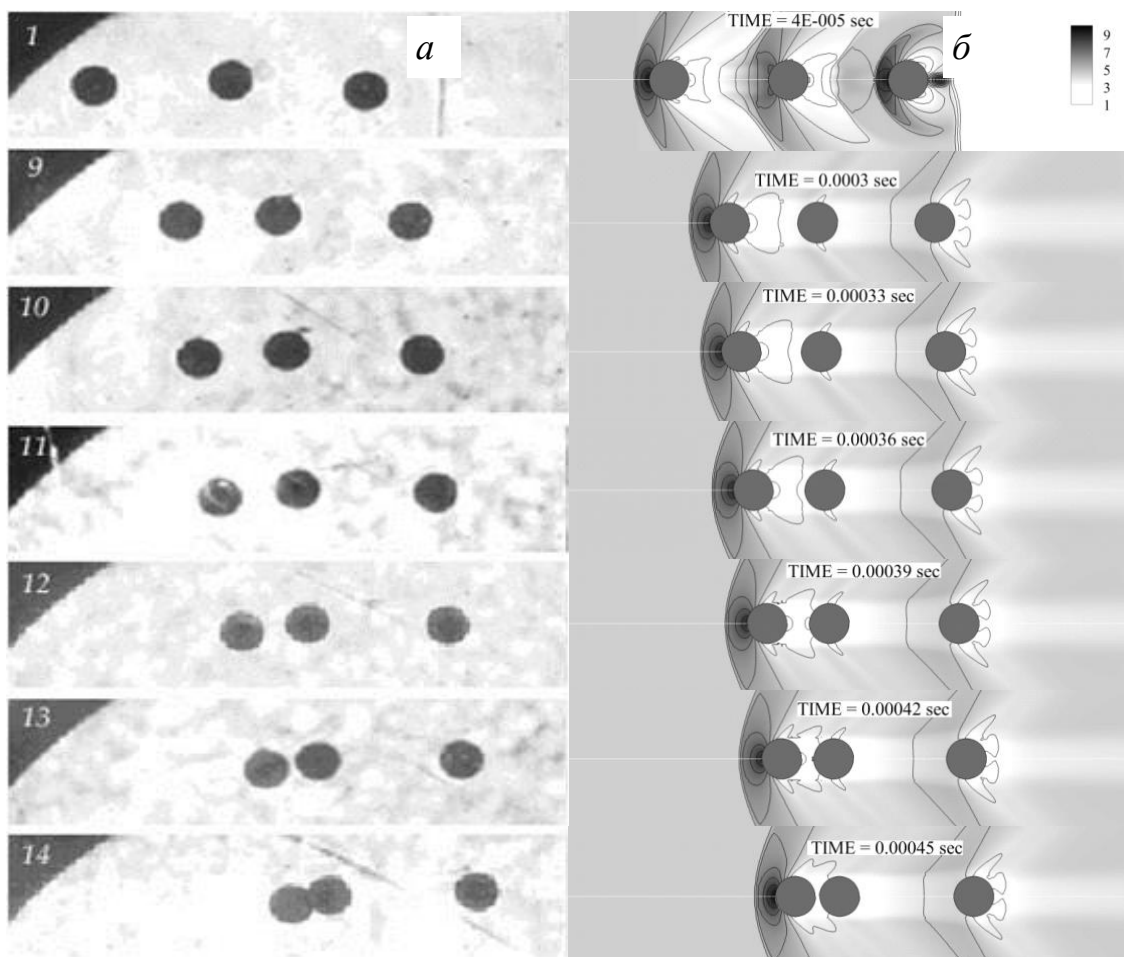


Рис. 3 Экспериментальные (а) и расчетные поля плотности и изолинии давления (б) в различные моменты времени.

На рис 4, б представлены изменения расстояний между тремя сферами в зависимости от времени при их взаимодействии с ударной волной. В начальный момент сферы расположены на одинаковом расстоянии друг от друга $3d$. Приведены расстояния между первой и второй (1, 3) и между второй и третьей (2, 4) частицами. Здесь также можно отметить деформацию сфер в эксперименте. Расчет позволяет проследить динамику частиц на большем временном промежутке, чем эксперимент. В случае взаимодействия трех частиц наблюдается ситуация, когда все три частицы сходятся в одной точке в момент времени $1 \div 1,5$ мс. Что можно трактовать как предварительную фокусировку дисперсной фазы. Первая и вторая частицы передают свой импульс третьей, она приобретает большое ускорение и «убегает» от других частиц. Первая и вторая частицы в дальнейшем распространяются совместно, несмотря на множественные столкновения, происходящие между ними. Это явление можно назвать «слиянием». Вторая частица находится в аэродинамической тени первой. Поэтому ее коэффициент сопротивления меньше чем у первой, что и объясняет наблюдаемый эффект «слияния».

В целом с учетом допущений расчетной модели сопоставление расчетных и экспериментальных данных показывает их удовлетворительное согласование.

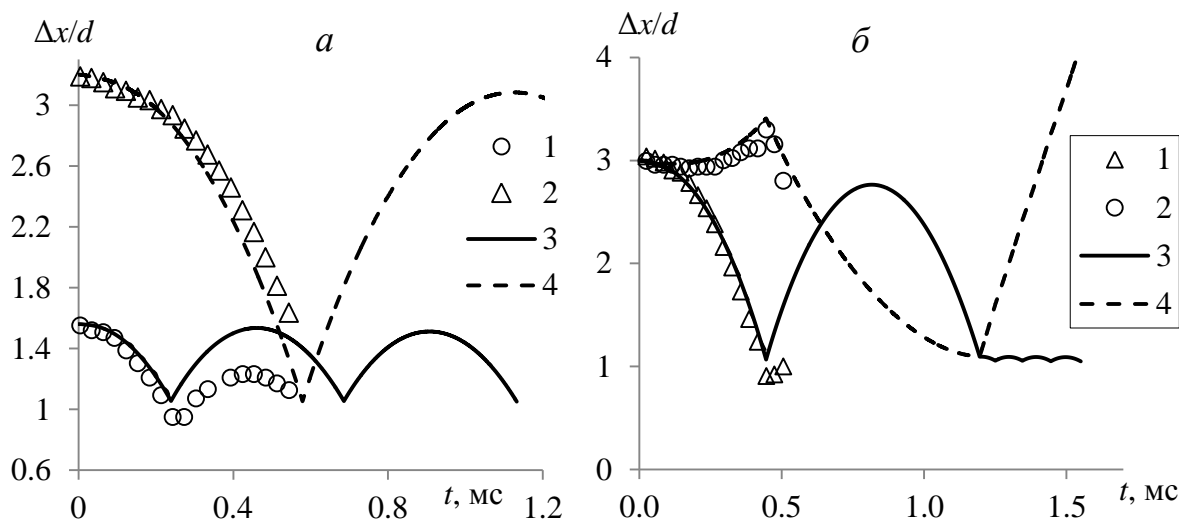


Рис. 4 Изменение расстояния между частицами от времени. Для двух частиц (а), отстоящих на $1,56d$ (1, 3) и $3,2d$ (2, 4) и для трех частиц (б), отстоящих на $3d$, расстояние между первой и второй (1, 3) и второй и третьей (2, 4). 1, 2 – эксперимент, 3, 4 – расчет.

На рис. 5а, б приведено сравнение данных, полученных в двумерном моделировании динамики частиц под воздействием ударной волны, с расчетом по приближенной модели с использованием обыкновенного дифференциального уравнения для скорости с коэффициентом сопротивления, рассчитанным с помощью корреляции Хендерсона [15]. Представлены траектории (рис 5а) и скорости (рис. 5б) для одиночной частицы, рассчитанные по приближенной (кривые 1) и двумерной (кривые 2) моделям, а также траектория и скорость первой из трех частиц в двумерном расчете. Видно, что траектория и скорость одиночной частицы хорошо предсказывается в приближенном расчете. Можно лишь отметить, что на начальной стадии взаимодействия в двумерном расчете частица имеет меньшее ускорение. Существенные отличия наблюдаются в динамике первой из трех частиц (кривая 3). Даже на начальном этапе взаимодействия до соударения скорость первой частицы меньше, чем скорость одиночной частицы. Это говорит о неприменимости упрощенной модели в случае взаимного влияния частиц.

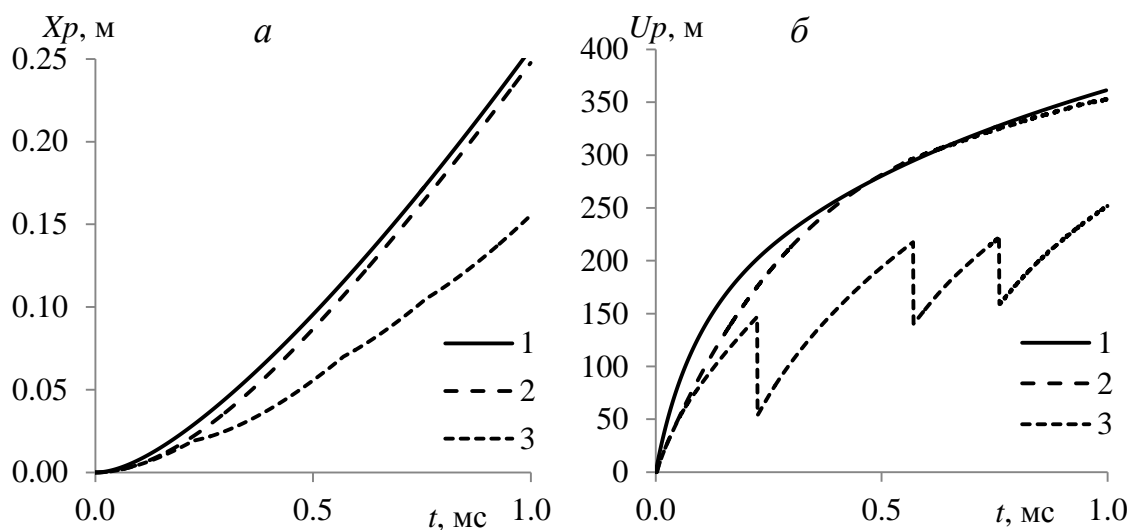


Рис. 5. Траектории и скорости одиночной частицы (1 – 0-D, 2 – 2-D расчет) и первой из трех частиц (3).

Динамика частицы в наших условиях, прежде всего, определяется коэффициентом сопротивления частиц. На рис. 6 приведены коэффициенты сопротивления для первой (кривая

1), второй (кривая 2) и третьей (кривая 3) частиц в прямом расчете в сравнении с коэффициентом сопротивления, вычисленным по аппроксимации [15] в приближенном расчете. Можно видеть, что значения коэффициентов сопротивления для второй и третьей частиц, начиная с момента времени 10^{-4} с существенно ниже приближенного значения. Это означает, что модель одиночной частицы хороша при описании движения действительно одиночной частицы. Когда в ее окрестности отсутствуют другие. При приближении к ней других частиц, то есть при росте взаимного влияния, необходимо внесение в корреляционные формулы для коэффициента сопротивления, поправок учитывающих влияние объемной концентрации частиц.

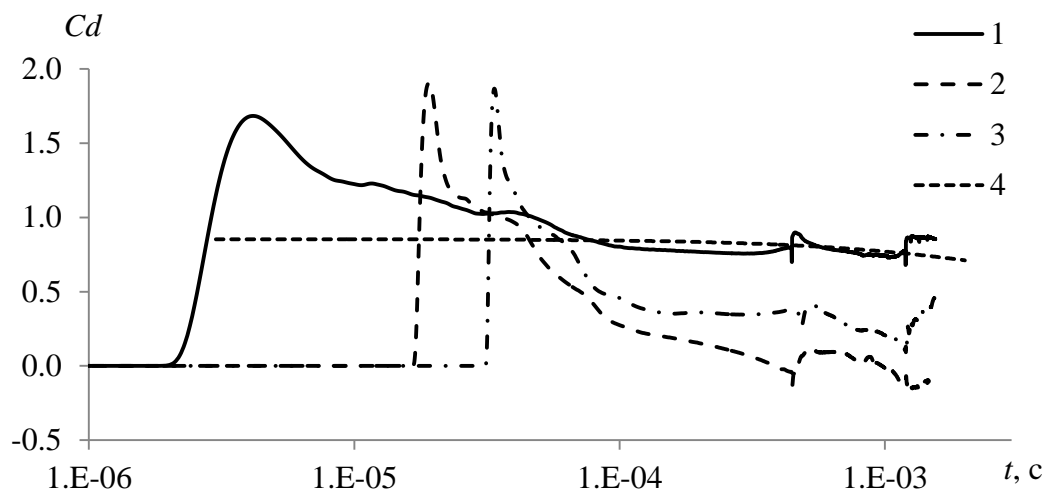


Рис. 6 Сравнение коэффициентов сопротивления одиночной частицы, рассчитанных с помощью приближенного подхода (4) и прямым моделированием (1-3) трех релаксирующих частиц.

Заключение. В работе изучено воздействие ударной волны на совокупность нескольких движущихся частиц. Вычислительная технология прямого численного моделирования скоростной динамики массива частиц верифицирована по данным [14] относительно динамики частиц.

Получена подробная волновая картина нестационарного взаимодействия проходящей ударной волны с движущимися частицами.

Показано, что приближенная модель расчета скоростной релаксации (режим одиночных частиц – модель Ньютона) плохо работает в случае взаимного влияния частиц, когда одни частица находятся в аэродинамической тени других частиц. Это свидетельствует об ограниченной применимости Лагранжевого подхода для концентраций частиц, при которых возможно взаимодействие частиц.

Литература.

1. Федоров А.В., Фомин В.М., Гостеев Ю.А. Динамика и воспламенение газозвесей. НГТУ, 2006. С. 342.
2. Благосклонов В.И., Кузнецов В.М., Минайлос А.Н., Стасенко А.Л., Чеховский В.Ф. О взаимодействии гиперзвуковых неоднородных течений // ПМТФ. 1979. №5. С.59-67
3. Бойко В.М., Клинков К.В., Поплавский С.В. Коллективный головной скачок перед поперечной системой сфер в сверхзвуковом потоке за проходящей ударной волной // Известия РАН. МЖГ. 2004. № 2. С.183-192.
4. Nourgaliev R.R., Dinh T.N., Nguyen L., Theofanous T.G. Treatment of Particle Collisions in Direct Numerical Simulations of High Speed Compressible Flows // Proceedings of an IUTAM Symposium on Computational Approaches to Disperse Multiphase Flow, S.Balachandar and A.Prosperetti (eds), Springer, pp.247-259, Dordrecht, 2006.
5. Федоров А. В., Хмель Т. А. Математическое моделирование гетерогенной детонации угольной пыли в кислороде с учетом стадии воспламенения // ФГВ. 2005. № 1. С. 89-99

6. Федоров А.В., Тетенов Е.В., Вессьер Б. Воспламенение газозвеси частиц металлов при реальном взрыве. // Физика горения и взрыва. 1991. Т. 27. № 5. С. 16–28.
7. Sridharan P., Jackson T. L., Zhang J., Balachandar S. Shock interaction with one-dimensional array of particles in air // Journal of Applied Physics 117, 2015. P. 1-17.
8. Regele J.D., Rabinovitch J., Colonius T., Blanquart G. Unsteady effects in dense, high speed, particle laden flows // International Journal of Multiphase Flow 61, 2014, pp. 1–13.
9. Sambasivan Lu S., Kapahi A., Udaykumar H. S. Multiscale modeling of shock interaction with a cloud of particles using an artificial neural network for model representation // Proceeding IUTAM 3, 2012, pp. 25–52.
10. Boiko V.M., Kiselev V.P., Kiselev S.P., Papyrin A.N., Poplavsky S.V., Fomin V.M. Shock wave Interaction with a Cloud of Particles // ShockWaves, 1997. № 7. P. 275-285.
11. Бедарев И.А., Федоров А.В., Фомин В.М. Численный анализ течения около системы тел за проходящей ударной волной // Физика горения и взрыва, 2012. Т 48. № 4. С. 83-92.
12. Бедарев И.А., Федоров А.В., Фомин В.М. Численное моделирование обтекания системы тел за проходящей ударной волной // ДАН, Механика, 2011, Т. 441, № 5. С. 621-624
13. Бедарев И.А., Федоров А.В. Расчет волновой интерференции и релаксации частиц при прохождении ударной волны // Прикладная механика и техническая физика. 2015. № 5. С. 18-27.
14. Boiko V. M., Klinkov K. V., Poplavski S. V. On a mechanism of intraphase interaction in non-relaxing two-phase flow // 11th International Conference on Methods of Aerophysical Research ICMAR'2002: Proceedings, 28 June - 3 July 2004, Russia, Novosibirsk. - Novosibirsk, 2002.- С.24-27
15. Хендерсон С.В. Коэффициент сопротивления сферы в течениях разреженного газа и сплошной среды // Ракетная техника и космонавтика, 1976. Т.14, №6. С.5-7.

Раздел 2

ГЛАВА 6. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ АКУСТО-КОНВЕКТИВНОЙ СУШКИ КАПИЛЛЯРНО- И ВОЛОКНИСТО-ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ

6.1. Акусто-конвективная сушка кедрового ореха

Кедровые орехи широко применяются в медицинской, косметической и пищевой промышленности. Полезные свойства кедрового ореха обусловлены содержанием в его ядрах большого количества витаминов, аминокислот, макро- и микроэлементов [1]. Как известно заготовка кедрового ореха осуществляется в труднодоступных районах и в очень сжатые сроки в осенний период [2]. В результате этого собранный кедровый орех имеет повышенную влажность. Для сохранения питательных и лечебных свойств кедрового ореха необходимо уменьшить содержание влаги в орехе-сырце до 15%. Традиционно для этого используется термический способ, в результате чего затрачивается большое количество энергии, времени и при этом ядро теряет свои полезные свойства.

В работе для сушки ореха взамен термической обработки предлагается применение акусто-конвективного способа, основанного на эффекте Гартмана [3]. Главным преимуществом данного метода является отсутствие нагрева осушаемого материала, что позволяет сберечь полезные свойства ядра кедрового ореха.

Ранее в работах [4 – 6] изучалось акусто-конвективное воздействие на материалы, представляющие собой однородное пористое тело. Отличительной особенностью данной работы является то, что проводится исследование пористого тела сложной структуры, т.к. кедровый орех состоит из нескольких оболочек защищающих ядро рис. 1 [1, 2]. В случае, когда орех находится в шишке на ветке кедра, то эти оболочки необходимы для защиты, питания и развития ядра. После сбора ореха многослойная защитная оболочка препятствует удалению влаги из зерен, что в свою очередь способствует достаточно быстрому образованию плесени. Для замедления этого процесса часть орехов подвергается заморозке при этом содержание

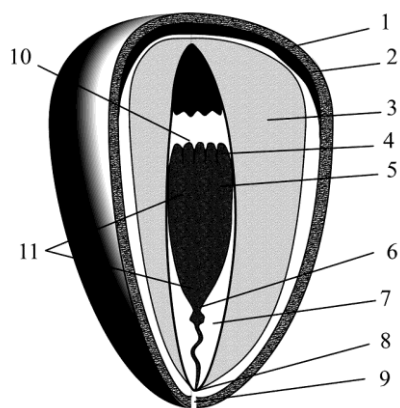


Рис. 1. Строение зерна кедрового ореха:

- 1 – кожура,
- 2 – эндоспермальная пленка,
- 3 – эндосперм, 4 – семядоли,
- 5 – зародыш, 6 – корешок,
- 7 – подвесок, 8 – остаток нуцеллуса,
- 9 – микропиле, 10 – почечка,
- 11 – подсемядольное колено

массу абсолютно сухой порции кедрового ореха, находим начальную абсолютную влажность оставшихся порций кедровых орехов. Под абсолютной влажностью понимается отношение массы влаги к массе сухого материала:

$$W = (m - m_0) / m_0 \times 100 \% .$$

В результате проведенного исследования была определена начальная влажность кедрового ореха, которая составила 52,27 %. Полученное значение начальной влажности принималось за опорное для остальных порций кедрового ореха.

влаги в зернах может сильно увеличиваться по сравнению с корневой. Для наших экспериментальных исследований использовались предварительно замороженные зерна сибирского кедрового ореха сбор 2012 года.

Определение начальной влажности. Для проведения экспериментов по акусто-конвективной сушке на акусто-конвективной сушильной установке (АКСУ) ИТПМ СО РАН было приготовлено пять порций примерно одинаковой массы кедровых орехов. Предварительно определялась начальная влажность ореха. Для этого одна из пяти порций ореха была подвергнута сушке в вакуумном сушильном шкафу СНВС-4,3.4,3.4,9/3U24n при температуре 120 °С в течение 7 часов. Начальная масса осушаемой порции составляла 96,75 г. Масса абсолютно сухой порции орехов составляла 63,54 г. Определение массы контрольных порций образцов проводилось с помощью лабораторных весов AND EK 610i с максимально возможным весом 600 грамм и дискретностью 0,01 грамм. Зная

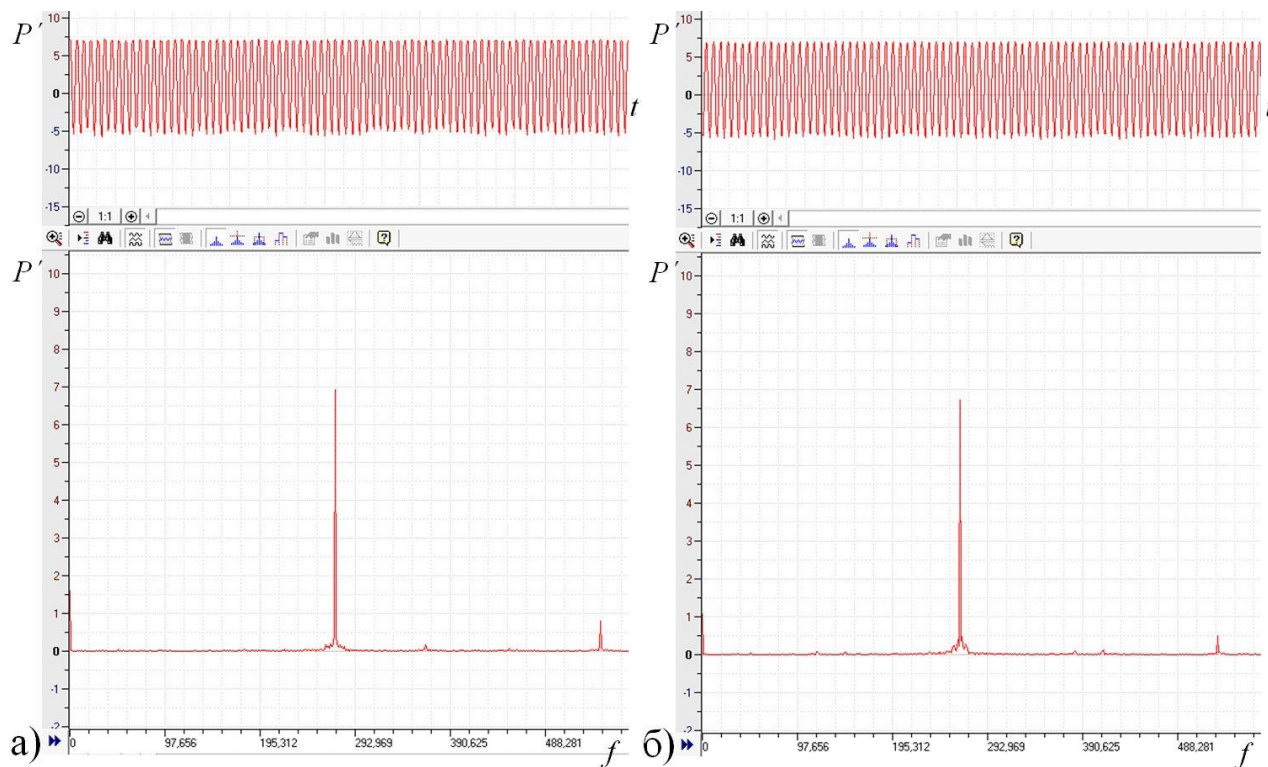


Рис. 2. Амплитудно-частотная характеристика акусто-конвективного потока в рабочей части АКСУ: а) без осушаемого материала, б) с установленным контейнером. P' , мВ; f , Гц

Сушка акусто-конвективным способом. Вторая порция орехов помещалась в прямоугольный металлический контейнер с размерами $281 \times 31 \times 28$ мм, имеющий жесткий каркас, а его стенки закрывались металлической сеткой. Собранный контейнер периодически помещался в рабочую часть АКСУ. Принципиальная схема установки представлена в [7].

Пуск АКСУ осуществлялся без осушаемого материала. Рабочее давление в форкамере регистрировалось образцовым манометром и составляло $P_0 = 6,2$ атм. В процессе эксперимента давление в форкамере поддерживалось постоянным с помощью прецизионного регулировочного клапана. Параметры сформированного акусто-конвективного потока на входе в рабочую часть АКСУ регистрировались с помощью датчика акустического давления ЛХ-610. С помощью АЦП L-Card E-440 показания датчика ЛХ-610 передавались в программу PowerGraph, установленную на ПК. Исходный $P'(t)$ и обработанный $P'(f)$ сигнал представлен на рис. 2,а. Из рис. 2,а видно, что сформированный в рабочей части акусто-конвективный поток имеет частоту $f = 272$ Гц и интенсивность $I = 183,8$ дБ.

С помощью измерителя влажности и температуры ИВТМ-7 МК-С регистрировались теплофизические параметры в тракте рабочей части АКСУ. Температура потока составляла $12,4$ °С, влажность $5,9$ %, содержание водяных паров $0,6$ г/м³, температура точки росы $21,3$ °С.

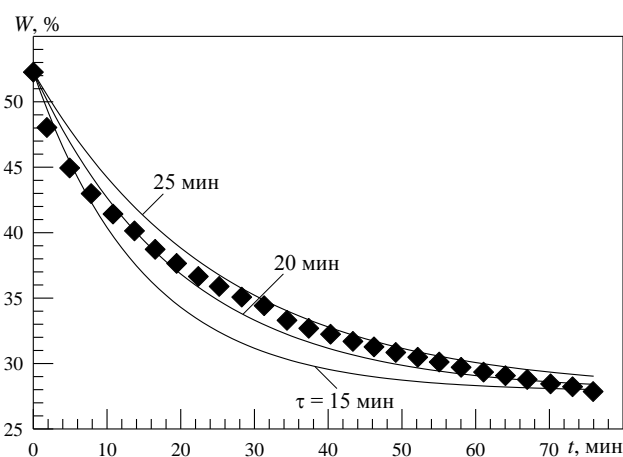


Рис. 3. Динамика экстракции влаги из зерен кедровых орехов при акусто-конвективной сушке (точки – эксперимент, сплошные линии – численный расчет).

особенностью представленной кривой является ее вогнутая форма с монотонным убыванием.

Акусто-конвективная сушка скорлупы и ядра кедрового ореха. Так как кедровый орех имеет сложную структуру, то представляется интересным провести оценку влияния скорлупы ореха на процесс акусто-конвективной сушки зерна. Для проведения предлагаемой оценки была отобрана третья порция кедровых орехов общей массой $250,60$ г. Далее орехи из рассматриваемой порции были расколоты и разделены на две фракции: скорлупа и ядра. Масса скорлупы составила $107,40$ г, а вес ядер $134,81$ г., таким образом, $8,39$ г. было утрачено в виде мелких крошек скорлупы и избыточной влаги находящейся в зазоре между скорлупой и ядром ореха.

Скорлупка ореха и ядра по очереди помещались в тот же прямоугольный контейнер, что и целые кедровые орехи и подвергались сушке в АКСУ.

На рис. 4 показана динамика изменения абсолютной влажности скорлупы подвергаемой акусто-конвективному воздействию. Стоит отметить, что за $33,5$ мин. влажность скорлупы значительно уменьшилась и достигла $14,3$ %. Заметим, что в процессе сушки скорлупа остается равномерно распределенной по всему объему контейнера, также как и в случае сушки зерна кедрового ореха. Также для сравнения на рис. 4 нанесены экспериментальные данные по акусто-конвективной сушке зернистого силикагеля из работы [6]. Как видно, начальное содержание влажности для обоих материалов практически одинаковое, а динамика уменьшения влажности до 20 мин описывается одной и той же зависимостью с характер-

В работающую АКСУ помещался ранее подготовленный контейнер с кедровыми орехами и фиксировался в рабочей части установки при помощи винта. При помещении контейнера в рабочую часть АКСУ амплитудно-частотная характеристика потока немного изменялась (см. рис. 2,б). Как видно из рис. 2,б частота уменьшилась до $f = 265$ Гц, а интенсивность до $I = 183,6$ дБ, то есть практически осталась неизменной.

Через каждые 3 минуты контейнер с орехами извлекался из установки и подвергался взвешиванию на весах. Динамика изменения абсолютной влажности кедровых орехов показана на рис. 3, где видно, что за 76 минут влажность засыпки кедровых орехов уменьшилась до $27,86$ %. Характерной

ным временем релаксации равным 7,5 мин. Последующее отличие при временах более 25 мин обуславливается разрушением зерен силикагеля. Таким образом, можно утверждать, что процесс экстракции влаги из скорлупы кедрового ореха и из зерен силикагеля имеет схожий физический механизм.

На рис. 5 показана зависимость абсолютной влажности ядра от времени сушки в АК-СУ. За 36,25 мин. влажность снизилась до 29,13 %. Таким образом, сушка ядра кедрового ореха протекает значительно медленнее, чем его скорлупы. Отличительной особенностью сушки ядра является тот факт, что из ядер выделяется влага с характерными маслянистыми свойствами. В результате выделения масел, ядра, равномерно распределенные по контейнеру в начале эксперимента, начинают слипаться между собой и группироваться у торца находящегося в противоположной стороне к набегающему акусто-конвективному потоку.

Термо-конвективная сушка. Для оценки скорости экстракции влаги из засыпок зерен кедрового ореха при сушке термо-конвективным способом был сконструирован экспериментальный стенд. Основой экспериментального стенда являлся источник теплового потока, который формируется при помощи тепловой пушки марка ЭТВ-4,5/220 Т с мощностью нагрева 4,5 кВт. В качестве нагревательного элемента используется оребренный тэн. Производительность тепловентилятора составляет $450 \text{ м}^3/\text{ч}$. При проведении экспериментов тепловая пушка включалась заблаговременно, чтобы создать постоянный тепловой поток в выходном сечении круглой формы диаметром 145 мм. Зная производительность тепловентилятора и диаметр выходного сечения можно определить скорость теплового потока на выходе из тепловой пушки, которая составляет 7,6 м/с. Сформировавшийся тепловой поток имел температуру $120 \text{ }^\circ\text{C}$, влажность около 0,1 % или $0,9 \text{ г}/\text{м}^3$, температура точки росы составляла $-25,6 \text{ }^\circ\text{C}$.

Четвертая контрольная порция кедровых орехов помещалась в термо- и влагопроницаемый контейнер, изготовленный из нестерильного медицинского марлевого бинта размером $50 \times 100 \text{ мм}$. Сконструированный контейнер с кедровыми орехами имел форму цилиндра с характерными размерами: длина 270 мм, диаметр 35 мм. Цилиндрический образец помещался в центре сформировавшегося теплового потока, при этом один из торцов образца располагался вплотную к выходному сечению потока из тепловой пушки. Положение контейнера фиксировалось с помощью проволочных фиксаторов. Таким образом, термо-конвективный поток не только обдувал поверхность цилиндрической засыпки, но и проникал вглубь нее. Через заданный интервал времени образец вынимался из термо-конвективного потока, снимался с креплений и взвешивался.

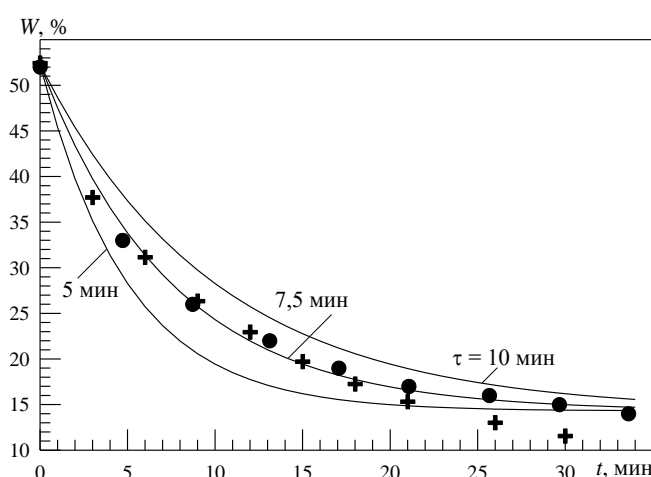


Рис. 4. Изменение содержания влаги в скорлупе кедровых орехов (●), в зернах силикагеля (+) при АКС (точки – эксперимент, сплошные линии – численный расчет).

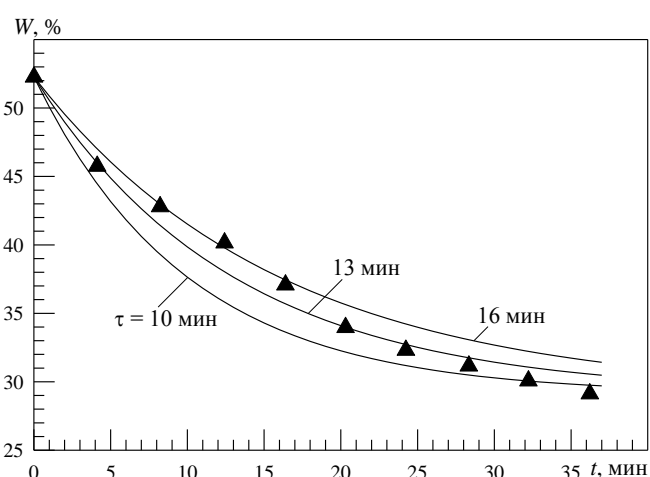


Рис. 5. Кинетика экстракции влаги из ядер кедровых орехов при АКС (точки – эксперимент, сплошные линии – численный расчет).

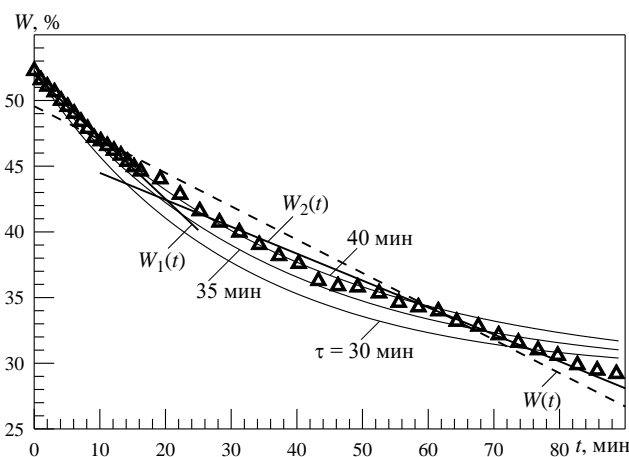


Рис. 6. Динамика термо-конвективной сушки кедровых орехов (точки – эксперимент, сплошные линии – численный расчет).

области: первая имеет продолжительность с начала эксперимента до 15 мин, вторая с 15 мин до конца эксперимента. В первой области наблюдается интенсивное уменьшение влажности, обусловленное испарением влаги с поверхности зерен и скорлупы. Вторая область характеризуется почти вдвое меньшей скоростью экстракции влаги, это замедление можно объяснить тем, что влага экстрагируется из внутренней части зерна, а для этого влага должна просочиться через скорлупу ореха. Получим закон для линейной зависимости на каждом временном интервале, для этого с помощью метода наименьших квадратов найдем коэффициенты для искомой линейной зависимости. В результате на первом интервале получаем зависимость в виде:

$$W_1(t) = 51,958 - 0,473 \times t, \%$$

Во второй области зависимость будет иметь вид:

$$W_2(t) = 46,544 - 0,205 \times t, \%$$

Полученные линейные зависимости нанесены на рис. 6. Видно, что обе линии на своих интервалах времени хорошо описывают экспериментальные данные. Оценим степень соответствия экспериментальных точек линейному закону на каждом интервале, для этого определим коэффициент линейной корреляции. Вычисления показали что, в первой области r_1 принимает значение $-0,9963$, во второй $-r_2 = -0,9886$. Стоит обратить внимание на то, что коэффициенты при t в полученных зависимостях отвечающие за скорость экстракции влаги отличаются в 2,3 раза. Для сравнения, на рис. 6 также нанесено уравнение линейной зависимости для всего временного интервала, которое имеет вид:

$$W(t) = 49,568 - 0,254 \times t, \%$$

Как и следовало ожидать степень соответствия экспериментальных точек линейному закону для всего интервала имеет худшее значение равно $-0,9830$.

Термическая сушка. Следующим этапом было проведение эксперимента по выявлению влияния конвективной составляющей на процесс термо-конвективной сушки. Для этого пятую порцию кедровых орехов поместили в стеклянную банку (чтобы исключить любой обдув) и поместили её в сушильный шкаф SNOL 67/350 (220 В, 2 кВт) предварительно разогретый до $100\text{ }^\circ\text{C}$, температура в сушильном шкафу поддерживалась постоянной в автоматическом режиме. Приблизительно через каждые пять минут контрольная порция извлекалась из сушильного шкафа, и проводился замер массы контрольной порции орехов.

На рис. 7 показана динамика потери влаги орехов от времени при термической сушке. Общая продолжительность сушки в эксперименте составляла 7 ч. 16 мин. 21 с. за это время влажность уменьшилась до $8,25\%$. На графике можно отметить существование трех областей.

Первая область (I) характеризуется медленной потерей влаги образцом, это обусловлено прогревом поверхности и содержимого зерна кедрового ореха. Стоит отметить, что к 20

На рис. 6 представлена динамика изменения влажности осушаемой цилиндрической засыпки зерен кедровых орехов при термо-конвективном способе сушки. Общая продолжительность сушки составила 1 ч. 28 мин. 39 с. за это время влажность образца уменьшилась до $29,21\%$. Влажность контрольной порции уменьшается по билинейному закону, то есть акусто-конвективный и термо-конвективный механизмы сушки имеют принципиально различную динамику экстракции влаги.

Проведем анализ полученной зависимости содержания влаги в образце от времени. Представленные экспериментальные данные условно можно разделить на две

минуте нагрева, т.е. в конце первого временного этапа из скорлупы орехов наблюдалось выделение смолянистых компонентов. Таким образом, можно предположить, что за 20 мин происходит прогрев всех элементов (представленных на рис 1.) зерна кедрового ореха.

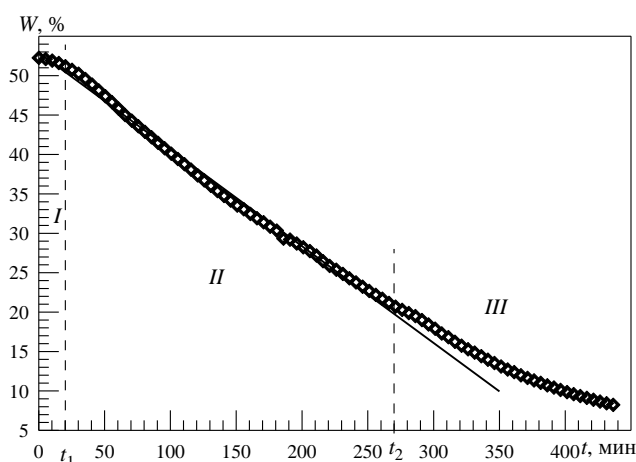


Рис. 7. Изменение влажности кедрового ореха при термической сушке.

Видно, что полученная линейная зависимость на интервале от t_1 до t_2 полностью сливается с экспериментальными данными. Проведем количественную оценку степени соответствия экспериментальных точек линейному закону, для этого определим коэффициент линейной корреляции. Проведенные вычисления показали что, на интервале от t_1 до t_2 r принимает значение $-0,9977$, т.е. наблюдается обратная (отрицательная) корреляция.

В третьей области (III) процесс выделения влаги начинает замедляться, при этом график зависимости начинает выходить на асимптоту. Аналогичная динамика с тремя характерными областями наблюдалась ранее при микроволновом способе сушки в [6]. Характерным отличием теплового от микроволнового способа сушки является протяженность областей. Отметим, что термический режим сушки наиболее близко подходит к существующим широко распространенным способам осушки зерен кедровых орехов.

Обсуждение результатов. Подробно рассмотрим и сравним полученные результаты по акусто-конвективной сушке ядер, скорлупы и зерен кедрового ореха. На рис. 8 сведены результаты по сушке акусто-конвективным потоком зерен кедрового ореха, его скорлупы и ядер в течение первых 40 мин. Как и следовало ожидать, первым необходимого значения влажности в 15 % достигнет скорлупа ореха. Этот факт можно объяснить тем, что скорлупа имеет ярко выраженную пористую структуру и малую толщину порядка 0,5 мм. Влажность ядра ореха к 30 минуте уменьшается до 30,62 %, что почти вдвое больше, чем у скорлупы (15,11 %). Данное обстоятельство обусловлено: во-первых, меньшей пористостью ядра, чем скорлупы; во-вторых, большими характерными размерами ядра, которые составляют в длину около 10,75 мм, а продольное сечение с максимальной площадью имеет сплюснутый эллипсообразный вид с размером ширина 7,1 мм, высота 4,8 мм; в-третьих, в процессе сушки из ядра выделяется влага с характерными маслянистыми свойствами, в результате чего ядра слипаются, образуя единый достаточно плотный комок, т.е. зерна, равномерно распределенные по контейнеру при засыпке, уплотняются возле одного из торцов находящегося вниз по потоку, при этом вторая половина контейнера остается

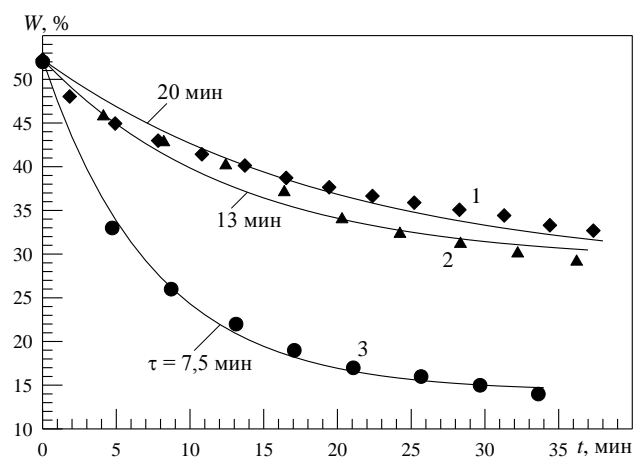


Рис. 8. Сопоставление скорости экстракции влаги кедрового ореха (1), скорлупы (3) и ядра (2) при сушке в АКСУ (точки – эксперимент, сплошные линии – численный расчет).

Во второй области (II) из нагретого зерна наблюдается интенсивное выделение влаги, при этом данный процесс протекает практически по линейному закону. Данная область заканчивается к середине пятого часа сушки. Проанализируем поведение влажности на данном интервале более подробно. Найдем вид линейной зависимости, для этого воспользуемся методом наименьших квадратов и получим коэффициенты для искомой линейной зависимости. В результате получаем зависимость в виде:

$$W = 52,926 - 0,123 \times t, \%$$

Полученная зависимость нанесена на рис. 7 для значений времени от 0 до 350

практически пустой.

Как и следовало ожидать, наиболее медленно влага экстрагируется из целых зерен, так их влажность уменьшилась только до 34,07 %. Хотя из рис. 8 видно, что в первые моменты времени до 10 минуты динамика экстракции влаги из целых зерен немного выше, чем у ядер, это можно объяснить, тем, что в начале происходит интенсивная сушка поверхности зерна, т.е. скорлупы ореха, а как было показано ранее сушка скорлупы самый быстрый процесс. В последующие моменты времени картина меняется, и динамика экстракции влаги из зерен становится более медленной. Этого и следовало ожидать, т.к. к скорлупе целого ореха непрерывно поступает влага из пространства находящегося между внутренней поверхностью скорлупы и ядром, но в тоже время эта воздушная прослойка замедляет процесс выделения влаги из зерна.

Таким образом, в механизме акусто-конвективной сушки зерен кедрового ореха можно выделить три стадии протекающие одновременно. Первая стадия обусловлена сушкой скорлупы ореха. Вторая стадия связана с понижением влажности в зазоре между скорлупой и ядром. Третья стадия – осушение ядра, при этом экстрагированная влага из зерна поступает в промежуток между скорлупой зерна и ядром, а затем выносится через скорлупу в набегающий акусто-конвективный поток.

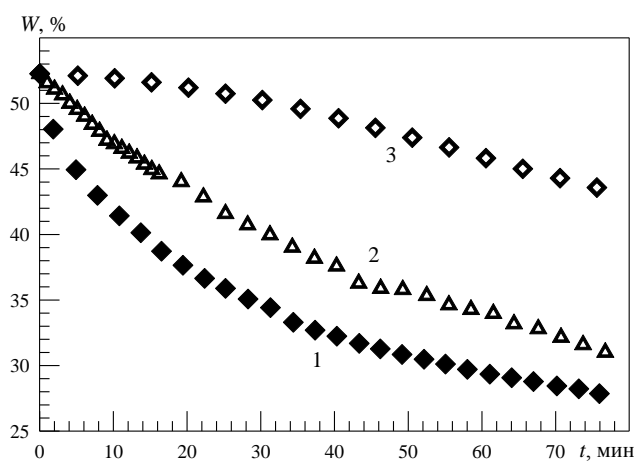


Рис. 9. Сравнение динамики экстракции влаги кедрового ореха при разных способах сушки:

1 – акусто-конвективный, 2 – термо-конвективный, 3 – тепловой.

влажности орехов:

1) до 45 % для акусто-конвективного режима требуется менее 5 мин., термо-конвективного 15 мин., а для термического 1 ч. 5 мин.;

2) до 40% при акусто-конвективной сушке понадобилось 14 мин., при термо-конвективной 30 мин., а при термической 1 ч. 43 мин.;

3) до 35 % при акусто-конвективной сушке затрачено 30 мин, при термо-конвективной 54 мин., а при термической 2 ч. 20 мин.;

4) до 30 % для акусто-конвективного режима нужно 57 мин., термо-конвективного 1 ч. 20 мин., а для термического 3 ч. 4 мин.

Следовательно, при акусто-конвективной сушки мы получаем выигрыш по времени в два раза при продолжительности сушке до 30 мин по сравнению с термо-конвективным и почти 5 раз по сравнению с термическим способом. Скорость сушки термо-конвективным способом выше, чем термическим почти в три раза. Таким образом, получено количественное соотношение производительности акусто-конвективного, термо-конвективного и термического способа сушки зерен кедрового ореха.

Математическая обработка экспериментальных данных. Для описания полученных в экспериментах кинетических кривых экстракции влаги используют релаксационное уравнение в линейном виде:

$$\frac{dW}{dt} = \frac{W_K - W}{\tau}, \quad (1)$$

с соответствующим начальным условием

$$\text{при } t = 0 \quad W = W_0. \quad (2)$$

Уравнение (1) имеет решение в виде:

$$W = W_K + (W_0 - W_K)e^{-(t/\tau)}. \quad (3)$$

На рис. 3 – 5 представлены результаты численных расчетов, полученные с помощью выражения (3) при разных значениях τ . Для того чтобы добиться удовлетворительного описания динамики экстракции влаги из зерен кедрового ореха при акусто-конвективной сушке выбираем τ равным 20 мин.

Чтобы получить хорошее описание изменения содержания влаги в скорлупе кедрового ореха при акусто-конвективной сушке с помощью уравнения (3) значение τ следует взять равным 7,5 мин.

На рис. 5 видно, что удовлетворительное согласование экспериментальных точек и теоретической зависимости для ядер кедрового ореха наблюдается при $\tau = 13$ мин.

Полученные времена релаксации для зерен кедрового ореха сопоставимы со значениями, полученными в работе [5] для акусто-конвективной сушки сорбентов, где характерные времена релаксации принадлежали интервалу от 18 до 50,6 мин. Найденное нами время релаксации для скорлупы кедрового ореха близко к значениям, полученным авторами [8] при моделировании пористого тела виде сборки микро-капиллярных трубок, здесь $\tau = 9$ мин при ориентации капилляров вдоль набегающего потока и $\tau = 6$ мин для размещения капилляров перпендикулярно потоку.

Была сделана попытка описать предлагаемой математической моделью результаты экспериментов по динамике экстракции влаги из зерен кедрового ореха при термо-конвективной сушке. На рис. 6 тонкими сплошными линиями представлены результаты расчетов выполненных при значениях τ равных 30, 35 и 40 мин. Как видно результаты расчета при $\tau = 40$ мин хорошо описывают экспериментальные данные только до 60 мин. Отметим, что полученное значение характерного времени релаксации при термо-конвективной сушке в два раза больше, чем определенное при акусто-конвективной.

На рис. 8 приведены расчетные зависимости при полученных ранее значениях τ для каждого осушаемого материала при акусто-конвективной сушке. Как видно из представленных результатов определенные времена (7,5; 13 и 20 мин) имеют некую закономерность. Ее можно представить виде коэффициента пропорциональности k , где $k = 1$ соответствует 7,5 мин, $k = 2$ – 13 мин, а $k = 3$ – 20 мин. Таким образом, наблюдается закономерность, по которой скорость экстракции влаги из скорлупы кедрового ореха в двое быстрее, чем скорость экстракции из ядер и в трое быстрее, чем из целых зерен.

Выводы

1. Экспериментально определена динамика экстракции влаги из зерен, скорлупы и ядер кедрового ореха при акусто-конвективном, термо-конвективном и термическом режимах сушки.
2. При акусто-конвективной сушке:
 - проведен анализ вклада элементов зерен кедрового ореха (скорлупы и ядра) в динамику сушки ореха;
 - отмечено сходство динамики экстракции влаги из скорлупы кедрового ореха и из зерен зернистого силикагеля что, по всей видимости, связано с протеканием схожих физических процессов в осушаемых материалах.
3. Показано, что при термо-конвективной сушке наблюдается билинейный закон экстракции влаги, а при тепловом режиме сушке имеют место комбинированный закон экстракции, состоящий из трех временных этапов характеризующихся различными режимами кинетики сушки.

4. Найденные количественные характеристики по динамике экстракции влаги из зерен кедрового ореха при трех способах сушки показали, что производительность сушки акусто-конвективным способом в два раза выше, чем термо-конвективным и в пять раз выше, чем термическим.
5. Для описания динамики экстракции влаги предложена простая релаксационная модель, удовлетворительно описывающая экспериментальные данные по акусто-конвективной сушке зерен, скорлупы и ядер кедрового ореха.

Литература

1. Воробьев В.Н., Воробьева Р.А., Свириденко Э.И., Колесов В.М. Семена кедрового ореха сибирского / Отв. ред. Судачкова Н.Е. – Новосибирск: Наука. Сибирское отделение, 1979. – 129 с.
2. Лесная энциклопедия: в 2-х т. / Гл. ред. Воробьев Г.И.; Ред. кол.: Анучин Н.А., Атрохин В.Г., Виноградов В.Н. и др. – М.: Сов. Энциклопедия, 1985. – 563 с.
3. Глазнев В.Н., Солотчин А.В., Сулейманов Ш. Параметрическое исследование автоколебаний при втекании сверхзвуковой струи в цилиндрическую полость // Известия СО АН СССР. Серия технических наук, 1983. № 13, вып. 3. С. 22 – 26.
4. Жилин А.А., Федоров А.В., Фомин, В.М. Коробейников Ю.Г. Математическое моделирование механизма акустической сушки пористых материалов // Прикладная механика и техническая физика, 2003. Т. 44, № 5. С. 102 – 117.
5. Коробейников Ю.Г., Федоров А.В., Булчевский Е.А., Лавренов А.В. Сорбент типа «соль в пористой матрице» и древесные опилки как осушители воздуха для систем вентиляции // Инженерно-физический журнал, 2009. Т. 82, № 2. С. 252 – 257.
6. Жилин А.А., Федоров А.В., Коробейников Ю.Г. Исследование процессов пропитки и сушки зернистого силикагеля // Инженерно-физический журнал, 2011. Т. 84, № 5. С. 897 – 906.
7. Глазнев В.Н., Коробейников Ю.Г. Эффект Гартмана. Область существования и частоты колебаний // Прикладная механика и техническая физика, 2001. Т. 42, № 4. С. 62 – 67.
8. Коробейников Ю.Г., Федоров А.В. Об экстракции воды из капиллярного образца в акустическом поле // Инженерно-физический журнал, 2003. Т. 76, № 1. С. 7 – 10.

6.2. Математическое моделирование процесса экстракции влаги из зерен риса

Одной из важнейших задач в пищевой промышленности и сельском хозяйстве является хранение зерновых культур. Для решения этой задачи необходимо удалить свободную влагу, находящуюся внутри зерен, имеющих развитую капиллярно-пористую структуру. Традиционные технологии экстракции влаги из зерновых культур основаны на подводе тепла к осушаемому материалу [1, 2], что при последующем хранении способствует тлению зерна и потере его ценных свойств. Данную проблему можно решить, осуществляя сушку акусто-конвективным способом без подвода тепла (при комнатной температуре). Данный подход позволяет экстрагировать влагу из пористого скелета зерновых культур, воздействуя на осушаемый материал высокоинтенсивным акустическим полем. Приведенные в работе [3] результаты экспериментов по сушке нешелушенного корейского риса акусто-конвективным способом свидетельствуют о значительной интенсификации процесса экстракции влаги по сравнению с процессом сушки конвективным способом. В настоящей работе на основе методики, предложенной в [4], выполнено математическое моделирование процесса экстракции влаги из нешелушенного корейского риса при акусто-конвективном воздействии.

Физико-математическая постановка задачи. Исследуется засыпка зерен риса с начальной влажностью W_0 , заключенная во влагопроницаемый контейнер цилиндрической формы радиусом R и длиной l . Контейнер помещается в рабочую часть акусто-конвективной сушильной установки (АКСУ) Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН. В момент времени $t = 0$ осуществляется пуск АКСУ и исследуемый материал подвергается воздействию высокоинтенсивных акустических волн. Согласно [3] параметры акусто-конвективного потока в рабочей части АКСУ соответствуют частоте колебаний 415 Гц при их интенсивности 167 дБ. Требуется определить динамику экс-

тракции влаги из засыпки зерен риса в последующие моменты времени $t > 0$, вычислить значения коэффициентов диффузии и массообмена и сравнить их с соответствующими значениями, полученными в работе [3] при анализе отдельного зерна риса.

При математическом моделировании процесса экстракции влаги из цилиндрической засыпки зерен риса используется двумерное уравнение диффузии, записанное в цилиндрической системе координат:

$$\frac{\partial W}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 W}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial W}{\partial r} + \frac{\partial^2 W}{\partial z^2} \right) \quad (1)$$

$W = (m - m_0) / m_0$ – абсолютная влажность; D – коэффициент диффузии; r, z – пространственные координаты; m – масса влажного материала; m_0 – масса абсолютно сухого материала.

Уравнение (1) дополняется начальными и граничными условиями

$$\begin{aligned} t = 0 : W(0, r, z) &= W_0, (r, z) \in [0, R] \times [0, l], \\ r = 0 : \partial W(t, 0, z) / \partial r &= 0, \\ r = R : \partial W(t, R, z) / \partial r &= -\alpha (W - W_K) S_B, \\ z = 0 : \partial W(t, r, 0) / \partial z &= \alpha (W - W_K) S_T, \\ z = l : \partial W(t, r, l) / \partial z &= -\alpha (W - W_K) S_T, \end{aligned} \quad (2)$$

где W_K – конечная влажность в засыпке; α – коэффициент влагоотдачи; S_B, S_T – площадь боковой и торцевой поверхностей образца.

Таким образом, задача об экстракции влаги из цилиндрической засыпки зерен риса сводится к нахождению решения начально-краевой задачи (1), (2). По аналогии с [4] для численного решения этой задачи используется метод прямых, а для решения получаемой при этом системы обыкновенных дифференциальных уравнений применяется метод, основанный на формуле дифференцирования назад [5].

Результаты представлены в безразмерных переменных. В качестве характерной длины принимается радиус цилиндрической засыпки R , в качестве масштаба времени – продолжительность каждого эксперимента t_3 . Коэффициент диффузии D обезразмеривался по величине R^2/t_3 , а коэффициент влагоотдачи α – по R^3 .

До проведения численных расчетов, необходимо определить коэффициент влагоотдачи α . В работе [4] показано, что коэффициент влагоотдачи при акустоконвективной сушке зависит от частоты колебаний акустоконвективного потока. С помощью полученного в [4] интерполяционного полинома второй степени, описывающего зависимость α от частоты, при частоте 415 Гц находим $\alpha = 10657 \text{ м}^{-3}$ ($\alpha/R^3 = 0,036$). В работах, посвященных изучению процесса термоконвективной сушки, в качестве аналогичного показателя используется коэффициент конвективного массопереноса. В [6] значение этого коэффициента для необработанного риса составляло $3,789 \cdot 10^{-7} \text{ м/с}$, в нашем случае при сушке акустоконвективным способом получено значение $1,883 \cdot 10^{-5} \text{ м/с}$. Для сравнения отметим, что вычисленный в работе [7] коэффициент конвективного массопереноса для винограда подвергнутого термоконвективной сушке, равен $8,05 \cdot 10^{-8} \text{ м/с}$. Таким образом, при акустоконвективной сушке имеет место значительное ускорение процесса экстракции влаги, о чем свидетельствует увеличение коэффициента конвективного массопереноса.

Результаты численных расчетов. На первом этапе определялся коэффициент диффузии путем решения последовательности прямых задач. Для этого использовались данные о динамике экстракции влаги, полученные в эксперименте продолжительностью 90 мин. За это время влажность уменьшилась с 0,228 до 0,185. На рис. 1 приведены экспериментальные данные и результаты численных расчетов при различных значениях коэффициента диффузии. Видно, что достигается при $D = 1,5$ оптимальное соответствие между экспериментальными и численными данными. Коэффициент диффузии для корейского нешелушенного риса, подвергнутого сушке акустоконвективным способом, равен $6,25 \cdot 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с}$ (для сравнения значение коэффициента диффузии для зернистого силикагеля составляет $1 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$ [4]). Уменьшение коэффициента диффузии для нешелушенного риса, по-видимому, обусловлено

наличием у него растительной оболочки. В работе [8] представлены результаты экспериментов по сушке необработанного риса конвективным способом при температуре 40 °С, в [9] в результате обработки этих данных получен коэффициент диффузии, равный $9,04 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2/\text{с}$. Таким образом, акустоконвективное воздействие приводит значительной интенсификации процесса сушки, что проявляется в увеличении значения D почти на четыре порядка.

На рис. 2 представлено распределение влажности в засыпке зерен корейского риса в различные моменты времени ($t = 0 \div 1$) в соответствии с продолжительностью эксперимента t_3 . Расчеты проведены при найденных значениях коэффициентов влагоотдачи и диффузии. На рис. 2 видно, что основной вклад в осушение засыпки зерен риса вносит миграция влаги к боковой поверхности. Этот факт объясняется тем, что площадь боковой поверхности засыпки больше площади торцевой поверхности. (Это соотношение площадей составляет $2l : 1$, в данном случае при $l = 20$ оно равно $40 : 1$.) По мере развития процесса в распределении влажности эффекты, происходящие вблизи к поверхности, сглаживаются, и влажность во внутренних областях образца уже не столь значительно превышает влажность в краевых областях.

Дальнейшие расчеты выполнялись при определенном выше коэффициенте диффузии и соответствующем режиме работы АКСУ коэффициенте влагоотдачи.

Влияние начальной влажности образца. Выясним, насколько точно предложенная математическая модель с определенными коэффициентами описывает экспериментальные данные при различных значениях начальной влажности зерен риса. На рис. 3 представлены экспериментальные данные [3], полученные при начальных значениях влажности $W_0 = 0,236; 0,204; 0,181; 0,156$, а также результаты численных расчетов. Заметим, что при $W_0 = 0,236$ продолжительность сушки в эксперименте составляла $t_3 = 30$ мин, а при остальных значениях W_0 $t_3 = 12$ мин. Из рис. 3. следует, что результаты расчетов по предлагаемой математической модели удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными как при различных начальных значениях влажности, так и при различной продолжительности акустоконвективного воздействия на осушаемую засыпку зерен риса.

На рис. 4 представлены кинетические характеристики акустоконвективного и естественного режимов сушки зерен риса при комнатной температуре. Естественная сушка проходила в помещении при комнатной температуре в течение 5 суток, продолжительность акустоконвективной сушки составляла 12 мин, при этом объем экстрагированной влаги в обоих случаях одинаков. Таким образом, время сушки в акустоконвективном режиме уменьшилось в 600 раз по сравнению со временем сушки в естественных условиях.

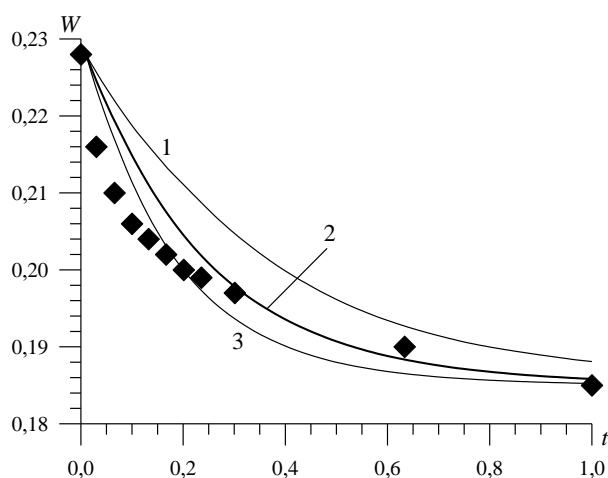


Рис. 1. Расчетные (линии) и экспериментальная (точки) зависимость влажности от времени при $\alpha = 0,036$ и различных значениях коэффициента диффузии:
 – $D = 1,0$, 2 – $D = 1,5$, 3 – $D = 2,0$

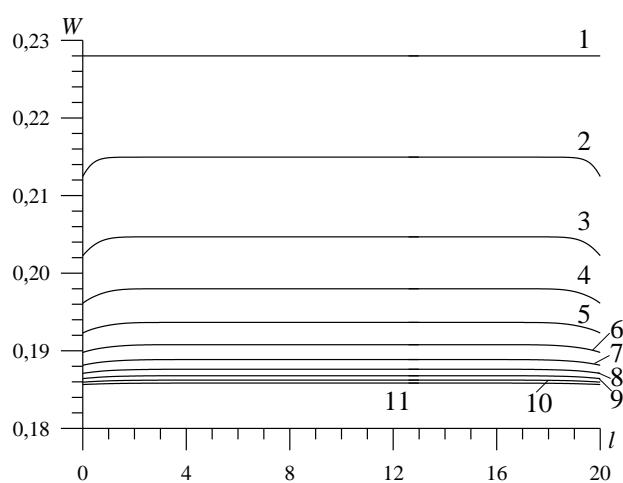


Рис. 2. Распределение влажности в засыпке риса в различные моменты времени: 1 – $t = 0$, 2 – $t = 0,1$, 3 – $t = 0,2$, 4 – $t = 0,3$, 5 – $t = 0,4$, 6 – $t = 0,5$, 7 – $t = 0,6$, 8 – $t = 0,7$, 9 – $t = 0,8$, 10 – $t = 0,9$, 11 – $t = 1,0$

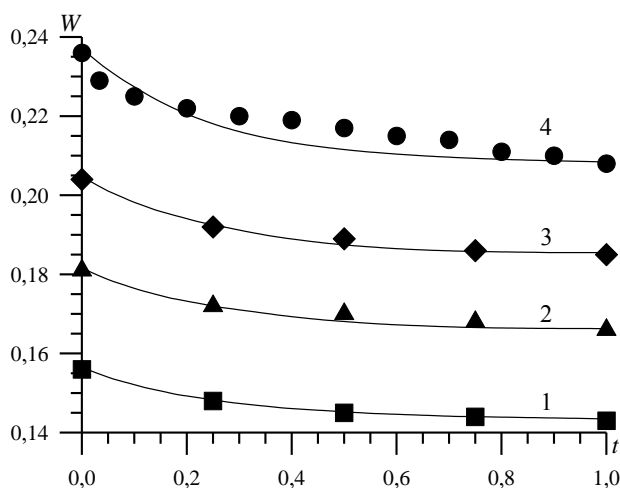


Рис. 3. Влияние начальной влажности на динамику сушки:

- 1 – 3 – $t_3 = 12$ мин ($1 - W_0 = 0,156$,
 2 – $W_0 = 0,181$, 3 – $W_0 = 0,204$),
 4 – $t_3 = 30$ мин, $W_0 = 0,236$

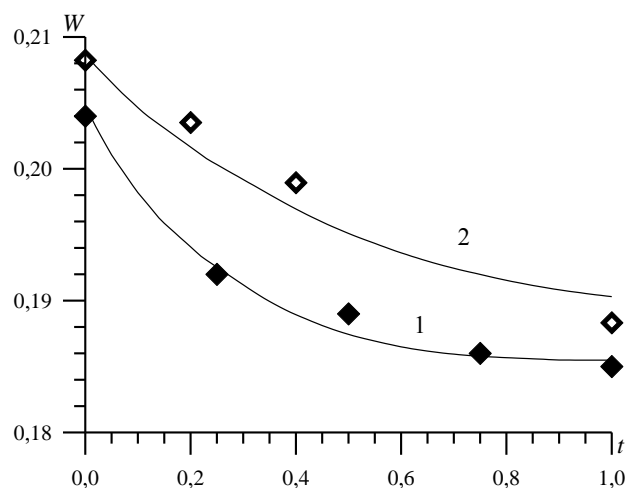


Рис. 4. Расчетные (линии) и экспериментальные (точки) зависимости влажности от времени, полученные при: 1 – акусто-конвективной сушке ($W_0 = 0,204$, $t_3 = 12$ мин, $\alpha = 0,036$),
 2 – естественной сушке ($W_0 = 0,208$,
 $t_3 = 5$ сут, $\alpha = 0,01$)

Для математического описания процесса сушки зерен риса при комнатной температуре в условиях естественной конвекции требовалось подобрать коэффициент влагоотдачи, так как для риса данный режим не был изучен ранее. Проведенные численные эксперименты показали, что оптимальным для режима естественной сушки неошелушенного корейского риса является безразмерное значение коэффициента влагоотдачи 0,01, соответствующее размерному значению $\alpha = 2963$ м-3. В работе [6] значение этого параметра было на порядок меньше, что обусловлено, по-видимому, различием сортов риса и учетом в [6] теплоподвода.

Выводы

1. Численно исследована динамика экстракции влаги из засыпки зерен риса при воздействии акусто-конвективного потока на основе математической модели диффузии влаги.
2. Показано, что методика, примененная в [4] для описания экстракции влаги из зернистого силикагеля, может быть использована и для описания процесса сушки неошелушенного корейского риса.
3. Определен коэффициент диффузии для неошелушенного корейского риса, что позволило воспроизвести динамику распределения влаги в цилиндрической засыпке зерен корейского риса.
4. Результаты численных расчетов, проведенных при различных значениях начальной влажности, удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.
5. Показано, что интенсивность процесса акусто-конвективной сушки значительно выше интенсивности процесса естественной сушки.

Литература

1. Лыков А.В. Теория сушки. М.: Энергия, 1968.
2. Лыков А.В. Тепло- и массообмен в процессах сушки. М.; Л.: Госэнергоиздат, 1956.
3. Коробейников Ю.Г., Трубочеев Г.В., Федоров А.В. и др. Экспериментальное исследование акусто-конвективной сушки неошелушенного корейского риса // Инж.-физ. журн., 2008. Т. 81, № 4. С. 652 – 655.
4. Жилин А.А., Федоров А.В., Коробейников Ю.Г. Исследование процессов пропитки и сушки зернистого силикагеля // Инж.-физ. журн., 2011. Т. 84, № 5. С. 897 – 906.
5. Berzins M, Dew P.M., Furzeland R.M. Developing software for time-dependent problems using the method of lines and differential-algebraic integrators // Appl. Numer. Math. 1989. N 5. P. 375 – 397.

6. Wilton Pereira da Silva, Jürgen W. Precker, Cleide M.D.P.S. e Silva, Josivanda Palmeira Gomes. Determination of effective diffusivity and convective mass transfer coefficient for cylindrical solids via analytical solution and inverse method: Application to the drying of rough rice // J. Food Eng-ng. 2010. V. 98. P. 302 – 308.
7. Wilton Pereira da Silva, Cleide M.D.P.S. e Silva, Jürgen W. Precker, et al. Diffusion models for the description of seedless grape drying using analytical and numerical solutions // Agricultural Sci. 2012. V. 3, N 4. P. 545 – 556.
8. Hacıhafızoglu O., Cihan A., Kahveci K., Lima A.G.B. A liquid diffusion model for thin-layer drying of rough rice // Eur. Food Res. Technol. 2008. V. 226, N 4. P. 787 – 793.
9. Wilton Pereira da Silva, Cleide M.D.P.S. Silva, Diogo D.P.S. Silva, Cleiton D.P.S. Silva. Numerical simulation of the water diffusion in cylindrical solids // Intern. J. Food Eng-ng. 2008. V. 4, iss. 2. Art. 6.

6.3. Исследование акусто-конвективной сушки мяса

Мясо является стратегическим продуктом для человека, так как в нем содержатся полезные питательные вещества, такие как животный жир, белок, витамины и микроэлементы [1]. Мясо в основном состоит из мышечной ткани, которая представляет собой набор мышечных волокон (рис. 1). В свою очередь мышечное волокно представляет собой клетку с длиной не более 15 см и диаметром от 10 до 100 мкм. В мышечных тканях свежего мяса может, содержится от 70 до 75 % воды. Большое содержание влаги в мясе не позволяет осуществлять его длительное сохранять без консервации. Для предотвращения порчи и сохранения полезных питательных свойств в мясе необходимо понизить содержание влаги в нем до 15 %. При этом температура, при которой происходит сушка, должна быть низкой 5 – 15 °С, что бы предотвратить активное развитие микроорганизмов. Традиционно для этого используется: тепловая сушка (конвективная, кондуктивная или сублимационная), охлаждение и замораживание. В результате этого затрачивается большое количество энергии и времени, теряется качество и полезные свойства продукта. Известно, что нагрев мяса до температур выше 45 °С приводит к разложению белков и разрушению витаминов, а это в свою очередь приводит к снижению гидрофильности и последующей неспособности восстанавливаться при увлажнении.

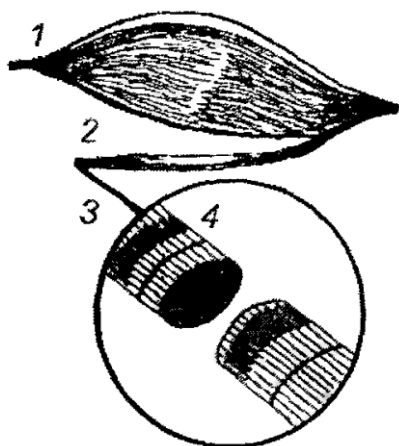


Рис. 1. Строение мышечной ткани.
 (1 – мышца; 2 – мышечный пучок; 3 –
 одиночное волокно;
 4 – вид мышечного волокна в электронном микроскопе)

В данном исследовании для сушки мяса предлагается применить акусто-конвективный способ, основанный на эффекте Гартмана [2]. Основным достоинством предлагаемого подхода является проведение сушки без повышения температуры осушаемого материала, что позволяет сохранять белок, витамины и другие его полезные свойства.

Эффективность данного метода для сушки капиллярно-пористых материалов была показана ранее для сушки таких материалов как силикагель [3, 4], древесина [5] и ряда других.

Определение начальной влажности. До начала экспериментов по исследованию динамики сушки мяса на акусто-конвективной сушильной установке ИТПМ СО РАН была определена его начальная влажность. Для этого из одного большого куска продукта было приготовлено три небольших образца с разной начальной массой. Так начальная масса первого осушаемого образца составляла 20,82 г, второго – 35,34 г, третьего – 50,23 г. Подготовленные образцы помещались в вакуумный сушильный шкаф СНВС- 4,3.4,3.4,9/3U24n. Регулятор нагревательного элемента был установлен в выключенное положение, при этом температура в шкафу на протяжении всего эксперимента колебалась в интервале 26 ÷ 27 °С. Общая

продолжительность сушки в вакуумном сушильном шкафу составила около 25 часов. По завершению эксперимента была зафиксирована масса образцов мяса в абсолютно сухом состоянии. Масса первого образца составила 5,06 г, второго – 11,12 г, третьего – 13,65 г. Регистрация массы образцов проводилась с помощью лабораторных весов AND EK 610i с максимально возможным весом 600 грамм и ценой деления 0,01 г. Зная массу абсолютно сухих образцов мяса, определяем начальную абсолютную и относительную влажность исследуемого материала. Абсолютная влажность – есть отношение массы влаги к массе абсолютно сухого материала:

$$W = \frac{m - m_0}{m_0} \times 100 \% ,$$

а относительная влажность – это отношение массы влаги к текущей массе исследуемого материала:

$$w = \frac{m - m_0}{m} \times 100 \% ,$$

где m – суммарная масса трех влажных образцов, m_0 – совокупная масса трех исследуемых образцов в абсолютно сухом состоянии. Таким образом, была определена начальная влажность мяса, которая составила $W = 256,65 \%$ или $w = 71,96 \%$. Полученное значение влажности принималось за начальное W_0 (w_0) во всех последующих экспериментах с мясом.

Сушка мяса акусто-конвективным способом. Эксперименты по сушке мяса акусто-конвективным способом проводились на лабораторной модельной установке ИТПМ СО РАН. Схема и принцип работы АКСУ рассмотрены ранее в работе [6]. Все опыты проводились в помещении с температурой 19,5 °С, влажностью 72,2 % (12,1 г/м³) и температурой точки росы 14,4 °С. Регистрация температуры и влажности окружающей среды и параметров потока в рабочей части АКСУ осуществлялась с помощью измерителя влажности и температуры ИВТМ-7 МК-С.

Подготовленные образцы испытуемого материала помещались в цилиндрический контейнер, изготовленный из металлической сетки с размером ячейки на просвет 0,7×0,7 мм и толщиной проволоки 250 мкм. В качестве материала сетки использовалась нержавеющая сталь. После загрузки контейнера он закрывался и крепился к подложке с помощью проволоки. Подложка с помощью системы крепления надежно фиксировалась в рабочей части АКСУ.

Запуск АКСУ осуществлялся без осушаемого материала. После выхода установки на режим проводилась регистрация параметров сформированного акусто-конвективного потока в рабочей части АКСУ. Осушающий поток имеет температуру 12,4 °С, влажностью 9,8 % (1,6 г/м³) и температурой точки росы -2,5 °С. В зависимости от цели проводимого исследования параметры рабочего потока менялись, но во всех видах экспериментов проводимых на АКСУ, постоянным поддерживалось давление в форкамере $P_0 = 5$ атм. Исследования проводились на трех режимах работы АКСУ: 1) при глубине резонатора $l = 300$ мм акусто-конвективный поток имеет частоту 270 Гц, интенсивность 184 дБ; 2) при $l = 80$ мм – частота 860 Гц, интенсивность 178 дБ; 3) при $l = 0$ мм – нет ярко выраженной частоты, а интенсивность 138 дБ.

Влияния расположения волокон мяса на динамику сушки мяса. Подготовленные контейнеры с образцами мяса загружались в рабочую часть действующей акусто-конвективной сушильной установки с установившимся осушающим потоком. Через фиксированные интервалы времени контейнеры с образцами извлекались из сушильной установки и взвешивались. Полученные после обработки результаты по динамике экстракции влаги из мяса представлены на рис. 2 как для образцов с первоначальным продольным, так и поперечным расположением волокон относительно рабочего потока.

Для случая, когда глубина стакана резонатора установлена в нулевое положение, динамика сушки мяса представлена на рис. 2а. Продолжительность сушки для образцов при по-

перечном расположении волокон составила 30 мин, за это время содержание влаги в образце уменьшилось на 45 %. Для случая с продольным расположением волокон продолжительность сушки составляла 25 мин. При этом влажность уменьшилась на 40 %. Из рис. 2а видно, что динамика сушки мяса для продольного и поперечного расположения волокон одинакова. Одним из объяснений отсутствия различия в динамике сушки образцов с различным расположением волокон может служить тот факт, что в процессе эксперимента изначально равномерно уложенные образцы кусочков мяса в контейнере имеют возможность перемещаться вниз по потоку, уплотняться и менять свое положение по отношению к набегающему потоку.

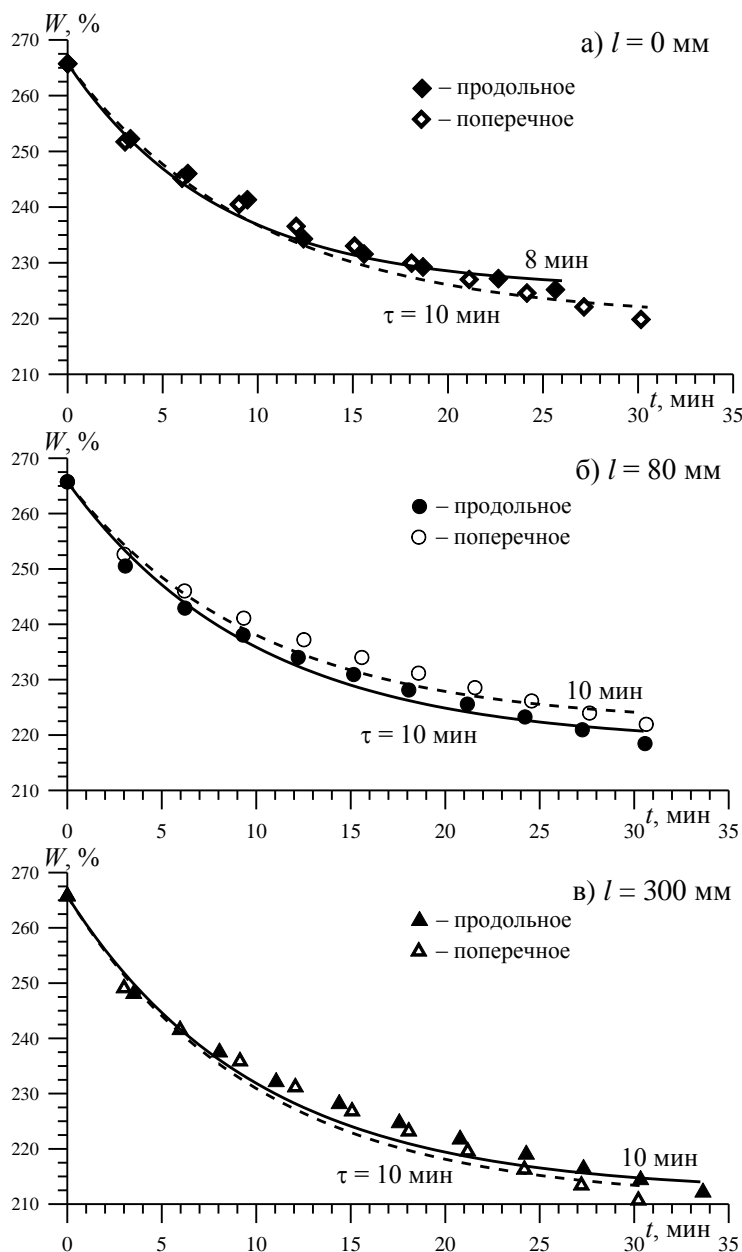


Рис. 2. Динамика экстракции влаги при акусто-конвективной сушке.

Сушка мяса термо-конвективным способом. Для сопоставления результатов по динамике сушки акусто-конвективным способом с традиционным основанным на подведении тепла к осушаемому материалу была выполнена серия экспериментов по сушке мяса термо-конвективным потоком. Для этого был изготовлен экспериментальный стенд. В качестве источника теплового потока использовалась тепловая пушка ЭТВ-4,5/220 Т с мощностью нагрева 4,5 кВт и скоростью потока 7,6 м/с. На тепловой пушке был установлен режим с ми-

На рис. 2б представлены результаты экспериментов по динамике сушки образцов мяса потоком при частоте 857 Гц и интенсивности 178 дБ. Продолжительность эксперимента, как для продольного, так и для поперечного расположения волокон в исследуемых образцах была одинаковой и составляла по 30 мин. За рассматриваемый интервал времени образец с продольными волокнами потерял 47,3 % влаги, а с поперечными только 43,8 %, т.е. динамика потери влаги из продольного образца за рассматриваемый интервал времени на 3,5 % больше, чем из образца с поперечным расположением волокон. Таким образом, наблюдается незначительное преимущество по скорости сушки мяса с продольной ориентацией волокон к набегающему акусто-конвективному потоку по сравнению с поперечной.

В последнем цикле экспериментов рабочий поток имел максимальную интенсивность 184 дБ при частоте 268 Гц. Как видно из рис. 2в динамика экстракции влаги из образцов практически не зависит от ориентации волокон мяса по отношению к набегающему осушающему потоку. Отметим, что за 30 мин. озвучивания потеря влаги составила 55 %, что является самым лучшим показателем из рассмотренных выше экспериментальных результатов.

нимальной температурой теплового потока. Параметры потока на выходе из тепловой пушки составляли: температура 51,6 °С, влажность 14,3 % или 13,1 г/м³, температура точки росы 16,3 °С.

Исследуемые образцы мяса помещались в центр теплового потока истекающего из тепловой пушки. Через определенные интервалы времени образцы извлекались из теплового потока и взвешивались. Интервалы времени между взвешиваниями изменялись в процессе экспериментов, так в первые моменты времени интервал между взвешиваниями изменялись в процессе экспериментов, так в первые моменты сушки интервал между взвешиваниями составлял 1 минуту, после 10 – 15 минут увеличивался до 3 минут, а с 40 – 60 минуты возрастал до 5 минут. Эксперимент по термо-конвективной сушке продолжался до тех пор, пока потери влаги за пятиминутный интервал времени не становились менее 0,5 % от начальной массы осушаемого образца.

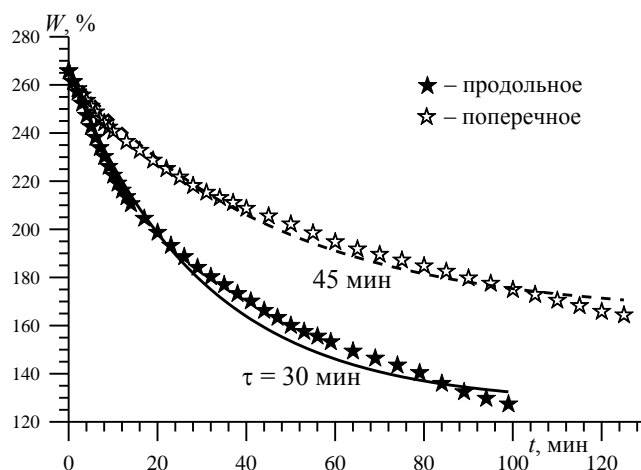


Рис. 3. Изменение влажности при термо-конвективной сушке.

%, а из продольных 27 %. За третий десяток минут уменьшилось содержание влаги в случае поперечного расположения волокон на те же 12 %, а в продольном случае на 15 %. За четвертый, пятый и шестой периоды сушки содержание влаги в образцах с поперечным расположением волокон составило 7 % за каждые 10 минут, а в образцах с продольными волокнами по 10 %. В последующие три интервала по 10 минут уменьшение составило по 5 % и 6 % для поперечных и продольных волокон соответственно. На следующих 10 минутных интервалах начиная с 90 ÷ 100 мин. различие сушки образцов с продольным и поперечным расположением волокон не наблюдается.

Таким образом, анализ динамики экстракции влаги при термо-конвективной сушке образцов мяса показал, что этот процесс по времени можно разбить на четыре участка. Первый участок ($t < 20$ мин.) характеризуется значительным преобладанием скорости сушки ($\Delta W \approx 15$ %) образцов с продольным расположением волокон над поперечным. Второй участок ($t \in (20, 60)$ мин.) имеет менее выраженное преобладание скорости сушки ($\Delta W \approx 3$ %) образцов с продольными волокнами мяса по сравнению с поперечными. На третьем участке ($t \in (60, 90)$ мин.) отличие в скорости сушки становится незначительной ($\Delta W \approx 1$ %), но, тем не менее, экстракция влаги из продольных волокон протекает быстрее, чем из поперечных. На четвертом участке ($t > 90$ мин.) наблюдается выравнивание динамики сушки ($\Delta W \approx 0$ %), т.е. влияние расположения волокон по отношению к набегающему термо-конвективному потоку становится незначительным.

Обсуждение экспериментальных результатов. Проведем сравнение результатов, полученных в экспериментах по акусто-конвективной сушке мяса на разных режимах и сопоставим их с термо-конвективным способом. На рис. 4 нанесены результаты по акусто-конвективной сушке мяса при трех рассмотренных ранее режимах и термо-конвективным потоком в течении 35 мин. На рис.4а представлены данные по динамике экстракции влаги из

образцов мяса с поперечным расположением волокон. Полученные зависимости для сушки при частоте 860 Гц с интенсивностью 178 дБ и при обтекании преграды с интенсивностью 138 дБ показывают практически одинаковый результат. В тоже время процесс сушки при частоте 270 Гц с интенсивностью 184 дБ имеет большую скорость, так для представленного случая за 30 мин. влажность уменьшилась на 55,1 %, против 43,8 % и 45,9 % для режима с интенсивностью 178 дБ и 138 дБ, соответственно. Из рисунка видно, что результаты по динамике сушки мяса термо-конвективным способом качественно отличаются от акусто-конвективного. В первые моменты времени ($t < 10$ мин.) потеря влаги при термо-конвективной сушке протекает медленнее, чем при акусто-конвективной, затем динамика обоих способов сушки сравнивается ($t = 10 \div 20$ мин.) и на последнем интервале времени ($t > 20$ мин.) динамика потери влаги при термо-конвективном способе сушки начинает преобладать над акусто-конвективной. Отметим, что количество потерянной влаги при термо-конвективной и акусто-конвективной сушке сопоставимо. Таким образом, динамика сушки образцов с поперечным расположением волокон относительно рабочего потока с температурой 12,4 °С при акусто-конвективной сушке и с температурой 51,6 °С при термо-конвективной сушке является подобной.

На рис. 4б показаны экспериментальные данные для мяса с продольным расположением волокон. Из рисунка видно, что динамика уменьшения влажности при акусто-конвективной сушке с интенсивностью в 138 дБ и 178 дБ практически совпадает, а случай с интенсивностью 184 дБ обладает более высокой скоростью влагоотдачи. Следовательно, наблюдается корреляция результатов по скорости акусто-конвективной сушки мяса для продольного и поперечного расположения волокон. Результат по термо-конвективной сушке образца мяса с продольным расположением волокон к набегающему потоку демонстрирует более высокую скорость экстракции влаги, чем при акусто-конвективной сушке.

Данный факт, как отмечалось ранее, можно объяснить тем, что при термо-конвективной сушке строго соблюдалась ориентация волокон по отношению к набегающему тепловому потоку. При акусто-конвективной сушке правильно ориентированные в начале эксперимента образцы мяса в процессе осушения перемещались внутри контейнера, в результате чего меняли свое пространственное расположение относительно набегающего потока. Кроме этого в процессе эксперимента происходило перемещение образцов вниз по потоку, что приводило к более плотному их расположению внутри контейнера, в результате образовывался единый плотный комок с большими размерами, тем самым происходило уменьшение площади контакта осушающего потока с осушаемым образцом. Это обстоятельство, по всей видимости, послужило причиной, которая привела к замедлению выхода влаги из исследуемых образцов мяса.

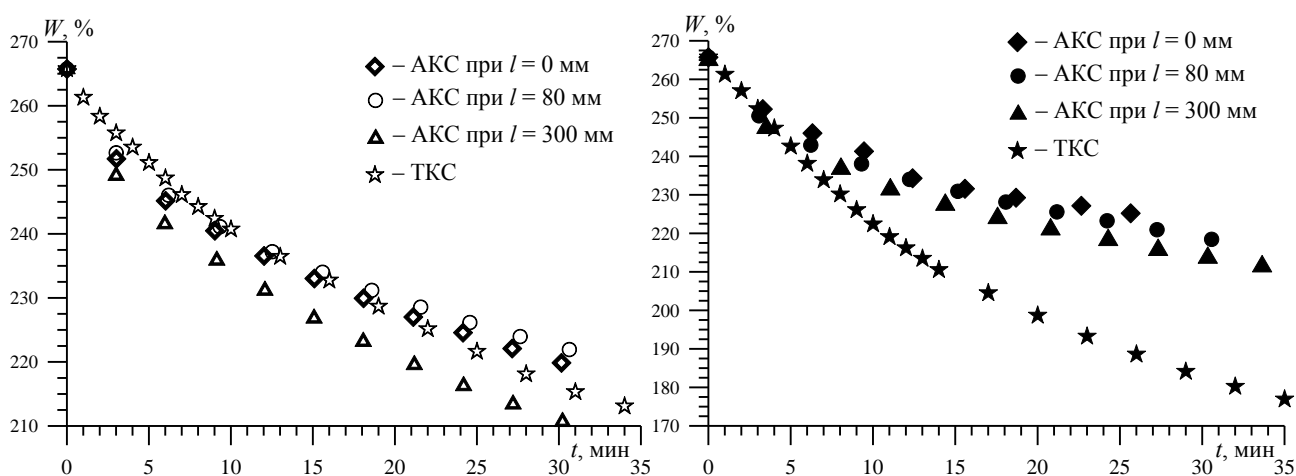


Рис. 4. Сопоставление динамики акусто-конвективной сушки при разных режимах и термо-конвективной сушки мяса для поперечных (а) и продольных (б) волокон.

Отработка технологии сушки мяса акусто-конвективным способом. С целью создания технологической цепочки по сушке мяса с применением акусто-конвективного метода была выполнена серия экспериментов. В рамках исследований проводилось изучение способов оптимизации энергозатрат на единицу осушаемой продукции при этом полностью сохранить все полезные свойства мяса. Результаты, представленные в данной работе, показывают, что наиболее оптимальным интервалом времени для акусто-конвективной сушки является период первых 20 – 30 мин., в последующие временные интервалы сушка значительно замедляется. Поэтому представляется целесообразным осуществить выдержку осушаемых образцов, чтобы дать возможность влаге перераспределиться внутри исследуемого образца, а затем выполнить повторное озвучивание образцов по аналогии с работой [11].

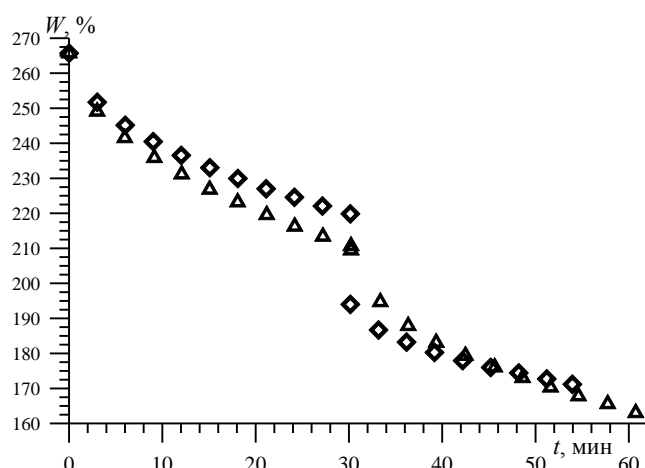


Рис. 5. Динамика акусто-конвективной сушки с выдержкой в течение суток: а) в непроницаемом пакете, б) в помещении при комнатной температуре.

Образец, находящийся в комнате на открытом воздухе уменьшал влагосодержание в среднем на $25 \div 26 \%$, при этом поверхность образца была сухой, т.е. образовывалась подсохшая корочка.

Повторная акусто-конвективная сушка осуществлялась на тех же режимах и при тех же условиях, что и сутками ранее. Образцы, хранившиеся в целлофановом пакете, при повторном озвучивании акусто-конвективным потоком имеют похожую динамику потери влаги, что и полученная сутками ранее для этих же образцов. Отличие, как видно из рис. 8, наблюдается только в количестве экстрагированной влаги, так 30 минутная сушка в первые сутки приводила к потере 55 % влаги, а через сутки повторное озвучивание уменьшало содержания влаги в мясе на 46 %. Таким образом, за два получасовых приема абсолютная влажность образцов суммарно уменьшилась на $\approx 100 \%$, а относительная влажность на $\approx 10 \%$ с начальной $\approx 72 \%$ до конечной $\approx 62 \%$.

Образцы, хранящиеся в течение суток в комнате, при повторном озвучивании теряют влагу достаточно медленно, так при первом цикле озвучивания влажность уменьшилась на $\approx 46 \%$, а после суток выдержки озвучивание привело к уменьшению влажности только на $\approx 23 \%$. Причин такого значительного замедления динамики потери влажности при повторном озвучивании две. Первая причина связана с неравномерным распределением влажности внутри образца возникающей при естественной сушке, что замедлило процесс переноса влаги внутри образца. Во-вторых, как было отмечено ранее, на поверхности образцов образовалась сухая корочка, которая замедляет процесс влагоотдачи с поверхности образца. Проведя анализ потерянной влаги в результате двух периодов озвучивания с интервалом в сутки и выдержкой образцов в течение суток при комнатной температуре можно заметить, что суммарная абсолютная влажность уменьшилась на $\approx 95 \%$. Таким образом, объем влаги экстрагированной в процессе сушки по обеим схемам оказался сопоставимым.

Подытоживая полученные результаты можно представить технологическую цепочку по сушке мяса используя комбинацию двух физических процессов: акусто-конвективная сушка и диффузии влаги.

Математическое описание экспериментальных данных. Для проведения математической обработки полученных в экспериментах кинетических кривых экстракции влаги привлекается линейное релаксационное уравнение в виде:

$$\frac{dW}{dt} = \frac{W_K - W}{\tau}, \quad (1)$$

с начальным условием

$$\text{при } t = 0 \quad W = W_0, \quad (2)$$

где W_0 – начальная влажность, W_K – условная конечная равновесная влажность, τ – время релаксации экстракции влаги. Аналитическое решение уравнения (1) имеет вид:

$$W = W_K + (W_0 - W_K) e^{-(t/\tau)}. \quad (3)$$

На рис. 2 сплошными линиями представлены результаты численных расчетов, полученные с помощью выражения (3) при соответствующих наилучших значениях τ . Здесь можно заметить, что практически для всех режимов акусто-конвективной сушки удовлетворительное согласование предлагаемой математической модели с экспериментальными данными по динамике экстракции влаги из мяса достигается при $\tau = 10$ мин. Исключением является случай сушки мяса с продольным расположением волокон при интенсивности 138 дБ без явно выраженного максимума по частоте, здесь $\tau = 8$ мин.

Полученные времена релаксации процесса сушки мяса сопоставимы со значениями, полученными в работе [12] для акусто-конвективной сушки зерен кедрового ореха, где характерное время релаксации для скорлупы кедрового ореха составляло 7,5 мин, для ядер – 13 мин, а для зерен – 20 мин. Авторы работы [13] моделирующие волокнистое пористое тело в виде сборки микро-капиллярных трубок получили времена релаксации равные 9 и 6 минутам при продольном и поперечном расположении капилляров по отношению к набегающему потоку, соответственно. Таким образом, полученные времена релаксации для акусто-конвективной сушки волокон мяса хорошо коррелируют со значениями, полученными в других работах.

С помощью предлагаемой математической модели были обработаны экспериментальные данные по сушке мяса термо-конвективным способом. На рис. 3 сплошной и пунктирной линиями нанесены результаты численных расчетов, выполненных при $\tau = 30$ мин для продольного волокна и $\tau = 45$ мин для поперечного.

Выводы

1. Экспериментально изучена динамика экстракции влаги из образцов мяса при акусто-конвективном и термо-конвективном режимах сушки.
2. При акусто-конвективной сушке было обнаружено, что при низких частотах помещение образца в тракт рабочей части акусто-конвективной сушильной установки приводит к уменьшению интенсивности акусто-конвективного потока на $\approx 3\%$, а при высоких частотах к увеличению на $\approx 18\%$.
3. Проведенные эксперименты показали, что:
 - а. при термо-конвективной сушке наблюдается значительное увеличение скорости экстракции влаги в образцах с продольным размещением волокон относительно набегающего потока, по сравнению со случаем поперечного волокна;
 - б. при акусто-конвективной сушке влияние положения волокон мяса относительно рабочего потока либо отсутствует, либо является не существенным.
4. Полученные количественные данные по динамике экстракции влаги из поперечных волокон мяса при двух способах сушки показали, что для достижения схожей производитель-

ности по сушке температура термо-конвективного потока должна составлять 52 °С, в то время как температура осушающего акусто-конвективного потока 12 °С.

5. Для описания динамики экстракции влаги предложена простая релаксационная модель, со временем релаксации $8 \div 10$ мин удовлетворительно описывающая экспериментальные данные по акусто-конвективной сушке мяса, а для термо-конвективной 30 и 45 мин для продольного и поперечного расположения волокон, соответственно.

Литература

1. Винникова Л. Г. Технология мяса и мясных продуктов. Киев: «ИНКОС», 2006. – 600 с.
2. Глазнев В.Н., Солотчин А.В., Сулейманов Ш. Параметрическое исследование автоколебаний при втекании сверхзвуковой струи в цилиндрическую полость // Известия СО АН СССР. Серия технических наук, 1983. № 13, вып. 3. С. 22 – 26.
3. Жилин А.А., Федоров А.В., Коробейников Ю.Г. Исследование процессов пропитки и сушки зернистого силикагеля // Инженерно-физический журнал, 2011. Т. 84, № 5. С. 897 – 906.
4. Жилин А.А. Изучение процессов пропитки и сушки пористых материалов // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского, 2011. № 4 Часть 3. С. 777 – 778.
5. Жилин А.А., Федоров А.В., Фомин, В.М. Коробейников Ю.Г. Математическое моделирование механизма акустической сушки пористых материалов // Прикладная механика и техническая физика, 2003. Т. 44, № 5. С. 102 – 117.
6. Глазнев В.Н., Коробейников Ю.Г. Эффект Гартмана. Область существования и частоты колебаний // Прикладная механика и техническая физика, 2001. Т. 42, № 4. С. 62 – 67.
7. Борисов Ю.Г. Газоструйные излучатели звука Гартмановского типа // Физика и техника мощного ультразвука. Книга 1: «Источники мощного ультразвука» / Под ред. Л.Д. Розенберга. – М.: Наука, 1967. С.7 – 110.
8. Голубков А.Г., Козьменко Б.К., Остапенко В.А., Солотчин А.В. О взаимодействии сверхзвуковой недорасширенной струи с плоской ограниченной преградой // Изв. СО АН СССР, серия техн. наук, 1972, вып. 3, № 13. С. 52 – 58.
9. Семилетенко Б.Г., Усков В.Н. Экспериментальные зависимости, определяющие положение ударных волн в струе, натекающей на преграду, перпендикулярную ее оси // Инженерно-физический журнал, 1972. Т. 23, № 3. С. 453 – 458.
10. Глазнев В.Н. О механизме обратной связи в автоколебаниях при натекании сверхзвуковой недорасширенной струи на плоскую преграду // Прикладная механика и техническая физика, 1991. №4. С. 59 – 63.
11. Коробейников Ю.Г., Трубачев Г.В., Федоров А.В. и др. Экспериментальное исследование акусто-конвективной сушки неошелушенного корейского риса // Инженерно-физический журнал, 2008. Т. 81, № 4. С. 652 – 655.
12. Жилин А.А., Федоров А.В. Акусто-конвективная сушка кедрового ореха // Инженерно-физический журнал, 2014. Т. 87, № 4. С. 879 – 886.
13. Коробейников Ю.Г., Федоров А.В. Об экстракции воды из капиллярного образца в акустическом поле // Инженерно-физический журнал, 2003. Т. 76, № 1. С. 7 – 10.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Краткие выводы по результатам НИР в целом:

В работе развиты физико-математические модели механики гомогенных/гетерогенных реагирующих/инертных сред и математические технологии для решения задач взрывопожаробезопасности промышленных производств, основанных на использовании дисперсных сред микро - и нано – структуры (алюминий, железо и др.), а также гомогенных реагирующих сред (силан, водород, метан и др.). Впервые получены новые данные о параметрах: - воспламенения и горения, - подавления и ослабления детонационных явлений в неоднородных средах, в том числе содержащие инертные частицы, - теплофизических характеристиках

наноразмерных частиц алюминия и железа, тепломассопереноса в капиллярно-пористых телах под воздействием акусто-конвективного потока. Предложены математические модели для моделирования воздействия взрывных волн на структуры, моделирующие городскую среду, позволяющие оценить устойчивость объектов относительно подобных воздействий.

Оценка полноты решений поставленных задач по НИР в целом:

Работы по проекту выполнены на высоком научном уровне с помощью современных феноменологических и молекулярно – динамических методов механики реагирующих гетерогенных сред. Разработанные математические модели верифицированы по литературным экспериментальным данным. Для проведения численных расчетов используются как высокоточные математические технологии, разработанные исполнителями проекта, так и некоторые открытые и коммерческие пакеты программ для расчета задач проекта.

Рекомендации по конкретному использованию результатов НИР:

Полученные новые данные могут использоваться при проектировании образцов новой техники, основанной на использовании гетерогенных смесей газов и мелких частиц металлов микро- и нано- структуры, при разработке новых методов подавления нежелательных катастрофических явлений в промышленных производствах с рабочими телами в виде газозвесей реагирующих частиц, при оценке катастрофических последствий взрывного воздействия катастрофической техногенной и террористической приролы.

Оценка научного уровня выполненной НИР в целом в сравнении с лучшими достижениями в данной области.

Работа выполнена на высоком научном уровне, обусловленном использованием современных феноменологических и молекулярно – динамических методов механики реагирующих/инертных гомогенных/гетерогенных сред, наличием модернизированных струйных установок для проведения исследований по проблемам тепло-массопереноса в капиллярно-пористых средах при акусто-конвективном воздействии. Результаты доложены на многочисленных отечественных и зарубежных конференциях, опубликованы в высокорейтинговых журналах в РФ и за рубежом. Исследования поддерживались также грантами различных фондов РФ. Развитые теории и экспериментальные подходы сопоставимы с уровнем международных исследований, а в некоторых областях превосходят его.

ПРИЛОЖЕНИЕ.

Список трудов 2016

1. Федоров А.В., Федорова Н.Н., Фомин П.А., Вальгер С.А. Распространение взрывных процессов в неоднородных средах. Новосибирск: Параллель, 2016. 258 с.
2. Khmel T.A., Fedorov A.V. Shock wave processes in collisional gas particle mixtures // [Journal of Physics: Conference Series](#). 2016.Vol. 722 No. 1. P. 012044.
3. Федоров А.В., Шульгин А.В. Молекулярно динамическое и феноменологическое моделирование нагрева нанобъекта алюминия // *Физика горения и взрыва*. 2016. Т. 52, № 3. С. 45–50.
4. Кратова Ю.В., Хмель Т.А., Федоров А.В. Осесимметричная расширяющаяся гетерогенная детонация в газозвесах частиц алюминия // *Физика горения и взрыва*. 2016. Т. 52, № 1. С. 84–95.
5. Тропин Д.А., Федоров А.В. Расчет пределов воспламенения смесей силан - кислород и силан - воздух // *Физика горения и взрыва*. 2016. Т. 52, № 1. С. 46–51.
6. Хмель Т.А., Федоров А.В. [Влияние столкновительной динамики частиц на процессы ударно-волнового диспергирования](#) // *Физика горения и взрыва*. 2016. Т. 52, № 2. С. 93–105.

7. Федоров А.В., Шульгин А.В., Лаврук С.А. Описание плавления наноразмерных образцов алюминия // Физика горения и взрыва, 2016, т. 52 №4, с. 94-100.
8. Бедарев И.А., Федоров А.В. Моделирование динамики нескольких частиц за проходящей ударной волной // Письма в журнал технической физики, 2016. Т. 42, № 24. С. 17-23.
9. Жилин А.А., Федоров А.В. Исследование акустоконвективной сушки мяса // Инженерно-физический журнал. 2016. Т. 89, № 2. С. 316–325.
10. Bedarev I.A., Fedorov A.V. Numerical modeling of the particle velocity and thermal relaxation behind passing shock waves // [18th International Conference on the Methods of Aerophysical Research \(ICMAR2016\) \(Russia, Perm, 27 Jun.-3 Jul., 2016\)](#) : AIP Conference Proceedings. S. 1.: 2016. Vol. 1770. P. 030072.
11. Fedorov A.V., Khmel T.A., Kratova Yu.V. Numerical modeling of heterogeneous detonation suppression by micro - and nanosize inert particles // Nonequilibrium processes in physics and chemistry/ Ed. by A.M. Starik, S.M. Frolov. Moscow: TORUS PRESS, 2016. Vol. 2. Combustion and detonation. P. 319-326.
12. Fedorov A.V., Lavruk S.A. Two-phase flows simulation in closed volume // [18th International Conference on the Methods of Aerophysical Research \(ICMAR2016\) \(Russia, Perm, 27 Jun.-3 Jul., 2016\)](#) : AIP Conference Proceedings. S. 1. 2016. Vol. 1770. P. 030082.
13. Fedorov A.V., Shulgin A.V., Lavruk S.A. Study of iron nanoparticle melting // [18th International Conference on the Methods of Aerophysical Research \(ICMAR2016\) \(Russia, Perm, 27 Jun.-3 Jul., 2016\)](#) : AIP Conference Proceedings. S. 1. 2016. Vol. 1770. P. 030099.
14. Fedorova N.N., Valger S.A., Fedorov A.V. Simulation of blast action on civil structures using ANSYS Autodyn // [18th International Conference on the Methods of Aerophysical Research \(ICMAR2016\) \(Russia, Perm, 27 Jun.-3 Jul., 2016\)](#) : AIP Conference Proceedings. S. 1.: 2016. Vol. 1770. P. 020016.
15. Khmel T.A., Fedorov A.V. Detonation structures in gas suspensions of submicron and nanoaluminum particles // Nonequilibrium processes in physics and chemistry / Ed. by A.M. Starik, S.M. Frolov. Moscow: TORUS PRESS, 2016. Vol. 2. Combustion and detonation. P. 341-351.
16. Kratova Y.V., Fedorov A.V., Inert particles size distribution influence on heterogeneous detonation suppression // [18th International Conference on the Methods of Aerophysical Research \(ICMAR2016\) \(Russia, Perm, 27 Jun.-3 Jul., 2016\)](#) : AIP Conference Proceedings. S. 1.: 2016. Vol. 1770. P. 040020.
17. Tropin D.A., Fedorov A.V. Ignition of dual-fuel mixture of hydrogen-silane in oxidizer // Nonequilibrium processes in physics and chemistry/ Ed. by A.M. Starik, S.M. Frolov. Moscow: TORUS PRESS, 2016. Vol. 2. Combustion and detonation. P. 164-171.
18. Tropin D.A., Fedorov A.V. Ignition of hydrogen-air mixture diluted by silane // [18th International Conference on the Methods of Aerophysical Research \(ICMAR2016\) \(Russia, Perm, 27 Jun.-3 Jul., 2016\)](#) : AIP Conference Proceedings. S. 1.: 2016. Vol. 1770. P. 030090.
19. Tropin D.A., Fedorov A.V. Interaction of detonation waves with clouds of inert nanoparticles // Nonequilibrium processes in physics and chemistry / Ed. by A.M. Starik, S.M. Frolov. Moscow: TORUS PRESS, 2016. Vol. 2. Combustion and detonation. P. 634-641.
20. Valger S.A., Fedorova N.N., Fedorov A.V. Numerical study of atmospheric air flow in the vicinity of urban environment // [18th International Conference on the Methods of Aerophysical Research \(ICMAR2016\) \(Russia, Perm, 27 Jun.-3 Jul., 2016\)](#) : AIP Conference Proceedings. S. 1.: 2016. Vol. 1770. P. 040017.
21. Zakharova Y.V., Fedorova N.N., Fedorov A.V. Modeling of interior explosions // [18th International Conference on the Methods of Aerophysical Research \(ICMAR2016\) \(Russia, Perm, 27 Jun.-3 Jul., 2016\)](#) : AIP Conference Proceedings. S. 1.: 2016. Vol. 1770. P. 040013.
22. Bedarev I.A., Fedorov A.V. Numerical modeling of the particles velocity and thermal relaxation behind passing shock waves // XVIII International Conference on the Methods of Aero-

- physical Research (ICMAR-16) (Russia, Perm, 27 Jun.-3 Jul., 2016) : abstracts. pt. II. Perm: 2016. P. 24-25.
23. Fedorov A.V., Khmel T.A., Kratova Y.V. Inert particle size distribution influence on heterogeneous detonation suppression // XVIII International Conference on the Methods of Aerophysical Research (ICMAR-16) (Russia, Perm, 27 Jun.-3 Jul., 2016) : abstracts. pt. II. Perm: 2016. P. 54-55.
 24. Fedorov A.V., Lavruk S.A. Two-phase flows simulation in closed volume // XVIII International Conference on the Methods of Aerophysical Research (ICMAR-16) (Russia, Perm, 27 Jun.-3 Jul., 2016) : abstracts. pt. I. Perm: 2016. P. 70-71.
 25. Fedorov A.V., Shulgin A.V., Lavruk S.A. Study of iron nanoparticle melting // XVIII International Conference on the Methods of Aerophysical Research (ICMAR-16) (Russia, Perm, 27 Jun.-3 Jul., 2016) : abstracts. pt. I. Perm: 2016. P. 72-73.
 26. Fedorova N.N., Valger S.A., Fedorov A.V. Simulation of blast action on civil structures using ANSYS AUTODYN // XVIII International Conference on the Methods of Aerophysical Research (ICMAR-16) (Russia, Perm, 27 Jun.-3 Jul., 2016) : abstracts. pt. II. Perm: 2016. P. 56-57.
 27. Fomin P.A., Fedorov A.V., Chen J.-R. Calculation of detonation characteristics of silane-air mixtures // 11th International Symposium on Hazards, Prevention and Mitigation of Industrial Explosions (11th ISHPMIE) (China, Dalian, 24-29 July 2016) : Proceedings. Dalian: 2016. P. 74-78.
 28. Tropin D.A., Fedorov A.V. Ignition limits of silane-air mixture // 11th International Symposium on Hazards, Prevention and Mitigation of Industrial Explosions (11th ISHPMIE) (China, Dalian, 24-29 July 2016) : Proceedings. Dalian: 2016. P. 1142 - 1153.
 29. Tropin D.A., Fedorov A.V. Ignition of hydrogen-air mixture diluted by silane // XVIII International Conference on the Methods of Aerophysical Research (ICMAR-16) (Russia, Perm, 27 Jun.-3 Jul., 2016) : abstracts. pt. I. Perm: 2016. P. 202-203.
 30. Zakharova Y.V., Fedorova N.N., Fedorov A.V. Modeling of an interior explosions // XVIII International Conference on the Methods of Aerophysical Research (ICMAR-16) (Russia, Perm, 27 Jun.-3 Jul., 2016) : abstracts. pt. II. Perm: 2016. P. 230-231.
 31. Бедарев И.А., Темербеков В.М., Федоров А.В. Численное моделирование взаимодействия детонационной волны с реагирующим сверхзвуковым потоком // Механика композиционных материалов и конструкций, сложных и гетерогенных сред : тезисы докладов 6-й Всероссийской научной конференции с международным участием им. И.Ф. Образцова и Ю.Г. Яновского (Москва, 16-18 нояб. 2016 г.). М: ИПРИМ РАН, 2016. С. 118.
 32. Бедарев И.А., Федоров А.В. Численное моделирование тепловой и скоростной динамики частиц за проходящими ударными волнами // Механика композиционных материалов и конструкций, сложных и гетерогенных сред : тезисы докладов 6-й Всероссийской научной конференции с международным участием им. И.Ф. Образцова и Ю.Г. Яновского (Москва, 16-18 нояб. 2016 г.). М: ИПРИМ РАН, 2016. С. 97-98.
 33. Зырянов К.И., Руев Г.А., Федоров А.В. Развитие неустойчивости Рихтмайера – Мешкова при падении ударной волны на каплю тяжелого газа // Актуальные вопросы строительства : Материалы IX Всероссийской научно-технической конференции. Новосибирск: НГАСУ (Сибстрин), 2016. С. 206-211.
 34. Федоров А.В., Бедарев И.А. Решение типа бегущей волны и его численная реализация в гетерогенных средах с двумя давлениями // Всероссийская конференция "Нелинейные волны: теория и новые приложения", посвященная 70-летию со дня рождения члена-корреспондента РАН В. М. Тешукова (29 февр.–2 март. 2016 г.) : тезисы докладов. Новосибирск: 2016. С. 108-109.
 35. Федоров А.В., Бедарев И.А., Шульгин А.В. Численная реализация решений типа бегущей волны в гетерогенных средах с двумя давлениями и учетом объемной концентрации частиц // Механика композиционных материалов и конструкций, сложных и гете-

- рогенных сред : тезисы докладов 6-й Всероссийской научной конференции с международным участием им. И.Ф. Образцова и Ю.Г. Яновского (Москва, 16-18 нояб. 2016 г.). М: ИПРИМ РАН, 2016. С. 160.
36. Федоров А.В., Тропин Д.А. Пределы воспламенения силано-кислородных и силано-воздушных смесей // XV Минский международный форум по тепло- и массообмену (Минск, 23–26 мая. 2016 г.): тезисы докладов и сообщений = XV Minsk international Heat and Mass Transfer Forum/ Институт тепло- и массообмена НАН Беларуси. Минск: Институт тепло- и массообмена НАН Беларуси, 2016. Т. 2. С. 184-188.
37. Федоров А.В., Фомин П.А., Цай Ш.Ю., Ханг Х.Л., Ву С.И., Ку Ч.В., Чен Дж.Р. Исследование воспламенения и взрыва струи силана, истекающей в открытое пространство // Механика композиционных материалов и конструкций, сложных и гетерогенных сред : тезисы докладов 6-й Всероссийской научной конференции с международным участием им. И.Ф. Образцова и Ю.Г. Яновского (Москва, 16-18 нояб. 2016 г.). М: ИПРИМ РАН, 2016. С. 131.
38. Федоров А.В., Хмель Т.А., Лаврук С.А. Выход детонационной волны в расширяющийся канал // Механика композиционных материалов и конструкций, сложных и гетерогенных сред : тезисы докладов 6-й Всероссийской научной конференции с международным участием им. И.Ф. Образцова и Ю.Г. Яновского (Москва, 16-18 нояб. 2016 г.). М: ИПРИМ РАН, 2016. С. 113-114.
39. Хмель Т.А., Федоров А.В. Ударно-волновые процессы в столкновительных газовзвесьях // Всероссийская конференция "Нелинейные волны: теория и новые приложения", посвященная 70-летию со дня рождения члена-корреспондента РАН В. М. Тешукова (29 февр.–2 март. 2016 г.) : тезисы докладов. Новосибирск: 2016. С. 113-114.
40. Хмель Т.А., Федоров А.В. Физико-математическая модель детонации газовзвеси микро и наночастиц алюминия // Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики (ФППСМ-2016): Сборник трудов IX всероссийской научной конференции, 21-25 сентября 2016 года, г. Томск. Томск: Томский государственный университет, 2016. 474 с. С. 108–110.

Таблица. Количественные характеристики публикационной активности

индикатор	Ед. измерения	Всего за 2013-2016 гг.	2013	2014	2015	2016
Количество публикаций в ведущих российских и международных журналах по результатам исследований, полученных в процессе реализации проекта	единиц	49	14	11	12	12
Количество публикаций в мировых научных журналах, индексируемых в базе данных «Сеть науки» (WEB of Science)	единиц	10	3	2	3	2

Число тезисов в конференциях	единиц	114	37	16	27	34
Число охраняемых объектов интеллектуальной собственности: зарегистрированных патентов в России зарегистрированных патентов за рубежом	единиц единиц					

Результат научной деятельности л. 12 в 2016

Создана иерархия физико-математических моделей механики гетерогенных/гомогенных реагирующих сред (микро- и нано- структуры) для описания проблем снижения риска возникновения и уменьшения последствий катастрофических взрывных явлений. Разработана математическая технология для реализации конкретных задач, позволившая предложить критерии подавления или ослабления последствий этих воздействий.

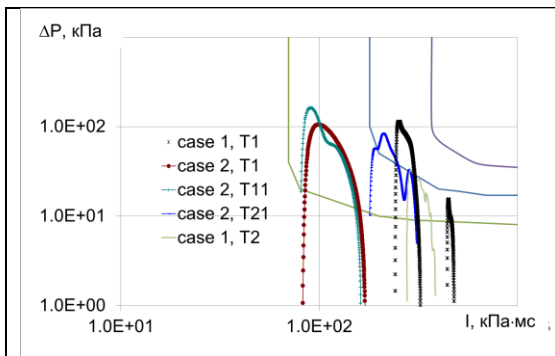


Рис. 1. P-I диаграмма нагрузок для различных точек случаев (case) 1 и 2. 3D подход.

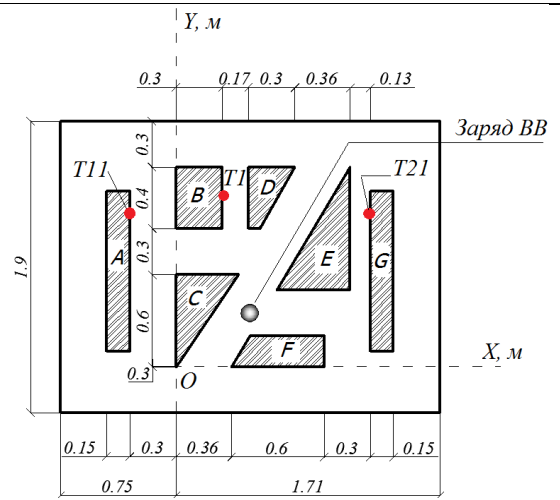


Рис. 2. Расположение объектов в пространстве. Точки T_{ij} расположены на А,В,Г объектах.