

Российская академия наук
Отделение энергетики, машиностроения, механики и процессов
управления Российской академии наук
Научный совет РАН по механике конструкций из композиционных
материалов
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
прикладной механики Российской академии наук
Федеральное государственное бюджетное учреждение Московский
авиационный институт (Национальный исследовательский университет)

МЕХАНИКА КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ И КОНСТРУКЦИЙ

СБОРНИК ТРУДОВ
IV-го Всероссийского симпозиума

(4 – 6 декабря 2012 года, г. Москва)

Том 2.

МОСКВА

«Механика композиционных материалов и конструкций».
Сборник трудов IV-го Всероссийского симпозиума в 2-х томах. Том 2.
Москва, 4 – 6 декабря 2012 г. – М.: ИПРИМ РАН, 2012. – 268 с.

В том 2 Сборника трудов симпозиума включены работы участников симпозиума, доложенные на секциях: “Горение и детонация сложных сред” и “Вычислительные методы механики гетерогенных сред”.

Составители сборника:

Карнет Ю.Н., Яновская Ю.Ю., Левин Ю.К., Яновский Ю.Г.

© ФГБУН Институт прикладной механики
Российской академии наук, 2012

Горение и детонация сложных сред

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИНГЕР-ЭФФЕКТА ПРИ ФИЛЬТРАЦИОННОМ ГОРЕНИИ*

Алдушин А.П., Ивлева Т.П.

*ФГБУН Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения
Российской академии наук, г. Черноголовка, МО, Россия*

РЕЗЮМЕ

В работе [1] было показано, что плоский фронт выгорания топлива в пористой среде при фильтрации окислителя может быть неустойчивым и принимать конфигурацию фингера, наблюдающегося при вытеснении маловязкой жидкостью сильновязкой жидкости в плоском канале [2].

Данный результат был получен в рамках гидродинамического приближения, пренебрегающего шириной зоны горения по сравнению с шириной канала.

В настоящей работе проведено численное моделирование распространения волны фильтрационного горения в пористой среде с учетом теплодиффузионных и кинетических факторов, определяющих реально конечную ширину зоны горения.

Математическая модель процесса включает уравнения баланса тепла и массы твердых и газообразных реагентов. Скорость фильтрации газа определялась по закону Дарси. Задача рассматривалась в плоской геометрии, имитирующей тонкий щелевидный канал, заполненный пористой средой, содержащей топливную компоненту.

Проведенные расчеты показали, что при определенных условиях плоский фронт горения искривляется и принимает форму фингера. В частности, такой эффект возникает в том случае, когда проницаемость среды увеличивается вследствие выгорания топлива.

Ключевые слова: горение; фильтрация; фингеринг

1. ВВЕДЕНИЕ

Фильтрационное горение (ФГ) охватывает широкий класс процессов распространения волн экзотермического взаимодействия горючей компоненты пористой среды с фильтрующимся газом, содержащим окислитель. Интерес к изучению ФГ связан с довольно широким его использованием в технологических схемах различных производств (газификация твердых топлив, регенерация катализаторов, обжиг и агломерация минералов, внутрислоевое горение, утилизация отходов, синтез материалов в режиме горения и др.). Научное исследование процессов ФГ, начавшееся в 50-х и значительно активизировавшихся на рубеже 80-х годов прошлого столетия фокусировалось, в основном, на стационарных и квазистационарных режимах процесса. Обзор результатов, полученных на этом этапе, содержится в [3].

В работе [1] был поставлен вопрос о соответствии режимов, наблюдаемых в лабораторных установках, режимам ФГ в реакторах практического назначения.

Было показано, что при переходе к реакторам большого поперечного сечения плоский фронт горения, заполняющий всё поперечное сечение реактора, может стать неустойчивым. Согласно [1], разрушение плоской волны ФГ должно приводить к

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 12-03-00944).

структурированию фронта горения в виде пальцев (фингеров), обнаруженных Саффманом и Тейлором (Saffman, Taylor (ST)) при изучении процесса вытеснения сильновязкой жидкостью маловязкой жидкостью [2].

Механизм самопроизвольного структурирования фронтов в виде фингеров в различных физико-химических процессах представляет большой интерес и является предметом одного из направлений нелинейной физики [4]. В работах [5,6] анализировались эффекты структурирования фронтов применительно к некоторым разновидностям ФГ.

В настоящей работе рассматривается наиболее распространенная в технологии схема организации ФГ с вынужденной фильтрацией окислителя через продукты сгорания. Именно для этого случая в [1] был сделан вывод о возможности структурирования фронта в волнах ФГ. Полученные в [1] результаты указывали, что помимо неустойчивой плоской волны горения существуют стационарные решения задачи, отвечающие конфигурации фронта реакции в виде ST фингеров.

Особенностью решения является его многозначность. При заданных параметрах задачи допускается непрерывный спектр решений, отвечающих различным конфигурациям фингеров. Для выбора реального решения из спектра возможных необходимо исследовать нестационарный процесс выхода на установившийся режим распространения волны горения. В данной работе проведено численное моделирование нестационарного процесса инициирования и распространения фронта ФГ с целью определения возможных режимов горения.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Процесс фильтрационного горения заключается в распространении зоны экзотермического взаимодействия между фильтрующимся газом, содержащим активную компоненту (окислитель) и горючей частью пористой среды (топливом). Помимо реагирующих компонент газ и пористая масса содержат инертные составляющие, не принимающие участие в реакции, но играющие важную роль в процессах тепло и массообмена в волне горения. Принципиальная схема процесса представлена на рис.1.

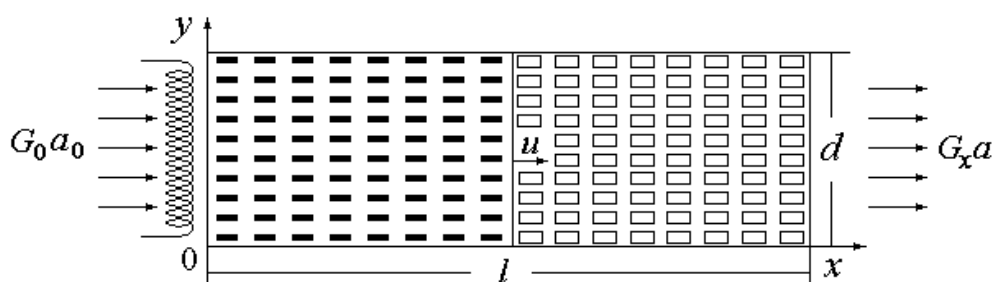


Рис.1. Схема процесса ФГ с продувом газа через продукты сгорания. d , l – ширина и длина канала; G – расход газа, a – концентрация окислителя.

В реактор, заполненный пористой шихтой, содержащей топливную компоненту, подается газовая смесь с концентрацией окислителя a_0 . Расход газа на входе ($x=0$) поддерживается постоянным (G_0). Инициирование реакции высокотемпературным источником приводит к распространению фронта в направлении x со скоростью u . Выгорание топлива приводит к изменению структуры пористой среды, в результате чего пористость, температуропроводность и проницаемость исходной шихты и продуктов могут стать различными. Задача

рассматривается в плоской геометрии, предполагающей, что реактор имеет вид тонкого щелевидного канала.

При малых скоростях распространения фронта реакции, характерных для волн ФГ, различием температур частиц и газа можно пренебречь и рассматривать пористую среду локально однородной в тепловом и концентрационном отношении. В этом приближении система уравнений, описывающая процесс ФГ, имеет следующий вид

$$c_v \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div } \lambda \nabla T - c_g \bar{G} \nabla T + QW - \alpha_z (T - T_0); \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} = -\text{div } \bar{G} + \mu_g W; \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} = -W; \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho_p}{\partial t} = \mu_p W \Rightarrow \rho_p = \mu_p (\rho_{f,0} - \rho_f); \quad (4)$$

$$\rho_g \frac{\partial a}{\partial t} = -\bar{G} \nabla a - (\mu + a\mu_g) W + \text{div} (D \rho_g \nabla a); \quad (5)$$

$$\bar{G} = -\rho_g k_f \nabla p; \quad \bar{G} = \rho_g \bar{v}, \quad \bar{v} = -k_f \nabla p; \quad (6)$$

$$p = \frac{R \rho_g T}{\sigma M}; \quad (7)$$

$$W = k_w \rho_f p a k T, \quad k T = k_0 \exp \left(-\frac{E}{RT} \right); \quad (8)$$

$$c_v = c_f \rho_f + c_i \rho_{i,0} + c_p \rho_p + c_g \rho_g; \quad (9)$$

$$\eta = (\rho_{f,0} - \rho_f) / \rho_{f,0}; \quad (10)$$

$$k_f = k_{f,0} + (k_{f,1} - k_{f,0}) \eta; \quad (11)$$

$$\lambda = \lambda_0 + (\lambda_1 - \lambda_0) \eta; \quad (12)$$

$$\sigma = \sigma_0 + (\sigma_1 - \sigma_0) \eta. \quad (13)$$

Здесь: t – время; c_g, c_f, c_i, c_p – теплоёмкости (газа, горючего, инертного газа, продукта); a – концентрация окислителя в газе; T, T_0 – температура (текущая и начальная); η – глубина превращения горючего; $\rho_g, \rho_{g,0}, \rho_f, \rho_{f,0}, \rho_{i,0}, \rho_p$ – эффективные плотности (масса в единице объема пористой среды) газа и горючего (текущая и начальная, соответственно), твёрдого инертного разбавителя, продукта; p – давление газа; $\bar{v}$ – скорость газа; $\bar{G}$ – поток газа; $\lambda, \lambda_0, \lambda_1$ – теплопроводности (текущая, исходной шихты и продуктов); $k_f, k_{f,0}, k_{f,1}$ – коэффициенты фильтрации (текущий, исходный и в продуктах); $\sigma_0, \sigma, \sigma_1$ – пористость (начальная, текущая и продуктов); Q – тепловой эффект на грамм топлива; α_z – коэффициент теплопотерь от поверхности горючего; D – коэффициент диффузии; μ, μ_g, μ_p – стехиометрические коэффициенты, соответствующие потреблению окислителя, генерации газа и производства конденсированного продукта в процессе реакции; k_0

– предэкспоненциальный множитель; E – энергия активации; R – универсальная газовая постоянная; M – молекулярный вес газа. Коэффициент k_w в выражении (8) введен с целью исследования роли скорости реакции на характеристики процесса.

Рассматриваемой схеме процесса ФГ соответствуют следующие начальные и граничные условия для системы (1)-(13)

$$\begin{aligned} t=0: \quad T &= T_0, \quad a = a_0, \quad \rho_g = \rho_{g,0}, \quad \rho_f = \rho_{f,0}. \\ x=0: \quad G_x &= G_0, \quad a = a_0, \quad B_0 \lambda \frac{\partial T}{\partial x} = c_g G_0 (T - T_g); \\ T_g &= \begin{cases} T_{ign}(y) & \text{при } t \leq t_{ign}; \\ T_0 & \text{при } t > t_{ign}; \end{cases} \\ x=l: \quad p &= p_0, \quad \frac{\partial a}{\partial x} = 0, \quad T = T_0; \\ y=0: \quad G_y &= 0, \quad \frac{\partial a}{\partial y} = 0, \quad \lambda \frac{\partial T}{\partial y} = \alpha_y (T - T_0); \\ y=d: \quad G_y &= 0, \quad \frac{\partial a}{\partial y} = 0, \quad \lambda \frac{\partial T}{\partial y} = -\alpha_y (T - T_0), \end{aligned} \quad (14)$$

где x, y – координаты вдоль и поперёк канала; l, d – длина и ширина канала; G_x, G_0 – продольная составляющая потока газа (текущая и начальная), G_y – поперечная составляющая потока газа; a_0 – начальная концентрация окислителя; p_0 – начальное давление газа; T_g, T_{ign} – температуры газа и зажигания; t_{ign} – время зажигания; α_y – коэффициент теплопотерь от боковых границ канала. Коэффициент B_0 характеризует условия теплообмена газа с пористой средой на входе в канал. Значение $B_0=1$ соответствует случаю, когда вдуваемый газ нагревается от начальной температуры T_g до температуры на входе T за счет теплового потока от продуктов сгорания.

При решении задачи использовались общепринятые в теории горения допущения. В частности, произведение $D \rho_g$ полагалось независимым от температуры. Также принималось, что теплоемкость смеси не менялась в процессе реакции ($c_f = \mu_g c_g + \mu_p c_p$), т.е. тепловой эффект Q является константой. Помимо этого рассматривалась довольно типичная для ФГ ситуация, когда проницаемость среды является весьма высокой и перепад давления по длине канала незначителен. В этом случае давление p в уравнении (7) можно считать постоянным, что соответствует так называемому изобарическому приближению.

3. МАСШТАБИРОВАНИЕ ПЕРЕМЕННЫХ. БЕЗРАЗМЕРНАЯ ФОРМА ПОСТАНОВКИ ЗАДАЧИ

Для численного моделирования процесса проводилось масштабирование независимых переменных и функций

$$\tau = \frac{t}{t_*}; \quad \xi = \frac{x}{x_*}; \quad \zeta = \frac{y}{x_*}; \quad \theta = \frac{T}{T_*}; \quad \rho = \frac{\rho_g}{\rho_{g,0}}; \quad (15)$$

$$G_\xi = \frac{G_x}{G_*}; \quad G_\zeta = \frac{G_y}{G_*}; \quad W_\eta = \frac{W}{W_*}.$$

Для расчета скорости фильтрации вводился безразмерный потенциал

$$P = \varepsilon \frac{k_{f,0} p_0}{\kappa} \left(\frac{p}{p_0} - 1 \right). \quad (16)$$

В отличие от слабо меняющегося давления p , потенциал P может меняться в широких пределах вследствие больших значений коэффициента фильтрации $k_{f,0}$ в условиях высокой проницаемости пористой среды.

Выбор масштабов при обезразмеривании переменных осуществлялся следующим образом

$$t_* = \frac{1}{k_0} \exp E_a; \quad x_*^2 = \kappa t_*; \quad T_* = T_a = T_0 + \frac{Q \rho_{f,0}}{c_f \rho_{f,0} + c_i \rho_i};$$

$$W_* = \rho_{f,0} p_0 k_0 \exp -E_a; \quad G_* = \frac{\rho_{f,0} x_*}{t_*}. \quad (17)$$

С учетом принятых приближений и выбранного способа масштабирования безразмерная формулировка задачи имеет вид

$$(1 + c_\rho \varphi - c_\rho \mu_g \eta) \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left((1 + (\Lambda_1 - 1) \eta) \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right) +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial \zeta} \left((1 + (\Lambda_1 - 1) \eta) \frac{\partial \theta}{\partial \zeta} \right) - c_\rho \left(G_\xi \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + G_\zeta \frac{\partial \theta}{\partial \zeta} \right) +$$

$$+ (1 - \theta_0) \frac{\partial \eta}{\partial \tau} - \alpha_h (\theta - \theta_0); \quad (18)$$

$$\varepsilon \frac{\partial \rho}{\partial \tau} = - \frac{\partial G_\xi}{\partial \xi} - \frac{\partial G_\zeta}{\partial \zeta} + \mu_g \frac{\partial \eta}{\partial \tau}; \quad (19)$$

$$\rho = \frac{\theta_0}{\theta} 1 + \Sigma_1 - 1 \eta; \quad (20)$$

$$G_\xi = -\rho 1 + K_1 - 1 \eta \frac{\partial P}{\partial \xi}; \quad G_\zeta = -\rho 1 + K_1 - 1 \eta \frac{\partial P}{\partial \zeta}; \quad (21)$$

$$\varepsilon \rho \frac{\partial a}{\partial \tau} = -G_\xi \frac{\partial a}{\partial \xi} - G_\zeta \frac{\partial a}{\partial \zeta} + \varepsilon L e \left(\frac{\partial^2 a}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial \zeta^2} \right) - (\mu + \mu_g a) \frac{\partial \eta}{\partial \tau}; \quad (22)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tau} = W_\eta = \begin{cases} k_w (1 - \eta) a \exp \left(E_a \left(1 - \frac{1}{\theta} \right) \right) & \text{при } \eta < 1, a > 0, \\ 0 & \text{при } \eta = 1, a = 0. \end{cases} \quad (23)$$

Начальные условия

$$\tau = 0: \quad \theta = \theta_0, \eta = 0, \rho = 1, a = a_0. \quad (24)$$

Граничные условия

$$\xi = 0: \quad G_\xi = G_{\xi,0}, a = a_0,$$

$$\frac{B_0}{c_\rho G_{\xi,0}} 1 + \Lambda_1 - 1 \eta \frac{\partial \theta}{\partial \xi} = \theta - \theta_g;$$

$$\theta_g = \begin{cases} \theta_{ign}(\zeta) & \text{при } \tau \leq \tau_{ign}; \\ \theta_0 & \text{при } \tau > \tau_{ign} \end{cases}; \quad (25)$$

$$\xi = L_\xi: \quad P = 0, \frac{\partial a}{\partial \xi} = 0, \frac{\partial \theta}{\partial \xi} = 0;$$

$$\zeta = 0: \quad G_\zeta = 0, \frac{\partial a}{\partial \zeta} = 0, \frac{\partial \theta}{\partial \zeta} = \alpha_\zeta \theta - \theta_0;$$

$$\zeta = L_\zeta: \quad G_\zeta = 0, \frac{\partial a}{\partial \zeta} = 0, \frac{\partial \theta}{\partial \zeta} = -\alpha_\zeta \theta - \theta_0.$$

Решение задачи определяется группой безразмерных параметров

$$\varepsilon = \frac{\rho_{g,0}}{\rho_{f,0}}; \quad \kappa = \frac{\lambda_0}{c_f \rho_{f,0} + c_i \rho_i}; \quad c_\rho = \frac{c_g \rho_{f,0}}{c_f \rho_{f,0} + c_i \rho_i}; \quad K_1 = \frac{k_{f,1}}{k_{f,0}}; \quad \Lambda_1 = \frac{\lambda_1}{\lambda_0};$$

$$\Sigma_1 = \frac{\sigma_1}{\sigma_0}; \quad E_a = \frac{E}{RT_*}; \quad Le = \frac{D_0}{\kappa}; \quad \alpha_h = \frac{t_* \alpha_z}{c_f \rho_{f,0} + c_i \rho_i}; \quad G_{\xi,0} = \frac{G_0}{G_*};$$

$$\theta_g = \frac{T_g}{T_*}; \quad \tau_{ign} = \frac{t_{ign}}{t_*}; \quad L_\xi = \frac{l}{x_*}; \quad L_\zeta = \frac{d}{x_*}; \quad c_{i,f} = \frac{c_i}{c_f}; \quad c_{g,f} = \frac{c_g}{c_f}; \quad \rho_{i,f} = \frac{\rho_i}{\rho_f};$$

$$\alpha_\zeta = \frac{x_* \alpha_y}{\lambda_0}; \quad W_\eta = \frac{W}{W_*}; \quad W_* = \rho_{f,0} p_0 k_0 \exp(-E_a).$$

Математическая модель содержит систему дифференциальных уравнений различного типа с необходимым набором начальных и граничных условий. Наибольшую сложность представлял поиск решения эллиптического уравнения с граничными условиями первого и второго рода на границах рассматриваемой области. Как известно, такие проблемы относятся к классу плохо обусловленных задач, решаемых итерационными методами, ни один из которых не гарантирует быстрой сходимости итераций. В нашем случае ситуация осложнялась тем, что коэффициенты эллиптического уравнения могли быстро меняться (на порядок в зоне реакции). Учёт специфического свойства рассматриваемого процесса (высокая проницаемость пористой среды) и аналитических оценок (постоянства интегрального по поперечнику образца потока газа и др.) позволил создать расчётный алгоритм, при котором итерации сходятся с удовлетворительной скоростью. В этом была настоятельная необходимость, т.к. реальный интерес представляют реакторы большого масштаба, в которых поперечный и продольный размеры существенно превосходят толщину волны горения, и, следовательно, требуют большого времени расчётов. Разностные схемы для решения других уравнений выбирались из стандартных условий – устойчивости, сходимости и консервативности.

Поскольку в данном случае проблема структурирования фронта является существенно двумерной, для визуализации результатов были созданы графические подпрограммы, позволяющие следить за процессом по ходу его развития. Для тестирования программы использовалось сопоставление численных и приближенных аналитических результатов по расчету характеристик плоских волн ФГ.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

В данном разделе представлены результаты численного решения задачи (18)-(25). Основной целью расчетов было определение условий потери устойчивости

плоского фронта и режимов распространения волны ФГ в области неустойчивости. В гидродинамическом приближении (бесконечно тонкая зона горения) анализ устойчивости плоской стационарной волны к бесконечно малым возмущениям выполнен в (1). Было показано, что причинами неустойчивости плоских волн ФГ являются повышенная (по сравнению с исходной шихтой) проницаемость продуктов горения и генерация газа в зоне реакции. В настоящей работе исследовался эффект проницаемости на характер распространения волны ФГ при нулевом балансе газа во фронте горения $\mu_g = 0$. В тех случаях, когда это не оговорено специально, в расчетах использованы следующие значения безразмерных параметров

$$G_{\xi 0} = 1; a_0 = 1; \theta_0 = 0.3; E_a = 10; B_0 = 0;$$

$$c_p = 0.6; \frac{c_i}{c_f} = 1; \frac{\rho_i}{\rho_f} = 0; Le = 0; \varepsilon = 10^{-3};$$

$$\mu = 0.2; \mu_g = 0; \alpha_h = \alpha_\zeta = 0; K_1 = 10; \Lambda_1 = 1;$$

$$L_\xi = 200; L_\zeta = 10; kW = 1.$$

Время и температура поджигания $(\tau_{ign}, \theta_{ign})$ выбирались так, чтобы минимизировать время выхода на установившийся режим распространения фронта.

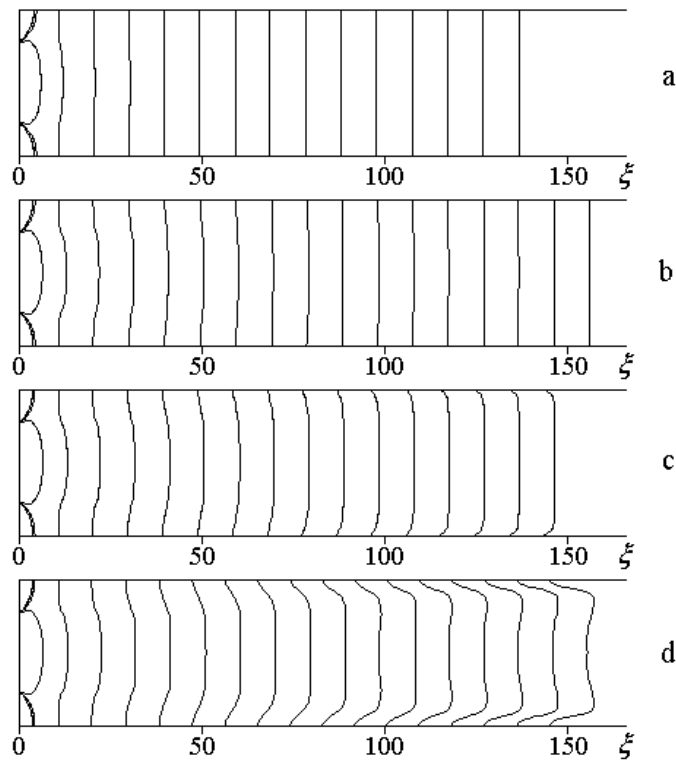


Рис.2. Эволюция формы фронта реакции при различных значениях K_1 : а – $K_1 = 0.5$; б – $K_1 = 0.9$; в – $K_1 = 1.0$; г – $K_1 = 1.1$.

На рис.2 представлена серия расчетов, показывающих положение фронта реакции (определяемое по глубине превращения $\eta = 0.5$) для эквидистантных последовательно возрастающих моментов времени τ_i при различных значениях отношения коэффициентов фильтрации продуктов сгорания и исходной шихты K_1 . Во всех вариантах этой серии инициирование осуществлялось

высокотемпературным источником $\theta_{ign} = 2$ рассредоточенным на половину ширины канала в центральной его части. При пониженной проницаемости продуктов сгорания $K_1 < 1$ изначально локализованный в центре фронт горения распространяется на всю ширину канала и приобретает плоскую форму. В случае повышенной проницаемости области продуктов горения $K_1 = 1.1$ фронт также распространился на всю ширину канала, однако его конфигурация все более отличается от плоской по мере продвижения волны.

Результаты расчетов, представленные на рис.2, позволяет заключить, что потеря устойчивости плоского фронта происходит при значениях K_1 , близких к единице, что соответствует выводу [1].

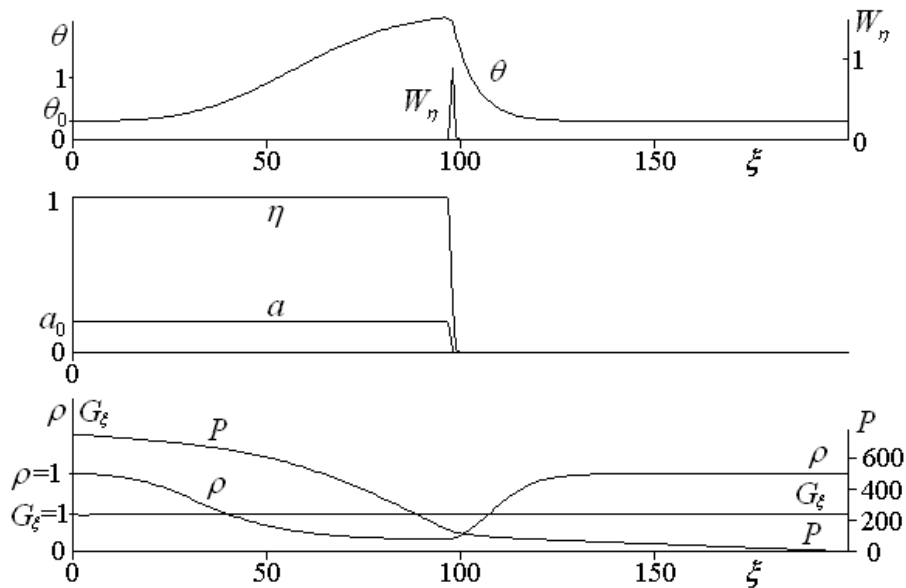


Рис.3. Распределение функций вдоль оси образца $\zeta = 0.5L_\zeta$.

Структура плоской волны ФГ, полученная при $K_1 = 0.5$, представлена на рис.3. Температурный профиль волны ФГ формируется в результате действия трех факторов – тепловыделения в зоне реакции со скоростью W_η , теплопроводности и конвективного переноса тепла фильтрующимся газом. Холодный поток газа, инжектируемый в канал, отбирает тепло от продуктов сгорания и переносит его в зону подогрева шихты, в результате чего температура во фронте реакции превышает температуру адиабатического сгорания топлива («сверхадиабатический» эффект [7]). При выбранных значениях параметров распространение волны горения осуществляется в фильтрационном режиме. Концентрация окислителя перед фронтом практически нулевая, что означает полное потребление газообразного реагента в зоне реакции. В этих условиях скорость W_η определяется скоростью поставки окислителя $G_{\xi,0}a_0$. Учитывая, что скорость потребления горючего (U) находится в стехиометрическом соотношении с потреблением окислителя, получаем

$$U = \frac{G_{\xi,0}a_0}{\mu} \quad (26)$$

Расчетные значения U с высокой точностью совпадают с величиной скорости фронта, определяемой выражением (26).

Роль параметра K_1 в дестабилизации плоского фронта и динамике самопроизвольного структурирования иллюстрирует рис.4. В расчетах этой серии зажигание осуществлялось температурой, слабо возмущенной по ширине канала:

$$\theta_{ign}(\zeta) = \theta_g + 0.03 \sin\left(\frac{\pi\zeta}{L_\zeta}\right).$$

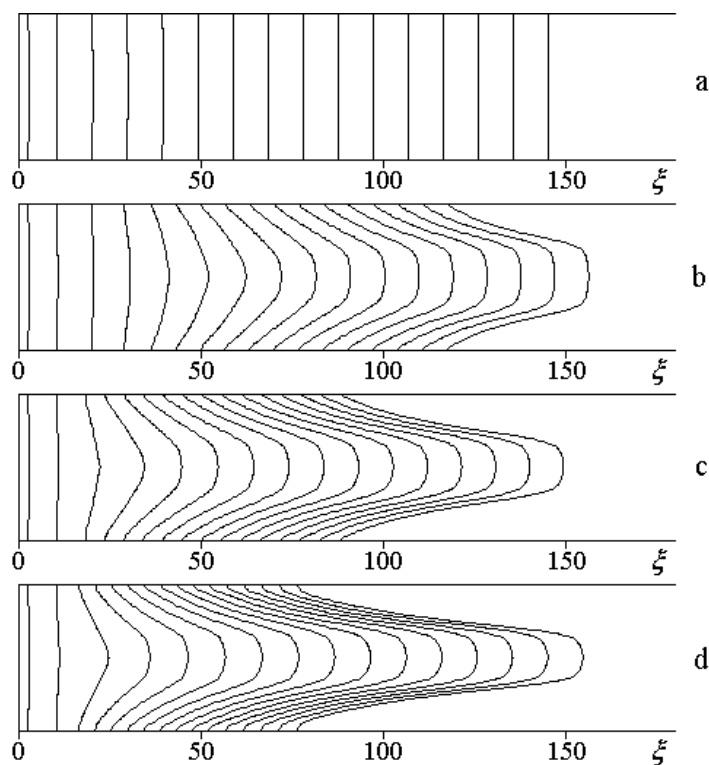


Рис.4. Динамика распространения фронта при слабо возмущенной температуре источника зажигания. а – $K_1 = 1$; б – $K_1 = 2$; в – $K_1 = 5$; г – $K_1 = 10$.

Как видно из рис.4, при сверхкритических значениях $K_1 > 1$ центральные участки фронта движутся быстрее периферийных, в результате чего фронт вытягивается в осевом направлении. С ростом величины K_1 время разрушения квазиплоского фронта, инициированного на этапе зажигания, уменьшается и самоорганизация неоднородной структуры волны горения происходит быстрее.

При больших временах процесса в волне горения можно выделить две части – голова фронта, имеющая стационарную форму и распространяющаяся с постоянной скоростью U , и хвостовую нестационарную часть, перемещающуюся с меньшей скоростью. В результате отставания хвостовой части головная часть вырывается вперед, и при распространении в достаточно длинном канале фронт реакции приобретает форму пальца (фингера).

На рис.5 показан процесс распространения волны горения в длинном канале. Однородное по ширине канала инициирование реакции приводит к формированию плоской волны, неустойчивость которой сначала проявляется в мелкомасштабных возмущениях поверхности фронта. В ходе дальнейшей эволюции волны горения

начинают преобладать крупномасштабные возмущения. Фронт разглаживается, и его головная часть приобретает форму фингера.

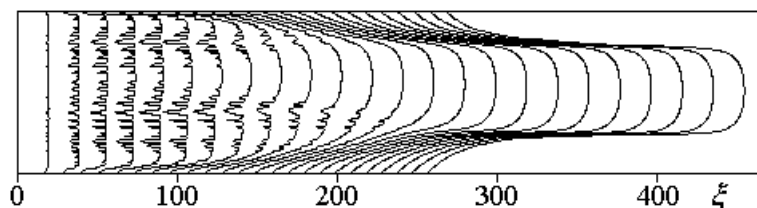


Рис.5. Динамика структурирования фронта в длинном канале при однородном зажигании. ($K_1 = 6$; $L_\zeta = 24$; $k_w = 20$).

Одиночный фингер, распространяющийся вдоль оси канала является доминирующей структурой в задаче о вытеснении вязкой жидкости. При фильтрационном горении, как показывают расчеты, возможны и другие структуры.

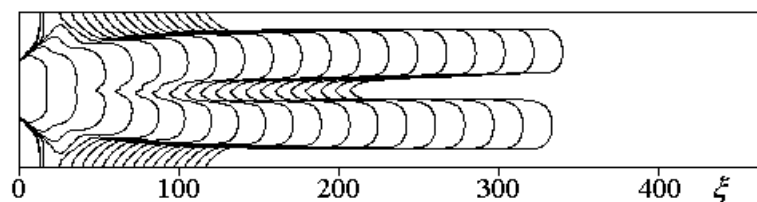


Рис.6. Динамика структурирования фронта в длинном канале при локальном центральном инициировании процесса. ($K_1 = 6$; $L_\zeta = 48$; $k_w = 8$).

На рис.6 показана эволюция фронта горения при локальном инициировании волны реакции высокотемпературным источником, сосредоточенным на одной трети ширины канала в центральной его части. В отличие от предыдущего варианта, в данном случае последовательность мягких трансформаций фронта заканчивается формированием двух уединенных фингеров, распространяющихся независимо друг от друга.

ЛИТЕРАТУРА

1. Aldushin A.P., Matkowsky B.J. Fingering and the Saffman-Taylor problem in filtration combustion // Comb.Sci.and Tech. – 1998. – Vol.133. – P.293-341.
2. Saffman P.G., Taylor G.I. The penetration of a fluid into a porous medium or Hele-Shaw cell containing a more viscous liquid // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A. – 1958. – Vol.245. – №1242. – P.312-329.
3. Алдушин А.П., Мержанов А.Г. Теория фильтрационного горения: общие представления и состояние исследований / В сборнике «Распространение тепловых волн в гетерогенных средах». – Новосибирск: Наука, 1988. – С.9-51.
4. Garonov-Grekhov A.V., Rabinovich M.I. Nonlinearities in action. Oscillations, chaos, order, fractals. – Berlin: Springer-Verlag, 1992. – P.1-191.
5. Zik O., Olami Z., Moses E. Fingering instability in combustion // Phys. Rev. Letters. – 1988. – Vol.81. – №18. – P.3868-3871.
6. Костин С.В., Кришеник П.М., Озерковская Н.И., Фирсов А.Н., Шкадинский К.Г. Ячеистые режимы фильтрационного горения пористого слоя // Физика горения и взрыва. – 2012. – Т.48. – №1. – С.3-13.
7. Алдушин А.П., Сеплярский Б.С. Распространение волны экзотермической реакции в пористой среде при продуве газа // ДАН СССР. – 1978. – Т.241. – №1. – С.72-75.

РАЗРАБОТКА МОДУЛЯ РАСЧЕТА ПЛОСКИХ ДЕТОНАЦИОННЫХ ТЕЧЕНИЙ В СИСТЕМЕ ANSYS FLUENT*

Бедарев И.А., Федоров А.В., Ульзутуева К.В.

*ФГБУН Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича
Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск, Россия*

РЕЗЮМЕ

На основе детальных и приведенных кинетических механизмов неравновесных химических превращений в рамках прикладного пакета ANSYS Fluent создана математическая технология для описания распространения ячеистой детонации в каналах технических устройств. Математическая технология верифицирована на основе экспериментальных данных по времени задержки воспламенения, скорости детонационной волны в зависимости от разбавления смеси аргоном и размеру ячеистой структуры детонационной волны. Показано, что в случае ширины канала равном 30 мм в смеси на 92 % разбавленной аргоном размер ячейки соответствует экспериментальным данным. В двумерной постановке проведен расчет процесса подавления ячеистой детонации инертным пористым фильтром. Полученные в двумерном расчете данные коррелируют с оценками, приведенными в одномерных расчетах.

Ключевые слова: подавление детонации; математическое моделирование; смесь реагирующих газов и инертных частиц

1. ВВЕДЕНИЕ

Работа посвящена проблеме механики реагирующих гетерогенных сред, связанной с разработкой методов управления, подавления и ослабления ударно-волновых, взрывных и детонационных явлений в гомогенных реагирующих смесях газов путем введение в поле течения облаков инертных частиц. Актуальность данной проблемы обусловлена вопросами взрыво-пожаробезопасности угольных шахт, промышленных производств, основанных на использовании рабочих тел в виде реагирующих газовых смесей.

Цель работы:

- Построение методологии расчета детонационных течений в ANSYS Fluent с использованием детальной и приведенной кинетики.
- Верификация моделей кинетики воспламенения и горения водорода по экспериментальным данным.
- Анализ численных аспектов моделирования структуры детонационных ячеек.
- Определение влияния неравновесных химических превращений на передачу размера детонационной ячейки в водород-кислородной смеси с использованием детальных и приведенных кинетических механизмов и получение других количественных характеристик изучаемого явления.
- Разработка в рамках пакета ANSYS Fluent технологии расчетов двумерных детонационных течений в системе реагирующая газовая смесь – инертный

*Исследование выполнено при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (соглашение № 14.B37.21.0645) и Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 12-08-00311-а).

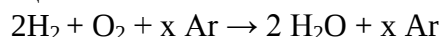
пористый фильтр для анализа вопросов связанных с подавлением ячеистой детонации.

2. ДЕТАЛИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ И ЧИСЛЕННОГО АЛГОРИТМА РАСЧЕТОВ В ANSYS FLUENT

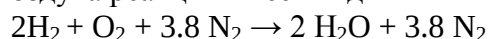
В качестве математической модели использована модель неравновесной газовой динамики (уравнения Эйлера, дополненные блоком уравнений неравновесной химической кинетики). Использован «density based» решатель, который является наиболее подходящим для такого типа задач. Для аппроксимации по времени использован явный четырехшаговый метод Рунге-Кутты, а для аппроксимации пространственных производных в уравнениях Эйлера использованная схема расщепления потоков AUSM с дискретизацией второго порядка точности.

Для описания химических превращений в водород-кислородной смеси выбран детальный кинетический механизм, верифицированный по временам задержки воспламенения и по скорости детонационной волны в зависимости от разбавления смеси аргоном. Эта кинетическая схема учитывает 38 прямых и обратных реакций для 8-ми компонентов. Также для ускорения расчетов использовалась приведенная одностадийная кинетика, позволяющая, тем не менее, описать и воспламенение и горение компонентов с приемлемой точностью, что будет показано дальнейшей верификацией модели по экспериментальным данным.

Остановимся на описании построения математической модели приведенной кинетики. Рассматриваем область заполненной смесью водорода, кислорода и аргона или азота. Горение стехиометрической смеси водорода и кислорода с инертным аргоном (обычно используется как разбавитель в экспериментах) описывается брутто-реакцией



Для воздуха реакция имеет вид



В статических условиях (т.е. скорость смеси везде равна нулю), можно построить следующую модель. Такие условия соответствуют случаю, когда воспламенение газа происходит за отраженной ударной волной.

$$\frac{d\rho}{dt} = 0$$

$$\frac{de}{dt} = 0, \quad e = c_v T + \sum \xi_i h_{0i} - c_p T_0, \quad c_v = \sum c_{vi} \xi_i, \quad c_p = \sum c_{pi} \xi_i$$

где ρ – плотность; e – внутренняя энергия; T – температура; ξ_i – относительная массовая концентрация компонент; h_{0i} – энтальпия образования; $T_0=298,15\text{K}$; c_{pi} и c_{vi} – удельная теплоемкость при постоянном давлении и объеме соответствующих компонент.

Для описания кинетики горения используется одностадийная Аррениусова кинетика.

$$\frac{d\xi_i}{dt} = \chi_i, \quad i = 1, 2, 3$$

где $\chi_i = -v_i \mu_i \chi$, а $\chi = \rho^2 k_f \frac{\xi_1^m \xi_2^n}{\mu_1 \mu_2}$, $k_f = k T^w e^{-\frac{E}{RT}}$, i – индекс для описания компонент:

1 – водород, 2 – кислород, 3 – вода; χ – скорость химической реакции, зависящая от концентрации и температуры смеси; k_f – коэффициент скорости химической реакции; $R=8.314$ Дж/К моль – газовая постоянная; m, n, w – степени (константы модели).

Тогда для температуры смеси можно получить следующее уравнение.

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{1}{c_v} \sum (c_{vi} T + h_{0i} - c_{pi} T_0) \chi_i$$

В правой части этого уравнения тепловыделение за счет химической реакции и изменения теплоемкости смеси.

При этом константами, которые нужно подобрать являются: k, E, m, n, w, h_{03} , где k – предэкспоненциальный множитель; E – энергия активации; m, n – степени при массовой концентрации; w – степень при температуре; h_{03} – теплота химической реакции.

3. ВЕРИФИКАЦИЯ МОДЕЛЕЙ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

3.1. Верификация по времени задержки воспламенения.

Проведено сравнение моделей химической кинетики горения водорода [1-3] с экспериментальными данными [4-6]. В таблице указаны условия экспериментов и критерии, по которым определялось t_{ign} .

В [4] для смеси 8% H_2 , 2% O_2 и 90 % Ar измерена максимальная концентрация радикала OH в зависимости от температуры при давлении за ударной волной $P_1=5$ атм.

В [5] исследованы времена задержки воспламенения смесей 4% H_2 , 2% O_2 , 94 % Ar и 1% H_2 , 2% O_2 , 97 % Ar в зависимости от температуры при $P=1$ атм. Временем задержки воспламенения считалась максимальная скорость изменения концентрации радикала OH.

В [6] приведены экспериментальные данные зависимости времени задержки воспламенения от температуры смеси 1% H_2 , 1% O_2 , 98 % Ar при $P=3$ атм. В качестве критерия воспламенения использован момент максимальной скорости изменения концентрации H_2O .

Таблица.

Условия экспериментов и критерии воспламенения.

N	$H_2, \%$	$O_2, \%$	$P, \text{ атм}$	ссылка	критерий
1	8	2	5	[4]	$\max \xi_{OH}$
2	4	2	1	[5]	$\max \xi_{OH}$
3	1	2	1	[5]	$\max \xi_{OH}$
4	1	1	3	[6]	$\max \xi_{H_2O}$

Детальная кинетика. На рис.1 приведено сравнение расчетных данных по трем кинетическим схемам и экспериментов [4-5] по зависимости времени задержки воспламенения (t_{ign}) ($W_{O_2}^0$ — начальная молярно-объемная концентрация O_2) от температуры за УВ. Видно, что все кинетические схемы правильно предсказывают величину t_{ign} в диапазоне температур $1000 < T < 2500$ К и занижают t_{ign} при $T < 1000$ К.

Кинетические схемы [1] с 60 и [2] с 42 реакциями показывают практически одинаковые результаты, а t_{ign} , полученное с использованием схемы [3] с 38 реакциями не значительно отличается от них при $T > 2000\text{K}$, однако результаты расчетов по схеме [3] лучше согласуются с экспериментальными данными в этом диапазоне. Очевидно, что в диапазоне температур $T < 1000\text{K}$ для лучшего соответствия эксперименту [4] необходима корректировка констант скорости.

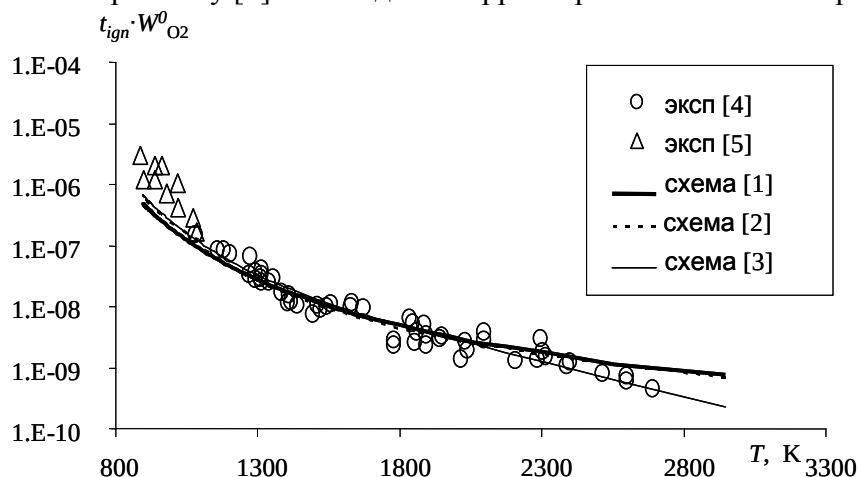


Рис.1. Время задержки воспламенения в зависимости от температуры за УВ в сравнении с экспериментом [4-5].

На рис.2 приведено сравнение расчетных данных по трем кинетическим схемам с экспериментом [6]. В качестве критерия и в расчете и в эксперименте использован момент максимальной скорости изменения концентрации H_2O . Наблюдается удовлетворительное согласование расчетов по всем трем схемам и эксперимента.

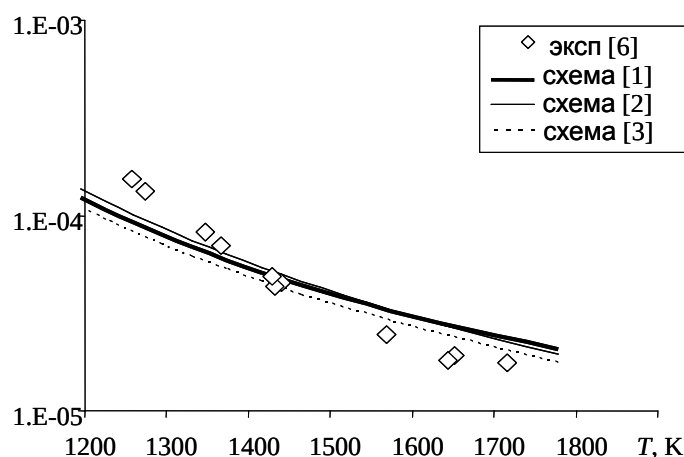


Рис.2. Времена задержки воспламенения в зависимости от температуры за УВ в сравнении с экспериментом [6].

На основании проведенных сравнений для дальнейших расчетов выбрана детальная схема [3].

Приведенная кинетика. Далее приводятся сравнительный параметрический анализ влияния констант приведенной модели химической кинетики на время задержки воспламенения. При этом используется фиксированный набор констант и изменяется всего одна из данного списка. Было рассмотрено влияние энергии

активации E , предэкспоненциального множителя k и теплоты сгорания h_{03} . Эти данные затем использованы для подбора наиболее подходящих констант модели.

Верифицируем модель в соответствии с экспериментальными данными по времени задержки воспламенения [4-6]. В расчете моментом воспламенения считался максимум роста температуры смеси.

На рис.3 представлено влияние энергии активации на поведение смеси. Энергия активации изменяется в пределах $E=60\div 90$ кДж/моль. Понятно, что чем больше энергия активации, тем позже начинается реакция и время задержки воспламенения больше.

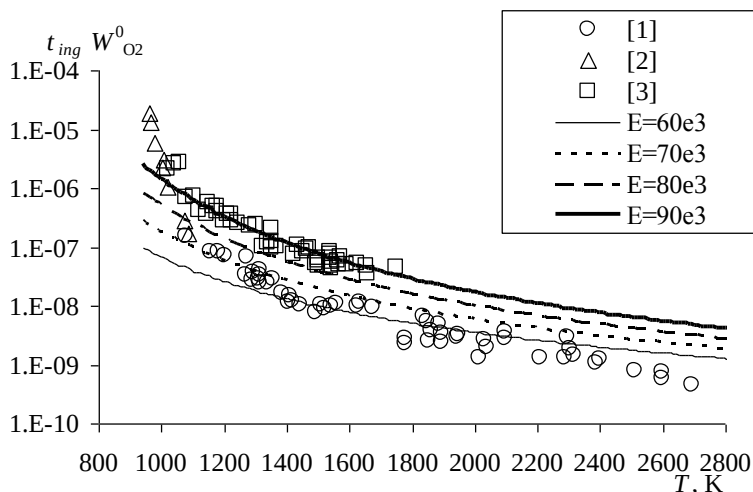


Рис.3. Влияния энергии активации E на время задержки воспламенения.

На рис.4 показано влияние предэкспоненциального множителя, который изменяли в пределах $k=10^2\div 10^4$. Видно, что чем больше предэкспоненциальный множитель тем реакция происходит быстрее и время задержки воспламенения меньше.

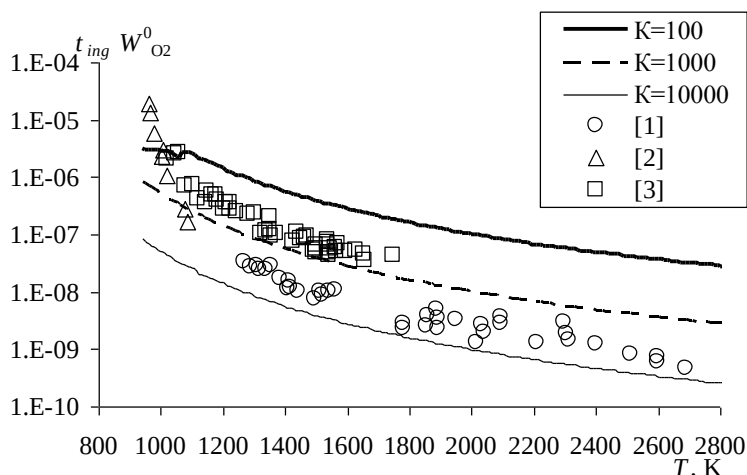


Рис.4. Влияния предэкспоненциального множителя k на время задержки воспламенения.

На рис.5 рассмотрели влияния теплоты сгорания h_{03} , которая находилась в интервале $h_{03}=100\div 180$ кДж/моль. Из рисунка хорошо видно, что теплота реакции слабо влияет на время задержки воспламенения.

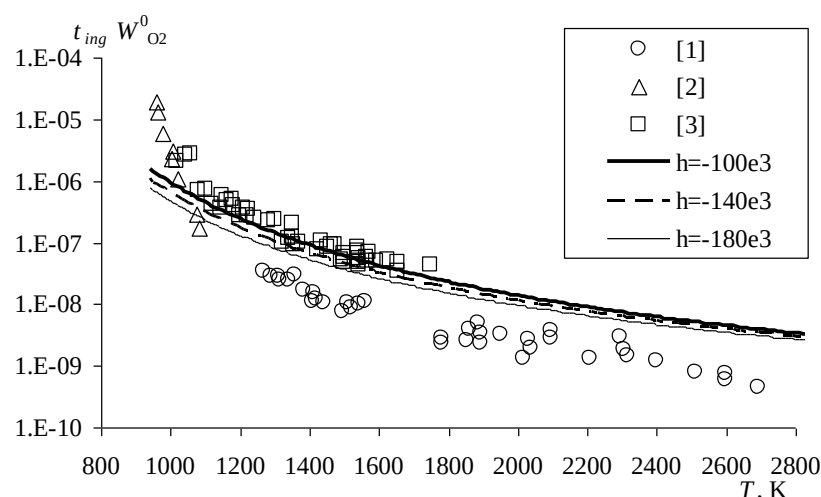


Рис.5. Зависимость при изменении теплоты реакции h_{O_2} на времени задержки воспламенения.

На рис.6 приведено поведение температуры смеси от времени при различной начальной температуре смеси. Из рисунка видно, что даже такая упрощенная модель позволяет адекватно описать задержку воспламенения и последующее горение смеси.

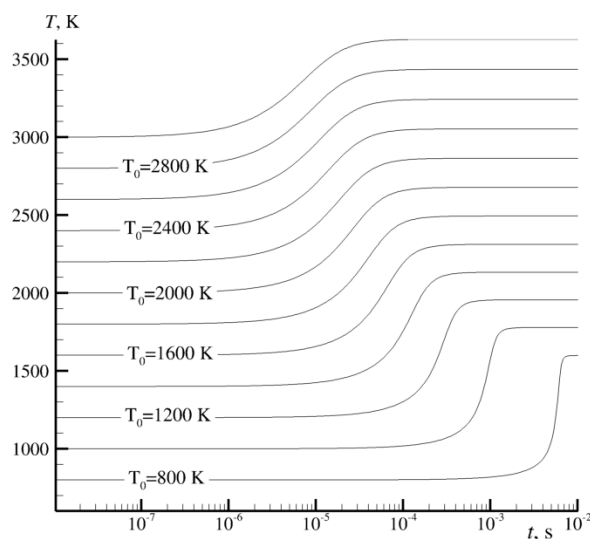


Рис.6. Поведение температуры смеси от времени при различной начальной температуре смеси.

3.2. Верификация моделей по скорости детонации в зависимости от разбавления смеси аргоном.

Проведем тестовые расчеты, верифицирующие используемую кинетическую схему горения водорода [3] по скорости детонационной волны. На рис.7 приведено сопоставление расчетных данных по скорости детонации в водород-кислородной смеси в узком диапазоне изменения концентрации аргона. Как видно наши расчеты с точностью до 5% совпадают с экспериментальными данными [7], в которых $p_0 = 0.2$ атм, $T_0 = 295$ К. Подавление ДВ наблюдается при концентрациях аргона в смеси больших, чем 95%. Под подавлением ДВ будем понимать распад детонационной волны на затухающую замороженную УВ (ЗУВ) и отстающий фронт/волну

воспламенения-горения (ВВГ). Таким образом, этот расчет показал, что используемая кинетическая схема удовлетворительно описывает имеющиеся экспериментальные данные по интегральным характеристикам процесса подавления детонации – зависимостям скорости ДВ от концентрации инертных компонент. Поэтому ниже мы применим ее к расчету подавления детонации в инертных фильтрах.

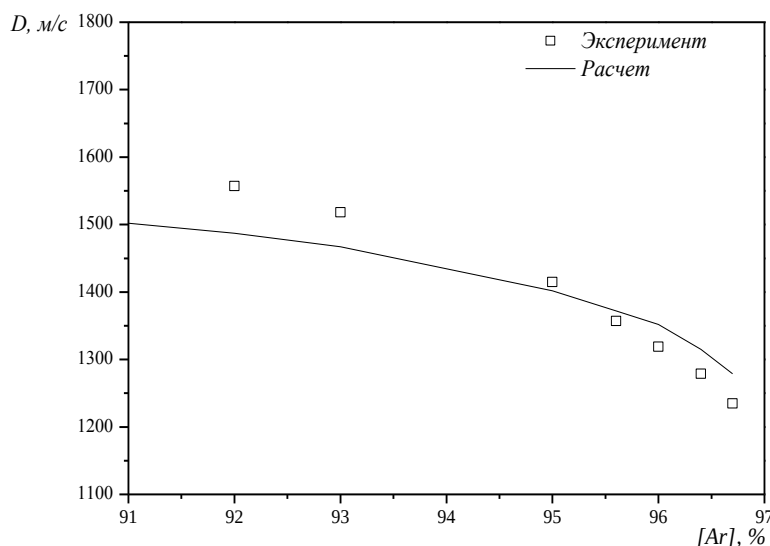


Рис.7. Зависимость скорости детонации от содержания аргона для детальной кинетики [3].

Рис.8, где представлено сравнение расчетной и экспериментальной скорости детонационной волны в зависимости от разбавления смеси аргоном для приведенной кинетики, показывает, что приведенная кинетика также позволяет адекватно описать скорость детонационной волны, погрешность в предсказании скорости не превышает 10%.

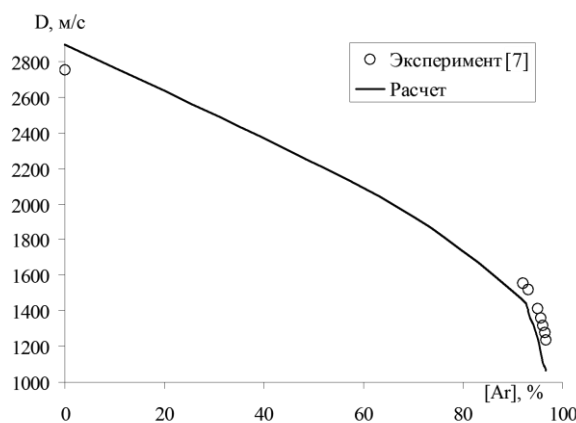


Рис.8. Сравнение расчетной и экспериментальной скорости детонационной волны в зависимости от разбавления смеси аргоном для приведенной кинетики.

3.3. Неустойчивость одномерной детонационной волны.

В литературе [8-10] описывается продольная неустойчивость детонационной волны, которая получается при исследовании детонационных процессов в рамках модели одномерной нестационарной неравновесной газовой динамики с учетом модельных одно- и двухстадийных кинетических законов окисления реагирующей

компоненты. Данный тип неустойчивости часто интерпретируется как моделирование проявлений ячеистой структуры детонации в одномерном нестационарном подходе. Он возникает при некоторых условиях на значение энергии активации и теплоподвода, в решении задачи об ослаблении пересжатой детонационной волны волной разрежения. Было показано, что возможен, выход как на режим Чепмена-Жуге, так и на колебательный аттрактор. Эта задача будет являться дополнительной тестовой задачей для применяемой нами приведенной кинетики.

В начальный момент времени данные Коши задавались как пересжатая детонационная волна. Далее решение проводилось по одномерным уравнениям Эйлера. В зависимости от энергии активации E_a , теплоты химической реакции Q и степени пересжатия η были промоделированы ситуации, когда детонационная волна переходит в стационарный режим (рис.9а), пульсирующий режим (рис.9б) и затухающий режим (рис.9в).

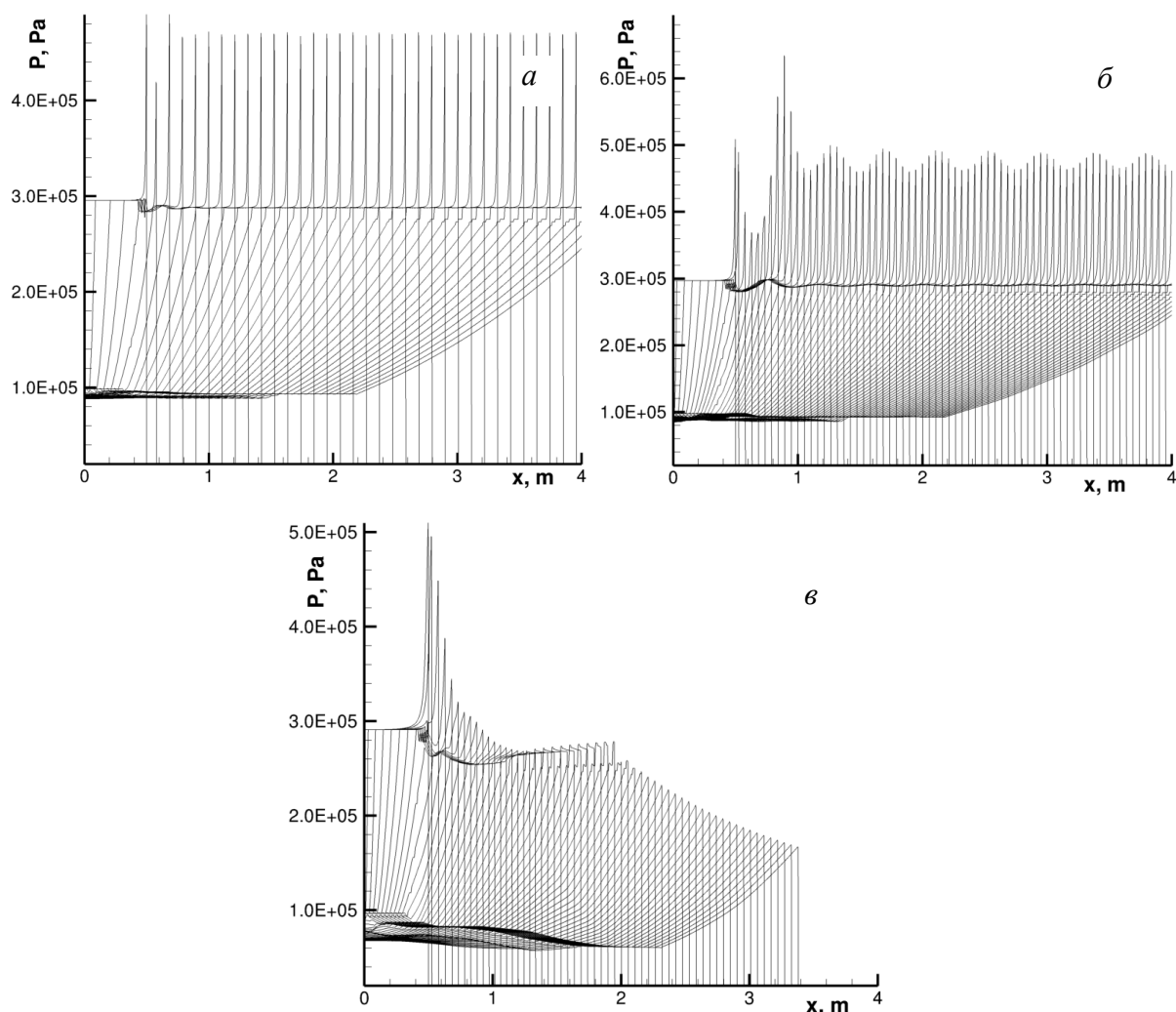


Рис.9. Стационарный, пульсирующий и затухающий режим распространения детонационной волны.

Таким образом, в соответствии с линейной теорией и численными расчетами, проведенными по другим методам [8-10], было показано, что на основе использованной приведенной кинетики, можно воспроизвести тот факт, что при

изменении E_a, Q реализуются различные режимы выхода на аттракторы решения детонационной задачи.

По результатам тестирования приведенной кинетики выбраны следующие значения параметров модели

$$k = 10^3, E = 80 \cdot 10^3, m = n = 0.7, w = 0.8, h_{03} = 170 \text{ кДж / моль}$$

4. РАСЧЕТЫ ДВУМЕРНЫХ ДЕТОНАЦИОННЫХ ТЕЧЕНИЙ В ANSYS FLUENT

Проведен расчет детонационной ячейки для канала шириной 30 мм в смеси водорода и кислорода на 92% по массе разбавленной аргонном. На рис.10 показан фрагмент расчетной сетки, которая динамически адаптировалась по градиенту плотности в процессе расчета. Видно, что технология адаптации позволяет разрешить тонкую структуру детонационной ячейки. Можно отметить, что после адаптации (в зонах высокого градиента) размер расчетной сетки составлял $1/16 \div 1/64$ мм. На рис.11 показаны поле плотности и изолинии давления. Расчет проведен с помощью упрощенной схемы химической кинетики.

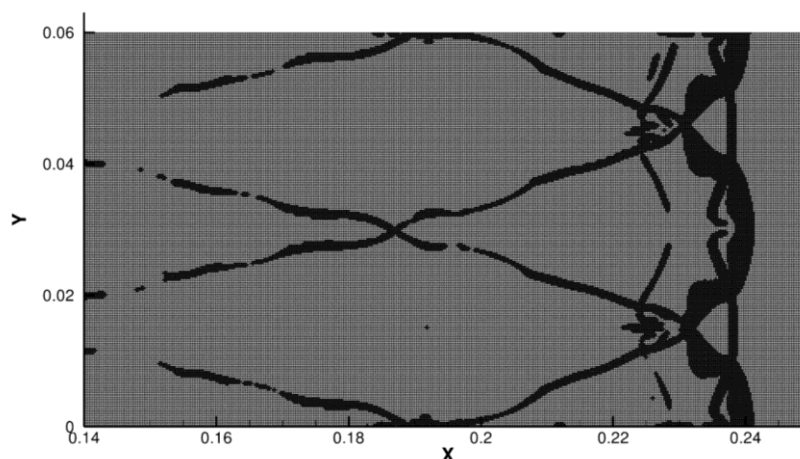


Рис.10. Фрагмент расчетной сетки.

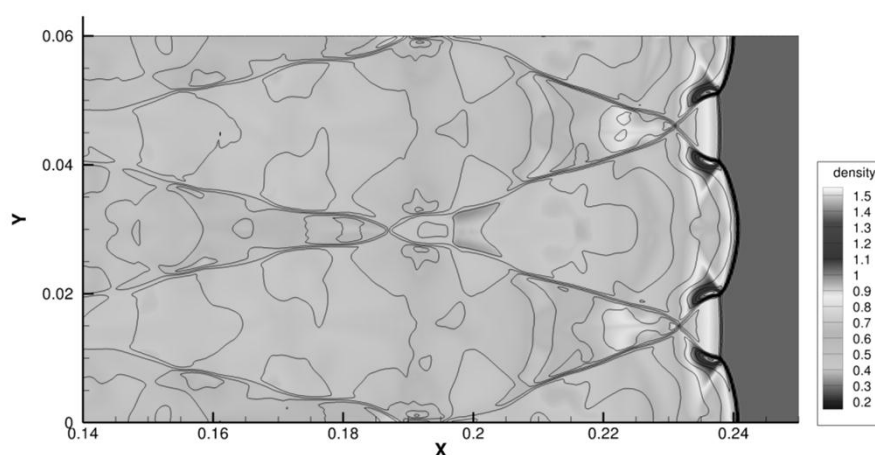


Рис.11. Поле плотности и изолинии давления.

Из рисунка можно сделать вывод, что выбранное сочетание математической модели и численных аспектов решателя позволяет увидеть особенности ячейистой детонации. Можно отметить, что в ANSYS Fluent имеется возможность выполнить

аппроксимацию по времени с помощью неявной схемы второго порядка. Однако расчеты показали, что такой вариант численного метода обладает существенно большей численной диссипацией, чем явный метод четвертого порядка, что приводит к сильному «размазыванию» ударно-волновых фронтов.

На рис.12 приведено поле максимумов давления во времени, которое позволяет судить о размере детонационной ячейки для данных параметров смеси. Сравнение с экспериментом [11] показывает, что размер ячейки соответствует экспериментальным данным. В расчете он составляет примерно 30 мм, а в эксперименте – 26 мм.

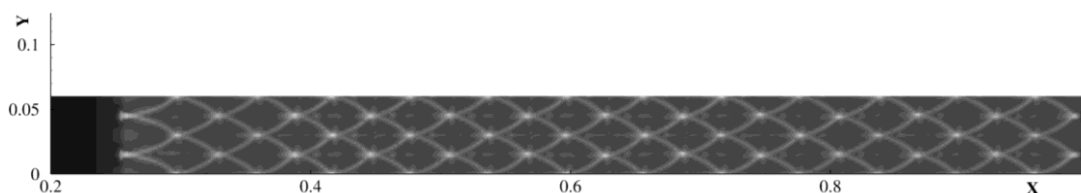


Рис.12. Поле максимумов давления от времени (приведенная кинетика).

На рис.13 показано поле максимумов давления во времени для расчетов с детальной кинетикой. Из рисунка видно, что хотя расчет воспроизводит двумерную поперечную неоднородность детонационной волны, однако выбранной разрешающей способности сетки недостаточно для хорошего разрешения структуры детонационной ячейки. Требуется провести расчет с более подробной сеткой.

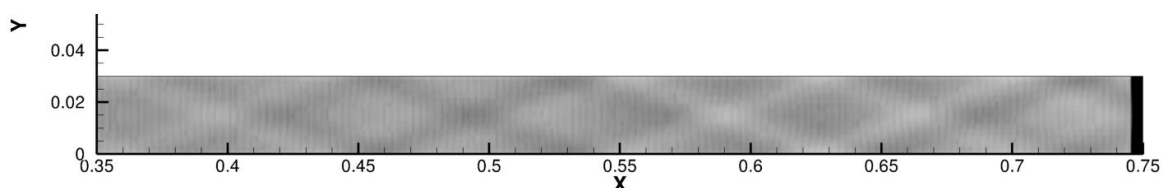


Рис.13. Поле максимумов давления от времени (детальная кинетика).

5. РАСЧЕТЫ ПОДАВЛЕНИЯ ЯЧЕИСТОЙ ДЕТОНАЦИИ ПОРИСТЫМ ФИЛЬТРОМ

Были проведены предварительные расчеты подавления ячеистой детонации с помощью пористого фильтра. Под фильтром понимается облако неподвижных инертных частиц. Как было показано в [12] неподвижными можно считать частицы, размер которых превышает 100 мкм. На рис.14 показана схема течения.

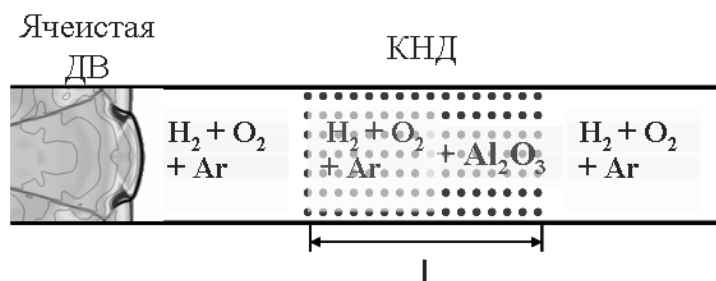


Рис.14. Схема течения детонационной волны в канале с пористым фильтром.

В начальный момент времени задается ячеистая детонационная волна, которая распространяется слева на право по камере низкого давления с горючей смесью и взаимодействует с пористым фильтром. В качестве материала фильтра выбраны

частицы глинозема (Al_2O_3). Размер фильтра, его пористость были выбраны по [12], где были проведены расчеты подавления детонации в одномерной постановке, так, чтобы гарантировано погасить детонационную волну.

На рис.15 показана картина течения ячейистой детонационной волны в канале с пористым фильтром в различные моменты времени. На рисунке схематично показано расположение пористого тела. Фильтр имеет протяженность 0.25 м и заполняет всю ширину канала. Видно как волна входит в пористое тело, отражаясь от его границы. Затем происходит срыв и гашение детонации. Из пористого тела выходит ударная волна, интенсивности которой недостаточно для реинициирования детонации.

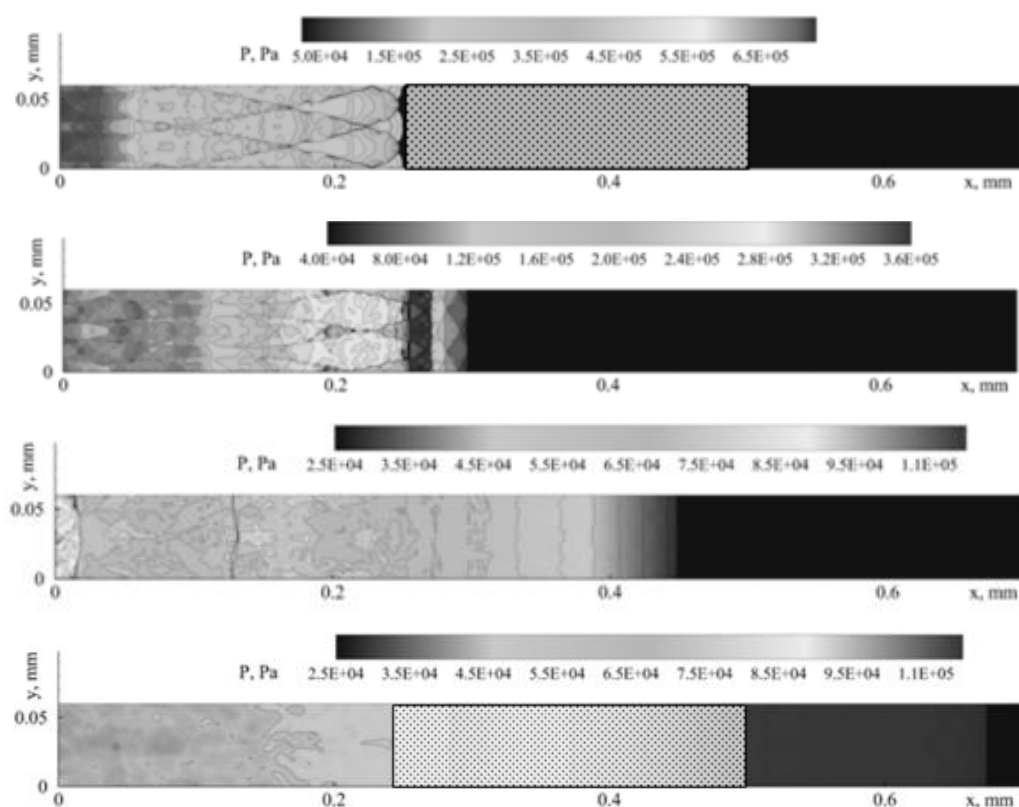


Рис.15. Течение ячейистой детонационной волны в канале с пористым фильтром в различные моменты времени.

6. ВЫВОДЫ

По результатам работы можно заключить следующее:

- Разработана методология расчета детонационных течений в ANSYS Fluent с использованием детальной и приведенной кинетики.
- Разработана и верифицирована по времени задержки воспламенения и скорости ДВ простейшая модель приведенной кинетики для описания детонации водорода в кислороде.
- С использованием приведенной и детальной кинетики рассчитана детонационная ячейка, размер которой согласуется с экспериментальными данными.
- В рамках пакета ANSYS Fluent разработана технология расчетов двумерных детонационных течений в системе реагирующая газовая смесь – инертный пористый фильтр для анализа вопросов связанных с подавлением ячейистой

детонации. Полученные в двумерном расчете данные коррелируют с оценками, приведенными в одномерных расчетах.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Димитров В.И.* Простая кинетика – Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1982. – 381 с.
2. *Warnatz J.* Combustion chemistry / Ed. by W.C. Gardiner. – Berlin: Springer-Verlag, 1984.
3. *Tien J.H., Stalker R.J.* Release of chemical energy by combustion in a supersonic mixing layer of hydrogen and air // *Combustion and Flame*. – 2002. – N130. – P.329-348.
4. *Skinner G.B., Ringrose G.H.* Ignition delays of a hydrogen-oxygen-argon mixture at relatively low temperatures // *J. Chem Phys.* – 1965. – N42. – P.2190-2204.
5. *Schott G.L., Kinsey J.L.* Kinetic studies of hydroxyl radicals in shock waves. II. Induction times in the hydrogen-oxygen reactions. // *J. Chem Phys.* – 1958. – N29. – P.1177-1188.
6. *Hidaka Y., Sato K., Henmi Y., Tanaka H., Inami K.* Shock-tube and modeling study of methane pyrolysis and oxidation // *Comb. Flame*. – 1999. – N118. – P.340-358.
7. *Akbar R.* Mach reflection of gaseous detonations / PhD thesis. – Troy (New York): Rensselaer Polytechnic Institute, August 1997. – 126 p.
8. *Fickett W., Wood W.W.* Flow calculations for pulsating one-dimensional detonations // *Physics of fluids*. – 1966. – Vol.9. – N5.
9. *Медведев С.А.* Об ослаблении пересжатых детонационных волн с конечной скоростью реакции // *Механика жидкости и газа*. – 1969. – №3.
10. *Левин В.А., Марков В.В.* Возникновение детонации при концентрированном подводе энергии // *Физика горения и взрыва*. – 1975. – Т.11. – №4. – С.623-633.
11. *Strehlow R.A., Liangminas R., Watson R.H., Eymann J.R.* Transverse wave structure in detonations. // 11th Symp. Int. Combust. Proceedings. – 1967. – P.683-692.
12. *Федоров А.В., Тропин Д.А.* Определение критического размера облака частиц, необходимого для подавления газовой детонации // *Физика горения и взрыва*. – 2011. – Т.47. – №4. – С.100-108.

БИФУРКАЦИЯ ГАЗОВЫХ СТРУЙ ПРИ АКУСТИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ*

Голуб В.В., Кривокорытов М.С.

ФГБУН Объединенный институт высоких температур Российской академии наук,
г. Москва, Россия

1. ВВЕДЕНИЕ

Эксперименты по определению влияния акустических колебаний на состав продуктов горения диффузионного факела выявили, что под действием звука снижается выход токсичных продуктов горения [1]. На резонансной частоте воздействия концентрация сажи снижается на 30%, а концентрация NOx на 50% (рис.1). При этом в отсоединенном метановом факеле наблюдается эффект бифуркации. Как показали исследования, бифуркация факела вызвана делением струи не прореагировавшего метана.

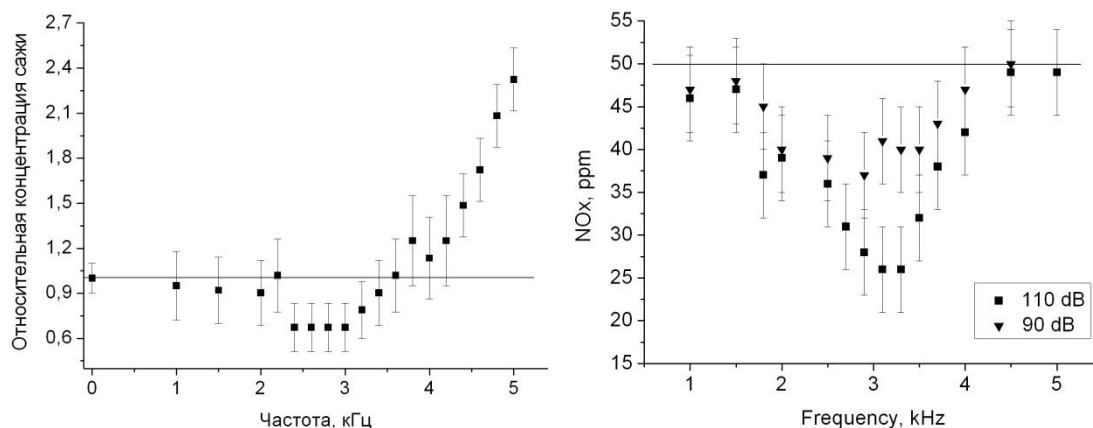


Рис.1. Концентрация сажи (слева) и оксидов азота (справа) в продуктах горения метана в зависимости от частоты акустического воздействия.

Теоретически и экспериментально доказано, что свободное сдвиговое течение, имеющее точки перегиба в профиле скорости, невязко неустойчиво. Его возмущения экспоненциально растут вниз по потоку, образуя вихри, которые объединяются друг с другом в форме больших когерентных структур. Исследованию неустойчивости струйных течений посвящено большое количество теоретических [2-4] и экспериментальных работ [5-8]. Важность этих исследований очевидна как для науки, так и для множества технических приложений, в том числе и в МЭМС технологиях (микроэлектромеханические системы).

В последнее время активно исследуется влияние акустических возмущений на струйные течения [9-11], так как подобные исследования позволяют найти ключ к пониманию физической природы развития струй и управлению потоками, в том числе и объяснению эффекта бифуркации.

* Работа выполнена в рамках программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Горение и взрыв», при поддержке совета по грантам Президента Российской Федерации, грант № МК-2894.2012.8.

Чтобы понять природу данного явления, было проведено исследование влияния акустических колебаний на газовые струи. Объектом исследования являлась струя гелия, истекающая в атмосферный воздух, и ее реакция на внешнее акустическое воздействие. Гелий истекал в воздух из трубок с различными внутренними (~ 1 мм) и внешними (от 1 до 100 мм) диаметрами. Скорость истечения задавалась таким образом, чтобы в трубках устанавливалось классическое пуазейлевское течение с параболическим профилем скорости.

2. БИФУРКАЦИЯ СРУИ ГАЗА. ТЕНЕВАЯ ВИЗУАЛИЗАЦИЯ

Эксперименты с теневой визуализацией газовой струи проводились с помощью теневого прибора ИАБ-451 методом ножа и щели. Перекрытие изображения щели составляло 50%. В качестве регистрирующего устройства применялась сверхвысокоскоростная камера Cordin222-16, позволяющая получать серии из 16 кадров с временем экспозиции и задержки между кадрами от 5 нс и более. В качестве подсветки использовалась галогеновая лампа мощностью 60 Вт, из-за низкой мощности подсветки экспозиция кадров составляла 10 мкс. Пространственное разрешение системы составляло 0.1 мм.

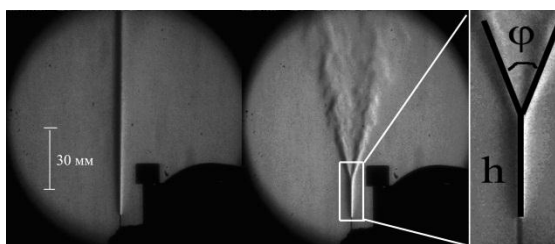


Рис.2. Теневые фотографии струи гелия: слева – в отсутствии звука, справа – под действием звука 1700 Гц, 80 дБ.

Как показал эксперимент, поведение газовой струи значительно зависит от внешнего акустического воздействия, при определенных условиях можно наблюдать деление (бифуркацию) потока (рис.2). В работе измерялся угол бифуркации ϕ , а также расстояние от конца трубки до места деления потока h (рис.2). Для случая со средней скоростью потока 76,2 м/с результаты измерений представлены в виде графиков на рис.3.

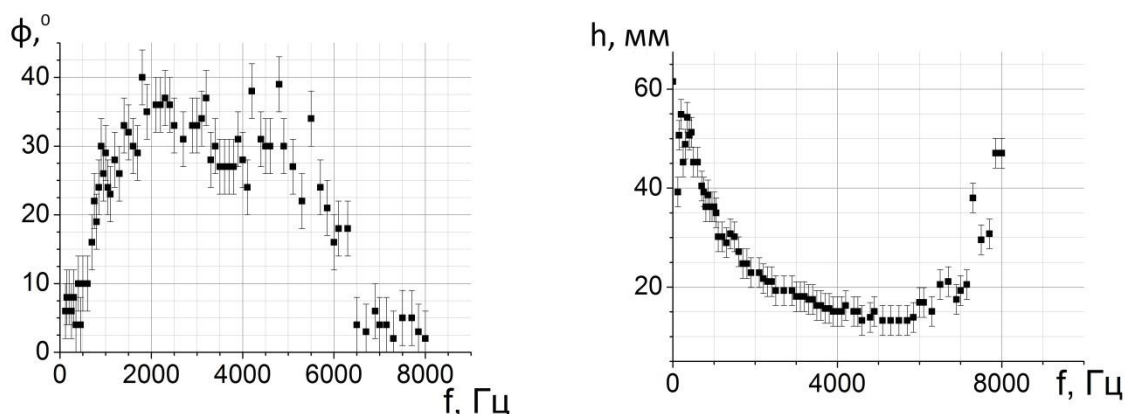


Рис.3. Зависимости угла бифуркации ϕ и расстояния h от частоты акустического воздействия. Уровень звукового давления – 80 dB.

Подобные эксперименты были проведены на трубках с разным внешним диаметром, а именно 6 мм и 100мм, внутренним диаметром 1 мм и 0,58 мм, а также с разными газами.

Эксперимент показал, что существует зависимость частоты, при которой наблюдается эффект, от средней скорости потока (рис.4). Причем частота, при которой наблюдается бифуркация, не зависит от внешнего диаметра трубки, это позволяет предполагать, что эффект деления не связан с собственным акустическим излучением струи. Экспериментально показано, что увеличение скорости струи и ее диаметра приводит к резкому росту частоты акустического воздействия, при которой наблюдается бифуркация.

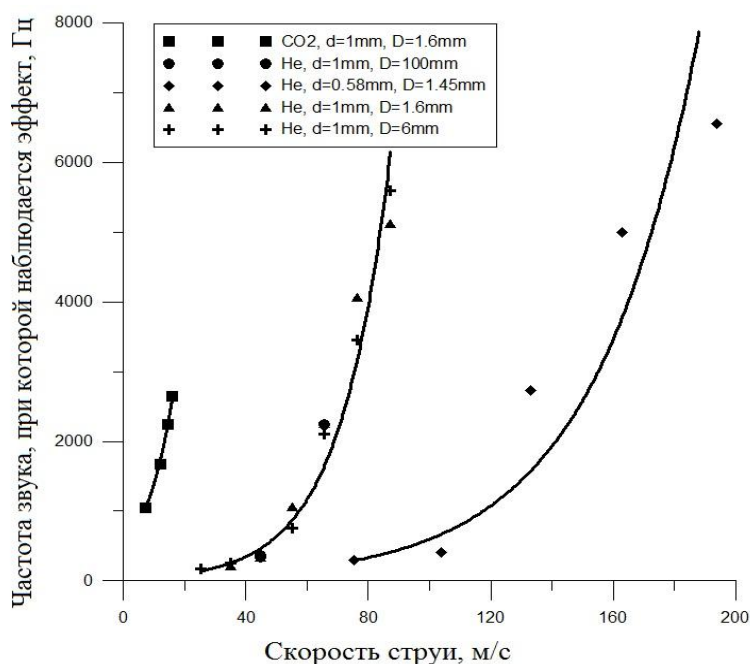


Рис.4. Зависимость частоты бифуркации от скорости потока для струй различных газов и геометрий.

3. БИФУРКАЦИЯ СТРУИ ГАЗА. PIV ДИАГНОСТИКА ПОЛЯ СКОРОСТЕЙ

Помимо теневого метода визуализация течения и измерение его параметров проводились методом Stereoscopic PIV, позволяющим измерять распределение мгновенных значений трех компонент вектора скорости потока в плоскости (плоскости лазерного ножа). Эта диагностика основана на системе LaVision FlowMaster Stereo PIV. Струя подсвечивалась лазерным ножом, сформированным из двойного лазерного импульса с энергией около 70 мДж и длительностью 6 нс каждый. Лазерный нож толщиной около 0.5 мм подсвечивал течение, засеянное частицами оксида титана (50 мкм), в плоскости распространения струи, проходящей через ее центр. Окружающий воздух был засеян частицами табачного дыма по системе co-flow. PIV-видеокамеры имели разрешение 2048×2048 пикселя, что обеспечивало пространственное разрешение системы 0,5 мм. Измерения проводились с максимальной для системы скоростью съемки – 7 Hz, при этом количество измерений за один эксперимент определялось объемом памяти видеокамеры и составляло значение 70. После усреднения по 70 измерениям получалось распределение вектора скорости в плоскости лазерного ножа.

В результате получены трехмерные поля скоростей потока в его продольном сечении (рис.5). Эксперимент проводился со струей гелия начального диаметра 1 мм, средняя скорость потока 45 м/с, частота акустического воздействия 300 Гц, уровень звукового давления 80 дБ. На рисунке представлены поля компонент вектора скорости, схематически показаны направления этих компонент, а также положения источника звука.

В отсутствии внешнего воздействия максимальная величина компонент V_x и V_z в исследуемой области составляет 5% от максимальной величины V_y . При наложении звука максимальная величина компонент V_x и V_z возрастает до 20% и 15% от максимальной величины V_y соответственно.

В поле компоненты V_x видны области с разной по направлению скоростью,двигающиеся друг за другом вниз по потоку. Они соответствуют изгибам струи, отчетливо видным на поле компоненты V_y . Помимо этого подобная картина наблюдается и в поле V_z , причины, по которым это происходит, до конца не ясны, и вопрос требует дополнительного изучения.

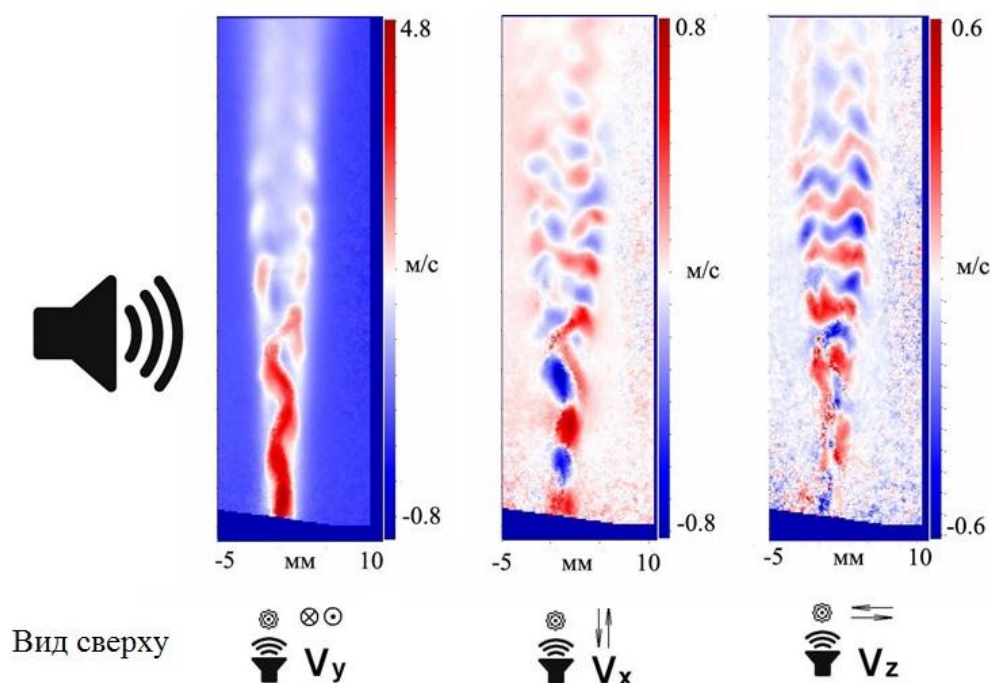


Рис.5. Поле (18-58 мм от среза сопла) скоростей потока.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Обнаружено, что эффект бифуркации потока обладает частотной зависимостью. Частота, при которой наблюдается эффект зависит от скорости потока, начального диаметра струи и газа, используемого в эксперименте.

Увеличение скорости струи и ее диаметра приводит к резкому росту частоты акустического воздействия, при которой наблюдается бифуркация, тоже самое происходит при одновременном увеличении плотности газа и уменьшении его динамической вязкости.

Экспериментально показано, что под действием звука в струе развивается асимметричная (синусоидальная) мода неустойчивости, нарастание которой вниз по потоку приводит к делению струи.

ЛИТЕРАТУРА

1. Krivokorytov M.S., Golub V.V., Volodin V.V. The effect of acoustic oscillations on diffusion combustion of methane // Technical Physics Letters. – 2012. – Vol.38. – N5. – P.478-480.
2. Brancher P., Chomaz J.M., Huerre P. Direct numerical simulation of round jets: Vortex induction and side jets // Phys. Fluids. – 1994. – Vol.6. – P.1768-1774.
3. Metcalfe R.W., Orszay S.A., Brachet M.E., Menon S., Riley J.J. Secondary instability of a temporally growing mixing layer // J. Fluid Mech. – 1987. – Vol.184. – P.207-243.
4. Crow S.C., Champagne F.H. Orderly structure in jet turbulence // J. Fluid Mech. – 1971. – Vol.48. – P.547-591.
5. Bernal L.P., Roshko A. Streamwise vortex structure in plane mixing layers // J. Fluid Mech. – 1986. – Vol.170. – P.499-525.
6. Lasheras J.C., Cho J.S., Maxworthy T. On the origin and evolution of streamwise vortical structures in plane free shear layer // J. Fluid Mech. – 1986. – Vol.172. – P.231-258.
7. Liepmann D., Gharib M. The role of streamwise vorticity in the near-field entrainment of round jets // J. Fluid Mech. – 1992. – Vol.245. – P.643-668.
8. Monkewitz P.A., Lehmann B., Barsikow B., Bechert D.W. The spreading of self-excited hot jets by side jets // Phys. Fluids. – 1989. – Vol.A1. – P.446-448.
9. Krashennnikov S.Yu., Mironov A.K. Effect of the stream wise component of the vorticity formed in a turbulent jet source on the acoustic characteristics of the jet // Fluid Dynamics. – 2003. – Vol.38. – N5. – P.698-711.
10. Nolle A.W. Sinuous instability of a planar air jet: Propagation parameters and acoustic excitation // J. Acoust. Soc. Am. – 1998. – Vol.103. – N6. – P.3690-3705.
11. Lebedev L.L., Pavel'ev A.A. Effect of the Nozzle Edge Shape on the Acoustic Sensitivity of a Jet // Fluid Dynamics. – 2002. – Vol.37. – N1. – P.21-26.
12. Грек Г.Р., Козлов В.В., Козлов Г.В., Литвиненко Ю.А. Влияние начальных условий на срезе сопла на структуру течения и устойчивость плоской струи // Вестник НГУ. Серия: Физика. – 2008. – Т.3. – Вып.3. – С.14-33.
13. Козлов В.В., Грек Г.Р., Литвиненко М.В., Литвиненко Ю.А., Козлов Г.В. Круглая струя в поперечном сдвиговом потоке // Вестник НГУ. Серия: Физика. – 2010. – Т.5. – Вып.1. – С.9-28.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СМЕШЕНИЯ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ВОЗДУШНЫХ ПОТОКОВ СО СТРУЯМИ, ИМИТИРУЮЩИМИ ГЕНЕРАТОРНЫЕ ГАЗЫ В КАМЕРЕ ДОЖИГАНИЯ РПД

Захаров Н.Н.¹, Кутузова А.Н.², Шаров М.С.²

¹*ФГБУН Институт прикладной механики Российской академии наук, г. Москва,
Россия*

²*ФГУП «ЦИАМ им. П.И. Баранова», г. Москва, Россия*

РЕЗЮМЕ

Проведены экспериментальные и расчётные исследования смешения пространственных воздушных потоков со струями, имитирующими генераторные газы в камере дожигания РПД.

Исследование проводилось путём физического моделирования процесса смесеобразования воздуха, поступающего из внешней среды по каналам воздухозаборного устройства за счет разряжения в полости модельной камеры дожигания (при помощи эксгаустера), с газовыми струями, имитирующими продукты газогенерации РПД.

Целью работы являлась выработка рекомендаций по оптимальному расположению сопловых отверстий на задней крышке газогенератора ракетно-прямоточного двигателя.

Объектом исследования была выбрана модель демонстратора камеры дожигания ракетно-прямоточного двигателя с каналами подвода воздуха из воздухозаборного устройства и системой подачи струй газа, имитирующего продукты газогенерации.

1. ВВЕДЕНИЕ

В проектировании комбинированных воздушно-реактивных двигательных установок важную роль играет выбранная аэродинамическая схема. В настоящее время в качестве перспективной рассматривается несимметричная схема с одним или двумя подфюзеляжными воздухозаборными устройствами (ВЗУ).

Одним из наиболее сложных и важных узлов комбинированной двигательной установки (КДУ) является камера дожигания, объединяющая ракетный и прямоточный контуры в единую силовую установку. Наибольшее влияние на эффективность рабочего процесса в камере дожигания оказывают характер распределения и смешения горючих элементов и воздуха по сечениям камеры, величина коэффициента избытка окислителя и время пребывания продуктов реакции в камере дожигания. Время, необходимое для сгорания твёрдых частиц, существенно больше времени, потребного для сгорания газообразного горючего. Поэтому для того, чтобы обеспечить полноту сгорания твёрдых частиц в случае топлива с металлическими добавками, требуется большая длина камеры дожигания. В свою очередь, объём последней определяется размером интегрированной в её тракт стартово-разгонной ступени и практически не подлежит изменению в ту или иную сторону. В связи с этим проблема оптимизации рабочего процесса в камере дожигания с несимметричным ВЗУ с целью получения максимальных полнотных характеристик двигательной установки при минимальных уровнях гидравлических потерь на всех режимах работы регулируемой КДУ становится наиболее актуальной.

В настоящей работе проводится анализ результатов расчётно-экспериментальных исследований процесса смесеобразования в камере демонстратора двигательной установки с несимметричным подфюзеляжным

воздухозаборным устройством при различных схемах подачи имитатора газогенераторного газа.

2. ОБЪЕКТ ИССЛЕДОВАНИЙ

При разработке новых КДУ придерживаются классических видов испытаний, обычно включающих: продувку ВЗУ в аэродинамической трубе, определение в аэродинамической трубе характеристик внешнего обтекания, испытания прямооточной камеры дожигания на присоединенном трубопроводе, испытания в свободной струе воздуха, летные испытания.

Все эти виды испытаний достаточно дороги вследствие высоких затрат энергии для создания условий их проведения, поэтому для сокращения объема экспериментальной отработки КДУ и его элементов и узлов возможно применение альтернативных, недорогих методик отработки, в частности модельных.

Для исследования характеристик двухканальных несимметричных подфюзеляжных ВЗУ и структуры течения в камере дожигания КДУ при несимметричном подводе воздуха был создан модельный узел-демонстратор (рис.1), включающий в себя короткие искривленные рукава модельного двухканального подфюзеляжного ВЗУ с различными углами входа потока в цилиндрическую камеру (30°, 45°, 60°, 90°).

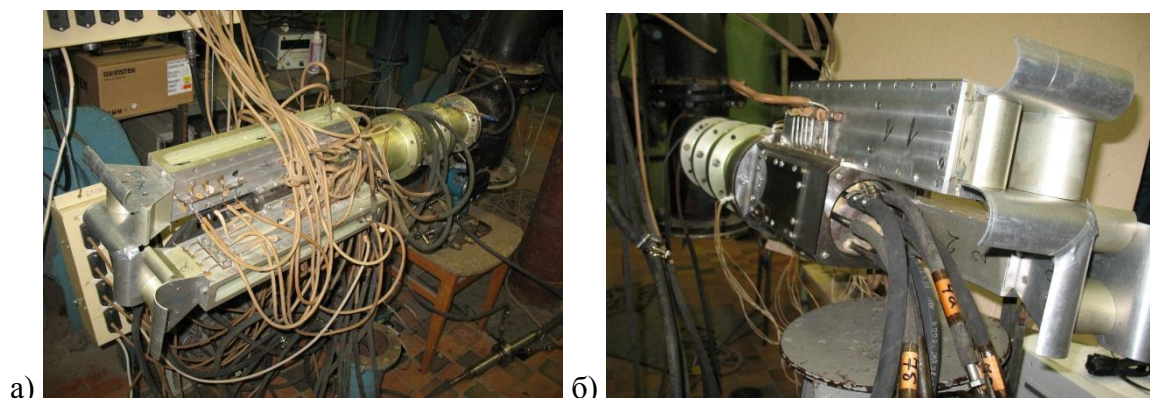


Рис.1. Внешний вид модели МД-180ПД на газодинамическом стенде УВ-16.

Конструктивная схема модели приведена на рис.2. Прямоугольные подводящие рукава двухканального ВЗУ расположены под углом 90° друг относительно друга. Предусмотрена возможность моделирования процессов смешения воздуха, поступающего в цилиндрическую камеру из подводящих рукавов, со струями газа, имитирующими поток продуктов сгорания газогенератора КДУ.

Модельный демонстрационный узел позволяет решить следующие задачи:

- изучение неравномерности и отрыва потока в камере дожигания и связанных с этими явлениями потерями полного давления;
- поиск оптимального угла подвода воздуха в камеру дожигания и средств влияния на изменение характеристик потоков воздуха;
- исследование процесса смешения воздушных потоков со струями, имитирующими продукты газогенерации, и поиск оптимального положения сопловых отверстий на крышке газогенератора КДУ.

Для этого демонстратор камеры дожигания КДУ был спроектирован таким образом, чтобы имелась возможность изменения схемы модельного ВЗУ и геометрических характеристик рабочего тракта (различные углы входа воздуха,

использование элементов, меняющих структуру потока: управляемые спрямляющие лопатки, решетки и т.д.). В переднем днище камеры смешения имеется возможность установки сменных крышек с различными схемами отверстий для подачи газа, имитирующего продукты газогенератора КДУ.

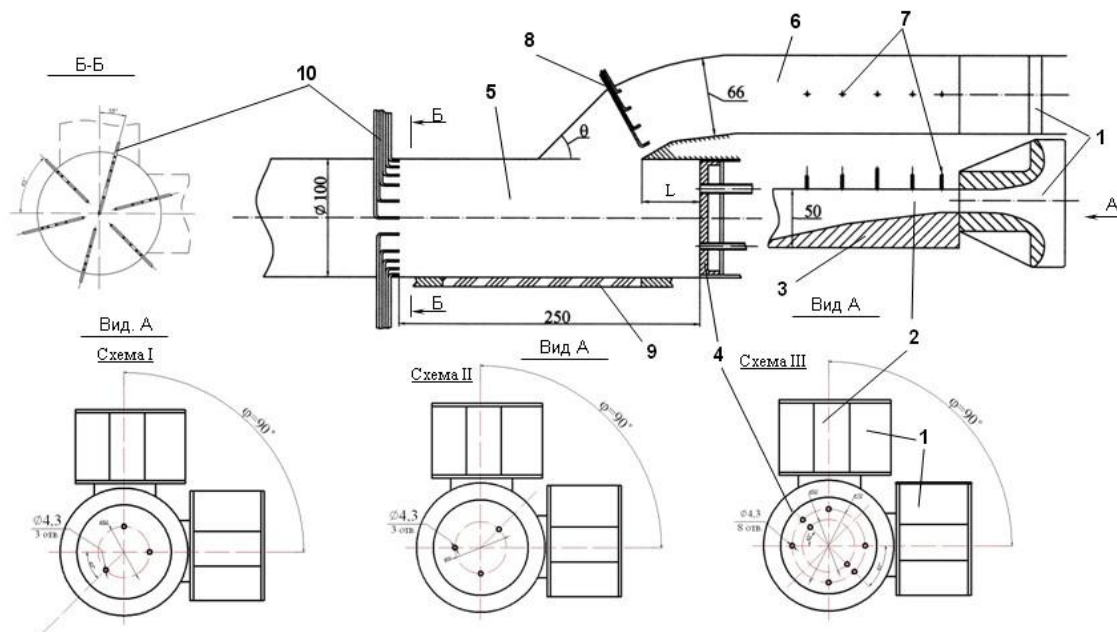


Рис.2. Конструктивная схема модели демонстратора камеры дожигания КДУ с несимметричным ВЗУ: 1 – коллектор; 2 – горло воздухозаборника; 3 – вставка, определяющая площадь горла воздухозаборника; 4 – крышка с отверстиями для вдува газа; 5 – камера смешения воздушных потоков; 6 – подводящий рукав ВЗУ; 7 – приёмники статического давления ВЗУ; 8 – гребёнка приёмников полного давления в переходном канале; 9 – оптические стёкла; 10 – шестилучевая гребёнка приёмников полного давления в камере.

Модель камеры дожигания и переходного канала ВЗУ КДУ (рис.2) состоит из осесимметричной камеры смешения 5 (КС) диаметром 100 мм и двух подводящих рукавов 6, по которым воздух поступает в КС от воздухозаборников, расположенных друг относительно друга в азимутальном направлении под углом $\varphi = 90^\circ$.

Подводящие рукава 6 представляют собой каналы плоской формы с переменной площадью поперечного сечения по длине и коллекторным входом 1. Высота горла 2 подводящих рукавов может изменяться с помощью сменных вставок 3 (рис.2) и принимать значения $h_r = 15, 20$ и 25 мм, что соответствует относительной площади горла $\bar{F}_r = F_r/F_0 = 0,2, 0,27$ и $0,33$. Здесь F_r – площадь горла, а F_0 – площадь входа в подводящий рукав.

Возможность изменения углов входа потока θ в камеру смешения предусмотрена с помощью направляющих вставок, обеспечивающих угол входа $30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$ и 90° , соответственно.

На рис.2 приведены три основные схемы исполнения сопловых отверстий на передней крышке модели. По схеме I («базовая») крышка 4 имеет 3 сопловых отверстия, расположенных на одной окружности и строго сориентированных относительно воздухозаборников. Схема II («оппозитная») представляет собой

развёрнутую на 180° относительно ВЗУ схему I (рис.2) так, что сопловые отверстия становятся диаметрально противоположными отверстиям по схеме I. Конструктивные схемы крышки с 3-мя сопловыми отверстиями по схеме расположения сопловых отверстий I и II и их ориентация относительно ВЗУ приведены на рис.3.

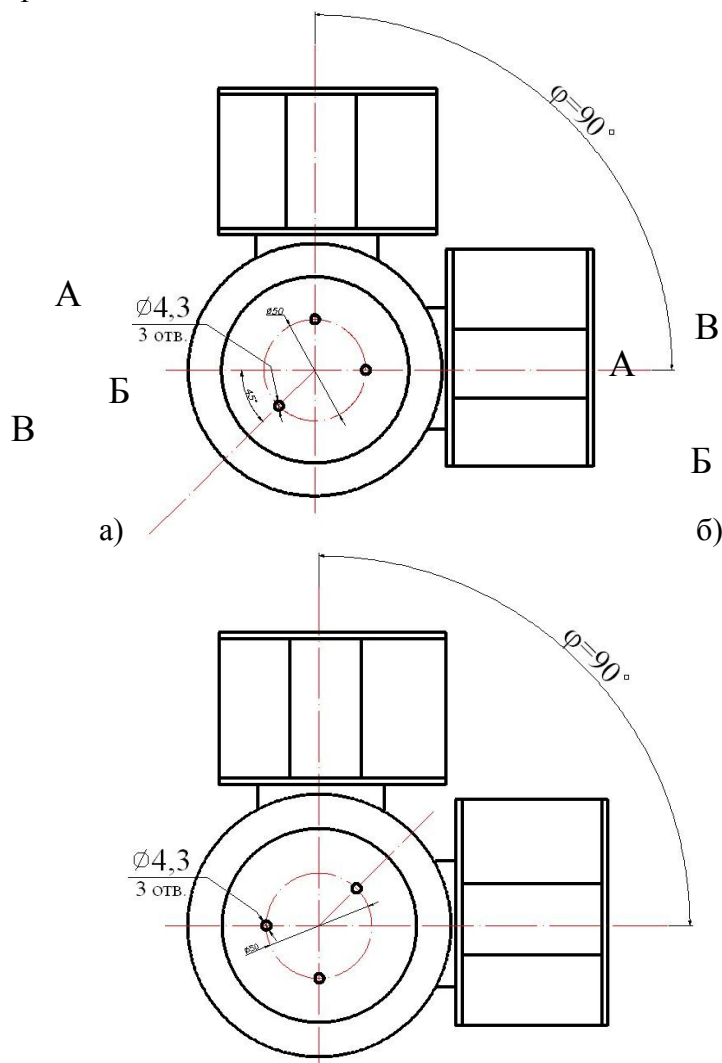


Рис.3. Конструктивная схема и ориентация сопловой крышки ГГ относительно ВЗУ по схеме I «базовая» (а) и II «оппозитная» (б).

По схеме III крышка 4 имеет 8 сопловых отверстий, также строго сориентированных относительно ВЗУ (рис.2). Внешний вид крышки с 8-ю сопловыми отверстиями приведен на рис.4. Конструктивная схема данного исполнения сопловой крышки и её ориентация относительно ВЗУ приведена на рис.5,а. В данной схеме предусматривается возможность подключения к подаче газогенераторного газа одновременно не более 2-х сопловых отверстий. Остальные отверстия при этом заглушаются.

Также для газодинамических исследований была предложена схема IV (рис.5,б), получаемая из схемы III путём поворота крышки на 90° . При этом отверстия Л, Г, Д, М должны находиться в плоскости симметрии модели относительно ВЗУ. В целом конструкция модели камеры дожигания позволяет легко

трансформировать геометрию модели под требуемые условия для конкретной программы испытаний.



Рис.4. Внешний вид сопловой крышки ГГ для схемы III.

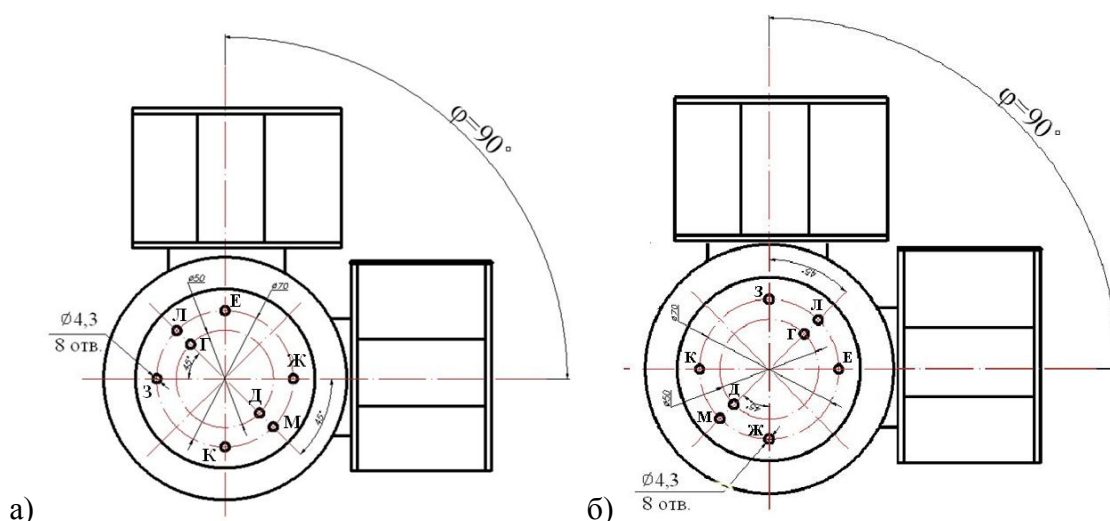


Рис.5. Конструктивная схема и ориентация сопловой крышки ГГ относительно ВЗУ:
а) по схеме III; б) по схеме IV.

3. УСТРОЙСТВО И СХЕМА СТЕНДА ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Газодинамические продувки модельной камеры дожигания КДУ проводились на стенде УВ-16 ЦИАМ. Для моделирования процессов течения в газодинамической модели камеры дожигания КДУ использовался наиболее экономичный способ воспроизведения скоростей и соотношений давления в потоке путём создания разрежения в полости модельной камеры с помощью эксгаустера. Через регулируемый дроссель камера смешения подстыковывалась к каналу отсоса воздуха аэродинамической трубы УВ-16. Воздух в канал модели поступал из атмосферы при температуре $T_o^* = 280-290\text{K}$. Для поддержания требуемых режимов течения в канале модели производился отсос воздуха из модели эксгаустерными машинами (ВЛ-2) цеха 28 с расходом воздуха до 3 кг/с при давлении в магистрали отсоса от 0,95 до 0,5 кг/см² и барометрическом давлении на входе в модель. Регулирование режимов работы производилось с помощью дросселя.

На рис.6 приведена схема установки для подачи в качестве газа-имитатора продуктов газогенерации КДУ горячего технического воздуха с расположением

В качестве регистрирующего прибора использовался модульный комплекс измерения температур МІС-140 фирмы НПП "Мера" (96 каналов, частота опроса до 100 Гц/канал), основная погрешность измерения 1°. Погрешность измерения температуры компенсации "холодного спая" $\pm 0,2^{\circ}\text{C}$.

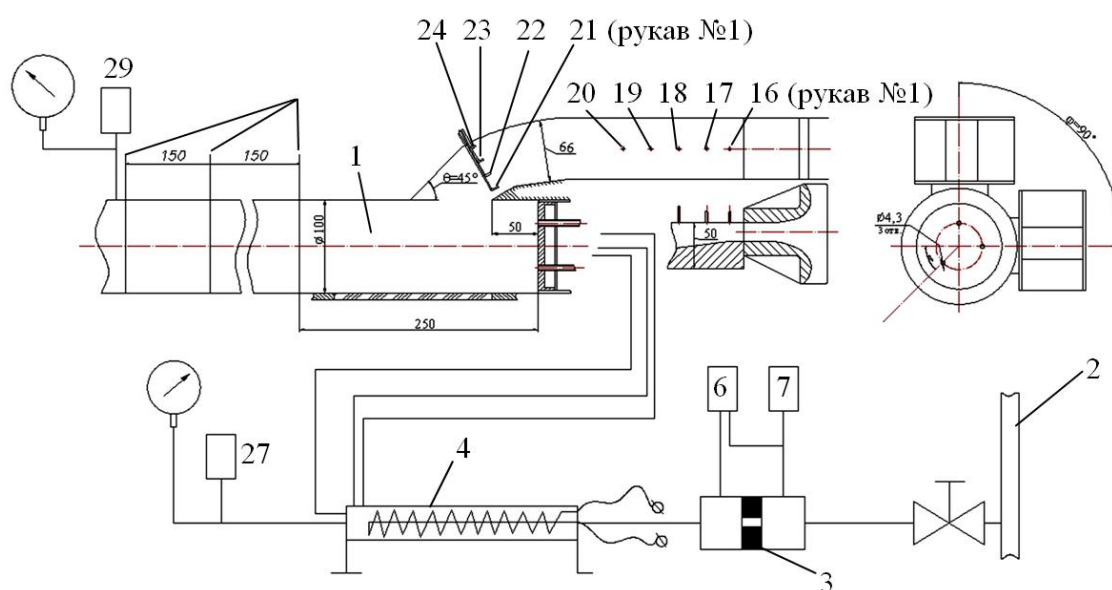


Рис.6. Схема подачи технического воздуха в модель и расположения и обозначения приёмников давлений на установке: 1 – модель камеры дожигания КДУ; 2 – магистраль технического воздуха; 3 – расходомерная шайба; 4 – подогреватель. Датчики: 6 – перепад на расходомерной шайбе; 7 – давление перед шайбой (давление в магистрали технического воздуха); 6...20 – приёмники статического давления во входном устройстве модели (рукав №1); 21...24 – приёмники полного давления в переходном канале ВЗУ (рукав №1); 27 – полное давление в коллекторе после подогревателя; 29 – приёмник, фиксирующий рабочее разрежение в камере модели.

Методика проведения испытаний (газодинамических продувок) модельной овки заключалась в следующем: после подключения модели выходной частью гистрала отсоса воздуха стенда, открывался дроссель и с помощью реборной установки ВЛ-2 происходил отсос воздуха из камеры модели. С щью дросселя по образцовому манометру устанавливался необходимый режим жения в камере. После выхода на режим начиналась подача газа-имитатора

продуктов газогенерации и происходила фиксация необходимых параметров по все подключенным датчикам и термопарам модели. После чего начинался переход на следующий режим согласно программе испытаний или изменение конфигурации модели.

Для правильного описания работы моделей ВЗУ и камеры дожигания (КД) КДУ существуют газодинамические параметры подобия, которые необходимо моделировать в экспериментальных исследованиях. Одним из основных параметров холодного моделирования горячей газогенераторной струи является параметр спутности воздушной и газогенераторной струй $m = u_2 / u_1$, где индексы «1» и «2» относятся к параметрам воздушной и газогенераторной струям соответственно. Помимо этого, необходимо выдерживать степень перегрева $\theta = T_2 / T_1$ и условие одинаковости бочек недорасширения в моделях камеры дожигания при горячих и холодных испытаниях, определяемых степенью нерасчётности $n = p_2^* / p_1^*$.

Основная задача данных экспериментальных исследований модели камеры дожигания – найти дисперсию концентраций холодного углекислого газа, гелия или избыточной температуры горячей воздушной струи с заданным параметром спутности m .

В условиях газодинамического стенда газогенераторные струи имитировались струями холодного углекислого газа, гелия или струями слабо подогретого воздуха. В табл.1 приведены значения параметров моделирования, которые были реализованы на аэродинамическом стенде УВ-16 при исследовании процессов смешения газогенераторных струй в модели камеры дожигания.

Таблица 1.

№ п/п	Параметры моделирования	Модельная КДУ	Модель камеры дожигания КДУ на установке УВ-16	
1	Параметр спутности струи $m = u_2 / u_1$	9.3	Воздух	2.4÷6
2	Степень перегрева $\theta = T_2 / T_1 = \rho_1 / \rho_2$	4	Воздух	1.7
3	Степень нерасчётности $n = P_2^* / P_1$	8-10	Воздух	4÷8

Из анализа табл.1 следует, что при имитации газогенераторных струй струями слабо подогретого воздуха хорошо моделируются параметры спутности m и степень нерасчётности n и плохо – степень перегрева θ .

Из теории турбулентных струй следует, что профили избыточных значений температуры и концентрации примеси в турбулентной струе, распространяющейся в спутном потоке одинаковы [1]. По этой причине безразмерное значение средней по расходу концентрации примеси в заданном сечении струи равно безразмерному значению средней избыточной температуры:

$$\frac{c(r, \varphi)}{c_2} = \frac{T^*(r, \varphi) - T_1^*}{T_2^* - T_1^*}, \quad (1)$$

где: c – массовая концентрация подогретого воздуха, распространяющегося в спутном потоке холодного воздуха из каналов ВЗУ; c_2 – концентрация воздуха в ядре горячей струи ($c_2=1$); T^* – температура торможения смеси; T_1^* – температура торможения спутного потока; T_2^* – температура торможения воздуха в ядре горячей струи; r, φ – радиальная и угловая координаты соответственно.

Это свойство турбулентных струй использовалось в настоящей работе для решения задачи смешения струй газогенераторного газа в модели камеры дожигания КДУ.

По результатам экспериментов, при использовании в качестве имитатора генераторного газа горячий воздух, определялись средние значения концентрации смеси в канале на основе определения полей избыточных температур, расходов воздуха и имитатора продуктов газогенерации.

Среднее значение концентрации примеси в канале определялось двумя способами. Первый способ заключался в определении среднего значения концентрации в канале по полю избыточных температур. В этом случае

$$c_{срТ} = \frac{1}{F_{\kappa}} \int_F c(r, \varphi) dF, \quad (2)$$

где F_{κ} – площадь канала, а $c(r, \varphi)$ – концентрация примеси, определяемая по формуле (1). Индекс «Т» означает осреднение по температуре.

Второй способ заключался в определении среднего значения концентрации в канале по расходу воздуха и имитатора топлива. В этом случае

$$c_{срG} = \frac{G_T}{G_B + G_T} \quad (3)$$

где G_T – расход имитатора топлива, а G_B – расход воздуха. Индекс «G» означает осреднение по расходу.

Расхода имитатора топлива определялся с помощью расходомерной шайбы [2].

Оба способа определения среднего значения концентрации примеси в проведенных экспериментах дают удовлетворительно совпадающие результаты.

Камеры смешения многих современных технических устройств представляют собой каналы, в которых какой-либо компонент в сравнительно небольших количествах подмешивается к основному потоку другого компонента, текущего по каналу с меньшей скоростью. Как правило, это подмешивание осуществляется при помощи системы большого числа струй. Эффективность протекания химических реакций (например, полнота сгорания топлива) зависит не только от перемешивания в среднем, а от того, перемешались ли компоненты до молекулярного уровня. Степень перемешанности в этом случае определяется пульсациями концентраций компонентов. При анализе экспериментальных и расчётных данных использовался критерий неоднородности концентрации Δc_0 пропорциональной разнице между максимальным $c_{\max}$ и минимальным $c_{\min}$ значениями концентрации в данном сечении.

При определении параметра неравномерности концентрации примеси для каждого углового положения определяется среднее по радиусу значение концентрации

$$c_r = \int_0^1 c(r) d\bar{r}^2.$$

Из распределения c_r по углу φ выделяется область $\varphi_1 \leq \varphi \leq \varphi_2$, в пределах которых $c_r < c_{ср}$.

Величина $c_{ср}$ определяется по формуле $c_{ср} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} c_r d\varphi$.

В выделенной области $\varphi_1 \leq \varphi \leq \varphi_2$ определяется среднее значение концентрации

$$c_o = \frac{1}{\varphi_2 - \varphi_1} \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} c_r d\varphi.$$

В качестве параметра неравномерности концентрации примеси по аналогии с окружающей неравномерностью полного давления принимается величина

$$\Delta c_o = \frac{c_{cp} - c_o}{c_{cp}}.$$

При обработке полей концентрации, значения концентрации примеси на стенках канала аппроксимировались линейной экстраполяцией по двум ближайшим точкам измерений гребенкой термопар. Вычисление интегралов в программе проводится по формуле трапеции.

Кроме вычисления параметров неравномерности концентрации программа осуществляет подготовку исходных данных для построения линий постоянного значения концентрации в сечении, где проводятся измерения температур. Массивы координат точек линий постоянного значения концентрации и самих величин концентрации выводятся в массив *per-izo*, который является массивом исходных данных для программы построения линий постоянного уровня [3].

5. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ СМЕСЕОБРАЗОВАНИЯ

Экспериментальные газодинамические исследования модели камеры дожигания КДУ проводились на присоединенном воздухопроводе при изменении давления в выходном сечении переходного канала ВЗУ $p_a=0,8, 0,7, 0,6$ и $0,5$ ата, что соответствовало изменению приведенной скорости в КД $\lambda_g=0,354, 0,403, 0,466$ и $0,589$. При исследовании процессов смешения в КД параметр спутности воздушной и газогенераторных струй изменялся в диапазоне $2,1 \leq m \leq 3,7$, а степень нерасчётности газогенераторных струй – в диапазоне $4 \leq n \leq 8$.

В процессе этих испытаний было исследовано влияние следующих режимных и геометрических параметров модели КД на процесс смешения газогенераторных струй с воздушным потоком:

- давления в выходном сечении переходного канала ВЗУ или величины приведённой скорости λ_g в КД,
- параметра спутности m смешивающихся потоков,
- степени нерасчётности газогенераторных струй,
- схемы подачи воздуха, имитирующего генераторный газ (количества и расположения сопел на задней крышке газогенератора КДУ),
- расстояния от задней крышки газогенератора КДУ до сечения измерения концентрации примеси $x=x/d$.
- угол входа потока воздуха θ в КС.

Фактические результаты этих исследований представлены в виде составленной обширной базы данных:

- распределений относительной температуры $T^*/T_{x,cp}^*$ в поперечных сечениях $x=2,5, 4$ и $5,5$ для различных режимных и геометрических параметров модельной установки, где T^* – температура смеси измеренная гребёнкой термопар, а $T_{x,cp}^*$ – среднее значение температуры воздушного потока;
- зависимостей параметра неравномерности концентрации Δc_o , который характеризует степень перемешанности компонент, от расстояния x/d ,

отсчитываемое от начала подачи генераторного газа, и от параметра спутности струи m (рис.7,8);

- распределений концентрации примеси газогенераторной струи $c = \frac{T^* - T_{x,cp}^*}{T_{z2}^* - T_{x,cp}^*}$ в поперечных сечениях $\bar{x}=2,5, 4$ и $5,5$, где T_{z2} – температура генераторного газа.

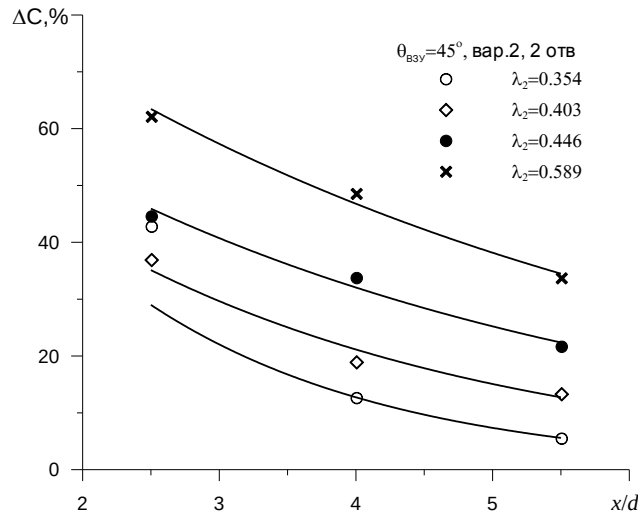


Рис.7. Изменение параметра неравномерности концентрации имитатора продуктов газогенерации по длине камеры модели с углом входа воздуха из ВЗУ $\theta=45^\circ$ при подаче имитатора через 2 отверстия (А и Б) в крышке ГГ по схеме II.

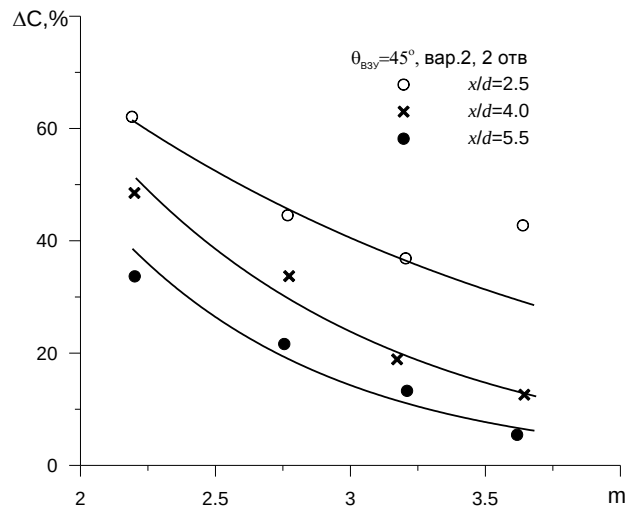


Рис.8. Влияние коэффициента спутности потока на неравномерность концентрации имитатора продуктов газогенерации в камере модели с углом входа $\theta=45^\circ$ при подаче имитатора через 2 отверстия (А и Б) в крышке ГГ по схеме II.

Рассмотрим влияние перечисленных геометрических и режимных параметров на характеристики смешения более подробно.

Для угла входа воздуха из ВЗУ $\theta=45^\circ$ в сечениях $\bar{x}=2,5, 4$ и $5,5$ в потоке за крышкой газогенератора по схеме I (3 отв.) при всех исследованных значениях давления p_a имеются области, в которых отсутствуют примеси генераторного газа ($T^*/T_{x,cp}^* \leq 1$). Для варианта входа рукавов ВЗУ с углом $\theta=60^\circ$ генераторный газ отсутствует в сечении $\bar{x}=2,5$ при всех исследованных значениях давления p_a , а в

сечении $\bar{x}=4$ только при $p_a=0,7, 0,6$ и $0,5$. Но для варианта с $\theta=60^\circ$ области потока, в которых концентрация примеси генераторного газа $c=0$ заметно уже, чем для варианта компоновки с $\theta=45^\circ$. В компоновке с углом $\theta=60^\circ$ идёт процесс равновесного смешения в отличие от варианта с $\theta=45^\circ$, что наглядно подтверждается данными по изменению параметра неравномерности концентрации Δc_0 по длине $\bar{x}$ и параметру спутности m . Как было сказано выше, параметр неравномерности концентрации Δc_0 характеризует степень перемешанности компонентов. В варианте с $\theta=60^\circ$ параметр Δc_0 монотонно уменьшается по длине, и по параметру спутности m от значения $\Delta c_0 \approx 80\%$ при $\bar{x}=2,5$ до 27% при $\bar{x}=5,5$. В компоновке с $\theta=45^\circ$ параметр неравномерности Δc_0 вяло изменяется как по длине, так и по параметру m , достигая минимального значения $\Delta c_0=50\%$ в сечении $\bar{x}=5,5$, что почти в 2 раза выше, чем для варианта с $\theta=60^\circ$.

Из результатов экспериментальных исследований следует, что характер смешения генераторной струи с воздухом за крышкой газогенератора по схеме II (3 отв.) для вариантов входа рукавов ВЗУ с углами $\theta=45^\circ$ и $\theta=60^\circ$ практически одинаков. В потоке за крышкой газогенератора по схеме II в сечении $\bar{x}=2,5$, при всех исследованных значениях давления p_a имеются области, в которых отсутствуют примеси генераторного газа ($T^*/T_{x,cr}^* \leq 1$). В остальных сечениях примесь генераторного газа присутствует за исключением сечения $\bar{x}=4$ при $p_a=0,5$ ата. В потоке за крышкой газогенератора по схеме II в камере дожигания с углами входа рукавов в ВЗУ $\theta=45^\circ$ и $\theta=60^\circ$ идёт процесс равновесного смешения. В указанных компоновках параметр неравномерности Δc_0 монотонно уменьшается по длине и по параметру m от значений $\Delta c_0=60 \div 40\%$ для варианта с $\theta=45^\circ$ и $\Delta c_0=70 \div 40\%$ для варианта с $\theta=60^\circ$ в сечении $\bar{x}=2,5$ до $\Delta c_0=32 \div 16\%$ и $\Delta c_0=43 \div 23\%$ в сечении $\bar{x}=5,5$ соответственно. Указанный диапазон изменения Δc_0 в каждом сечении соответствует изменению значения p_a от $0,8$ до $0,5$ ата или коэффициента скорости λ_v от $0,354$ до $0,589$.

Результаты исследования различных вариантов схем подачи имитатора продуктов газогенерации сведены в табл.2, в которой их эффективность определяется параметром неравномерности концентрации генераторного газа Δc_0 .

Таким образом, получена база данных по распределению концентрации примеси ГГ в поперечных сечениях $\bar{x}=2,5, 4$ и $5,5$, для двух схем входа воздуха в КС ($\theta=45^\circ$ и 60°) и по 11 вариантам подачи генераторных струй в камеру дожигания для каждой схемы входа воздуха. Для рассмотренных вариантов подачи ГГ исследования не выявили однозначного влияния угла входа воздуха в КС на процесс смешения.

Так при подаче генераторного газа через 2 сопловых отверстия в крышке газогенератора №1 (базовая схема, рис.3а, отв. А, Б) для варианта входа воздуха в КС с углом $\theta=60^\circ$ неравномерность концентрации имитатора ГГ Δc_0 монотонно уменьшается по длине $\bar{x}$ и по параметру спутности m от значения $\Delta c_0 \approx 80\%$ при $\bar{x}=2,5$ до 27% при $\bar{x}=5,5$. В компоновке с $\theta=45^\circ$ величина Δc_0 вяло изменяется как по длине $\bar{x}$ так и по параметру m , достигая минимального значения $\Delta c_0=50\%$ в сечении $\bar{x}=5,5$, что почти в 2 раза выше, чем для варианта с $\theta=60^\circ$.

При подаче генераторного газа через 2 сопловых отверстия в крышке газогенератора №2 (оппозитная схема, рис.3б, отв. А, Б) для вариантов входа воздуха в КС с углом $\theta=45^\circ$ неравномерность концентрации имитатора ГГ Δc_0 монотонно уменьшается по длине $\bar{x}$ и по параметру спутности m от значения

$\Delta c_0 \approx 60\%$ при $\bar{x}=2.5$ до 16% при $\bar{x}=5.5$, а в компоновке с $\theta=60^\circ$ величина Δc_0 уменьшается от значения $\Delta c_0 \approx 70\%$ при $\bar{x}=2.5$ до 23% при $\bar{x}=5.5$, что на 43% выше, чем для варианта с $\theta=45^\circ$.

Показано, что для рассмотренных компоновок канала ВЗУ и камеры дожигания наилучшими характеристиками по смешению генераторных струй с воздухом обладает компоновка с углом $\theta=45^\circ$ при условии подачи имитатора ГГ через 2 отверстия в крышке газогенератора №2 с оппозитным расположением сопловых отверстий относительно фронта выходного сечения ВЗУ. При указанной схеме подачи генераторного газа неравномерность концентрации примеси в сечении $x/d=5.5$ от начала подачи достигает 6% .

Установлено, что подача ГГ через третье отверстие в крышке газогенератора №2 малоэффективна.

Таблица 2.

№ п/п	Угол $\theta,^\circ$	Схема крышки ГГ / обозначение отверстий по схеме (рис.3,5)	Кол-во отв.	$\Delta c_0, \%$ $x/d=4.0$
1	45	IV / К, М, Ж	3	5.65
2	45	IV / К, Ж	2	5.65
3	45	IV / К, Д, Ж	3	6.35
4	45	III / З, К	2	8
5	45	IV / Л, М	2	12
6	45	II / А, Б	2	13
7	60	III / З, К	2	15
8	45	III / Л, М	2	18
9	60	II / А, Б	2	23
10	45	II / А, Б, В	3	24
11	45	IV / Г, Д	2	29
12	60	II / А, Б, В	3	32
13	60	I / А, Б, В	3	45
14	45	III / Е, Ж	2	47
15	60	III / Г, Д	2	50
16	45	I / А, Б, В	3	56
17	60	I / А, Б	2	58
18	60	III / Е, Ж	2	60
19	45	I / А, Б	2	70
20	45	III / Г, Д	2	74

Анализ материалов таблицы 2, в которой собраны экспериментальные значения параметра неравномерности концентрации имитатора генераторного газа в сечении $x/d=4.0$ модели для всех вариантов подачи ГГ, показывает, что наиболее эффективными схемами подачи являются схема IV (отв. К, М, Ж) и IV (отв. К, Ж) (рис.5). Эти варианты размещения сопловых отверстий дают минимальную неравномерность концентрации в сечении $\bar{x}=4.0$ $\Delta c_0=5.65\%$.

Самой неудачной схемой подачи генераторного газа, с точки зрения смешения, является подача через 2 отверстия в крышках по схеме I (отв. А, Б) и III (отв. Е, Ж) с углом входа потока воздуха в КС $\theta=45^\circ$. Для этих вариантов неравномерность концентрации примеси в сечении $x=4.0$ составляет 70% и 74% , соответственно.

6. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СМЕСЕОБРАЗОВАНИЯ В ГАЗОДИНАМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ КАМЕРЫ ДОЖИГАНИЯ КДУ

Численное моделирование процесса смесеобразования в модельной камере КДУ проводилось при помощи универсального программного комплекса FLUENT, позволяющего рассчитывать трехмерные турбулентные течения вязкого сжимаемого газа на основе уравнений Навье-Стокса. Исходными геометрическими размерами и граничными условиями для исследуемого рабочего процесса являлись данные по стендовой модельной камере КДУ, продувки которой проходили на стенде УВ-16 и параметры режимов работы. В силу особенностей несимметричного подвода воздуха из двухканального воздухозаборного устройства задача решалась в трёхмерной постановке. Наличие вертикальной плоскости симметрии в модели позволило рассматривать только половину расчётной области. В программе ICEM CFD были созданы пространственная 3D-модель, точно повторяющая внутренний профиль экспериментальной модельной установки, и расчётная неструктурированная сетка (рис.9) с количеством ячеек ~1 млн., со сгущениями к сопловым отверстиям газогенератора и окнам подвода воздуха из ВЗУ.

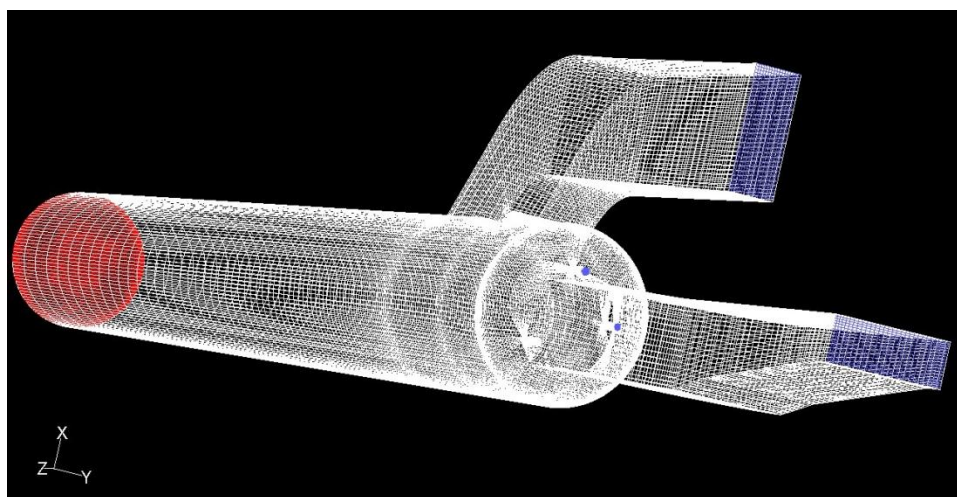


Рис.9. Геометрическая модель с расчётной структурированной сеткой.

Для моделирования турбулентного потока в камере смешения модели была выбрана модифицированная $k-\epsilon$ модель турбулентности RNG [52], с опциями Swirl Dominated Flow, Enhanced Wall Treatment, Pressure Gradient Effects, подходящая для сложных вихревых течений с большими ускорениями, обратными токами и местными переходными течениями (смешение дозвукового потока со сверхзвуковым или околоскоростным потоком). Расчёт проводился для вязкого, сжимаемого и теплопроводного воздуха в стационарной постановке газодинамической задачи с допущением об отсутствии теплообмена со стенкой камеры. Интегрирование системы уравнений Навье-Стокса проводилось с использованием метода конечных объёмов с параметром Куранта, равным единице и количеством итераций, при котором невязки по плотности составляли менее 10^{-5} , а расхождение баланса расхода газа в модели менее 0,5%.

Проводились расчёты как для базовой схемы с двумя и тремя отверстиями, так и для оппозитной схемы с двумя и тремя сопловыми отверстиями (см. рис.3). В качестве имитатора продуктов газогенерации использовался подогретый

технический воздух. Как и на эксперименте, оценивались поля температур по характерным сечениям камеры модели для различных режимных и геометрических параметров.

По результатам численного расчёта параметров потока в камере дожигания для базовой схемы подачи генераторного газа вариант крышки №1 и оппозитной – вариант №2 (см. рис.3) были вычислены неравномерности концентрации примеси в зависимости от коэффициента спутности потока и сопоставлены с данными, полученными в эксперименте. Результаты этих сравнений приведены на рис.10,11.

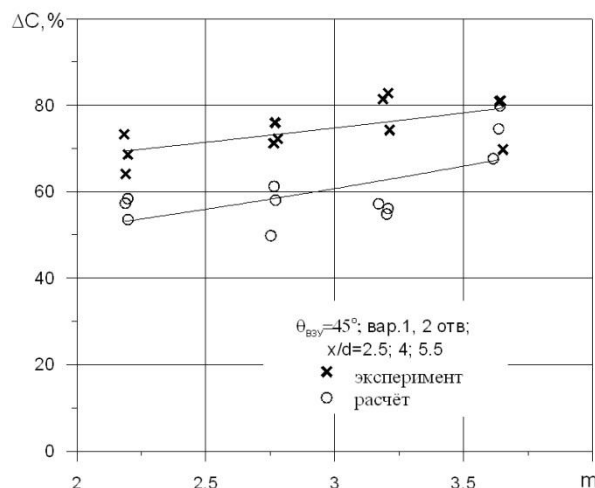


Рис.10. Влияние коэффициента спутности потока на неравномерность концентрации примеси в канале камеры дожигания модели МД-180ПД с углом входа воздуха в КС $\theta=45^\circ$ при подаче генераторного газа через 2 отверстия в крышке ГГ по варианту №1.

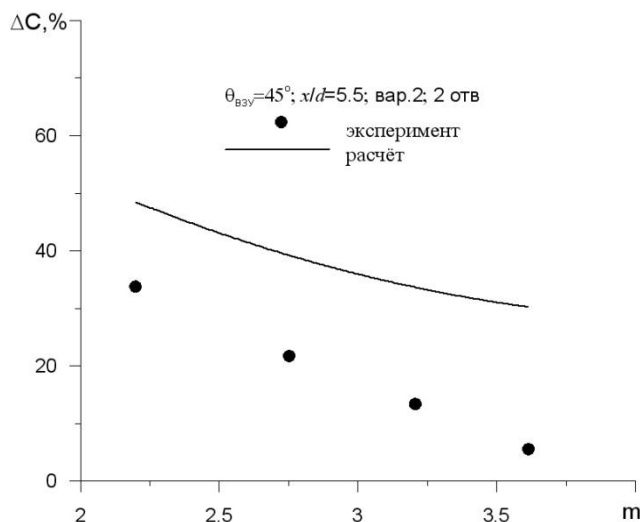


Рис.11. Влияние коэффициента спутности потока на неравномерность концентрации примеси в канале камеры дожигания модели МД-180ПД с углом входа воздуха в КС $\theta=45^\circ$ при подаче генераторного газа через 2 отверстия в крышке ГГ по варианту №2.

Можно отметить, что результаты численного расчёта и эксперимента качественно согласуются для обоих рассмотренных вариантов, но имеется

количественное расхождение, что возможно объяснить не полным совпадением некоторых условий расчёта и эксперимента.

На рис.12 показано изменение неравномерности концентрации примеси в сечении $x=5.5$ модели камеры дожигания при подаче генераторного газа через 2 отверстия в крышке газогенератора №1 и №2 (см. рис.3). Из расчётов следует, что эффективность смешения при оппозитной схеме подачи генераторного газа выше, чем при базовой, что также качественно согласуется с результатами эксперимента.

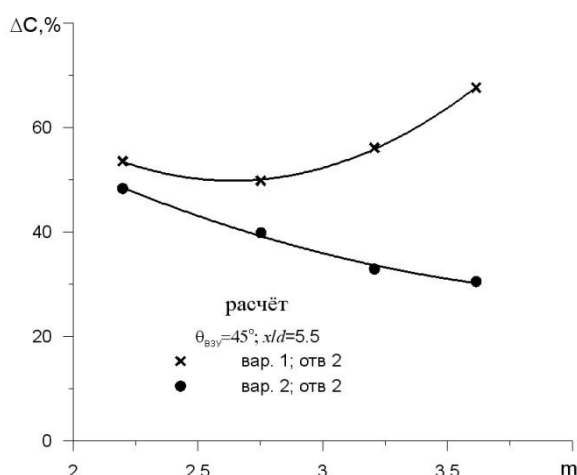


Рис.12. Влияние варианта крышки ГГ на неравномерность концентрации примеси в канале камеры дожигания модели МД-180ПД с углом входа воздуха в КС $\theta=45^\circ$ при подаче генераторного газа через 2 отверстия.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В модельной камере дожигания КДУ с несимметричным ВЗУ проведены расчётно-экспериментальные исследования процесса смесеобразования с углами входа воздуха в камеру смешения $\theta=45^\circ$ и $\theta=60^\circ$, относительным значением площади горла подводящих рукавов ВЗУ $F_r=0.33$ при изменении: приведенной скорости в камере смешения $\lambda_0=0.3\div 0.5$, параметра спутности воздушной и газогенераторных струй $m=2.1\div 3.6$, степени нерасчётности газогенераторных струй $n=4\div 8$. В качестве имитатора генераторного газа использовался подогретый воздух со степенью перегрева $\Theta=1.7$.

Исследовано влияние различных схем подачи имитатора генераторного газа в модельную камеру дожигания на процесс смешения воздуха и генераторных струй и получена база данных по 20 вариантам подачи генераторных струй в камеру дожигания.

Показано, что для рассмотренной компоновки канала ВЗУ и камеры дожигания КДУ наилучшими характеристиками по смешению генераторных струй с воздухом обладают варианты подачи по схеме IV (отв. К, М, Ж) с углом входа воздуха из ВЗУ 45° и оппозитным расположением сопловых отверстий относительно фронта выходного сечения ВЗУ. При подаче генераторного газа через 3 отверстия в варианте по схеме IV (отв. К, М, Ж) или через 2 отверстия (К, Ж) в канале камеры дожигания на расстоянии $x/d=4.0$ от начала подачи достигнута минимальная неравномерность концентрации примеси Δc_0 равная 5.65%.

Наихудшие результаты по смешению генераторного газа получены при условии подачи имитатора топлива через 2 отверстия (А и Б) в крышке газогенератора по схеме I с углом входа воздуха в камеру смешения $\theta=45^\circ$. При указанной схеме подачи генераторного газа неравномерность концентрации примеси в сечении $x/d=4.0$ и 5.5 достигает значения 70%.

Проведено сопоставление результатов численного расчёта смешения в модели камеры дожигания КДУ с результатами эксперимента и получено качественное соответствие.

В дальнейшем, основной задачей является повышение точности расчётов для достижения количественных совпадений с результатами экспериментов, в первую очередь за счёт создания расчётной сетки с большим разрешением.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Абрамович Г.Н., Гиршович Т.А., Крашенинников С.Ю. и др. Теория турбулентных струй / Под ред. Г.Н. Абрамовича. – М.: Наука, 1984. – 716 с.*
2. *Сорокин В.А., Захаров Н.Н., Шаров М.С. и др. Экспериментальные исследования характеристик модели камеры сгорания комбинированной двигательной установки с несимметричным воздухозаборником // Авиакосмическая техника и технология. – 2009. – №1. – С.45-51.*
3. *Захаров Н.Н., Шаров М.С. Расчётно-экспериментальное исследование процесса смесеобразования в модели камеры дожигания комбинированной двигательной установки / IX Международная конференция по неравновесным процессам в соплах и струях (25-31 мая 2012 г., Алушта). Материалы. – М.: Изд-во МАИ, 2012. – С.37-39.*

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ-СТОКСА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВОЛН ГОРЕНИЯ В ШАРОВОМ РЕАКТОРЕ И ПРОДУВОК МОДЕЛИ ТЯГОВОГО УСТРОЙСТВА С КОЛЬЦЕВЫМ СОПЛОМ

Левин В.А.¹, Громов В.Г.², Афонина Н.Е.², Марков В.В.², Хмелевский А.Н.²

¹Дальневосточный федеральный университет, г. Владивосток, Россия

²НИИ механики МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

Представлены результаты численного исследования на основе уравнений Навье-Стокса воспламенения и горения ацетилено-воздушной смеси в камере сгорания шаровой формы экспериментальной установки и моделирования продувок тягового модуля воздухом комнатной температуры и высокотемпературными продуктами сгорания стехиометрической ацетилено-воздушной смеси.

В процессе работы на основе вычислительного комплекса HighTemp проведена серия тестовых расчетов воспламенения газа и последующего распространения фронта горения по объему реактора в осесимметричном приближении.

В результате исследования для ряда начальных условий получены данные по динамике параметров поля течения в реакторе от момента воспламенения до полного сгорания топливной смеси. Отмечена значительная зависимость количественных результатов расчетов от выбора разностной сетки.

1. ТЕРМОХИМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Основные предположения. Расчетно-теоретическое исследование процесса воспламенения и распространения волны горения в реакторе проведено с использованием одно температурной химически неравновесной термохимической модели, основанной на следующих предположениях:

- газ представляет собой идеальную смесь совершенных газов;
- внутренние степени свободы всех компонентов смеси возбуждены равновесно с поступательными степенями свободы;
- ионизация газа и перенос энергии излучением не учитываются;

Состояние газовой среды при таких предположениях может быть описано следующей группой параметров: p – давление, ρ – плотность, T – температура, $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_\nu)$ – состав газа, где γ_i – мольно-массовая концентрация i -го компонента смеси, связанная с весовой концентрацией C_i и мольной концентрацией X_i этого компонента соотношениями $\gamma_i = C_i / M_i$, $\gamma_i = X_i / \bar{M}$.

По определению $\rho_i = \rho c_i$, $N_i = N x_i = N_A \rho \gamma_i$, где ρ_i , N_i – соответственно массовая и числовая плотность i -го компонента, $N = N_A \rho / \bar{M}$ – числовая плотность газа, N_A – число Авогадро, $\bar{M}$ – средний молекулярный вес газа, определяемый выражением

$$\bar{M} = \sum_{i=1}^{\nu} M_i x_i = \left[\sum_{i=1}^{\nu} C_i / M_i \right]^{-1} = \left[\sum_{i=1}^{\nu} \gamma_i \right]^{-1}$$

Концентрации компонентов смеси связаны соотношениями

$$\sum_{i=1}^{\nu} X_i = 1; \quad \sum_{i=1}^{\nu} C_i = 1; \quad \sum_{i=1}^{\nu} M_i \gamma_i = 1;$$

Значения давления, температуры и плотности связаны между собой термическим уравнением состояния, которое при сделанных допущениях имеет вид

$$p = \frac{\rho R_u T}{\bar{M}},$$

где R_u – универсальная газовая постоянная.

Термодинамические свойства. Термодинамические функции системы, состоящей из N_i частиц газа сорта i , определяются через сумму по всем возможным состояниям этой системы

$$Q_i = \frac{Z_i^{N_i}}{N_i!} \approx \left(\frac{e Z_i}{N_i} \right)^{N_i},$$

где Z_i статистическая сумма (сумма по состояниям) одной частицы сорта i

$$Z_i = \sum_j \exp(-(\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{i0}) / kT).$$

Здесь ε_{ij} – энергия частицы в j -ом состоянии, а суммирование производится по всем возможным состояниям одной молекулы. Приведенный термодинамический потенциал $\Phi_i^*(p, T)$, энтальпия $H_i(T)$ и теплоемкость $C_{p,i}(T)$ при постоянном давлении одного моля газа определяются следующими выражениями [1]

$$\Phi_i^* = R_u \ln \frac{Z_i}{N_A}, \quad H_i(T) = H_i(0) + T^2 \left(\frac{\partial \Phi_i^*}{\partial T} \right)_p, \quad C_{p,i} = \left(\frac{\partial H_i}{\partial T} \right)_p$$

Вычисление термодинамических функций компонентов газовой смеси основано на следующей аппроксимации зависимости теплоемкости при постоянном давлении $C_{p,i}$ от температуры T

$$C_{p,i}(T) / R_u = a_{-2,i} \tilde{T}^{-2} + \sum_{k=0}^5 a_{k,i} \tilde{T}^k \quad \text{при } T_{1,i} \leq T \leq T_{2,i};$$

$$C_{p,i}(T) = C_{p,i}(T_{1,i}) \quad \text{при } T < T_{1,i};$$

$$C_{p,i}(T) = C_{p,i}(T_{2,i}) \quad \text{при } T > T_{2,i}, \quad \text{где } \tilde{T} = T / 10^4 \text{ K}.$$

Коэффициенты $a_{k,i}$ определяются путем интерполяции табличных или аналитических данных [1,2] в диапазоне температур $T_{1,i} \leq T \leq T_{2,i}$. Выражения для энтальпии $H_i(T)$ и термодинамического потенциала $\tilde{\Phi}_i(p_{ref}, T)$ находятся последовательным интегрированием выражений для мольной теплоемкости по температуре с использованием в качестве констант интегрирования значений $H_i(T)$ и $\tilde{\Phi}_i(p_{ref}, T)$ при некоторой фиксированной температуре $T = T_i^*$. В качестве нулевой энергии $H_i(0)$ использована теплота образования вещества из элементов в стандартном состоянии при $p=1$ атм и $T=0^\circ\text{K}$.

Транспортные свойства. Для вычисления диффузионных потоков используется упрощенная (бинарная) модель, основанная на законе Фика [3]

$$\vec{K}_i = -\rho D \frac{\partial \gamma_i}{\partial \vec{r}},$$

где единый для всех компонентов коэффициент диффузии определяется через коэффициент вязкости смеси μ и заданное число Шмидта Sc

$$\rho D = \frac{\mu}{Sc}.$$

Плотность «вязкого» потока импульса $\hat{\tau}$ и энергии $\vec{q}$ определяются выражениями [4]

$$\hat{\tau} = -2\mu\hat{S}; \quad \vec{q} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial \vec{r}} + \sum_{i=1}^v \vec{K}_i H_i;$$

где $\hat{S}$ – тензор скорости сдвига

$$\hat{S} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial \vec{r}} \right) + \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial \vec{r}} \right)^T - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{u} \right) \hat{I} \right];$$

$\vec{u}$ – средняя массовая скорость газа (скорость потока), $\hat{I}$ – единичный тензор.

Для коэффициентов вязкости μ и теплопроводности λ газовой смеси в настоящей работе используются аппроксимационные зависимости типа Уилке-Васильевой, приведенные в [4]

$$\mu = \sum_{i=1}^v M_i \gamma_i Sc_i D_i; \quad \lambda = \sum_{i=1}^v \gamma_i \left[c_{pi} + 2.5 R_u (1.5 Sc_i - 1) \right] D_i;$$

где $D_i = 1 / \sum_j \gamma_j D_{ij}$, $Sc_i(T) = \mu_i / \rho_i D_{ii}$ – число Шмидта i -го компонента,

вычисленное по значениям коэффициента вязкости μ_i , плотности ρ_i и коэффициента самодиффузии D_{ii} этого компонента в чистом виде при температуре T .

Необходимые для вычислений коэффициентов переноса значения функций $d_{ij}(T)$ и $Sc_i(T)$ находятся по формулам [3]

$$d_{ij}(T) = 3.12 \cdot 10^5 \frac{\bar{\Omega}_{ij}^{(1.1)}(T) \sqrt{2M_i M_j}}{\sqrt{T(M_i + M_j)}}; \quad Sc_i(T) = \frac{5\bar{\Omega}_{ii}^{(1.1)}}{6\bar{\Omega}_{ii}^{(2.2)}};$$

$[d_{ij}] = \text{с} \cdot \text{м} / \text{кмоль}$, $[T] = ^\circ\text{K}$, $[M] = \text{кг} / \text{кмоль}$, $[\Omega] = \text{А}^2$.

Так называемые интегралы столкновений $\bar{\Omega}_{ij}^{(1.1)}(T)$, $\bar{\Omega}_{ij}^{(2.2)}(T)$ определяются на основе данных о потенциале упругого взаимодействия частиц при столкновении. В настоящей работе для расчета потенциалов взаимодействия компонентов используется простая интерполяционная зависимость вида

$$\bar{\Omega}_{ij}^{(1.1)}(T) = (a_{ij} + b_{ij} \ln T)^2,$$

в которой коэффициенты a_{ij} и b_{ij} находятся по заданным значениям интеграла столкновений при $T_1=300$ и $T_2=3000^\circ\text{K}$. Величины $\bar{\Omega}_{ij}^{(1.1)}(T_k)$, $k=1,2$, определяются на основе двухпараметрического потенциала Леннард-Джонса [3]. Значения параметров потенциалов для пар одноименных частиц заимствованы из известных литературных источников [4,5], параметры потенциалов взаимодействия разноименных частиц находятся по комбинаторным правилам [1]. При вычислении числа Шмидта $Sc_i(T)$ здесь для всех компонентов полагается $\bar{\Omega}_{ij}^{(2.2)}(T) = 1.1 \bar{\Omega}_{ij}^{(1.1)}(T)$.

Химические реакции. Согласно закону действующих масс [6] мольная скорость j -ой реакции

$$\sum_{i=1}^{\nu} \nu_{ji} A_i \Leftrightarrow \sum_{i=1}^{\nu} \nu'_{ji} A_i$$

где ν_{ij} , ν'_{ij} – стехиометрические коэффициенты, а A_i – символы химических веществ, определяется выражением

$$\bar{\omega}_j = \frac{1}{\nu'_{ji} - \nu_{ji}} \frac{d\rho_{\gamma_i}}{dt} = k_{f,j} \prod_i (\rho_{\gamma_i})^{\nu_{ji}} - k_{r,j} \prod_i (\rho_{\gamma_i})^{\nu'_{ji}}$$

в котором $k_{f,j}$ и $k_{r,j}$ – константы скорости реакции в прямом и обратном направлениях соответственно. По предположению отношение $k_{f,j}$ к $k_{r,j}$ равно константе равновесия реакции, зависящей от температуры и определяемой термодинамическими характеристиками компонентов, участвующих в реакции

$$k_{f,j} / k_{r,j} = K_{n,j}(T) = \prod_i (\rho_{\gamma_i})_{eq}^{\nu'_{ji} - \nu_{ji}}$$

поэтому для описания скорости реакции задается либо $k_{f,j}$, либо $k_{r,j}$. Константы скоростей реакций представляются в виде обобщенного закона Аррениуса $k = AT^n \exp(-E/T)$.

Константа равновесия реакции определяется через термодинамические и термохимические характеристики компонентов, участвующих в реакции, следующим образом [1]

$$K_n = (R_u T)^{r_j} \prod_i \exp(\Delta_j \tilde{\Phi}_i / R_u)$$

где $\tilde{\Phi}_i = \Phi_i^* - \frac{H_i(0)}{T}$, $\Delta_j \tilde{\Phi} = \sum_i (\nu'_{ji} - \nu_{ji}) \tilde{\Phi}_i$, $r_j = \sum_i (\nu_{ji} - \nu'_{ji})$. Мольная скорость

образования i -го компонента в j -ой реакции равна $\bar{\omega}_{ij} = (\nu'_{ji} - \nu_{ji}) \bar{\omega}_j$.

Суммируя по всем реакциям, получим мольную скорость образования i -го компонента в единице объема во всех химических реакциях.

Термохимическая модель реагирующей смеси ацетилен с воздухом. Газофазная модель включает следующие 16 компонентов: O, H, O₂, H₂, OH, CO, CO₂, NO₂, H₂O, CH₃, HCO, CH₂O, HCCO, C₂H₂, CH₂CO, N₂. Кинетическая схема включает 8 реакций диссоциации-рекомбинации и 33 обменных реакций. Значения констант скоростей реакций заимствованы, в основном, из работ [7-9].

2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ И МЕТОД ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ

Схема расчетов. Стехиометрическая ацетилено-воздушная смесь с исходным давлением P_0 и температурой T_0 в реакторе поджигается с помощью подвода тепла в небольшом объеме сферической формы радиуса, размещенного либо в центре сферы, либо на некотором расстоянии от него. Подвод тепла осуществляется в течение короткого промежутка времени. Расчет нестационарного течения в реакторе продолжается до установления с образованием во всем объеме химически равновесной газовой смеси с давлением p_{eq} , температурой T_{eq} и составом γ_{eq} .

Основные уравнения и граничные условия. Для принятой газофазной модели интегральная форма уравнений Навье-Стокса, описывающих

осесимметричное течение в цилиндрической системе координат (r, y, φ) , можно представить в виде

$$\frac{d}{dt} \int_S \mathbf{U} x dS + \int_{\delta S} \vec{n} \cdot \vec{\mathbf{F}} x dl = \int_S \Omega x dS$$

где S – фиксированная контрольная область в меридиональной плоскости ($x > 0, y$), δS – граница области, $\vec{n} = (n_x, n_y)$ – единичный вектор внешней нормали к δS , $\mathbf{U}$ – набор консервативных переменных в единице объема, $\vec{\mathbf{F}} = \vec{\mathbf{F}}^{inv} + \vec{\mathbf{F}}^{vis}$ представляет сумму невязких и вязких потоков вектора $\mathbf{U}$ через границу области и Ω состоит из источников членов. Для рассматриваемой газофазной модели эти векторы задаются так

$$\mathbf{U} = \{\rho\gamma_1, \dots, \rho\gamma_v, \rho u, \rho v, \rho E_0\}^T;$$

$$\vec{\mathbf{F}} = \left\{ \begin{array}{c} \rho \vec{u} \gamma_1 \\ \vdots \\ \rho \vec{u} \gamma_v \\ \rho \vec{u} u + p \vec{n} n_x \\ \rho \vec{u} v + p \vec{n} n_y \\ \rho \vec{u} H_0 \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} \vec{K}_1 \\ \vdots \\ \vec{K}_v \\ -\vec{\tau}_x \\ -\vec{\tau}_y \\ \vec{q}_h - u \vec{\tau}_x - v \vec{\tau}_y \end{array} \right\};$$

$$\Omega = \{\dot{\omega}_1, \dots, \dot{\omega}_v, 0, (p + \tau_{\varphi\varphi})/y, \dot{\omega}_h\}^T.$$

Здесь u, v – компоненты вектора скорости $\vec{u}$, $E_0 = E + 0.5(\vec{u} \cdot \vec{u})$ – полная энергия единицы массы, $H_0 = E_0 + p/\rho$ – полная энтальпия, $\vec{\tau}_x = (\tau_{xx}, \tau_{xy})$, $\vec{\tau}_y = (\tau_{yx}, \tau_{yy})$, $\tau_{xx}, \tau_{xy}, \tau_{yy}, \tau_{\varphi\varphi}$ – соответствующие компоненты тензора вязких напряжений $\hat{\tau}$ в цилиндрической системе координат, $\dot{\omega}_h$ – мощность теплового источника.

Предполагается, что поверхность реактора химически нейтральна и теплоизолирована. Вместе с условиями прилипания и непроницаемости поверхности граничные условия можно записать в виде

$$\rho u_n \gamma_i + \vec{K}_i \cdot \vec{n} = 0, \quad i = 1, \dots, v; \quad u_\tau = 0; \quad q = 0;$$

где u_τ , u_n – касательная и нормальная к поверхности составляющие скорости.

Численный метод. Приведенные выше уравнения решаются методом конечного объема на структурированной криволинейной сетке, ячейки которой построены пересечением двух наборов дискретных кривых. Система конечно-разностных уравнений состоит из разностных аналогов уравнений сохранения для четырехугольных ячеек, покрывающих расчетную область, и разностных аппроксимаций граничных условий. Этот метод позволяет приближенно определить значения искомой функции $\mathbf{Z} = \{p, u, v, T, \gamma_1, \dots, \gamma_v\}$ в центре каждой ячейки и в центре каждой стороны ячейки, лежащей на стенке.

Невязкие потоки через стороны ячейки $\mathbf{F}_G^{inv}$ вычисляются на основе точного решения задачи Римана о распаде произвольного разрыва $\mathbf{Z}_G = \mathcal{R}(\mathbf{Z}_G^L, \mathbf{Z}_G^R)$. Левые и правые граничные значения $\mathbf{Z}_G^L$ и $\mathbf{Z}_G^R$ находятся с помощью одномерной экстраполяции исходных переменных $\mathbf{Z}$ от центров ячеек к центрам их сторон. Аналогичным образом определяются невязкие потоки через границы, лежащие на

входе в резонатор и выходе из него. В первом случае полагается $Z_G^L = Z^*$, во втором случае $Z_G^R = Z_e$.

Значения вязких потоков через внутренние стороны ячеек F_G^{vis} определяются по центральным разностным формулам, а через стороны, лежащие на обтекаемой поверхности – по односторонним трехточечным формулам второго порядка точности.

Численное интегрирование уравнений по времени осуществлялось с помощью нескольких схем первого порядка точности: явной и неявной схемы Эйлера, полунеявной схемы и схемы суммарной аппроксимации. В случае неявной схемы решение разностных уравнений на каждом слое по времени проводится с помощью двухслойной неявной итерационной схем. Линейный неявный оператор итерационной схемы составляется из матриц Якоби от вязких и невязких потоков. Приближенное обращение оператора осуществляется с помощью блочного варианта метода последовательной релаксации Гаусса-Зейделя с применением векторных прогонок для решения уравнений блока. Сходимость итераций контролируется по относительному изменению на очередной итерации одного из параметров течения (чаще всего плотности). Шаг интегрирования по времени в случае неявной схемы на три порядка больше, чем для явной схемы.

3. ВОСПЛАМЕНЕНИЕ И РАСПРОСТРАНЕНИЕ ВОЛН ГОРЕНИЯ В АЦЕТИЛЕНО-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЯХ В ШАРОВОМ РЕАКТОРЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ УСТАНОВКИ

Целью выполненного исследования была разработка численной модели процесса воспламенения и горения ацетилено-воздушной смеси в сферическом реакторе (газогенераторе) экспериментальной установки НИИ механики МГУ и ее апробация на серии параметрических расчетов. Радиус реактора равен 0.143 м. Исходный состав топливной смеси в реакторе задается отношением мольной концентрации горючего к концентрации молекулярного кислорода $\alpha = \gamma_{C_2H_2} / \gamma_{O_2}$. Для стехиометрической смеси $\alpha = 2/5$. Воспламенение горючей смеси инициируется подводом тепла в сферической области, центр которой расположен на заданном расстоянии d_q от центра сферического реактора. Все расчеты выполнены в приближении симметрии течения относительно оси, проходящей через центры реактора и теплового источника. В случае, когда эти точки совпадают, постановка задачи имеет сферическую симметрию. В расчетах эта симметрия сохраняется до $t \approx 0.015$ с от начала теплоподвода. Затем появляются возмущения, разрушающие ее.

Расчеты проведены на сетке с числом ячеек 80x80. В меридиональной плоскости сетка образована пересечением двух семейств координатных линий в полярной системе координат с началом в центре теплового источника. В расчетах варьировались: суммарный теплоподвод Q , начальное давление в реакторе P_0 и расстояние от центра области теплоподвода до центра реактора d_q . Начальное значение температуры во всех вариантах $T_0 = 300$ К. Список вариантов приведен в таблице 1.

Электрический разряд имитировался локальным теплоподводом в близкой к сферической области радиуса ≈ 3 мм. Длительность разряда составляла 10 мкс. Подвод тепла приводил к повышению температуры ($T > 2500$ К) и повышению давления до 60% в области теплоподвода. Спустя 50–100 мкс давление

выравнивается и остается примерно постоянным в объеме. Однако сохраняющаяся неоднородность поля давления вызывает течения со скоростями до нескольких метров в секунду. Соответствующие конвективные потоки по порядку величины сопоставимы с диффузионными потоками.

Таблица 1.

Номер варианта	$d_q, м$	Q, J	$P_0, атм$
1	0	0.1	1
2	0	0.2	1
3	0	0.5	1
4	0	0.1	2
5	0	0.2	2
6	0	0.5	2
7	0.045	0.1	1
8	0.045	0.2	1
9	0.045	0.1	2

Во всех рассмотренных вариантах, кроме 4-го, подвод тепла приводил к поджигу горючей смеси с образованием узкого фронта горения, распространяющегося от источника энергоподвода к стенке реактора. В качестве иллюстрации на рис.1 показано распределение температуры и концентрации ацетилена в расчетной области для 5-го варианта расчетов при $t=100$ мс.

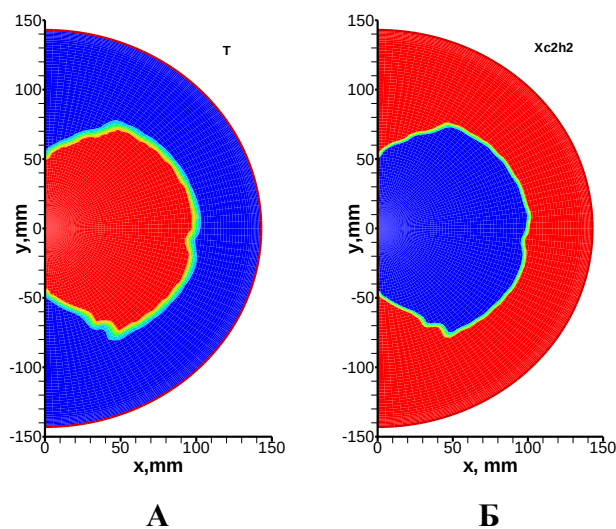


Рис.1. Конфигурация поля температуры (а) и концентрации ацетилена (б) при $t=100$ мс для 5-го варианта.

На рис.2а показана динамика давления в центре реактора для вариантов 1-3, 5 при различных значениях Q . Там же показана зависимость давления от времени, полученная из условия сохранения массы газа в реакторе в предположении, что нормальная скорость распространения пламени $V_f=1$ м/с, давление в реакторе постоянно по объему, а температура и состав газа в объеме за фронтом горения имеют равновесные значения. Получено (рис.2а), что величина энергоподвода в рассмотренных пределах оказывает сравнительно слабое влияние на скорость

распространения фронта горения. Сгорание всей топливной смеси в сферическом объеме радиуса 0.143 м при $P_0=1$ атм происходит примерно за 0.15 с, то есть средняя величина нормальной скорости распространения фронта горения близка к 1 м/с. При $P_0=2$ атм средняя скорость распространения фронта пламени несколько выше. Аналогичные результаты для вариантов 7-9 показаны на рис.2б.

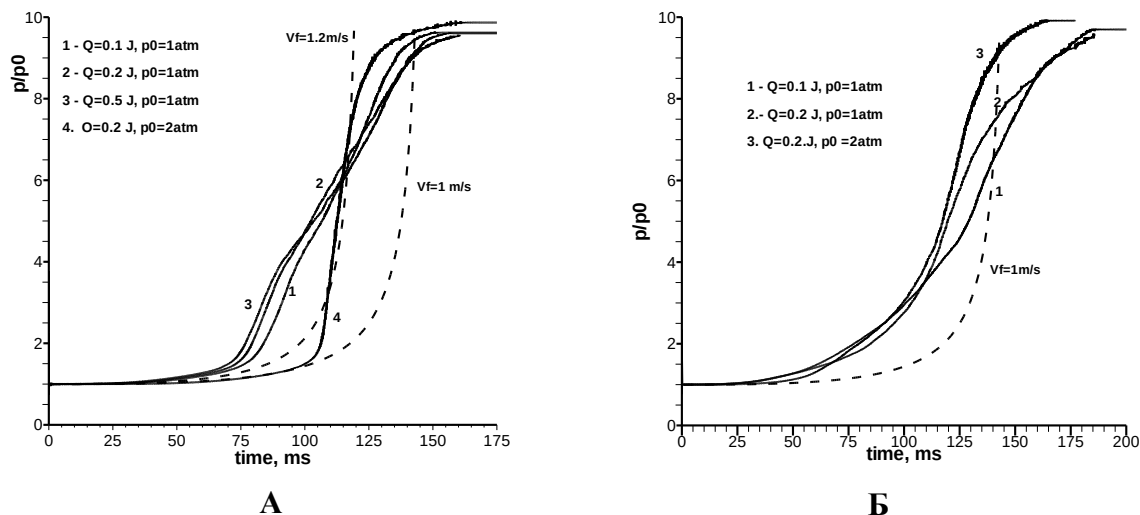


Рис.2. Динамика давления в центре области теплоподвода: а – для вариантов 1–3, 5 ($d_q=0$); б – для вариантов 7-9 ($d_q=0.045$ м).

4. РАСЧЕТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЯГОВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ОСЕСИММЕТРИЧНОЙ МОДЕЛИ ТЯГОВОГО МОДУЛЯ

В качестве продуваемого газа, использовался воздух комнатной температуры ($T^*=300^\circ\text{K}$) и высокотемпературные продукты сгорания стехиометрических ацетилено-воздушных смесей. Все расчеты выполнены для сверхзвуковой области течения в модели тягового модуля с условным диаметром выхлопа ДУ-70 мм. Указанная область включала:

- входное кольцевое сопло с высотой критического сечения $h=4.4$ мм;
- дефлектор с тяговой стенкой в форме сферического сегмента с радиусом 36 мм и высотой 22 мм. Диаметр основания сегмента равен при этом $d=66.4$ мм;
- выхлопное коническое сопло с полууглом раствора 45° и длиной 15 мм вдоль оси симметрии.

Границы расчетной области и распределение узлов разностной сетки для указанных геометрических параметров модели соплового устройства показаны на рис.3.

Значение суммарной тяги D и удельного импульса I_{y0} вычислялись по полученному в расчетах распределению давления вдоль поверхности тягового модуля

$$D = 2\pi \int_0^{s_n} (p_w - p_e) |x| n_y ds, \quad I_{y0} = D/gG.$$

Здесь p_w – давление на поверхности модуля, n_y – вертикальная составляющая вектора нормали к поверхности, s – расстояние, измеряемое вдоль контура

поверхности дефлектора от т. А (рис.3), – расстояние до кромки кольцевого сопла, G – суммарный массовый расход газа через сопло, g – ускорение свободного падения.

Во всех рассмотренных вариантах расчетов полагалось, что истечение воздуха или продуктов сгорания в полость дефлектора, заполненную неподвижным воздухом с параметрами $P_e=0,01$ атм, $T_e=300$ К начинается внезапно со скоростью на выходе из сопла, равной скорости звука. Анализ численных результатов развития процесса позволил выделить две его стадии.

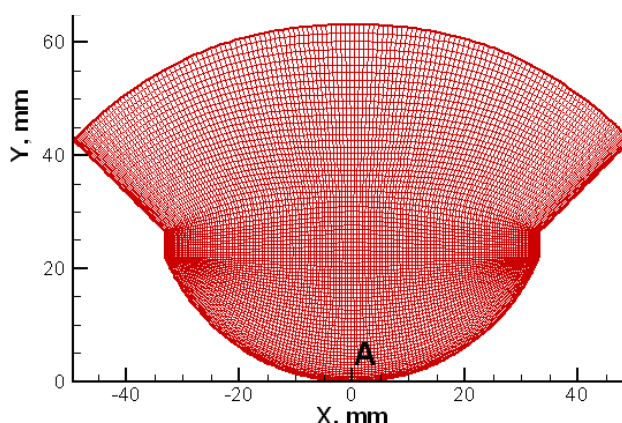


Рис.3. Расчетная область и сетка.

Начальная стадия характеризуется коротким временем и сильными колебаниями характеристик течения. С течением времени амплитуда колебаний уменьшается. Время установления зависит от параметров задачи и составляет более 2 мс. Наиболее интенсивные колебания давления испытывает в донной области дефлектора (т.А, рис.3). Как показали расчёты, амплитуда колебаний давления в других точках на поверхности тяговой стенки существенно ниже. В т.А на тяговой стенке в ходе запуска сопла на временной оси выделяется один острый локальный максимум давления.

Итоговые результаты выполненного расчётного моделирования стационарных значений тяги D , удельного импульса I_{y0} и давления $P(A)$ в донной области в центре тяговой стенки при истечении продуктов сгорания или воздуха в пространство с противодавлением $P_e=0.01$ атм приведены в таблице 2. Здесь же указаны значения величины острого локального максимума давления $P_{max}(A)$, в т.А на тяговой стенке в ходе процесса нестационарного запуска кольцевого сопла и время его достижения t_{max} . Табличные значения расчетных параметров приводятся в виде дроби. Ее числитель соответствует результатам расчетов характеристик тягового модуля, продуваемого высокотемпературными продуктами сгорания стехиометрических ацетилено-воздушных смесей, а знаменатель – для продувок модуля воздухом. Как видно в рассмотренных условиях расчетные значения силы тяги D и давления в центре тяговой стенки растут с увеличением давления торможения P_t , а удельный импульс I_{y0} остается практически постоянным.

Таблица 2.

№ вар.	P_t , атм	D , Н	I_{y0} , сек	$P(A)$, атм	$P_{max}(A)$, атм	t_{max} , мкс
1	4.81/4.8	612.36/600.60	193.70/5674	2.89/2,34	36.2/22.14	20/59.74
2	9.77/9.8	1245.58/1239.51	195.62/5731	6.14/6.63	36.4/44.01	18/53.09

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе уравнений Навье-Стокса разработана математическая модель газовой среды для проведения численного исследования воспламенения и горения ацетилено-воздушной смеси в камере сгорания шаровой формы экспериментальной установки и моделирования продувок тягового модуля воздухом комнатной температуры и высокотемпературными продуктами сгорания стехиометрической ацетилено-воздушной смеси.

На основе вычислительного комплекса HighTemp проведена серия тестовых расчетов воспламенения газа и последующего распространения фронта горения по объему реактора в осесимметричном приближении. Для ряда начальных условий получены данные по динамике параметров поля течения в реакторе от момента воспламенения до полного сгорания топливной смеси. Отмечена значительная зависимость количественных результатов расчетов от выбора разностной сетки, в связи с чем требуются дополнительные исследования по анализу механизма распространения фронта горения в предложенной численной модели.

Выполнено расчетное моделирование тяговых характеристик осесимметричной модели тягового модуля с условным диаметром выхлопа ДУ-70 мм, продуваемой воздухом комнатной температуры и высокотемпературными продуктами сгорания ацетилено-воздушных смесей, для значений критического сечения кольцевого сопла 4.4 мм при различных давлениях торможения на входе модели. Установлено, что при изменении давления торможения в пределах 4.8–9.8 атм расчетные значения силы тяги и давления в центре тяговой стенки растут с увеличением давления на входе тягового модуля, а удельный импульс остается практически постоянным.

ЛИТЕРАТУРА

1. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. / Под редакцией В.П. Глушко. – М.: Наука, 1982. – Т.4. – Кн.2. – 559 с.
2. THERMODYNAMIC DATA / CHEMKIN Collection 3.7.1.
3. Гирифельдер Д., Кертис Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. – М.: Издательство иностранной литературы, 1961. – 933 с.
4. Reid R.C., Prausnitz J.M., Sherwood T.K. The properties of gases and liquids. – New York: Mc. Graw-Hill Book Company, 1977. – 590 p.
5. Svehla R.A. Thermodynamic and Transport Properties of the Hydrogen and Oxygen System // NASA SP-3011, 1964. – 421 p.
6. Кондратьев В.Н. Кинетика химических газовых реакций. – М.: Изд-во АН СССР, 1958. – 687 с.
7. Варнатц Ю., Маас У., Дибба Р. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. – М.: Физматлит, 2003. – 351 с.
8. Edelman R.B., Harsha P.T. Laminar and Turbulent Gas Dynamics in Combustors – Current Status // Progress in Energy and Combustion Science. – 1978. – Vol.4. – N1. – P.1–62.
9. Wang T.S., Farmer R.C., Edelman R.B. Turbulent Combustion Kinetics for Complex Hydrocarbon Fuels // AIAA. – 1988. – Paper 88-0733.

СТАБИЛИЗАЦИЯ ДЕТОНАЦИИ В СВЕРХЗВУКОВОМ ПОТОКЕ ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ В ПЛОСКИХ КАНАЛАХ*

Левин В.А.¹, Журавская Т.А.²

¹*Дальневосточный федеральный университет, г. Владивосток, Россия*

²*НИИ механики МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия*

РЕЗЮМЕ

В рамках детальной кинетики химического взаимодействия численно изучены особенности распространения детонационной волны в сверхзвуковом потоке стехиометрической водородно-воздушной смеси в плоских каналах различной формы с целью определения условий, обеспечивающих стабилизацию детонации в потоке.

Исследована стабилизация сформированной ячеистой детонационной волны в сверхзвуковом потоке горючей газовой смеси в плоском канале с параллельными стенками с помощью слабых дополнительных разрядов. Определены условия, обеспечивающие стабилизацию ячеистой детонации дополнительным энергоподводом. Исследовано влияние числа Маха потока, энергии дополнительных разрядов и их локализации на процесс стабилизации ячеистой волны детонационного горения.

Рассмотрена стабилизация без дополнительного энергоподвода сформированной детонационной волны в потоке стехиометрической водородно-воздушной смеси, поступающей со сверхзвуковой скоростью в плоский канал переменного сечения.

1. ВВЕДЕНИЕ

Актуальность исследования особенностей распространения детонационной волны в сверхзвуковом потоке горючей газовой смеси, в частности, определения условий, обеспечивающих стабилизацию детонационного горения в потоке, обусловлена желанием использовать детонационные волны в различных энергетических установках. В работах [1-3] было показано, что одним из возможных механизмов, стабилизирующих детонацию, является дополнительный энергоподвод слабыми разрядами. Разряды усиливают движущийся против потока передний ударный фронт и, тем самым, препятствуют сносу детонации. Однако определенный интерес представляет возможность стабилизации детонационной волны без дополнительного энергоподвода. В [1] в рамках квазиодномерного приближения проведено исследование распространения детонации в пропано-воздушной смеси в каналах, состоящих из звеньев постоянного сечения и расширяющихся (или сужающихся) по линейному закону, с целью определения условий стабилизации детонации. В [4-6] представлены результаты детального исследования условий формирования стационарной детонационной волны в сверхзвуковых потоках водородосодержащих смесей в осесимметричном сопле. Подробно исследовано формирование стационарной детонации в плоских каналах с клиновидной частью для различных чисел Маха входящего потока и различных значений угла раствора клина [7,8]. Определен механизм управления положением стационарной детонационной волны в клиновидном канале с помощью резонансного лазерного излучения [9].

* Работа поддержана РФФИ (№ 11-01-00068а), Министерством образования и науки РФ (НИИ – 5911.2012.1), программой Президиума РАН. Работа выполнена с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М.В.Ломоносова.

Продолжая начатое ранее исследование [1-3], в представленной работе изучена возможность стабилизации сформированной ячеистой детонационной волны в сверхзвуковом потоке стехиометрической водородно-воздушной смеси в плоском канале с параллельными стенками с помощью слабых дополнительных разрядов. Кроме того, рассмотрена стабилизация без дополнительного энергоподвода сформированной детонационной волны в потоке стехиометрической водородно-воздушной смеси, поступающей со сверхзвуковой скоростью в плоский канал переменного сечения.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Исследуется распространение детонационной волны в потоке стехиометрической водородно-воздушной смеси, поступающей со сверхзвуковой скоростью в плоский канал постоянного или переменного сечения. Параметры газовой смеси на входе в канал имеют следующие значения: $p_0=1$ атм, $T_0=298^\circ\text{K}$, $M_0 > M_{J0}$, смесь движется вдоль плоскости симметрии канала. Здесь p_0 , T_0 , M_0 – давление, температура и число Маха потока, M_{J0} – число Маха самоподдерживающейся детонационной волны, распространяющейся по покоящейся стехиометрической водородно-воздушной смеси с параметрами p_0 , T_0 . Поступающая в канал горючая смесь рассматривается как смесь газов H_2 , O_2 , N_2 и Ar в объемном соотношении 42:21:78:1.

Для инициирования детонации используется мгновенный подвод сверхкритической (достаточной для прямого инициирования детонации) энергии E_0 в области, имеющей форму тонкого слоя толщины h . Плотность энергоподвода E_V зависит от поперечной координаты y ($y=0$ соответствует плоскости симметрии канала) по гауссовскому закону

$$E_V(y) = A_0 \exp\left(-\frac{y^2}{r_0^2}\right), \quad \text{где} \quad A_0: E_0 = 2hA_0 \int_0^l \exp\left(-\frac{y^2}{r_0^2}\right) dy$$

Здесь l – половина ширины канала в области подвода энергии, $r_0 = h/2$.

Система уравнений, описывающих плоское двумерное нестационарное течение невязкой многокомпонентной газовой смеси, имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(u\rho)}{\partial x} + \frac{\partial(v\rho)}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho vu)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v^2 + p)}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho(u^2 + v^2)/2 + \rho h - p)}{\partial t} + \frac{\partial(u\rho((u^2 + v^2)/2 + h))}{\partial x} + \frac{\partial(v\rho((u^2 + v^2)/2 + h))}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho n_i)}{\partial t} + \frac{\partial(u\rho n_i)}{\partial x} + \frac{\partial(v\rho n_i)}{\partial y} &= \rho \omega_i \end{aligned}$$

Здесь x и y – продольная и поперечная декартовы координаты; u и v – соответствующие компоненты скорости; t – время; ρ , p и h – плотность, давление и энтальпия газа; n_i и ω_i – удельная концентрация и скорость образования i -го компонента смеси.

В качестве уравнений состояния горючей смеси, рассматриваемой как совершенный газ, используются соотношения

$$p = \rho R_0 T \sum_i n_i, \quad h = \sum_i n_i h_i(T).$$

Здесь T – температура, R_0 – универсальная газовая постоянная. Зависимости парциальных энтальпий от температуры $h_i(T)$ получены путем аппроксимации табличных значений [10].

В силу симметрии поставленной задачи численно исследуется течение в верхней половине канала. Граничное условие на стенке канала – условие непротекания; на плоскости симметрии $y=0$: $v(x, y)|_{y=0} = 0$. Граничное условие в выходном сечении канала необходимо лишь в случае, когда нормальная к границе составляющая скорости меньше местной скорости звука (т.е. $M_{out} < 1$). В этом случае задается значение давления на выходе p_{out} : $p_{out} = p_0$.

Решение уравнений газовой динамики совместно с уравнениями детальной химической кинетики [10] (в случае плоского канала с параллельными стенками) или [11] (в случае канала переменного сечения) было проведено конечно-разностным методом, основанным на схеме С.К.Годунова [12].

3. СТАБИЛИЗАЦИЯ ЯЧЕИСТОЙ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ В ПЛОСКОМ КАНАЛЕ С ПАРАЛЛЕЛЬНЫМИ СТЕНКАМИ

Продолжая начатое ранее исследование, результаты которого представлены в [1-3], изучена возможность стабилизации сформированной ячеистой детонационной волны в плоском канале с параллельными стенками с помощью слабых дополнительных разрядов, расположенных на большом расстоянии от места инициирования детонации, при числах Маха входящего потока M_0 , существенно превосходящих M_{J0} .

Схема расположения областей энергоподвода в канале представлена на рис.1 (изображена часть канала, расположенная выше плоскости симметрии).

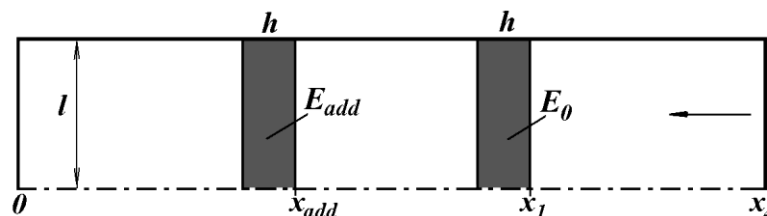


Рис.1. Схема расположения областей энергоподвода в плоском канале с параллельными стенками

Стехиометрическая водородно-воздушная смесь при нормальных условиях втекает в канал через границу $x = x_4$ (направление движение газа обозначено стрелкой, рис.1)

и вытекает через границу $x=0$. Начальным условием для определения течения в канале являются параметры входящего потока. В результате энергоподвода E_0 в канале формируются две детонационных волны: одна распространяется по потоку и быстро сносится им за пределы канала, а вторая – против. В силу того, что скорость потока превышает скорость распространения самоподдерживающейся волны детонации, движущаяся против потока волна, при отсутствии дополнительных возмущений, сносится потоком. Для стабилизации рассматриваемой волны используются мгновенные слабые дополнительные разряды, область энергоподвода которых расположена ниже по потоку от места инициирования детонации и представляет собой тонкий слой толщины h . Положение области дополнительных разрядов, определяемое величиной L ($L = x_1 - x_{add}$), выбиралось так, чтобы к разрядам подходила сформировавшаяся ячеистая детонационная волна. Дополнительные разряды подводят энергию E_{add} ($E_{add} = \alpha E_0$, где $\alpha \ll 1$), плотность энергоподвода разрядов зависит от поперечной координаты по гауссовскому закону (аналогично работам [2,3]). Подвод энергии E_{add} дополнительным разрядом происходит в тот момент, когда фронт детонационной волны на плоскости симметрии канала ($y=0$) сносится потоком до середины области дополнительных разрядов. Энергоподвод усиливает детонационную волну, препятствуя тем самым ее сносу потоком. Однако скорость волны постепенно падает и волна снова перемещается потоком к середине области дополнительного энергоподвода, что приводит к «срабатыванию» следующего разряда (выделению энергии E_{add}) и т.д. Численное исследование возможности стабилизации в канале ширины $2l$ детонационной волны, инициируемой сверхкритическим энергоподводом E_0 в слое толщины h , проведено для различных значений числа Маха входящего потока M_0 и различных положений области дополнительных разрядов L .

Расчеты показали, что при фиксированных значениях M_0 и L существует критическое значение α^* , определяющее критическое значение энергии дополнительных разрядов E_{add}^* : $E_{add}^* = \alpha^* E_0$, такое, что при $E_{add} < E_{add}^*$ описанный выше механизм не приводит к стабилизации детонационной волны в потоке. В этом случае после энергоподвода очередным разрядом усиление лидирующего фронта оказывается недостаточным для перемещения волны в часть канала, расположенную выше по потоку середины области дополнительного энергоподвода. Это делает невозможным дальнейшее «срабатывание» разрядов и детонационная волна сносится потоком. Расчеты показали, что разрушенная дополнительным энергоподводом ячеистая структура детонационной волны после прекращения воздействия разрядов восстанавливается с течением времени (рис.2). Факт восстановления ячеистой структуры детонации даже после достаточно сильного, но не разрушающего детонационный режим горения возмущения, был установлен ранее в работах [14,15].

Расчеты показали, что при фиксированном значении числа Маха потока M_0 критическое значение α^* слабо зависит от L . При этом, увеличение M_0 приводит к существенному росту α^* .

В случае сверхкритического дополнительного энергоподвода (при $\alpha > \alpha^*$), т.е. при стабилизации детонационного горения в потоке дополнительными разрядами, с

течением времени волна детонации выходит на стационарный пульсирующий режим. Форма фронта стабилизированной детонации слабо зависит от L , α и определяется, главным образом, числом Маха потока. Так, было установлено, что с увеличением M_0 фронт волны больше «вытягивается» по потоку, при этом область фронта, представляющая собой прямой детонационный скачок, уменьшается (рис.3).

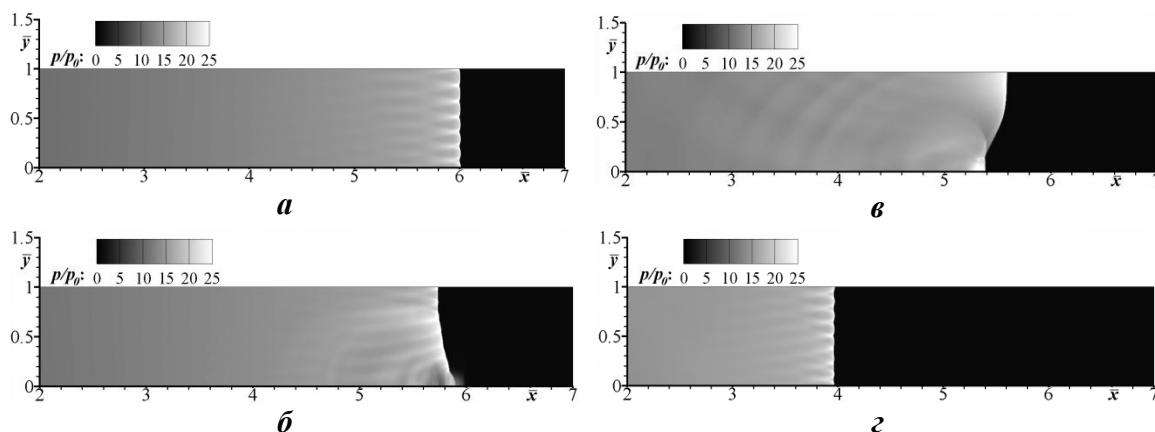


Рис.2. Снос детонационной волны (ДВ) потоком в случае докритического дополнительного энергоподвода ($\alpha=0.007$) при $M_0=5.5$, $L/l=4$: а – ДВ до воздействия дополнительных разрядов ($t=0.060$ мс), б – ДВ во время дополнительного энергоподвода ($t=0.065$ мс), в – видоизмененная структура ДВ после взаимодействия с разрядами ($t=0.070$ мс); г – восстановление ячеистой структуры детонации ($t=0.100$ мс). Здесь и далее $\bar{x} = x/l$, $\bar{y} = y/l$.

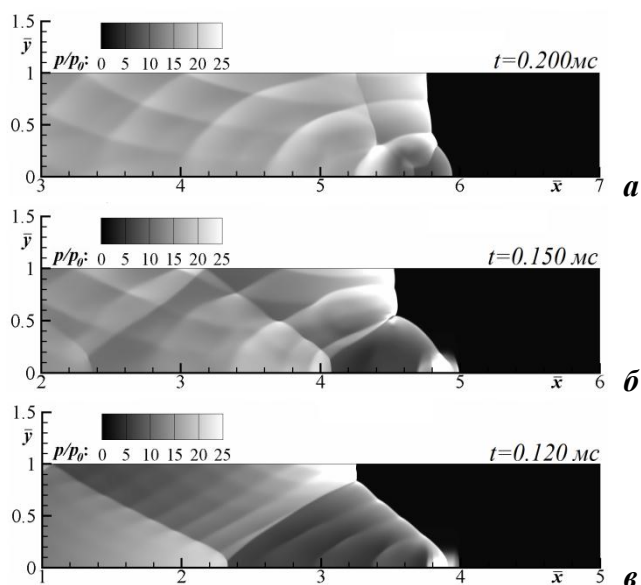


Рис.3. Стабилизация ячеистой детонационной волны слабыми дополнительными разрядами при $\alpha=0.1$: а – $M_0=5.2$, $L/l=4$ ($x_{add}/l=6$); б – $M_0=5.5$, $L/l=5$ ($x_{add}/l=5$); в – $M_0=6.0$, $L/l=6$ ($x_{add}/l=4$).

Проведенное исследование влияния числа Маха потока, энергии дополнительных разрядов и их локализации на процесс стабилизации детонационной волны показало, что при увеличении энергии стабилизирующих

разрядов ($\alpha : \alpha > \alpha^*$) или уменьшении числа Маха потока M_0 при прочих равных условиях частота дополнительного энергоподвода, поддерживающего детонацию в стационарном режиме, уменьшается.

4. ФОРМИРОВАНИЕ СТАЦИОНАРНОЙ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ В ПЛОСКИХ КАНАЛАХ ПЕРЕМЕННОГО СЕЧЕНИЯ

Исследовано распространение детонации в плоском симметричном канале с гладко меняющейся площадью поперечного сечения (схема части канала, выше плоскости симметрии, представлена на рис.4а). Стехиометрическая водородно-воздушная смесь при нормальных условиях втекает в канал через границу $x = x_4$ (направление движения газа обозначено стрелкой, рис.4а) и вытекает через границу $x = 0$. Форма границы канала в областях расширения в направлении потока ($[x_1, x_2]$) и сужения ($[x_2, x_3]$) определяется многочленами третьей степени, обеспечивающими гладкое изменение площади поперечного сечения. Начальное условие для решения поставленной задачи – стационарное сверхзвуковое плоское двумерное течение газовой смеси в рассматриваемом канале без учета химического взаимодействия, полученное методом установления. Область энергоподвода, инициирующего детонацию, расположена около сечения $x = x_1$ (затемненная область, рис.4а). В результате выделения энергии образуются две детонационные волны: одна распространяется по потоку и быстро сносится им за пределы канала, вторая – против потока. Особенности распространения этой волны и были исследованы в работе.

Расчеты, результаты которых обсуждаются ниже, проведены при следующих значениях геометрических параметров канала: $l = 0.025\text{м}$, $x_1/l = 5$, $x_2/l = 10$, $x_3/l = 15$, $x_4/l = 20$ и ширине области энергоподвода $h = 0.005\text{м}$.

Подробно исследовано распространение волны детонации при $M_0 = 5.2$ и различных значениях l_2/l и l_3/l , определяющих конфигурацию канала. Заметим, что при распространении детонации в канале с параллельными стенками ($l_2/l = l_3/l = 1$) при указанном значении числа Маха детонационная волна сносится потоком, так как $M_0 > M_{j0}$. Однако переменная площадь поперечного сечения канала делает возможным реализацию различных режимов распространения детонации (рис.4б). Так, в случае $l_2/l = 1$ и $l_3/l \leq 1.3$ детонационная волна сносится потоком. Однако увеличение l_3/l или уменьшение l_2/l приводит к стабилизации детонации либо в части канала с параллельными стенками около выходного сечения, либо в расширяющейся (в направлении потока) части канала (рис.4в). Расчеты показали, что увеличение l_3/l приводит к тому, что детонационная волна не стабилизируется, а проходит против потока через весь канал (рис.4г).

Исследование влияния числа Маха входящего потока на распространение детонации в канале показало, что увеличение M_0 при прочих равных условиях препятствует прохождению детонационной волны по каналу (рис.4д).

В случае больших значений числа Маха входящего потока было рассмотрено распространение детонации в плоском симметричном канале с двухступенчатым сужением в направлении потока. Схема части канала, выше плоскости симметрии,

представлена на рис.5а. Исследовано влияние величины промежуточного сужения канала l_{23} на формирующееся течение при $x_{34}/l=17.5$, $l_2/l=0.7$, $l_3/l=2.0$.

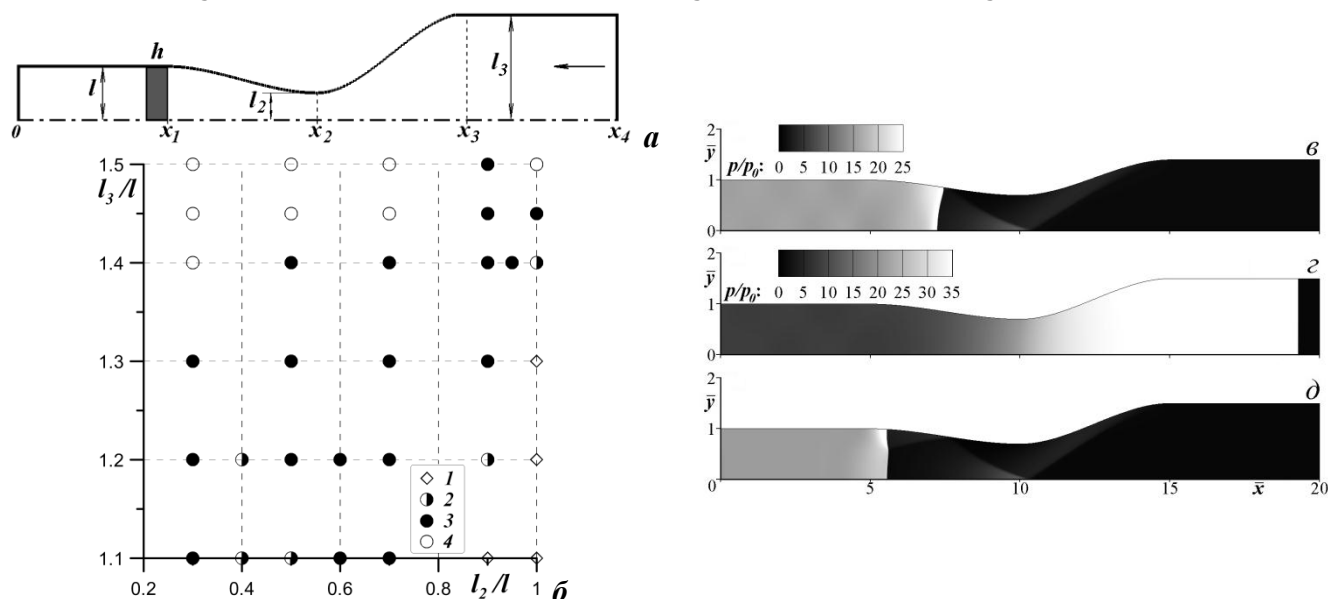


Рис.4. Распространение ДВ в канале переменного сечения: *а* – схема канала; *б* – режимы распространения ДВ при $M_0=5.2$ (1 – ДВ сносится потоком; 2 – ДВ стабилизируется около выходного сечения; 3 – ДВ стабилизируется в расширяющейся части канала; 4 – ДВ проходит по каналу против потока); *в* – стабилизация детонации в расширяющейся части канала при $M_0=5.2$, $l_2/l=0.7$, $l_3/l=1.4$; *г* – ДВ проходит по каналу против потока при $M_0=5.2$, $l_2/l=0.7$, $l_3/l=1.5$ ($t=2.195\text{мс}$); *д* – стабилизация ДВ в расширяющейся части канала при $M_0=5.5$, $l_2/l=0.7$, $l_3/l=1.5$.

Установлено, что наличие двухступенчатого сужения в ряде случаев способствует формированию стационарной детонационной волны в части канала с переменной площадью поперечного сечения. Так, при $M_0=6$ и 7 в отсутствие промежуточного сужения детонационная волна стабилизируется в части канала около выходного сечения. В результате численного исследования было установлено, что в случае $M_0=6$ существуют такие значения l_{23} , что детонационная волна стабилизируется в расширяющейся (в направлении потока) части канала (рис.5б).

В результате проведенных исследований течения при $M_0=7$ установлено, что существуют такие значения l_{23} , что детонационный режим горения возникает без энергоподвода за косыми скачками вблизи минимального сечения канала. Иницирование детонации становится возможным благодаря формированию в стационарном решении областей с высокими параметрами газовой смеси. В результате в сужающейся части канала формируется стационарная детонационная волна с сопутствующим ударным фронтом за ней (рис.5в).

Следует отметить, что формирующаяся в сужающейся части канала стационарная детонационная волна представляет собой устойчивую к малым возмущениям структуру, что не противоречит установленной в работе [16] неустойчивости одномерной детонации в сужающейся части канала, поскольку исследуемое течение является существенно неодномерным.

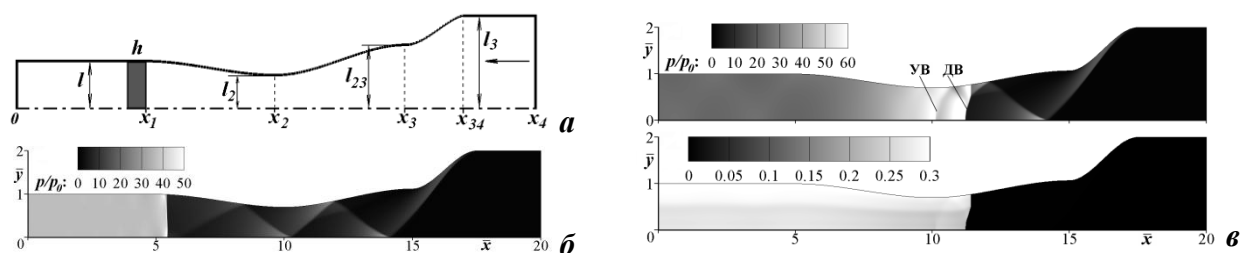


Рис.5. Формирование стационарной ДВ в канале с двухступенчатым сужением: **а** – схема канала; **б** – формирование стационарной ДВ при $M_0=6$, $l_{23}/l=1.123$; **в** – поля давления и молярной доли воды, иллюстрирующие формирование без энергоподвода стационарной ДВ при $M_0=7$, $l_{23}/l=1.069$.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С использованием детальной кинетики химического взаимодействия численно изучены особенности распространения детонационной волны в сверхзвуковом потоке стехиометрической водородно-воздушной смеси в плоских каналах различной формы с целью определения условий, обеспечивающих стабилизацию детонации в потоке.

Установлена возможность стабилизации ячеистой волны детонации слабыми дополнительными разрядами в сверхзвуковом потоке в плоском канале с параллельными стенками.

Исследовано формирование стационарной детонации без дополнительного энергоподвода в потоке горючей газовой смеси, поступающей со сверхзвуковой скоростью в плоский канал переменного сечения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Левин В.А., Марков В.В., Журавская Т.А., Осинкин С.Ф. Инициирование, распространение и стабилизация детонационных волн в сверхзвуковом потоке / Проблемы современной механики. К 85-летию со дня рождения академика Г.Г.Черного. М.: Изд-во МГУ; Изд-во «Омега-Л», 2008. – С.240-259.
2. Журавская Т.А., Левин В.А. Исследование некоторых способов стабилизации детонационной волны в сверхзвуковом потоке // МЖГ. – 2012. – №6. – С.126-136.
3. Levin V.A., Zhuravskaya T.A. Stabilization of Detonation Combustion in a Supersonic Gas Flow in Plane Channels / Nonequilibrium Processes in Plasma, Combustion, and Atmosphere. – М.: TORUS PRESS, 2012. – P.367-374.
4. Туник Ю.В. Стабилизация детонационного горения в высокоскоростном потоке водород-кислородной смеси // Изв. РАН. МЖГ. – 2008. – №6. – С.130-135.
5. Туник Ю.В. Численное моделирование детонационного горения водородовоздушных смесей в сопле Лавала // Изв. РАН. МЖГ. – 2010. – №2. – С.107-114.
6. Туник Ю.В. Устойчивость детонационного горения к изменению концентрации водорода на входе в сверхзвуковое сопло // Изв. РАН. МЖГ. – 2011. – №1. – С.143-150.

7. Trotsyuk A.V., Kudryavtsev A.N., Ivanov M.S. Numerical investigations of detonation waves in supersonic steady flows / Pulse and Continuous Detonation Propulsion. – М.: TORUS PRESS, 2006. – P.125-138.
8. Fan H.Y., Lu F.K. Numerical modelling of oblique shock and detonation wave induced in a wedged channel // J. Aerospace Engng. – 2008. – Vol.222. – №5. – P.687-703.
9. Безгин Л.В., Копченков В.И., Старик А.М., Титова Н.С. Инициирование детонационной волны при обтекании клина сверхзвуковым потоком водородно-кислородной смеси резонансным лазерным излучением // ЖТФ. – 2007. – Т.77. – Вып.1. – С.42-49.
10. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. / Под ред. Глушко В.П. и др. – М.: Наука, 1978. – Т.1. – 495 с.
11. Попов Н.А. Влияние неравновесного возбуждения на воспламенение водород-кислородных смесей // ТВТ. – 2007. – Т.45. – №2. – С.296-315.
12. Maas U., Warnatz J. Ignition processes in hydrogen-oxygen mixtures // Combust. and Flame. – 1988. – Vol.74. – №1. – P.53-69.
13. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я. и др. Численное решение многомерных задач газовой динамики. – М.: Наука, 1976. – 400 с.
14. Levin V.A., Markov V.V., Zhuravskaya T.A., Osinkin S.F. Influence of Obstacles on Detonation Wave Propagation / Pulsed and Continuous Detonations – М.: TORUS PRESS, 2006. – P.176-180.
15. Журавская Т.А. Распространение волн детонации в плоских каналах с препятствиями // МЖГ. – 2007. – №6. – С.135-143.
16. Левин В.А., Мануйлович И.С., Марков В.В. Возбуждение и срыв детонации в газах // ИФЖ. – 2010. – Т.83. – №6. – С.1174-1201.
17. Воеводин Вл.В., Жуматий С.А., Соболев С.И., Антонов А.С., Брызгалов П.А., Никитенко Д.А., Стефанов К.С., Воеводин Вад.В. Практика суперкомпьютера "Ломоносов" / Открытые системы. – М.: Издательский дом "Открытые системы", 2012. – 77 с.

ЯЧЕИСТАЯ ДЕТОНАЦИЯ В ТРЕХМЕРНЫХ КАНАЛАХ И ОТКРЫТОМ ПРОСТРАНСТВЕ*

Левин В.А.¹, Мануйлович И.С.², Марков В.В.²

¹Дальневосточный федеральный университет, г. Владивосток, Россия

²НИИ механики МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

В работе представлены результаты численного моделирования спонтанного формирования двумерной и трехмерной ячеистой структуры детонации в стехиометрической пропановоздушной смеси при прямом инициировании. Исследование проводится в рамках одностадийной кинетики горения численным методом, основанным на схеме С.К. Годунова. Рассмотрены двумерные течения в каналах различной конфигурации: постоянного сечения, в том числе с криволинейными стенками, переменного сечения с расширениями, сужениями и изломами боковых стенок, а также при распространении расходящейся цилиндрической волны детонации. В последнем случае показано хорошее соответствие расчетов с экспериментами Р.И. Солоухина [1].

Представлены и обсуждаются результаты инициирования трехмерной детонации: в канале постоянного квадратного, прямоугольного, круглого и эллиптического сечения. Во всех случаях канал с одного конца закрыт плоской твердой стенкой, а его внутреннее пространство заполнено однородной стехиометрической пропановоздушной смесью при комнатных условиях. В начальный момент времени к зоне ширины 3 см вблизи закрытого конца мгновенно подводится энергия, достаточная для инициирования детонации. На начальной фазе течение не зависит от поперечных координат, но в силу неустойчивости детонация приобретает трехмерную ячеистую структуру. Получены детальные картины развития процессов с использованием численных шлирен-диаграмм и анимаций газодинамических параметров. Расчеты трехмерной ячеистой детонации в трубах различного сечения проведены на суперкомпьютере МГУ «Ломоносов».

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время важным показателем качества численного моделирования процессов в химически активных смесях является способность воспроизведения ячеистой структуры течения за волной детонации. Ячеистая детонация представляет собой сложный, не до конца изученный процесс, связанный с неустойчивостью зоны горения за головным скачком уплотнения, из-за которой малые возмущения растут, и благодаря сильной нелинейности процесса формируется пространственное течение с поперечными волнами в потоке за головным скачком и с изломами его фронта [2]. При этом тройные точки в местах изломов фронта двумерной детонационной волны оставляют за собой следы в виде ромбовидных ячеек, которые фиксируются в экспериментах на закопченной пластине, а при численном моделировании как точки максимумов давления в расчетной области.

Ранее различными авторами проводились теоретические исследования формирования и распространения двумерной ячеистой детонации в основном в каналах постоянного поперечного сечения. Но особый интерес представляют течения с расходящимися детонационными волнами, особенности которых детально

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 11-01-00068, 11-01-12043-офи, 12-01-90416-Укр_а), Совета по грантам Президента РФ (НШ 8424.2010.1), Программ фундаментальных исследований Президиума РАН.

изучал экспериментально Р.И.Солоухин [2]. Численное исследование ячеистой расходящейся детонации представляет собой трудоемкую задачу из-за необходимости проведения расчетов в области большого размера с разрешением узких зон химических реакций.

Еще более трудоемкой является задача моделирования трехмерной ячеистой детонации ввиду необходимости использования огромного числа расчетных ячеек. В данном случае провести расчеты за разумное время можно только на суперкомпьютерах с производительностью не менее нескольких сотен терафлопс. Представляет интерес исследовать трехмерную ячеистую детонацию, как в свободном пространстве, так и в каналах различного поперечного сечения. В связи с большими техническими трудностями при численном моделировании к настоящему времени отсутствуют серьезные комплексные исследования трехмерной структуры детонации. Кроме этого, до сих пор не осуществлен и не обоснован предельный переход от трехмерной ячеистой структуры к двумерной.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

Для описания газодинамических течений используется система уравнений Эйлера для идеальной многокомпонентной реагирующей смеси в неподвижной декартовой системе координат. В случае двумерных плоских течений уравнения имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_i v)}{\partial y} &= \omega_i, \quad \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(p + \rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(p + \rho v^2)}{\partial y} &= 0, \quad \frac{\partial(H - p)}{\partial t} + \frac{\partial(Hu)}{\partial x} + \frac{\partial(Hv)}{\partial y} = 0, \\ H &= \sum_{i=1}^N \rho_i h_i + \rho \frac{u^2 + v^2}{2} = 0, \quad \rho = \sum_{i=1}^N \rho_i. \end{aligned}$$

Здесь p , ρ – давление и плотность смеси, u и v – компоненты скорости вдоль осей x и y соответственно, N – число компонентов смеси, ρ_i и h_i – плотность и энтальпия i -го компонента, ω_i – скорость изменения ρ_i при химических реакциях, H – полная энтальпия.

Уравнения состояния смеси имеют вид

$$p = \sum_{i=1}^N (\rho_i / \mu_i) R_0 T, \quad h_i = c_{0i} + c_{pi} T, \quad i=1, \dots, N,$$

где T – температура смеси, μ_i – молярные массы компонентов, R_0 – универсальная газовая постоянная, а c_{0i} , c_{pi} – постоянные коэффициенты, полученные аппроксимацией табличных значений.

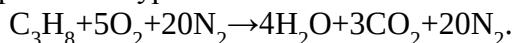
Нестационарные трехмерные течения описываются системой уравнений

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_i v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho_i w)}{\partial z} &= \omega_i, \quad \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(p + \rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial z} = 0, \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(p + \rho v^2)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial z} &= 0, \quad \frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial y} + \frac{\partial(p + \rho w^2)}{\partial z} = 0, \\ \frac{\partial(H - p)}{\partial t} + \frac{\partial(Hu)}{\partial x} + \frac{\partial(Hv)}{\partial y} + \frac{\partial(Hw)}{\partial z} &= 0, \quad H = \sum_{i=1}^N \rho_i h_i + \rho \frac{u^2 + v^2}{2} = 0, \quad \rho = \sum_{i=1}^N \rho_i. \end{aligned}$$

Здесь w – компонента скорости вдоль оси z , а остальные обозначения совпадают с

приведенными выше. В качестве граничных условий на твердых стенках используется условие непротекания.

Изучение течений с химическими реакциями проводится в рамках модели одностадийной кинетики [3], в которой горение описывается одной необратимой реакцией. Рассматривается стехиометрическая пропановоздушная смесь, в которой одностадийная экзотермическая реакция протекает в соответствии со стехиометрическим уравнением



При этом $N=5$, а скорость реакции определяет все ω_i согласно равенствам

$$\frac{\omega_{\text{C}_3\text{H}_8}}{\mu_{\text{C}_3\text{H}_8}} = \frac{\omega_{\text{O}_2}}{5\mu_{\text{O}_2}} = -\frac{\omega_{\text{H}_2\text{O}}}{4\mu_{\text{H}_2\text{O}}} = -\frac{\omega_{\text{CO}_2}}{3\mu_{\text{CO}_2}} = AT^\beta e^{-\frac{E}{R_0T}} \left(\frac{\rho_{\text{C}_3\text{H}_8}}{\mu_{\text{C}_3\text{H}_8}} \right)^a \left(\frac{\rho_{\text{O}_2}}{\mu_{\text{O}_2}} \right)^b, \quad \omega_{\text{N}_2} = 0.$$

Здесь индексы i заменены на символы компонентов смеси. A , E , a и b – постоянные.

В рассмотренных ниже задачах воздух считается смесью кислорода с азотом в молярном соотношении $\nu_{\text{O}_2}:\nu_{\text{N}_2}=1:4$, а стехиометрическая пропановоздушная смесь задается соотношением $\nu_{\text{C}_3\text{H}_8}:\nu_{\text{O}_2}:\nu_{\text{N}_2}=1:5:20$.

Исследование проводится модифицированным методом С.К.Годунова [4] 1-го порядка точности по пространству и по времени. Метод реализован в оригинальном программном комплексе, предназначенном для решения широкого круга одномерных, двумерных и трехмерных задач нестационарной динамики газообразных реагирующих смесей. Для корректности расчета течений реагирующих газовых смесей требуется высокое пространственное разрешение, при котором на зону реакции всегда приходится достаточно большое число ячеек. Поэтому для численного исследования необходимы большие ресурсы многопроцессорных суперЭВМ. Программный комплекс, разработанный и используемый в данном исследовании, распараллелен на основе MPI и позволяет проводить расчеты течений на сетках с количеством расчетных ячеек, достигающим нескольких миллиардов. Ниже представлены результаты расчетов, которые проводились на суперкомпьютере МГУ «Ломоносов» на расчетных сетках, содержащих от 0.1 до 10 миллиардов ячеек.

3. ЯЧЕИСТАЯ СТРУКТУРА РАСХОДЯЩЕЙСЯ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ВОЛНЫ ДЕТОНАЦИИ

В настоящей работе смоделирован наблюдавшийся в экспериментах Р.И. Солоухина [1] процесс инициирования и распространения расходящейся детонации в узком зазоре между пластинами, в который через круглое отверстие переходит волна детонации, сформированная в трубке, присоединенной под прямым углом к пластине. Очевидно, что реальное явление трехмерно из-за сложной геометрии области течения. Следует отметить, что поток в трубке близок к одномерному, а размеры зазора между пластинами настолько малы, что в нем отсутствуют поперечные волны, распространяющиеся в направлении, перпендикулярном пластинам, и поэтому в зазоре реализуется двумерная расходящаяся ячеистая детонация. В связи с отмеченными свойствами реального процесса далее рассматривается его двумерная модель.

Предполагается, что в круге небольшого радиуса r с центром в начале декартовой системы координат в начальный момент $t=0$ находятся продукты детонации с параметрами, соответствующими газу непосредственно за фронтом одномерной самоподдерживающейся волной детонации, а вне круга имеется

сверхкритических величинах на начальной стадии она имеет тенденцию к затуханию, а затем переходит на самоподдерживающийся режим, о чем свидетельствует неоднородная следовая картина. Этот процесс иллюстрирует рис.2, где представлены следы тройных точек, полученные в эксперименте и расчете.

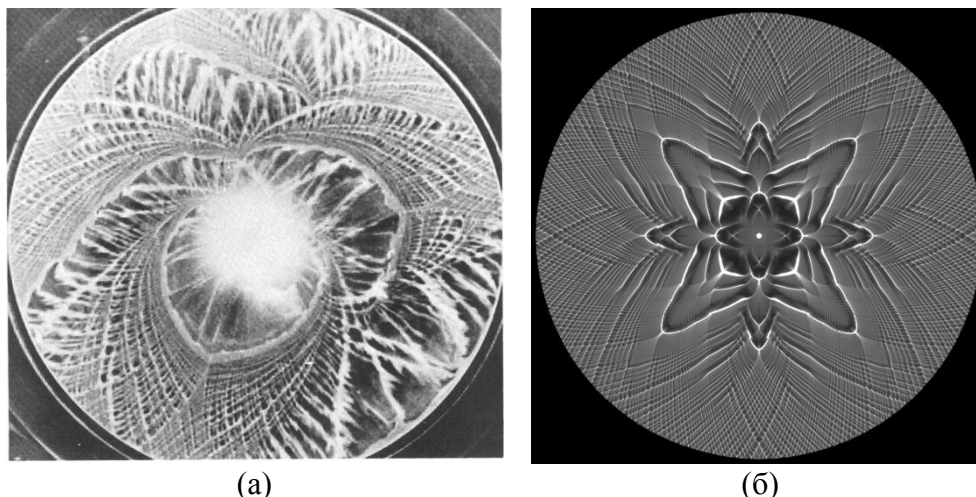


Рис.2. Следы тройных точек за расходящейся цилиндрической волной детонации при тенденции к затуханию на начальной стадии. Результаты эксперимента (а) и расчета (б).

4. ТРЕХМЕРНАЯ СТРУКТУРА ЯЧЕИСТОЙ ДЕТОНАЦИИ В КАНАЛАХ РАЗЛИЧНОГО ПОПЕРЕЧНОГО СЕЧЕНИЯ

Разработанный программный комплекс был применен для детального моделирования ячеистой структуры детонации в трехмерных каналах различного поперечного сечения – квадратного, прямоугольного, круглого и эллиптического. Рассматривался канал длиной 1 м. Прямоугольное сечение определялось размерами сторон H_x и H_y от 1 до 20 мм, а эллиптическое – длинами полуосей a и b от 0.5 до 10 мм. В первом случае использовалась декартова расчетная сетка с постоянным шагом, а во втором – строилась специальная О-сетка, не сгущающаяся к оси симметрии. Линейный размер расчетных ячеек не превышал 0.1 мм.

Исследовалась детонация покоящейся стехиометрической пропановоздушной смеси при давлении 1 атм и температуре 20°C. Предполагалось, что детонация инициируется мгновенным однородным электрическим разрядом, подводившим к смеси энергию в зоне протяженностью 3 см у закрытого конца канала. В силу постановки задачи течение одномерно на начальной стадии, и его параметры зависят только от продольной координаты z . Но неустойчивость горения за головным фронтом волны детонации приводит к росту возмущений, источником которых являются ошибки округления на уровне машинной точности, в результате чего одномерная детонационная волна постепенно приобретает трехмерную ячеистую структуру. Этот спонтанный переход наблюдался в расчетах для всех каналов, у которых достаточно большой хотя бы один линейный размер сечения, допускающий распространение поперечных волн. При расчетах по локальным максимумам давления составлялась трехмерная шлирен-диаграмма, аналогичная численным шлирен-диаграммам при моделировании двумерной ячеистой детонации, а также регистрируемым в экспериментах следовым картинам тройных точек.

Для проверки корректности расчетной схемы и программного комплекса в целом был осуществлен предельный переход $H_x \rightarrow 0$ для случая прямоугольного поперечного сечения. При этом H_y фиксировалось равным 20 мм. Расчеты показали, что реализуется переход к обычной двумерной ячеистой детонации. Так, при $H_x=1$ мм численная шлирен-диаграмма на одной из поверхностей трехмерного канала в плоскости yz практически не отличалась от аналогичной, полученной в двумерном расчете. Рис.3 иллюстрирует эту ситуацию.

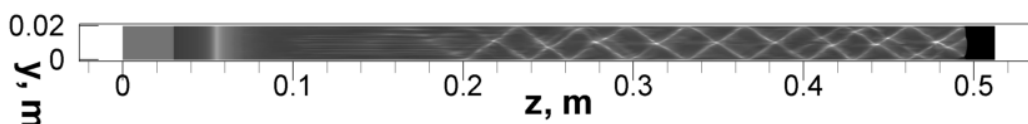


Рис.3. Численная шлирен-диаграмма для $H_x=1$ мм, $H_y=20$ мм на одной из поверхностей трехмерного канала

Однако даже в этом случае на некотором расстоянии от места зарождения ячеистой детонации появлялась небольшая зависимость газодинамических параметров от координаты x . В случае $H_x=2$ мм, $H_y=10$ мм численная шлирен-диаграмма на широкой стороне трехмерного канала была сильно размытой (рис.4), а в направлении оси x наблюдалось существенное изменение параметров (рис.5).

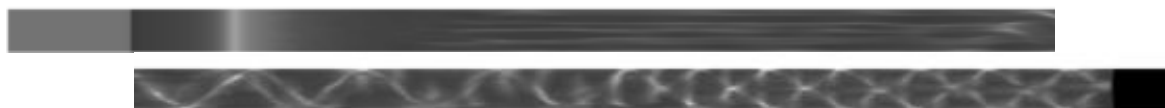


Рис.4. Численная шлирен-диаграмма для $H_x=2$ мм, $H_y=10$ мм на одной из поверхностей трехмерного канала ширины 10 мм.



Рис.5. Численная шлирен-диаграмма для $H_x=2$ мм, $H_y=10$ мм на одной из поверхностей трехмерного канала ширины 2 мм.

Для каналов, у которых оба линейные размеры сечения допускают распространение поперечных волн, получена трехмерная ячеистая структура детонации с поперечными волнами, распространяющимися в плоскости сечения, существенно отличающаяся от двумерных. При этом форма следов на поверхности канала отличается от ромбовидной, но напоминает периодическую, хотя и «хаотичную». На рис.6 для примера приведена шлирен-диаграмма на поверхности канала квадратного сечения с $H_x=H_y=10$ мм, полученная при расчете ячеистой детонации. Рис.7 иллюстрирует фрагмент этой следовой картины на поверхности канала, параллельной плоскости xz .

Согласно расчетам, на фронте головной ударной волны имеется несколько перемещающихся по нему изломов (рис.8), а позади него формируется течение с фронтом горения сложной формы, охватывающим отдельные маленькие объемы несгоревшей пропановоздушной смеси (рис.9).

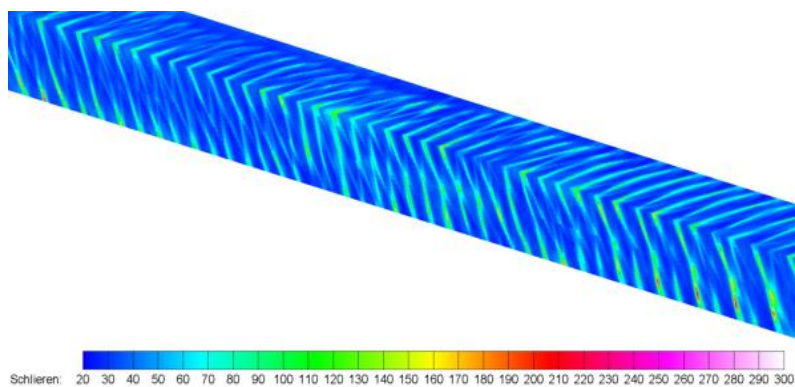


Рис.6. Численная шlieren-диаграмма на поверхности канала квадратного сечения с $H_x=H_y=10$ мм.

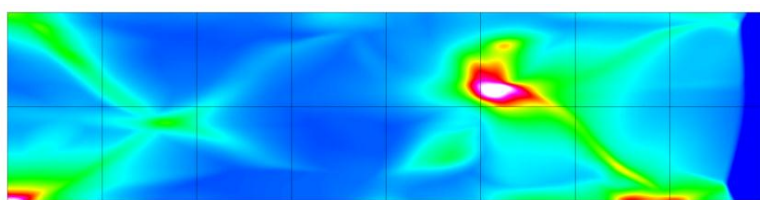


Рис.7. Фрагмент численной шlieren-диаграммы на поверхности канала квадратного сечения с $H_x=H_y=10$ мм.

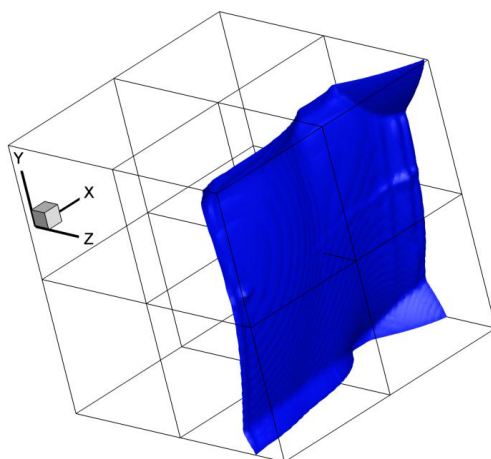


Рис.8. Поверхность головной ударной волны при трехмерной ячеистой детонации.

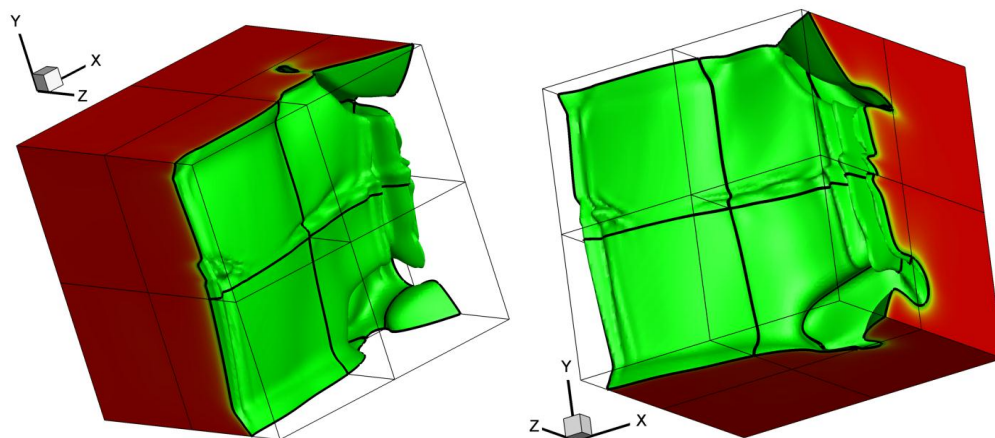


Рис.9. Область, где концентрация воды превышает 50% максимального значения.

Рис.10 иллюстрирует зарождение трехмерной ячеистой детонации в канале круглого сечения. Здесь ячеистая картина видна как на боковой поверхности канала, так и на любой поверхности, параллельной его оси. На рисунке видно множество поперечных волн, распространяющихся по фронту, которые взаимодействуют между собой и со стенками канала.

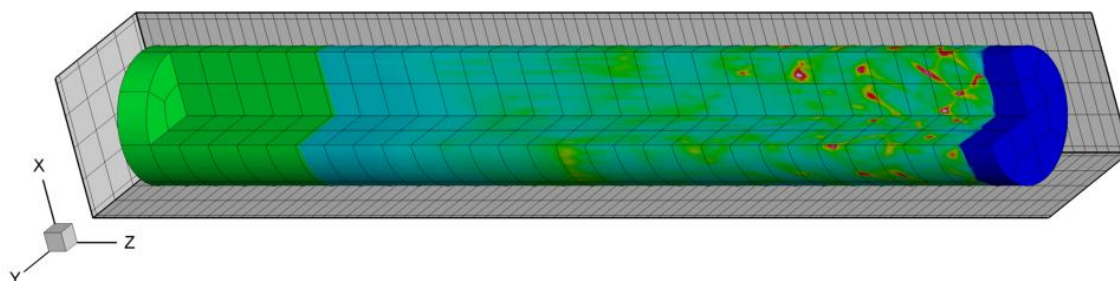


Рис.10. Зарождение трехмерной ячеистой детонации в канале круглого сечения.

Размеры поперечного сечения определяют количество поперечных волн, которые могут существовать при распространении детонации. При трехмерной детонации поперечные волны имеют возможность распространяться в любом направлении, перпендикулярном направлению нормали к ее фронту. При этом форма стенок канала может способствовать более сильной кумуляции поперечных волн. Так, в местах излома боковой поверхности канала или в точках ее минимальной кривизны (например, вблизи концов полуосей эллиптического сечения канала) наблюдаются большие значения давления, что видно на срезах трехмерной шпирен-диаграммы (рис.11).

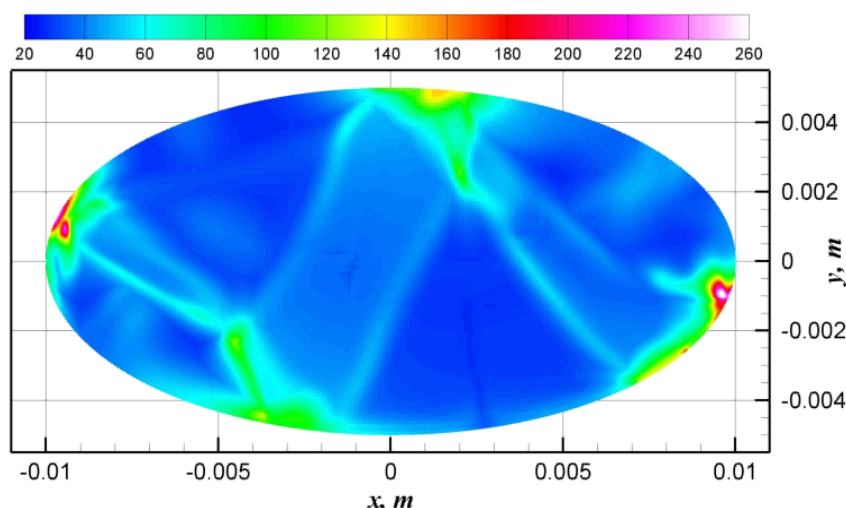


Рис.11. Срез $z=0.5$ м трехмерной шпирен-диаграммы, полученной для эллиптического канала с $a=1$ мм, $b=0.5$ мм

Во всех случаях трехмерная структура ячеистой детонации формируется при достаточной протяженности поперечного сечения по двум координатам. При трехмерной детонации в случае ее неустойчивости по фронту распространяются поперечные волны, которые могут иметь любое направление, перпендикулярное направлению нормали к фронту. В результате структура волн и следовая картина имеют нерегулярный, иногда хаотический характер.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Впервые получена и численно изучена детальная трехмерная ячеистая структура детонации в каналах различного сечения. Рассмотрены трехмерные каналы квадратного, прямоугольного, круглого и эллиптического сечений различного размера. Установлено, что наблюдаемая в экспериментах регулярная двумерная структура детонации реализуется благодаря тому, что поперечные возмущения не могут возрасти, т.е. подавляются в достаточно узком зазоре между стенками канала прямоугольного сечения. Показано, что вне зависимости от формы поперечного сечения при достаточно большой ширине канала наблюдается сильно нерегулярная, хаотичная следовая картина. Этот результат носит фундаментальный характер, раскрывая сильно нестационарную и многомерную структуру детонации. Для расчетов использовалась большая доля вычислительных ресурсов суперкомпьютера МГУ «Ломоносов». Без вычислительной системы сравнимой производительности получение отмеченных результатов за разумное время было бы невозможно из-за необходимости проводить трехмерные расчеты в протяженных расчетных областях с большим пространственным разрешением.

ЛИТЕРАТУРА

1. Солоухин Р.М. Детонационные волны в газах // УФН. – 1963. – Т.80. – Вып.4. – С.525-551.
2. Митрофанов В.В. Теория детонации. Новосибирск: НГУ, 1982. – 92 с.
3. Westbrook C.K., Dryer F.L. Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion // Prog. Energy Combust. Sci. – 1984. – Vol.10. – P.1-57.
4. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.Н., Прокопов Г.П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. – М.: Наука, 1976. – 400 с.

ДЕТОНАЦИЯ В КВАДРАТНОЙ КАМЕРЕ С ПОДВИЖНЫМИ СТЕНКАМИ И ТРЕХМЕРНЫХ КАНАЛАХ КВАДРАТНОГО СЕЧЕНИЯ*

Левин В.А.¹, Мануйлович И.С.², Марков В.В.²

¹Дальневосточный федеральный университет, г. Владивосток, Россия

²НИИ механики МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

Представлены результаты численного моделирования детонации покоящейся горючей смеси в плоской квадратной камере с подвижными стенками, а также в сверхзвуковых потоках в трехмерных каналах квадратного сечения. Исследование проводится в рамках одностадийной кинетики горения численным методом, основанным на схеме С.К. Годунова, реализованном в оригинальном программном комплексе.

В задаче о формировании детонации в квадратной области с изменяющейся по синусоидальному закону длиной стороны проведено 200 расчетов для различных пар значений амплитуды и периода колебаний. Результаты, полученные в серии расчетов, выявили различные режимы инициирования детонации, разделяемые критическими кривыми. Детонация может не возникать или возникает вдоль всего периметра, в углах или в центре через один или несколько периодов колебаний (в некоторых случаях ≥ 5).

В задаче о формировании детонации в трехмерном канале квадратного сечения переменной площади получены детальные стационарные (рис.1) и нестационарные картины течения с детонацией и без нее. Определены критические значения газодинамических параметров, разделяющие различные режимы течения. Подтверждена гиперзвуковая аналогия плоских и пространственных течений, позволяющая использовать двумерные решения для оценки параметров трехмерных сверхзвуковых потоков. Расчеты трехмерной детонации проводились на суперкомпьютере МГУ «Ломоносов».

1. ВВЕДЕНИЕ

Логика развития газовой динамики приводит к необходимости усложнения математических моделей в направлении учета реальных свойств среды, разнообразных быстропротекающих физико-химических процессов и рассмотрения течений в пространственных областях сложной геометрии. В современных условиях основным инструментом исследования, способным решать фундаментальные проблемы науки и практики, становится вычислительный эксперимент, который благодаря достижениям в области вычислительной техники и вычислительных технологий открывает перед специалистами практически безграничные возможности.

Среди проблем, которыми занимаются исследователи волновых процессов в реагирующих газовых смесях, особое место занимает формирование самоподдерживающегося режима распространения детонации. Повышенный интерес к этому вопросу обусловлен, в частности, практическим использованием детонации в различных областях человеческой деятельности. В последнее время внимание к детонации возросло в связи с попытками ее использования в реактивных двигателях и энергоустановках различного назначения. Среди всех проблем наиболее важной является задача инициирования детонации. Традиционно рассматриваются два

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 11-01-00068, 11-01-12043-офи, 12-01-90416-Укр_а), Совета по грантам Президента РФ (НШ 8424.2010.1), Программ фундаментальных исследований Президиума РАН.

подхода. Первый связан с поджиганием смеси слабым источником энергии и последующей трансформацией горения в детонацию с помощью специальных устройств, интенсифицирующих горение. При втором подходе, называемом прямым инициированием детонации, она формируется за счет ударной волны от внешнего источника энергии, например, при взрыве ВВ, электрическом или лазерном пробое.

В данной работе представлены результаты последних исследований по фундаментальным проблемам детонации, связанным с обоснованием новых способов инициирования детонации без объемного подвода энергии извне, в которых определяющую роль играет взаимодействие газовых смесей с твердыми границами области течения, эффекты кумуляции и формирование сложных ударно-волновых структур.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

Для описания газодинамических течений используется система уравнений Эйлера для идеальной многокомпонентной реагирующей смеси в неподвижной декартовой системе координат. В случае двумерных плоских течений уравнения имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_i v)}{\partial y} &= \omega_i, \quad \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(p + \rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(p + \rho v^2)}{\partial y} &= 0, \quad \frac{\partial(H - p)}{\partial t} + \frac{\partial(Hu)}{\partial x} + \frac{\partial(Hv)}{\partial y} = 0, \\ H = \sum_{i=1}^N \rho_i h_i + \rho \frac{u^2 + v^2}{2} &= 0, \quad \rho = \sum_{i=1}^N \rho_i. \end{aligned}$$

Здесь p , ρ – давление и плотность смеси, u и v – компоненты скорости вдоль осей x и y соответственно, N – число компонентов смеси, ρ_i и h_i – плотность и энтальпия i -го компонента, ω_i – скорость изменения ρ_i при химических реакциях, H – полная энтальпия.

Уравнения состояния смеси имеют вид

$$p = \sum_{i=1}^N (\rho_i / \mu_i) R_0 T, \quad h_i = c_{0i} + c_{pi} T, \quad i = 1, \dots, N,$$

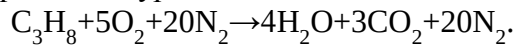
где T – температура смеси, μ_i – молярные массы компонентов, R_0 – универсальная газовая постоянная, а c_{0i} , c_{pi} – постоянные коэффициенты, полученные аппроксимацией табличных значений.

Нестационарные трехмерные течения реагирующих смесей описываются системой уравнений в форме

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_i v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho_i w)}{\partial z} &= \omega_i, \quad \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(p + \rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial z} = 0, \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(p + \rho v^2)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial z} &= 0, \quad \frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial y} + \frac{\partial(p + \rho w^2)}{\partial z} = 0, \\ \frac{\partial(H - p)}{\partial t} + \frac{\partial(Hu)}{\partial x} + \frac{\partial(Hv)}{\partial y} + \frac{\partial(Hw)}{\partial z} &= 0, \quad H = \sum_{i=1}^N \rho_i h_i + \rho \frac{u^2 + v^2 + w^2}{2} = 0, \quad \rho = \sum_{i=1}^N \rho_i. \end{aligned}$$

Здесь w – компонента скорости вдоль оси z , а остальные обозначения совпадают с приведенными выше. В качестве граничных условий на твердых стенках используется условие непротекания.

Изучение течений проводится в рамках модели одностадийной кинетики [1], в которой горение описывается одной необратимой реакцией. Рассматривается пропановоздушная смесь, в которой реакция протекает в соответствии со стехиометрическим уравнением



Здесь $N=5$, а скорость реакции определяет все ω_i согласно равенствам:

$$\frac{\omega_{\text{C}_3\text{H}_8}}{\mu_{\text{C}_3\text{H}_8}} = \frac{\omega_{\text{O}_2}}{5\mu_{\text{O}_2}} = -\frac{\omega_{\text{H}_2\text{O}}}{4\mu_{\text{H}_2\text{O}}} = -\frac{\omega_{\text{CO}_2}}{3\mu_{\text{CO}_2}} = AT^\beta e^{-\frac{E}{R_0 T}} \left(\frac{\rho_{\text{C}_3\text{H}_8}}{\mu_{\text{C}_3\text{H}_8}} \right)^a \left(\frac{\rho_{\text{O}_2}}{\mu_{\text{O}_2}} \right)^b, \quad \omega_{\text{N}_2} = 0.$$

где индексы i заменены на символы компонентов смеси. A , E , a и b – постоянные.

В рассмотренных ниже задачах воздух считается смесью кислорода с азотом в молярном соотношении $\nu_{\text{O}_2}:\nu_{\text{N}_2}=1:4$, а пропановоздушная смесь задается соотношением $\nu_{\text{C}_3\text{H}_8}:\nu_{\text{O}_2}:\nu_{\text{N}_2}=1:5:20$. В случае течений воздуха в отсутствии горючего $N=2$, $\omega_1=\omega_2=0$.

Исследование проводится модифицированным методом С.К.Годунова [2] 1-го порядка точности по пространству и по времени. Метод реализован в оригинальном программном комплексе, предназначенном для решения широкого круга одномерных, двумерных и трехмерных задач нестационарной динамики инертных и горючих смесей газрв. Для адекватного расчета течений реагирующих газовых смесей требуется высокое пространственное разрешение, при котором на зону реакции всегда приходится достаточно большое число ячеек. Поэтому для численного исследования необходимы большие ресурсы многопроцессорных суперЭВМ. Программный комплекс, разработанный и используемый в данном исследовании, распараллелен на основе MPI и позволяет производить расчеты задач с количеством расчетных ячеек, достигающим нескольких миллиардов. В данном исследовании расчеты проводились на суперкомпьютере МГУ «Ломоносов» с расчетными сетками, содержащими от 50 до 100 млн. ячеек.

Далее будет рассмотрен ряд двумерных и трехмерных задач, в которых ударные и детонационные волны возникают либо под воздействием подвижных границ двумерной области течения, либо при взаимодействии трехмерного сверхзвукового потока со стенками канала. Как будет видно в дальнейшем, все эти задачи тесно связаны между собой.

3. ТЕЧЕНИЕ ВОЗДУХА В КВАДРАТНОЙ КАМЕРЕ УМЕНЬШАЮЩЕГОСЯ РАЗМЕРА

Рассмотрим квадратную камеру с длиной стороны H , в которой в начальный момент времени находится неподвижный воздух при температуре T_0 и давлении p_0 , а противоположные стороны квадрата начинают двигаться навстречу друг другу с заданной постоянной скоростью W , так что длина стороны квадрата уменьшается по линейному закону $h=H-2Wt$, а центр квадрата не изменяет своего положения (рис.1).

Из постановки задачи следует, что возникающее течение симметрично в каждый момент времени относительно «горизонтальной», «вертикальной» и «диагональных» осей симметрии квадрата. Подвижные стороны квадрата играют роль поршня и генерируют в начальный момент плоские ударные волны, распространяющиеся по неподвижному воздуху с постоянной скоростью, зависящей от W . При $W \rightarrow 0$ скорость ударных волн стремится к скорости звука в невозмущенном воздухе, а перепад газодинамических параметров на ударных

волнах стремится к 0. При больших значениях W возрастает как скорость ударных волн, так и скачок газодинамических параметров на их фронте. Сразу после начала движения ударные волны взаимодействуют друг с другом вблизи диагоналей квадрата. Диагонали в силу симметрии можно рассматривать как твердые стенки, от которых отражаются падающие под углом 45° ударные волны. Это отражение имеет нерегулярный характер, и образуются маховские волны, распространяющиеся вдоль диагоналей.

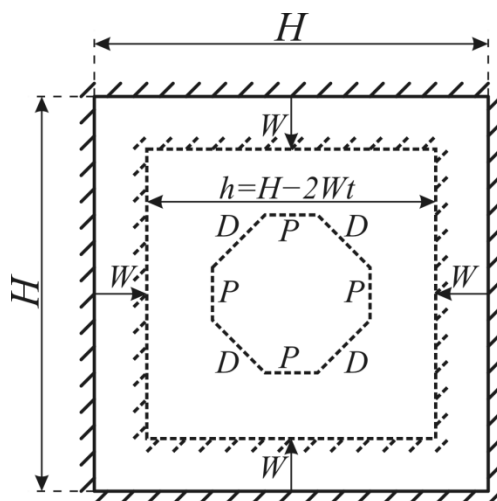


Рис.1. Схема, иллюстрирующая постановку задачи и форму ударной волны на начальной стадии течения.

На начальном этапе движения ударных волн от сторон квадрата они образуют восьмиугольник с четырьмя плоскими сторонами P , строго параллельными сторонам квадрата, и четырьмя другими сторонами D , разделяющими плоские участки P (см. рис.1). Волны D , как будет ясно из результатов расчетов, не прямолинейны.

Диагональные волны D , являясь результатом взаимодействия волн P , распространяются с большей скоростью, чем волны P , и поэтому плотность, давление и температура за ними выше. По мере движения ударных волн длина участков волн P уменьшается, а длина участков волн D увеличивается. В определенный момент времени волны P исчезают, а форма составной ударной волны становится близкой к квадрату с несколько криволинейными сторонами, расположенными вдоль диагоналей исходного квадрата. После указанного момента времени волны D взаимодействуют друг с другом вблизи «горизонтальной» и «вертикальной» осей симметрии квадрата. Дальнейшее развитие течения может происходить по различным сценариям в зависимости от главного определяющего параметра задачи – скорости движения сторон W . Исследовать соответствующие неавтономные течения возможно только численно.

Результаты расчетов.

Учитывая симметрию задачи, расчеты проводились в I квадранте в системе координат с началом, совпадающим с центром квадрата, и осями x и y , параллельными его сторонам. На всех границах расчетной области удовлетворялись условия непротекания. Использовалась подвижная равномерная ортогональная расчетная сетка, деформация которой определяется движением твердых границ квадрата. Далее приведены результаты, полученные для $H=0.06$ м при начальных условиях $T_0=20^\circ\text{C}$, $p_0=1$ атм.

Расчеты подтвердили описанную выше динамику ударно-волновой картины течения. На рис.2 представлено поле температуры при $W=1500$ м/с в момент времени, когда ударные волны образуют восьмиугольник из чередующихся волн P и D .

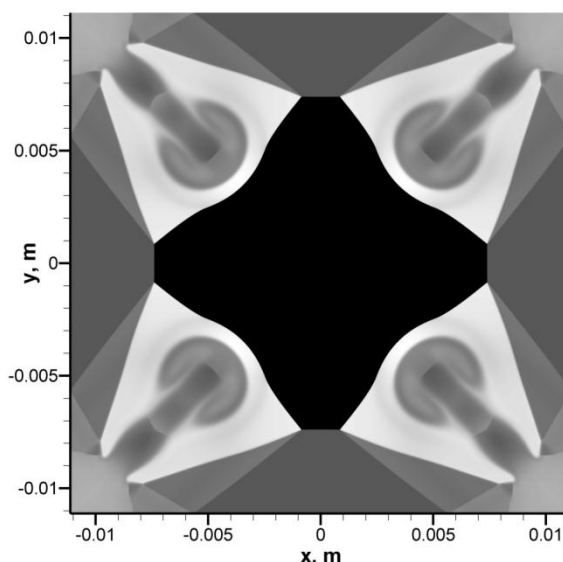


Рис.2. Поле температуры в воздухе при $W = 1500$ м/с.

Взаимодействие волн P и D приводит к сложной ударно-волновой структуре течения в возмущенной области. Так, в этом случае в потоке за составной ударной волной, разделяющей области течения и покоя, наблюдается регулярное отражение вторичных ударных волн от сторон квадрата. При этом формируются струи вдоль диагоналей квадрата, в которых воздух движется к центру. Эти струи приводят к существенному искривлению волн D . Степень искривления, связанная с интенсивностью струй, возрастает с увеличением скорости W . На рис.3 представлено поле температуры при небольшой скорости $W=500$ м/с. Видно, что искривление волн D практически отсутствует и имеет место маховское отражение вторичных волн от сторон квадрата.

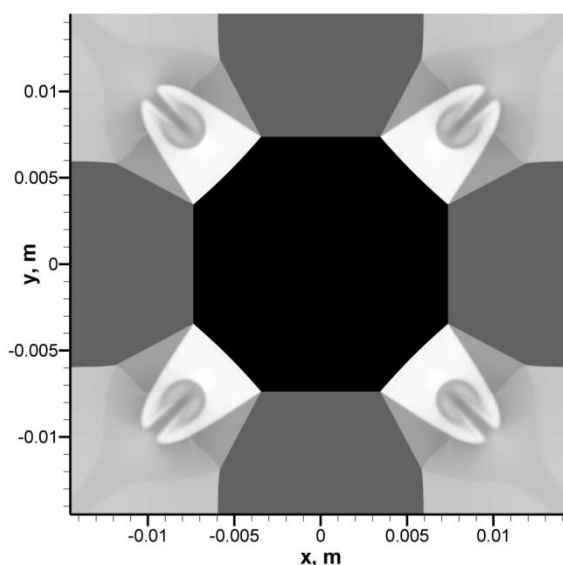


Рис.3. Поле температуры в воздухе при $W=500$ м/с.

Представляет особый интерес течение в моменты времени, когда ударная волна приближается к центру квадрата. Как было отмечено выше, начиная с некоторого момента времени волны P , параллельные сторонам квадрата, исчезают, а «диагональные» волны D начинают взаимодействовать между собой. Как показали расчеты, при скорости W , большей определенной критической $W_* = 750$ м/с, взаимодействие волн D имеет регулярный характер и вплоть до момента прихода волны к центру квадрата она имеет форму симметричного криволинейного четырехугольника. Более того, даже при $W < W_*$ регулярное отражение может наблюдаться длительное время при движении волн к центру квадрата. Сказанное иллюстрирует рис.4, на котором представлено поле температуры при $W = 700$ м/с.

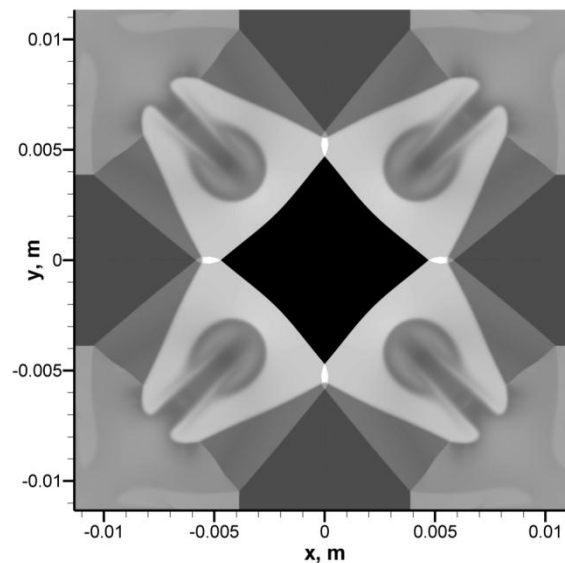


Рис.4. Поле температуры в воздухе при $W = 700$ м/с.

Приведенные результаты для течений воздуха позволяют выявить особенности ударно-волновой картины, определить высокотемпературные зоны, в которых для горючей смеси могут образоваться очаги воспламенения, приводящие к формированию детонации. Вместе с тем, для инициирования детонации может оказаться более выгодным не равномерное движение стенок, а движение по какому-либо более сложному закону, например, гармоническому.

4. ФОРМИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИИ ПРОПАНОВОЗДУШНОЙ СМЕСИ В КВАДРАТНОЙ КАМЕРЕ ИЗМЕНЯЮЩЕГОСЯ РАЗМЕРА

Рассмотрим квадратную камеру, в которой в начальный момент времени находится покоящаяся стехиометрическая пропановоздушная смесь при температуре T_0 и давлении p_0 . Предполагается, что в последующие моменты времени центр камеры неподвижен, а длина ее стороны изменяется по синусоидальному закону $h = H - A[1 - \cos(2\pi t/T)]$, в котором H – длина стороны в начальный момент времени, T – период колебаний, а $A < H/2$ – амплитуда колебаний каждой из сторон (рис.5).

Скорость движения сторон квадрата в рассматриваемом случае равна $2\pi A/T \sin(2\pi t/T)$. Она обращается в нуль в начальный момент времени и достигает максимального значения $2\pi A/T$ через четверть периода колебаний. После половины периода колебаний длина стороны принимает минимальное значение, равное $H - 2A$.

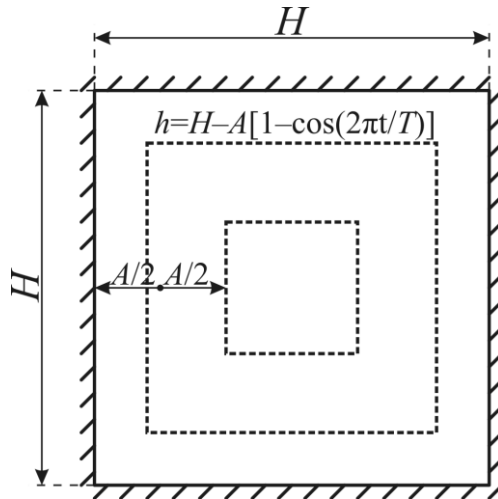


Рис.5. Схема, иллюстрирующая постановку задачи.

В каждый момент времени стенки камеры действуют как поршень, и в газе возникает ударная волна или волна разрежения в зависимости от того, в какую сторону движется стенка. Интенсивность ударных волн при движении стенки в сторону газа возрастает с ростом ее скорости, и в определенных диапазонах значений A и T движение стенки может привести к быстрому инициированию детонации во время первого сокращения размеров камеры. При небольшой интенсивности начальных ударных волн детонация может возникнуть за конечное время за счет их взаимодействия, кумуляции в центре камеры или при генерации новых ударных волн в течение последующих периодов колебаний. Картина течения усложняется также из-за наличия у камеры углов, в которых происходит кумуляция ударных волн. Детальное исследование протекающих процессов можно провести только численно. Как и в случае воздуха, при численном исследовании использовалась модифицированная схема Годунова с подвижной равномерной ортогональной расчетной сеткой, связанной с деформирующейся границей, и расчеты проводились в I квадранте.

Основными определяющими параметрами в рассматриваемой задаче являются амплитуда A и период колебаний T . От их величины существенно зависит возникающая картина течения. С целью классификации и построения диаграммы режимов течения проведено 200 расчетов для различных пар значений (A, T) при $T_0=20^\circ\text{C}$, $p_0=1$ атм, $H=0.06$ м.

Результаты расчетов.

Для построения диаграммы режимов течения величина A пробегала полный диапазон $(0, H/2=30 \text{ мм})$ с шагом $\Delta A=2 \text{ мм}$. Величина периода T задавалась в диапазоне $(0, 140 \text{ мкс})$ с шагом $\Delta T=10 \text{ мкс}$.

Полученные результаты расчетов позволили выявить различные режимы инициирования детонации, разделяемые критическими кривыми в плоскости амплитуда-период колебаний (рис.6). Детонация формируется тем интенсивнее, чем больше амплитуда колебаний и чем меньше период. Она может не возникать или возникает вдоль всего периметра, в углах или в центре через один или несколько периодов колебаний. В некоторых случаях горючая смесь воспламенялась после 5 и более периодов колебаний. При этом инициирование детонации происходит благодаря эффекту «накачки» энергии в горючую смесь за счет работы стенок камеры сгорания. Наблюдаются также определенные резонансные явления, заключающиеся в том, что воспламенение смеси может происходить на

определенном периоде колебаний при меньших значениях амплитуды или при больших значениях периода колебаний благодаря генерации стенками камеры ударных волн, согласованной с распространением ударных волн, сформированных на предыдущих периодах колебаний.

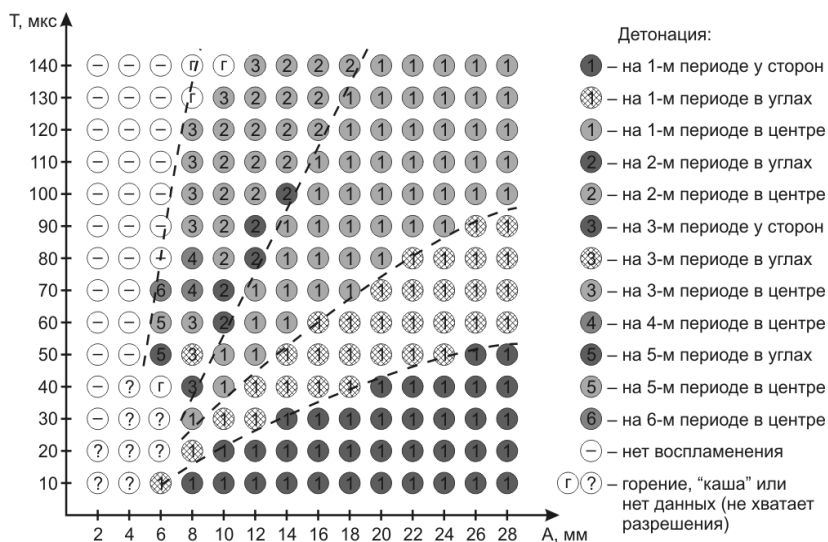


Рис.6. Диаграмма режимов течения в плоскости «амплитуда-период».

Для всех режимов течения на первом периоде колебаний вблизи углов квадрата наблюдается характерная структура волн, образованная из плоских ударных или детонационных волн P , параллельных сторонам квадрата, и диагональных ударных или детонационных волн D . В силу симметрии течения относительно диагоналей квадрата волны D можно рассматривать в качестве маховских волн, возникающих при падении волн P на диагонали как на твердые поверхности. Интенсивность диагональных волн D больше, чем интенсивность волн P , поэтому возможен режим с инициированием детонации только в углах. При этом с диагональными волнами детонации граничат плоские ударные волны, параллельные сторонам квадрата. Рис.7 иллюстрирует указанную ситуацию. На нем представлено поле температуры для случая $A=18$ мм, $T=60$ мкс.

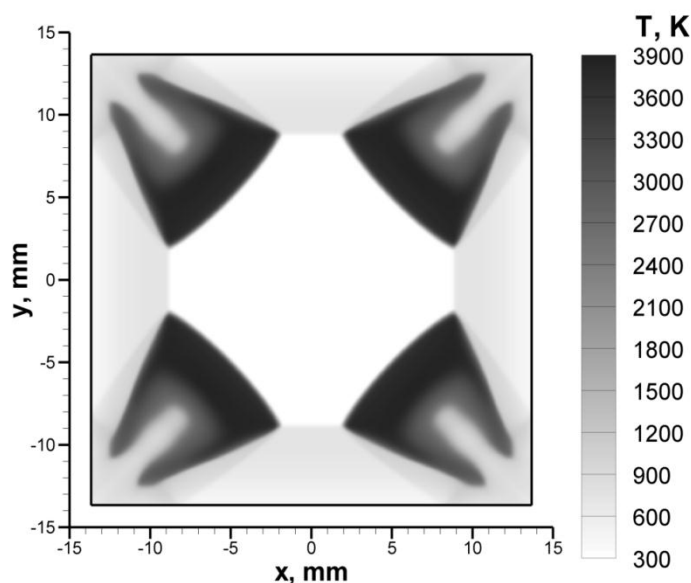


Рис.7. Поле температуры при $t=24$ мкс. $A=18$ мм, $T=60$ мкс.

Режимы с инициированием детонации в центре на первом периоде имеют место при меньших значениях амплитуды или при больших значениях периода колебаний. При этом в центре возникает сложная волновая структура течения и происходит кумуляция, способствующая инициированию детонации.

Отметим, что описанные выше результаты расчетов двумерных волновых процессов в воздухе и горючей смеси могут быть использованы для оценки параметров трехмерных течений при исследовании процесса инициирования детонации в трехмерных каналах с переменным вдоль канала квадратным сечением. Это позволяет сделать гипотеза плоских сечений [3,4].

5. ТЕЧЕНИЕ ВОЗДУХА В ТРЕХМЕРНОМ КАНАЛЕ КВАДРАТНОГО СЕЧЕНИЯ ПЕРЕМЕННОЙ ПЛОЩАДИ

Рассмотрим трехмерный канал, поверхность которого получается при одновременном линейном уменьшении размера квадрата и его перемещении с постоянной скоростью вдоль прямолинейной оси канала. Такой канал имеет 4 боковых стороны, наклоненных по отношению к оси канала на некоторый угол α . При этом $\operatorname{tg}\alpha$ является коэффициентом линейной зависимости, выбранной при построении формы канала.

Пусть в канал втекает с заданной сверхзвуковой скоростью U , направленной вдоль оси канала, однородный воздух с температурой T_0 и давлением p_0 . Пусть x и y – координаты вдоль сечений канала, z – значение координаты вдоль оси канала, отсчитываемое от входного сечения $z=0$. Для достаточно большой скорости потока течение воздуха стабилизируется, и в каждом сечении канала устанавливается определенное распределение всех газодинамических параметров.

Согласно гипотезе плоских сечений, при достаточно больших значениях U распределения параметров в сечении канала с координатой z близки к распределениям в момент времени $t=z/U$ в нестационарном двумерном течении, вызванном изменением формы сечения. При этом в двумерной задаче начальное условие ($t=0$) соответствует покоящемуся однородному воздуху с параметрами во входном сечении трехмерного канала ($z=0$). Кроме этого, при перемещении вдоль z квадратное сечение канала как область двумерного течения уменьшается в размерах, причем границы перемещаются со скоростями $W=U\operatorname{tg}\alpha$ навстречу друг другу. В связи с указанными свойствами стационарное течение воздуха в рассматриваемом трехмерном канале при больших U аналогично рассмотренному двумерному течению воздуха в квадрате уменьшающегося размера.

Результаты расчетов.

Расчеты трехмерного течения воздуха проводились методом С.К.Годунова на фиксированной расчетной сетке. При $t=0$ воздух, как и ранее, был однородным и неподвижным. При $t>0$ во входное сечение $z=0$ втекал сверхзвуковой поток с заданной скоростью U , и через некоторое время течение становилось стационарным.

Расчеты подтвердили гипотезу плоских сечений. На рис.8 представлены поля температуры в нескольких сечениях канала в стационарном воздушном потоке со скоростью $U=2000$ м/с для канала с $\operatorname{tg}\alpha=1/5$ и шириной входного сечения $H=0.06$ м. Видно хорошее соответствие с двумерными картинами течения.

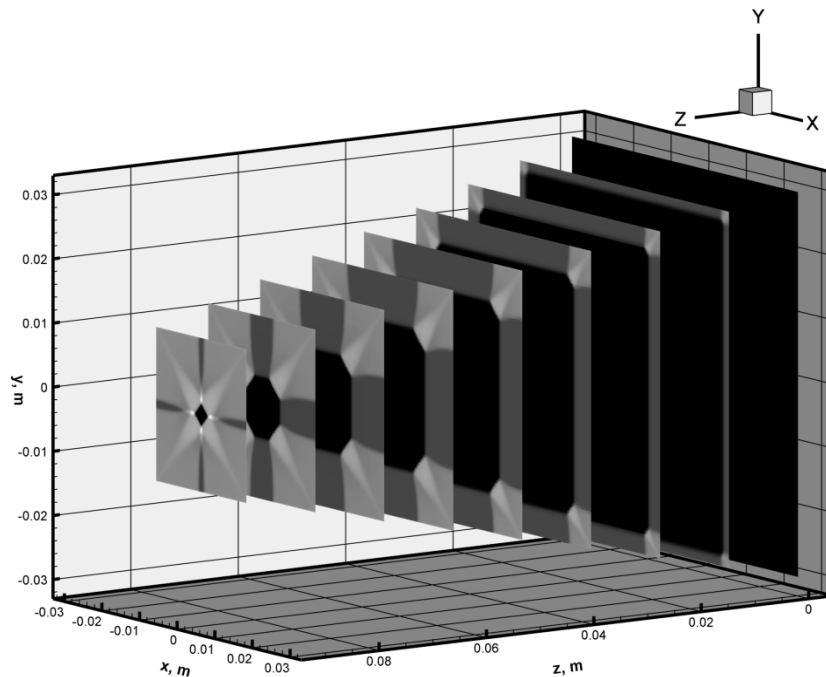


Рис.8. Срезы поля температуры в трехмерном стационарном воздушном потоке.
 $U=2000$ м/с, $\text{tg}\alpha=1/5$, $H=0.06$ м

6. ДЕТОНАЦИЯ В ТРЕХМЕРНОМ КАНАЛЕ КВАДРАТНОГО СЕЧЕНИЯ ПЕРЕМЕННОЙ ПЛОЩАДИ

Рассмотрим теперь трехмерный канал специальной формы, поверхность которого получается при одновременном изменении размера квадрата по гармоническому закону и его перемещении с постоянной скоростью вдоль оси канала. Такой канал имеет криволинейные боковые стенки, а его поперечное сечение подчиняется периодическому закону при перемещении вдоль оси канала. Будем называть указанный период шагом канала по аналогии с шагом винта. Если в канал втекает однородная горючая смесь с заданной скоростью U , направленной вдоль оси, то в результате возмущения потока при взаимодействии со стенкой канала могут создаться благоприятные условия для формирования детонации. Если шаг канала много больше размеров поперечного сечения, то можно воспользоваться гипотезой плоских сечений. При этом форма канала будет определяться скоростью потока горючей смеси U и величинами A и T . В плоскости, перпендикулярной оси канала и движущейся вдоль нее с заданной скоростью потока U , заданной на входе, размер области течения будет изменяться, а картина течения будет соответствовать двумерной в квадратной камере переменного размера. При этом расчетные данные, полученные при определенных значениях A и T , можно применить к целому спектру каналов с различными значениями шага $L=UT$, имеющих различный наклон боковых стенок по отношению к набегающему потоку. В каждой точке боковой стенки трехмерного канала с углом наклона α ударные или детонационные волны возникают, как в случае набегающего потока на клин. При этом углу наклона стенки канала α соответствует движение стенки в двумерном нестационарном течении со скоростью $W=Ut\text{tg}\alpha$, и это значение определяет интенсивность локального поршневого эффекта. Аналогии двумерных волн S и P в трехмерных сверхзвуковых течениях представляют собой поверхности взаимодействующих косых

стационарных ударных волн или волн детонации, сходящихся к оси канала вниз по потоку.

Результаты расчетов.

Расчеты трехмерного течения пропановоздушной смеси проводились методом С.К.Годунова на фиксированной расчетной сетке. Предполагалось, что при $t=0$ в канале находился однородный и неподвижный воздух. При $t>0$ во входное сечение $z=0$ с заданной скоростью U втекал сверхзвуковой поток воздуха, который практически полностью стабилизировался за время Δt , а при $t>\Delta t$ в канал с той же скоростью поступала стехиометрическая пропановоздушная смесь. При соответствующих условиях возникала детонация, и еще через некоторое время течение становилось стационарным.

Расчеты при больших значениях U подтвердили гипотезу плоских сечений. На рис.9 представлены поля температуры в нескольких поперечных сечениях канала в стационарном воздушном потоке со скоростью $U=6000$ м/с для канала с длиной $l=0.09$ м и шириной поперечного сечения $h=H-A[1-\cos(\pi z/l)]$ при $H=0.06$ м, $A=0.012$ м. В данном случае наблюдается хорошее совпадение с двумерными картинками течения. Видны косые ударные волны, присоединенные к сторонам входного сечения, и детонационные волны, представляющие собой криволинейные поверхности в виде углов, вершины которых находятся в углах входного сечения канала.

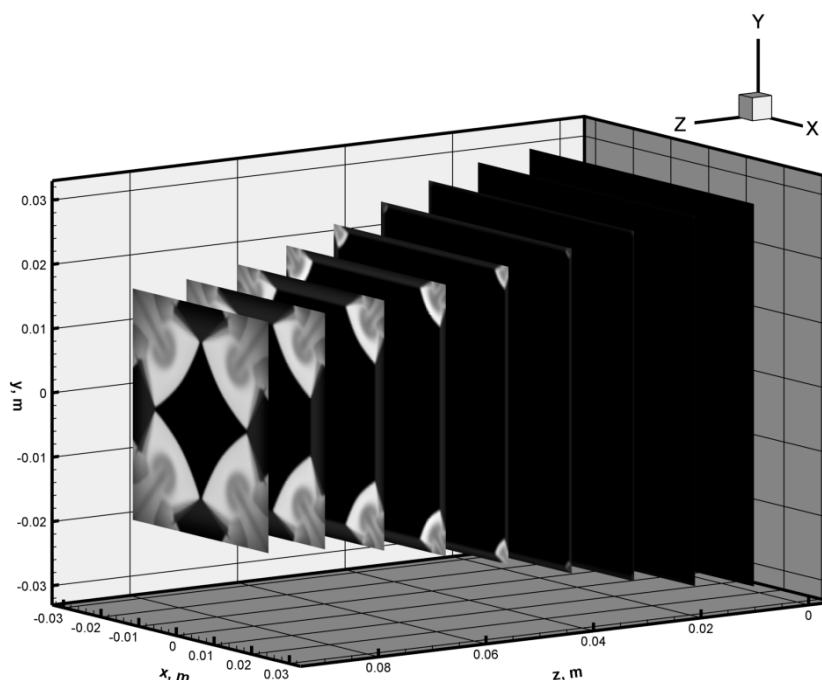


Рис.9. Стационарная детонация около двугранных углов трехмерного канала.

Следует отметить, что при рассмотрении течений с детонацией границы применимости гипотезы плоских сечений смещаются в сторону больших скоростей набегающего потока. Согласно расчетам, при недостаточно высокой его скорости увеличение энергии потока за счет тепловыделения при химических реакциях приводит к эффекту запираия и движению детонационной волны ко входному сечению. Эту ситуацию иллюстрирует рис.10, на котором представлено поле температуры в нескольких сечениях канала при $U=3000$ м/с.

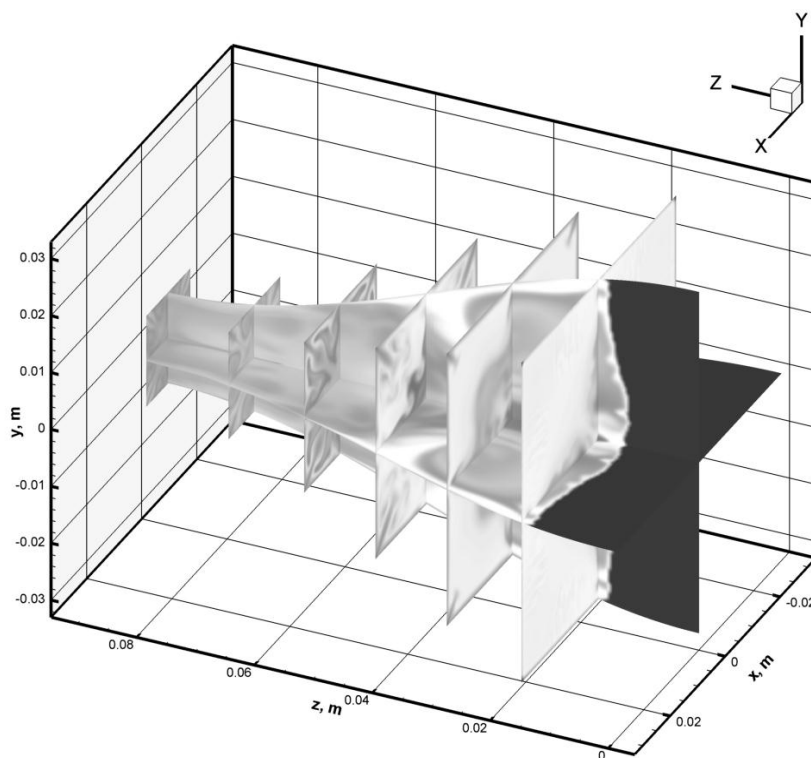


Рис.10. Поле температуры в сечениях канала в случае неприменимости гипотезы плоских сечений из-за запираания потока. $U=3000$ м/с.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Численное исследование плоских течений воздуха в области, ограниченной непроницаемым контуром в форме квадрата, возникающих при равномерном движении противоположных сторон навстречу друг другу, выявило закономерности развития ударно-волновой картины при различных скоростях сторон и позволило определить зоны концентрации энергии, в которых возможно возникновение детонации.

В задаче об инициировании детонации пропановоздушной смеси при изменении размера квадратной области по синусоидальному закону проведена классификация режимов формирования детонации в зависимости от амплитуды и периода колебаний длины стороны квадрата.

Расчетом трехмерных сверхзвуковых течений в каналах переменного квадратного сечения подтверждена гиперзвуковая аналогия плоских и пространственных течений, позволяющая использовать двумерные решения для оценки трехмерных проблем инициирования, распространения и стабилизации детонационных волн. Вместе с тем, установлена ограниченность данной аналогии, связанная с запиранием потока.

ЛИТЕРАТУРА

1. Westbrook C.K., Dryer F.L. Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion // Prog. Energy Combust. Sci. – 1984. – Vol.10. – P.1-57.
2. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.Н., Прокопов Г.П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. – М.: Наука, 1976. – 400 с.

3. *Ильюшин А.А.* Закон плоских сечений в аэродинамике больших сверхзвуковых скоростей // ПММ. – 1956. – Т.20. – Вып.6. – С.733-755.
4. *Черный Г.Г.* Течения газа с большой сверхзвуковой скоростью. М.: Физматгиз, 1959. – 220 с.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ В ИМПУЛЬСНОЙ ГИПЕРЗВУКОВОЙ АЭРОДИНАМИЧЕСКОЙ ТРУБЕ*

Левин В.А.¹, Мануйлович И.С.², Марков В.В.², Захаров Н.Н.³, Яновский Ю.Г.³,
Левин Ю.К.³

¹Дальневосточный федеральный университет, г. Владивосток, Россия

²НИИ механики МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия

³ФГБУН Институт прикладной механики Российской академии наук, г. Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

Смоделированы и исследованы течения в импульсной гиперзвуковой аэродинамической установке ИПРИМ РАН при обтекании тел сложной формы и при горении цилиндрической шашки твердого ракетного топлива. Расчеты проведены на суперкомпьютере «Ломоносов».

1. ВВЕДЕНИЕ

За последние годы во всем мире наблюдается тенденция использования мощных вычислительных систем для комплексного исследования быстропротекающих процессов в природе и технике, а также при создании высокотехнологичных промышленных изделий. Усилия больших групп ученых, инженеров и программистов направлены на разработку вычислительных комплексов, предназначенных для создания проектной документации по результатам численных экспериментов на базе соответствующих математических моделей функционирования технических устройств, испытания их виртуальных идеальных образцов, выбор по их результатам оптимальных вариантов конструкции и материалов для производства изделия с нужными свойствами. В настоящей работе предлагается вариант вычислительного комплекса, предназначенного, в конечном счете, для моделирования процессов в определенной импульсной установке, используемой при экспериментальном исследовании двигательных устройств, в которых реактивная тяга создается при сгорании твердого ракетного топлива. Данные экспериментов указывают на ряд проблем, связанных, в частности, с организацией устойчивого горения топливных элементов в сверхзвуковом потоке. Особенности протекающих процессов, которые необходимо учитывать при моделировании, приводят к необходимости использовать высокопроизводительные вычислительные системы с распараллеливанием процесса расчета. Для этого создан вычислительный комплекс, который апробирован на сложных и трудоемких задачах о ячеистой структуре трехмерной волны детонации и показал большие потенциальные возможности по исследованиям как фундаментальных, так и прикладных проблем.

Очевидно, что вычислительный эксперимент не может стать эффективным инструментом исследования сложных быстропротекающих процессов без коррекции математических моделей физических процессов, численных алгоритмов и компьютерных программ с использованием данных целенаправленных

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 11-01-00068, 11-01-12043-офи, 12-01-90416-Укр_а), Совета по грантам Президента РФ (НШ 8424.2010.1), Программ фундаментальных исследований Президиума РАН.

экспериментов. Это связано с тем, что все компоненты вычислительного эксперимента являются плодом творческого процесса, в основе которого лежит неизбежное абстрагирование от каких-то деталей реального процесса, построение его физической и математической модели, а также использование численных методов исследования сформулированных математических задач. Отсюда следует ограниченность области применения вычислительного эксперимента и необходимость комплексного теоретико-экспериментального подхода к изучению реальных процессов. Такой подход уже длительное время реализуется в НИИ механики МГУ при исследовании течений в модели тягового устройства с кольцевым соплом на импульсной аэродинамической установке. В настоящее время благодаря Программе Президиума РАН «Горение и взрыв» завязались тесные творческие контакты НИИ механики и ИПРИМ РАН, наметились направления сотрудничества в области теории и эксперимента. Сложение усилий теоретиков и экспериментаторов должно способствовать успешному исследованию фундаментальных и прикладных проблем в рамках Программы «Горение и взрыв». Большие надежды на реализацию многих идей связаны с импульсной аэродинамической трубой ИПРИМ РАН. Ее описанию посвящен следующий раздел статьи.

2. АЭРОДИНАМИЧЕСКИЙ СТЕНД

Гиперзвуковая импульсная аэродинамическая труба состоит из ручного сбрасывающего клапана, форкамеры (объемом 6.9 литра) с расположенным в нутрии неё омическим подогревателем мощностью 10 кВт, двухслойного теплоизолирующего кожуха, запорного клапана, сменного профилированного осесимметричного сопла, закрытой рабочей части в виде камеры Эйфеля, диффузора и рассекателя. Теплоизолирующий кожух представляет собой тонкостенный цилиндр из жаропрочной стали, обёрнутый снаружи слоем теплоизолятора толщиной 5мм. Все элементы трубы крепятся к общей раме.

Основным элементом аэродинамической трубы является быстродействующий не разрушаемый затвор, который открывается под действием давления рабочего газа после срабатывания сбрасывающего клапана. Время срабатывания затвора не более 7 мс.

Аэродинамическая труба имеет следующие характеристики:

- Число Маха /диаметр среза сопла мм: $M=2/56$; $M=3/80$; $M=4-7/100$.
- Давление в форкамере МПа – до 20
- Температура в форкамере К – до 800
- Длительность рабочего режима с – до 0.2
- Диаметр моделей мм – до 40
- Длина моделей мм – до 300

Время нагрева воздуха в форкамере до температуры 800К не превышает 15 – 25 с. При этом температура наружной стенки форкамеры составляет 30-40°C. Источником осушенного воздуха высокого давления является мобильный трёхступенчатый компрессор BAUER junior.

Стенд оснащён теневым прибором Теплера для визуализации течения газа в рабочей части аэродинамической трубы и трёхкомпонентными тензовесами, предназначенными для измерения быстроменяющихся аэродинамических сил действующих на модель, установленную в рабочей части трубы (компонент X – 0-20[кг], компонент Y – 0-20[кг], компонент Mz – +2[кг*м]). На установке есть

современный многоканальный измерительный комплекс, а также система автоматизации рабочих процессов при подготовке и проведении экспериментов.

Стенд позволяет решать следующие задачи:

1. управление пограничным слоем с помощью тепломассоподвода;
2. исследование тел минимального сопротивления;
3. испытания ПВРД с горением топлива;
4. исследования влияния массоподвода на сопротивление частей ЛА;
5. исследование характеристик сверхзвуковых воздухозаборников.

На рис.1,а показаны некоторые варианты экспериментальных моделей, а на рис.1,б – поля чисел маха, полученные на срезе сопл в импульсной аэродинамической трубе. Далее представлены результаты предварительных исследований [1].

На рис.2 приведены теневые фотографии обтекания конуса (рис.2,а) и носовой части центрального тела (рис.2,б) осесимметричного воздухозаборника с двумя рядами тонкостенных пилонов, за которыми расположены форсунки для подачи керосина. Исследуемая модель показана на рис.1,а.

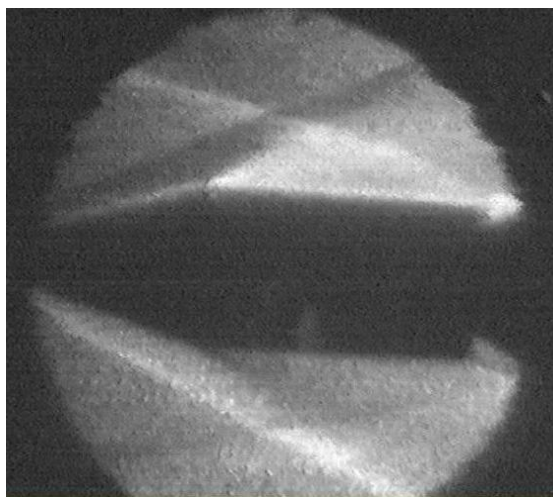


а)

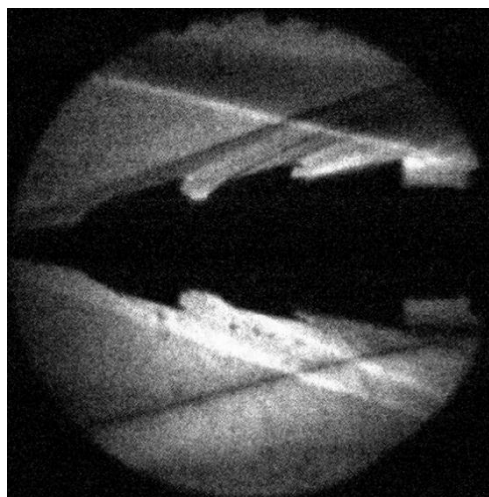


б)

Рис.1.



а)

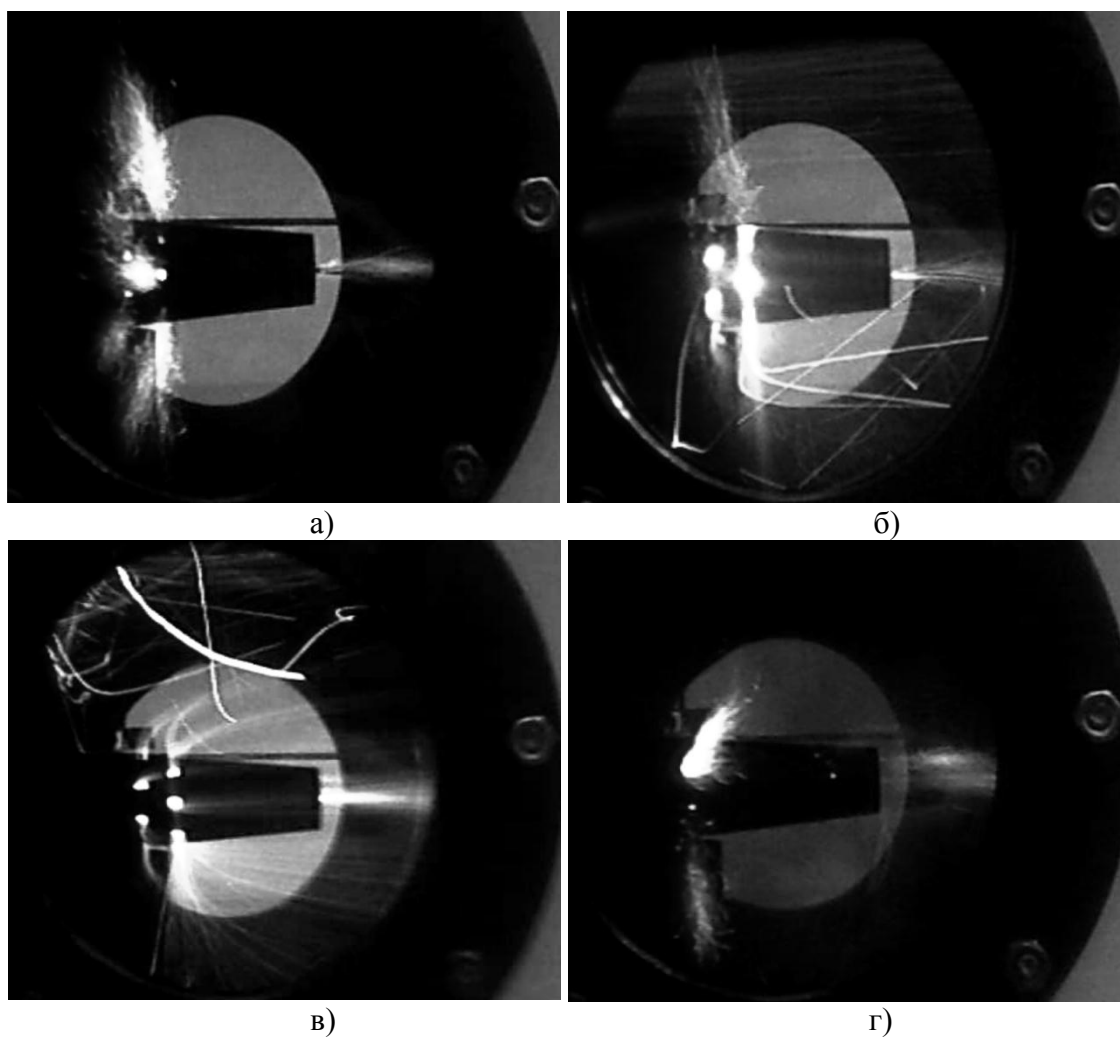
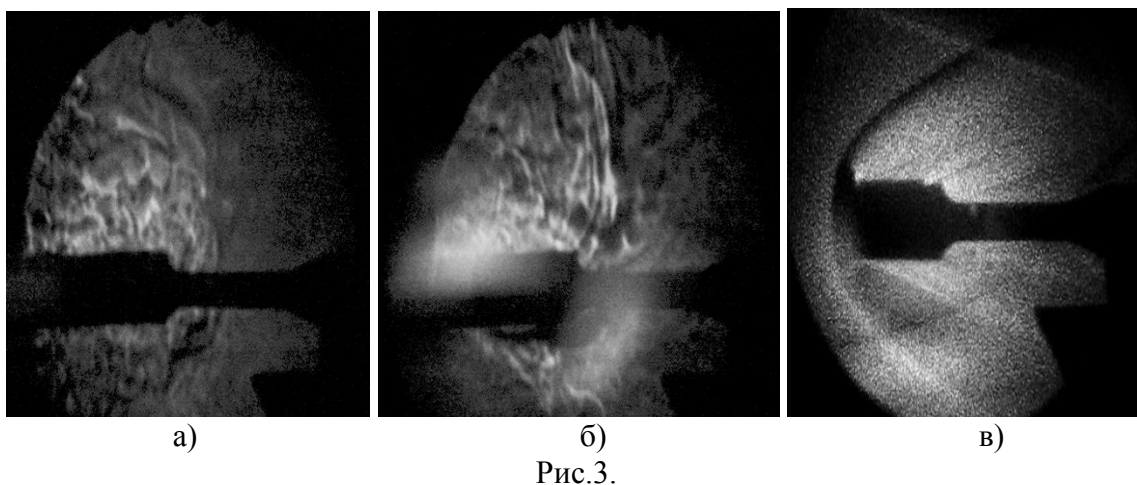


б)

Рис.2.

На рис.3 представлена кинограмма процесса горения цилиндрической шашки твёрдого топлива. Сначала (до запуска трубы) шашка поджигалась с помощью электрического запала, наклеенного на его лобовую поверхность (рис.3,а), через 1-3

секунды топливо начинало интенсивно гореть (рис.3,б), после чего производился запуск трубы. Многочисленные эксперименты показали, что после запуска трубы горение полностью прекращалось (рис.3,в) [1].



Иначе происходит процесс горения, когда топливо располагается внутри канала модели ПВРД ТТ с внешним горением (см. рис.4). До запуска трубы

топливная шашка поджигалась (рис.4,а), и через 2 секунды производился запуск трубы. Начальный момент формирования сверхзвукового обтекания модели показан на рис.4,б,а на рис.4,в – фотография сформировавшегося сверхзвукового потока, обтекающего модель. Видна форма многочисленных струй газа, выходящих из камеры сгорания. При этом, как показали фотографии воздухозаборника модели (модель была выдвинута из сопла), происходил его запуск. В следующий момент времени истечение из сопла аэродинамической трубы прекращается (на рисунке не показано), и все признаки горения топлива вне модели мгновенно исчезают, а затем процесс горения внутри канала восстанавливается (см. рис.4,г) и продолжается до полного выгорания топлива [1].

3. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

Для описания течений многокомпонентной газовой смеси без эффектов переноса используется система дифференциальных уравнений Эйлера. В случае осесимметричных течений она имеет вид [2]

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho r)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u r)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v r)}{\partial r} &= 0, \quad \frac{\partial(\rho_i r)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i u r)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_i v r)}{\partial r} = \omega_i r, \\ \frac{\partial(\rho u r)}{\partial t} + \frac{\partial[(p + \rho u^2)r]}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u v r)}{\partial r} &= 0, \quad \frac{\partial(\rho v r)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u v r)}{\partial x} + \frac{\partial[(p + \rho v^2)r]}{\partial r} = p, \\ \frac{\partial[(H - p)r]}{\partial t} + \frac{\partial(H u r)}{\partial x} + \frac{\partial(H v r)}{\partial r} &= 0, \quad H = \sum_{i=1}^N \rho_i h_i + \rho \frac{u^2 + v^2}{2} \end{aligned}$$

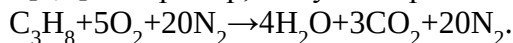
Здесь x и r – продольная и радиальная координаты; u и v – соответствующие компоненты скорости; t – время; ρ , p и H – плотность, давление и полная энтальпия смеси соответственно; N – число компонентов смеси; h_i , ρ_i и ω_i – энтальпия, плотность i -го компонента смеси и скорость ее изменения при химических реакциях.

Калорическое и термическое уравнения состояния смеси имеют вид

$$p = \sum_{i=1}^N (\rho_i / \mu_i) R_0 T, \quad h_i = c_{0i} + c_{pi} T, \quad i = 1, \dots, N,$$

где T – температура смеси, R_0 – универсальная газовая постоянная, μ_i – молекулярная масса i -го компонента смеси. Значения парциальных энтальпий $h_i(T)$ получаются аппроксимацией табличных значений [3]. В качестве граничных условий на твердых стенках используется условие непротекания.

При рассмотрении течений инертных газовых смесей полагается $\omega_i = 0$ для всех компонент смеси. При исследовании детонационных процессов используется одностадийная кинетика горения, описываемая одним стехиометрическим уравнением [4,5]. Например, в случае горения смеси пропана с воздухом



Здесь $N=5$, а скорость реакции определяет все ω_i согласно равенствам

$$\frac{\omega_{\text{C}_3\text{H}_8}}{\mu_{\text{C}_3\text{H}_8}} = \frac{\omega_{\text{O}_2}}{5\mu_{\text{O}_2}} = -\frac{\omega_{\text{H}_2\text{O}}}{4\mu_{\text{H}_2\text{O}}} = -\frac{\omega_{\text{CO}_2}}{3\mu_{\text{CO}_2}} = AT^\beta e^{-\frac{E}{R_0 T}} \left(\frac{\rho_{\text{C}_3\text{H}_8}}{\mu_{\text{C}_3\text{H}_8}} \right)^a \left(\frac{\rho_{\text{O}_2}}{\mu_{\text{O}_2}} \right)^b, \quad \omega_{\text{N}_2} = 0,$$

где индексы i заменены на символы компонентов, а A , β , E , a , b являются константами.

Для других реакций горения уравнение одностадийной химической кинетики выглядит аналогично. Изменяются только константы A , β , E , a , b и стехиометрические коэффициенты реакции.

В рассмотренных ниже задачах воздух считается смесью кислорода с азотом в молярном соотношении $v_{O_2}:v_{N_2}=1:4$. В случае течений воздуха в отсутствии горючего $N=2$, $\omega_1=\omega_2=0$.

Исследование проводится модифицированным методом С.К.Годунова [6] 1-го порядка точности по пространству и по времени. Метод реализован в оригинальном программном комплексе, предназначенном для решения широкого круга одномерных, двумерных и трехмерных задач нестационарной динамики газообразных горючих смесей. Для адекватного расчета течений реагирующих газовых смесей требуется высокое пространственное разрешение, при котором на зону реакции всегда приходится достаточно большое число ячеек. Поэтому для численного исследования необходимы большие ресурсы многопроцессорных суперЭВМ. Программный комплекс, разработанный и используемый в данном исследовании, распараллелен на основе MPI и позволяет производить расчеты задач с количеством расчетных ячеек, достигающим нескольких миллиардов. В данном исследовании расчеты проводились на суперкомпьютере МГУ «Ломоносов» с расчетными сетками, содержащими до 100 млн. ячеек.

Возможности разработанного программного комплекса были в полной мере использованы при моделировании течений в импульсной гиперзвуковой аэродинамической трубе. Для выявления основных особенностей течений была рассмотрена идеальная осесимметричная модель. Вместе с тем, форма и размеры большинства элементов модели полностью соответствовали реальной установке. Для проведения расчетов проводилось разбиение расчетной области на множество расчетных блоков, каждый из которых соответствовал отдельному вычислительному процессу. При этом расчетная сетка не имела сгущений, а пространственное разрешение было примерно одинаковым во всей расчетной области. Для моделирования обтекания тел сложной формы и горения твердотопливной шашки в импульсной трубе были реализованы 3 различные геометрические конфигурации расчетной области: 1) без установленных тел внутри установки; 2) с установленным по центру осесимметричным телом специальной формы; 3) с осесимметрично установленным круговым цилиндром с диаметром 5 см, по форме совпадающим с ТТШ. Характерное время расчета течения в любой из конфигураций составило 15 минут.

3. КОНФИГУРАЦИЯ №1

Рис.5 иллюстрирует форму расчетной области и ее разбиение на расчетные блоки, построенные в программном комплексе для случая 1). Количество расчетных блоков для первой конфигурации было 479. В каждом из них проводилось разбиение 100×100 ячеек.

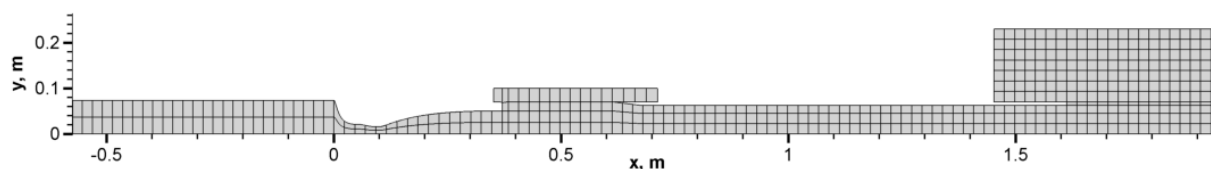


Рис.5. Разбиение расчетной области на расчетные блоки для трубы без установленных внутри нее тел.

Таким образом, полное количество ячеек было равно 4.79 миллиона. Расчеты в этом случае проводились на 479 процессорных ядрах, принадлежащих 60

вычислительным узлам суперкомпьютера «Ломоносов». На рис.6 показана использованная расчетная сетка для камеры в конфигурации №1 с прорежением через 10 узлов по обеим координатам.

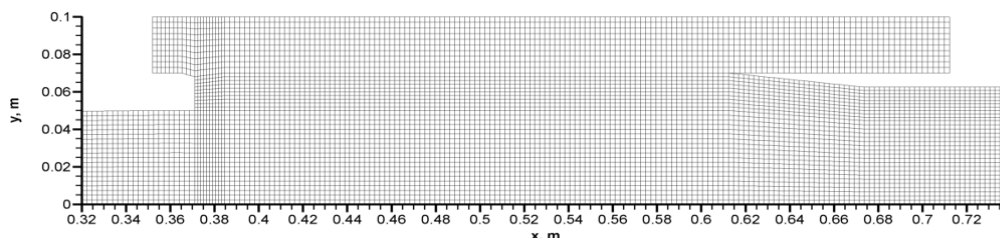


Рис.6. Расчетная сетка для камеры в конфигурации №1 (показана каждая 10-я линия сетки).

При моделировании считалось, что во всем пространстве установки, кроме форкамеры, находится неподвижный воздух при давлении 1 атм. и температуре 300К, а в форкамере находится неподвижный воздух при повышенном давлении 100 атм. и с той же температурой. Считалось, объем форкамеры составляет круговой цилиндр в «левой» части установки на приведенных выше схемах, а в начальный момент мембрана в форме диска, отделяющая объем форкамеры от остальной части установки, разрывается и начинается истечение. Расчеты выявили сложную, сильно нестационарную структуру течения с множеством ударных волн, взаимодействующих друг с другом и со стенками камеры, с периодически повторяющимися эффектами кумуляции вблизи оси симметрии. На рис.7 представлено поле давления внутри камеры, полученное в расчете во время начальной фазы истечения – спустя 2.8 мс после его начала. Для удобства восприятия рисунка произведено отражение расчетной области относительно оси симметрии.

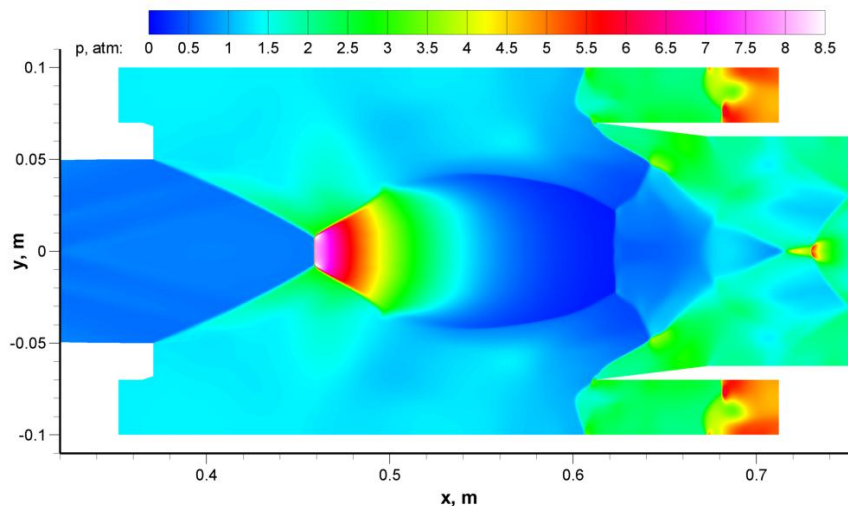


Рис.7. Поле давления на начальной фазе истечения (2.8 мс).

На рис.8 представлено поле числа Маха внутри камеры в тот же самый момент времени. Отчетливо виден диск Маха вблизи оси симметрии.

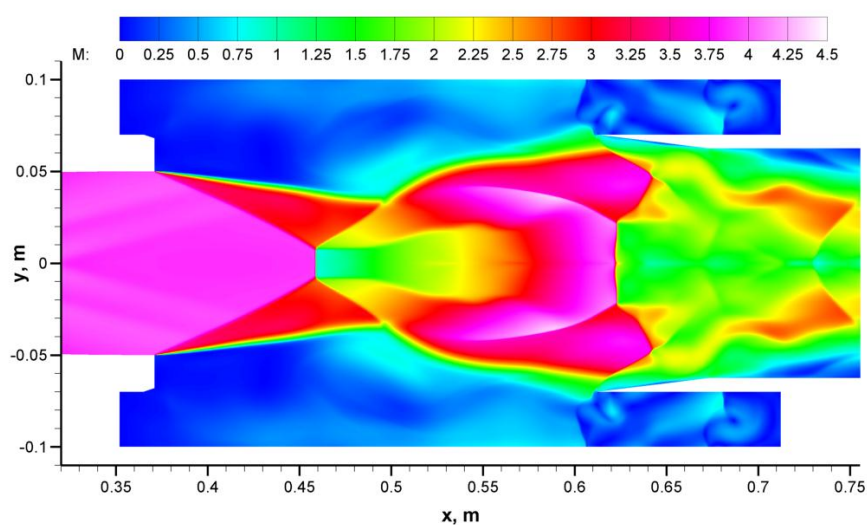


Рис.8. Поле числа Маха на начальной фазе истечения (2.8 мс).

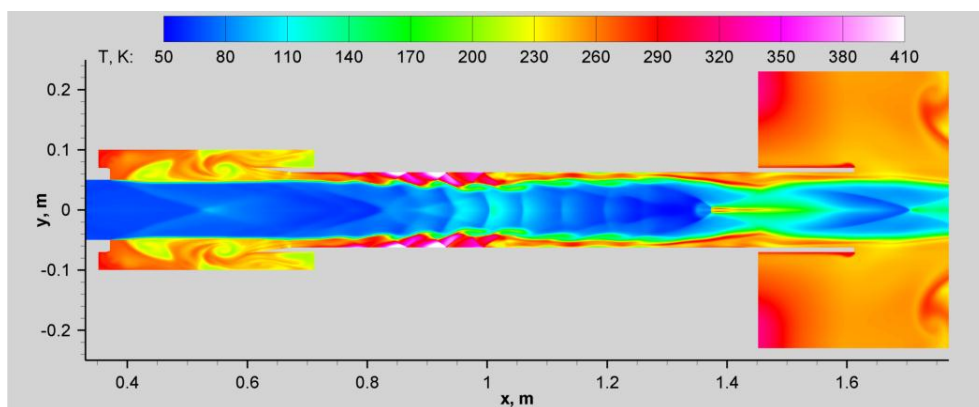


Рис.9. Поле температуры в выхлопной трубе спустя 17.8 мс.

Ударно-волновая картина течения в выхлопной трубе также является достаточно сложной. На рис.9 представлено поле температуры в момент времени 17.8 мс.

4. КОНФИГУРАЦИЯ №2

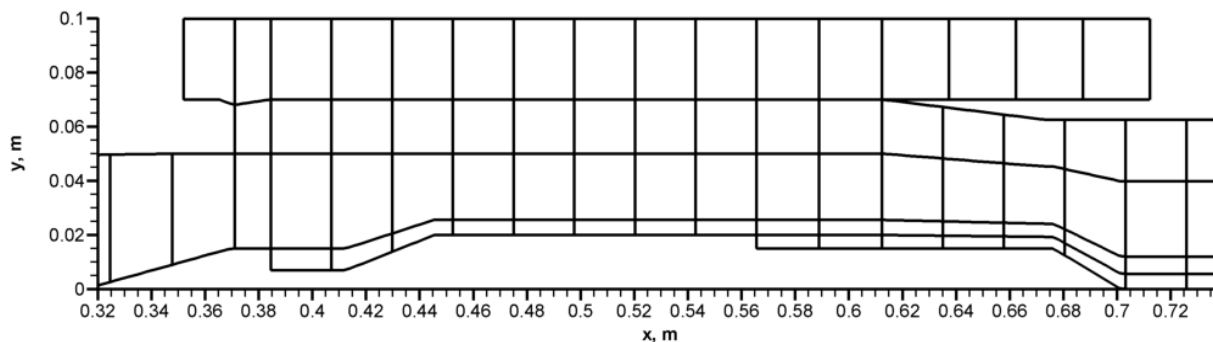


Рис.10. Разбиение расчетной области для расчета обтекания тела специальной формы.

Для конфигурации №2 в программном комплексе также производилось разбиение расчетной области на простые расчетные блоки (рис.10) и строилась расчетная сетка, границы которой точно совпадали с твердыми поверхностями аэродинамической трубы и тела специальной формы, установленного в газодинамическом тракте для обтекания.

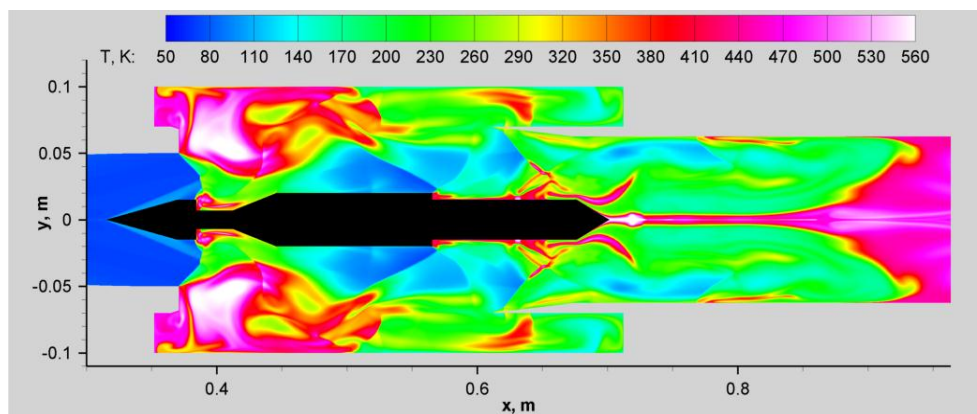


Рис.11. Поле температуры на начальной фазе истечения (2.1 мс).

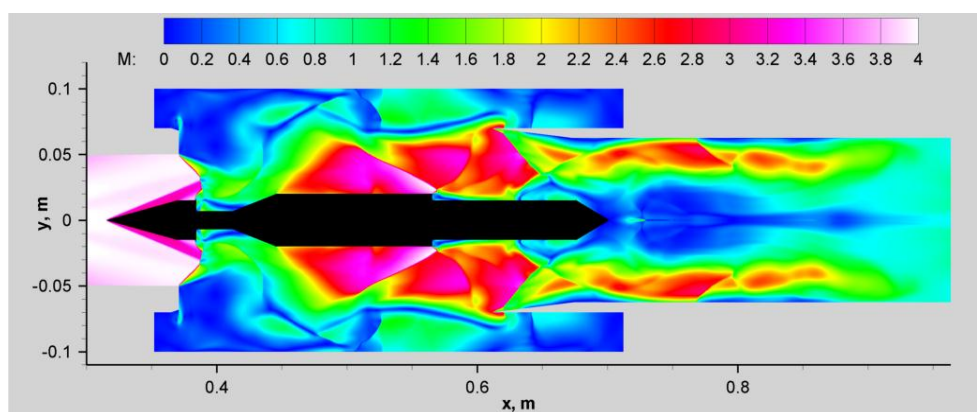


Рис.12. Поле числа Маха на начальной фазе истечения (2.1 мс).

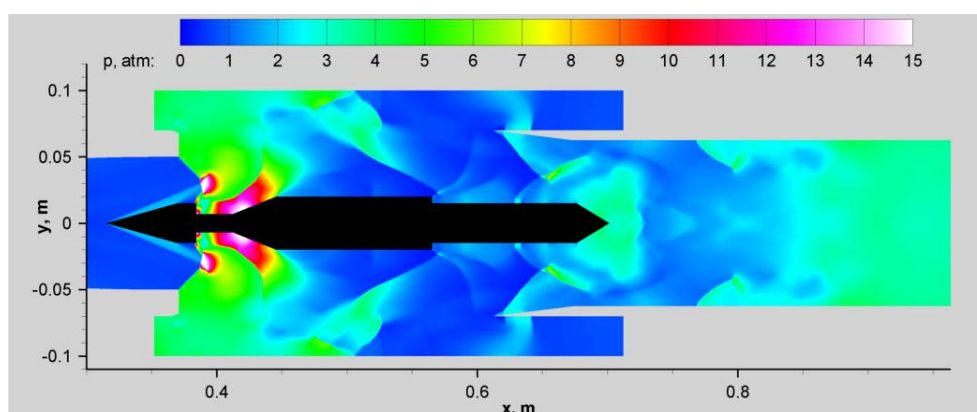


Рис.13. Поле давления на начальной фазе истечения (2.1 мс).

Рис.14 иллюстрирует поле числа Маха в более поздний момент времени, когда сформировались две конических ударных волны.

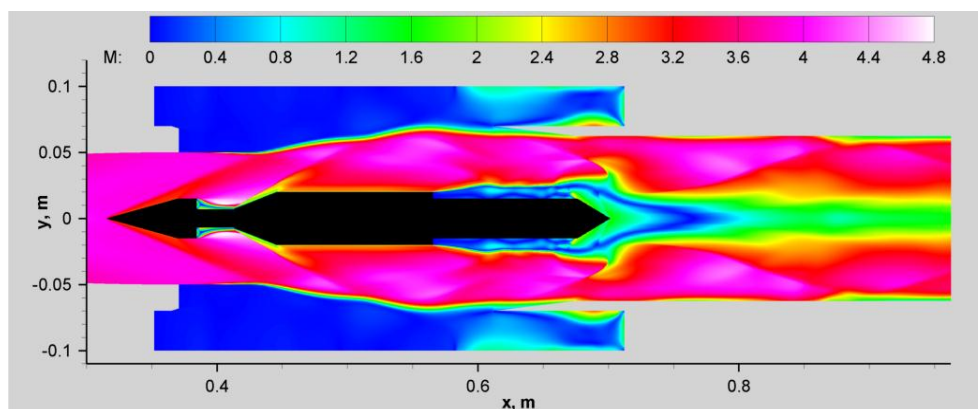


Рис.14. Поле числа Маха спустя 18 мс после начала истечения.

5. КОНФИГУРАЦИЯ №3

Конфигурация №3 соответствует случаю, когда внутри аэродинамической трубы устанавливается неподвижный цилиндр с диаметром 50 мм и длиной 183 мм. В реальных условиях цилиндр может быть металлическим или сделанным из твердого ракетного топлива при условии отсутствия поджигания. Расчетная сетка строилась аналогично случаю без внутренних тел, поскольку в месте расположения цилиндра сетка, построенная для конфигурации №1, является ортогональной. Расчеты проводились на 471 процессорном ядре при тех же физических условиях, что и для конфигураций №1 и №2.

В расчетах была получена детальная картина течения во всем пространстве аэродинамической трубы. Перед цилиндром образовывалась отошедшая ударная волна, за которой набегающий поток существенно замедляется. Рис.15, 16 и 17 иллюстрируют поля температуры, числа Маха и давления вблизи цилиндра на начальной фазе истечения, когда число Маха возле выхода из расширяющегося сопла еще равно 4.0. На рис.18, 19 и 20 также представлены поля температуры, числа Маха и давления, но в масштабе всей аэродинамической трубы и в более поздний момент времени.

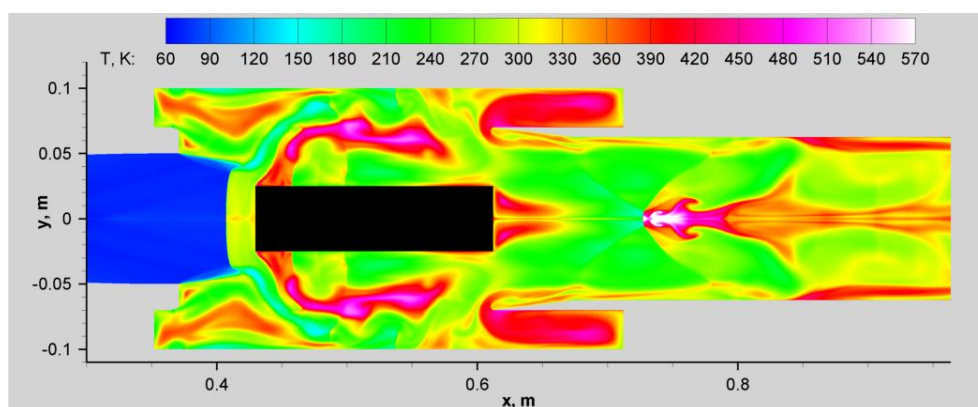


Рис.15. Поле температуры на начальной фазе истечения (3.6 мс).

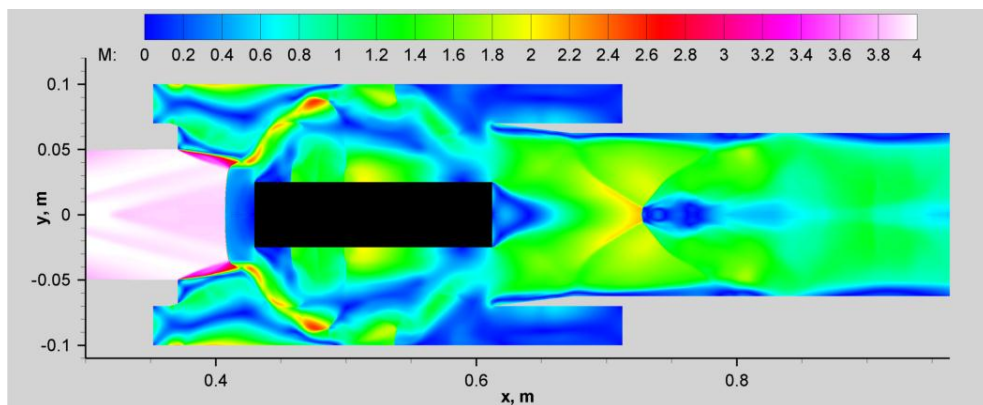


Рис.16. Поле числа Маха на начальной фазе истечения (3.6 мс).

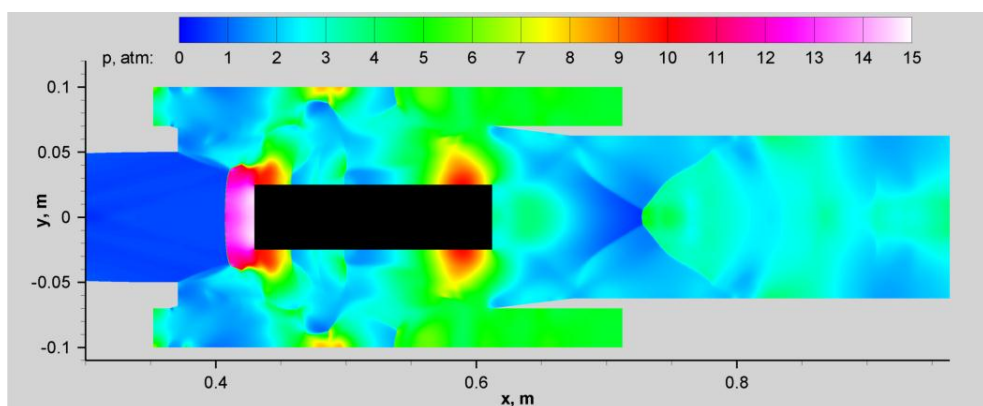


Рис.17. Поле давления на начальной фазе истечения (3.6 мс).

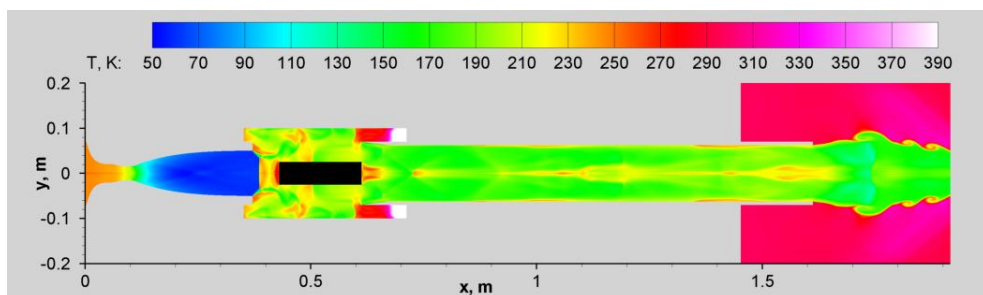


Рис.18. Поле температуры спустя 29.4 мс после начала истечения.

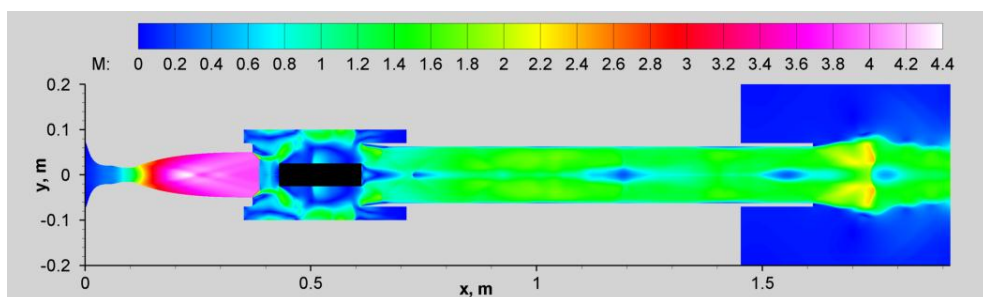


Рис.19. Поле числа Маха спустя 29.4 мс после начала истечения.

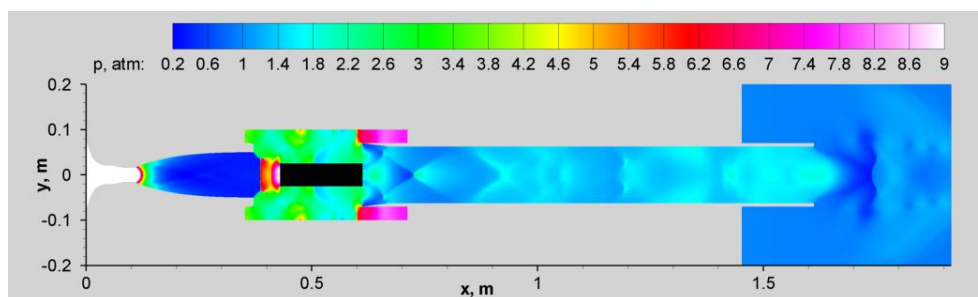


Рис.20. Поле давления спустя 24.9 мс после начала истечения.

6. КОНФИГУРАЦИЯ №4

Здесь и ниже представлены результаты моделирования горения ТТШ в форме цилиндра, имеющего размеры и положение согласно конфигурации №3. Горение ТТШ моделировалось следующим образом. Считалось, что горение ТТШ происходит с конца, обращенного к набегающему потоку, и что фронт горения остается плоским. Его скорость рассчитывалась как $U = 3.3 \times 10^{-3} \times (p/p_{atm})^{1/2}$, где $p_{atm} = 1$ атм – атмосферное давление, а p – переменное среднее давление за фронтом. Плотность ТТШ считалась равной $\rho_{ш} = 1660$ кг/м³, удельная теплота сгорания $Q = 2.5 \times 10^7$ Дж/кг, показатель адиабаты продуктов сгорания $\gamma_{пр} = 1.22$, молекулярный вес продуктов – $\mu_{пр} = 26.26$. Расчет производился на частично подвижной сетке, границы которой были связаны с границей ТТШ. При этом через границу расчетной области, соответствующую фронту горения, поступали продукты горения с массовым потоком на единицу площади, равным по модулю $\rho_{ш}U$, и потоком энергии на единицу площади, равным по модулю $\rho_{ш}U^3/2 + Q\rho_{ш}U$. В системе координат, связанной с фронтом горения, поток импульса, отнесенный к единице площади поверхности, был равен локальному давлению за фронтом p , поскольку материал ТТШ считался твердым и непроницаемым.

Выше при истечении воздуха под давлением 100 атм было получено давление вблизи переднего торца цилиндра, равное 15.0 атм. Для проверки корректности модели горения и выявления основных особенностей образования продуктов сначала были проведены расчеты горения ТТШ в аэродинамической трубе, полностью заполненной изначально неподвижным воздухом при давлении 15 атм и температуре 300 К.

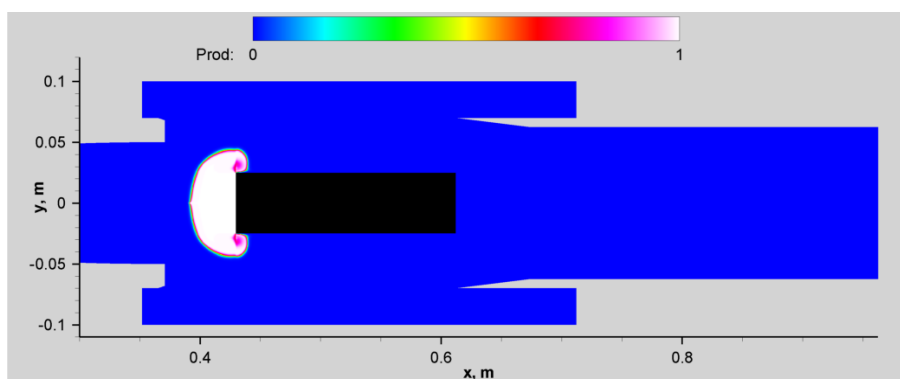


Рис.21. Массовая доля продуктов горения ТТШ в неподвижном воздухе с давлением 15 атм спустя 1.8 мс после начала горения

Расчеты показали адекватность модели горения изучаемому процессу, а также тот факт, что на интервалах времени, характерных для значительного распространения продуктов сгорания в пространстве аэродинамической трубы, фронт горения перемещается на ничтожно малое расстояние. В расчетах была выявлена характерная картина распространения продуктов, представленная на рис.21 в виде поля их массовой доли через 1.8 мс после начала горения. Как показал данный расчет, за это время фронт горения переместился на расстояние, меньшее 24 мкм, и приблизительно составляющее 1/10 размера расчетной ячейки.

В связи с этим на интервалах времени порядка 100 мс расчет горения ТТШ можно проводить и на неподвижной расчетной сетке с пренебрежимо малым искажением картины течения.

7. КОНФИГУРАЦИЯ №5

В данном разделе представлены результаты расчетов истечения воздуха в аэродинамическую трубу, в которой установлена горящая ТТШ. В этом случае, как и ранее, в форкамере в начальный момент времени находился неподвижный воздух с температурой 300 К и под повышенным давлением. При расчетах считалось, что в начальный момент одновременно начинается истечение воздуха из форкамеры и горение ТТШ. Параметры горения ТТШ использовались те же, что и в предыдущем разделе, но считалось, что пространство аэродинамической трубы, за исключением форкамеры, заполнено в начальный момент неподвижным воздухом при нормальных условиях: 1 атм и 300 К.

В расчетах на начальной фазе истечения была получена картина распространения продуктов горения, аналогичная представленной для горения в воздухе с давлением 15 атм. Расчеты при начальном давлении в форкамере, равном 100 атм, показали, что через некоторое ударная волна, подходящая к ТТШ из форкамеры со сверхзвуковым воздушным потоком за ней, сначала сильно деформирует область, занимаемую продуктами горения, а затем сильно сносит их вниз по потоку. Принимая во внимание невозможность прекращения горения ТТШ в использованной модели, в результате течение продуктов происходит в очень узком слое вблизи поверхности ТТШ. На рис.22-26 представлены поля массовой доли пропана и головной фронт ударной волны, иллюстрирующие процесс сноса продуктов горения.

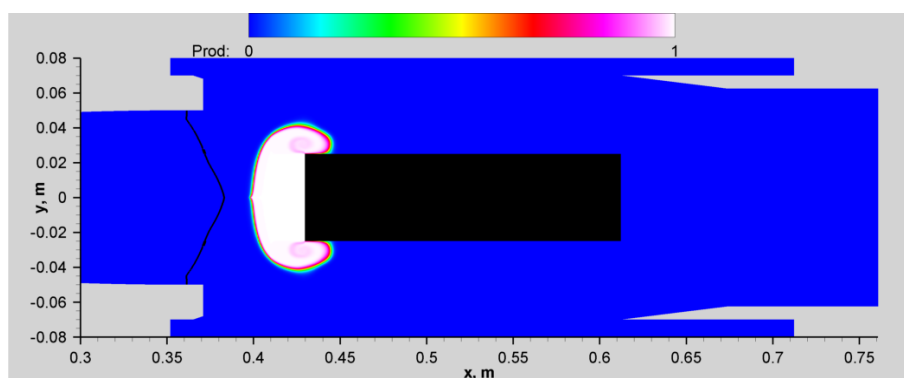


Рис.22. Массовая доля продуктов горения ТТШ и фронт головной ударной волны спустя 0.4 мс после начала горения и истечения сжатого воздуха под давлением 100 атм.

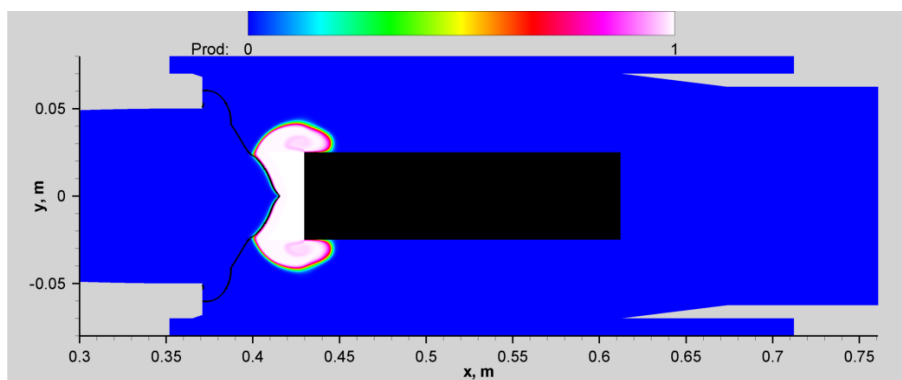


Рис.23. Массовая доля продуктов горения ТТШ и фронт головной ударной волны спустя 0.43 мс после начала горения и истечения сжатого воздуха под давлением 100 атм.

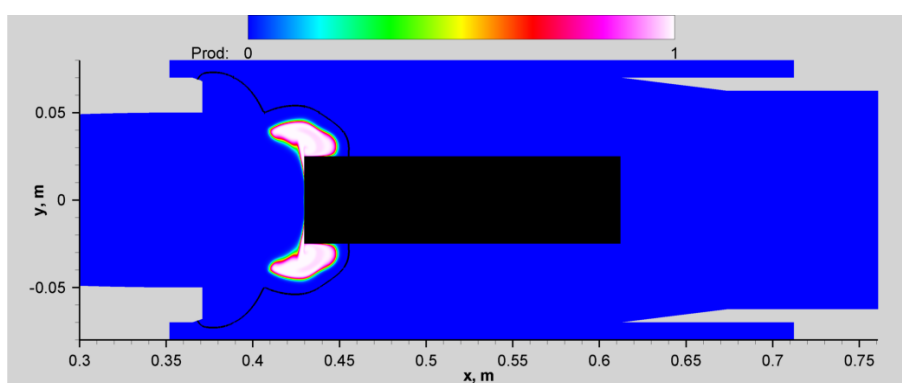


Рис.24. Массовая доля продуктов горения ТТШ и фронт головной ударной волны спустя 0.46 мс после начала горения и истечения сжатого воздуха под давлением 100 атм.

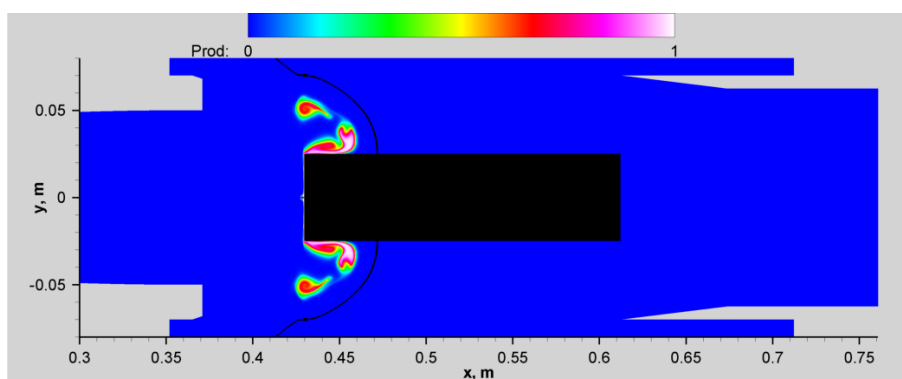


Рис.25. Массовая доля продуктов горения ТТШ и фронт головной ударной волны спустя 0.5 мс после начала горения и истечения сжатого воздуха под давлением 100 атм.

Как показали расчеты, уменьшение начального давления в форкамере позволяет увеличить толщину слоя продуктов горения после их сноса сверхзвуковым потоком.

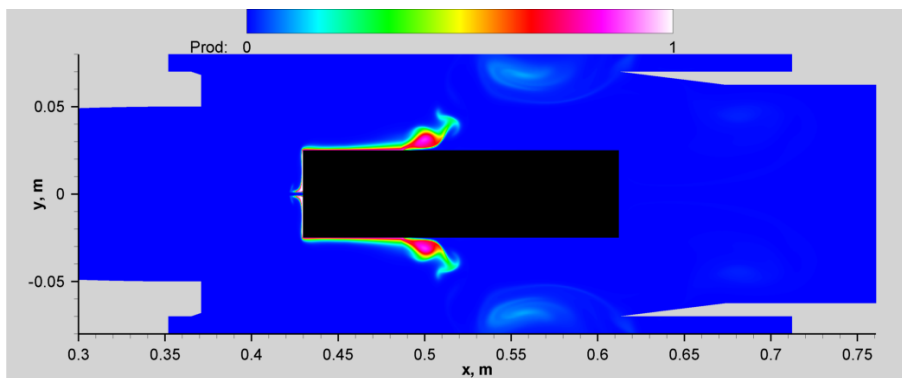


Рис.26. Массовая доля продуктов горения ТТШ и фронт головной ударной волны спустя 1.2 мс после начала горения и истечения сжатого воздуха под давлением 100 атм.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На разработанном авторами программном комплексе смоделированы и исследованы течения в импульсной гиперзвуковой аэродинамической трубе ИПРИМа РАН при обтекании тел сложной формы и при горении ТТШ в камере сгорания. Компоновка и размеры установки соответствуют реальному объекту. Для моделирования обтекания тел сложной формы и горения ТТШ в импульсной трубе были реализованы 3 различные геометрические конфигурации расчетной области: 1) без установленных тел внутри установки; 2) с установленным по центру осесимметричным телом специальной формы; 3) с осесимметрично установленным круговым цилиндром с диаметром 5 см, по форме совпадающим с ТТШ. Характерное время расчета течения в любой из конфигураций составило 15 минут. В расчетах была получена детальная картина течения во всем пространстве аэродинамической трубы. В частности, представлены результаты моделирования горения ТТШ в форме цилиндра. Была сформулирована и реализована модель, в которой считается, что фронт волны горения - плоский, а его скорость зависит от давления в продуктах горения. Получены данные о полях параметров потока, о характере растекания продуктов горения в неподвижной среде и при обтекании горячей топливной шашки сверхзвуковым потоком воздуха.

Авторы выражают благодарность к.т.н. И.Ю.Васильеву и Е.С.Прядко за помощь в проведении экспериментов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Васильев И.Ю., Захаров Н.Н., Полянских А.В., Прудников А.Г., Прядко Е.С. Исследование теплогазоаэродинамических процессов, происходящих при полетах высокоскоростных летательных аппаратов, в импульсной гиперзвуковой аэродинамической трубе / Всероссийская конференция «Механика и наномеханика структурно-сложных и гетерогенных сред. Успехи, проблемы, перспективы». Сборник трудов. – 2010. – Т.2. – С.161-166.
2. Левин В.А., Мануйлович И.С., Марков В.В. Формирование детонации во вращающемся эллиптическом цилиндре // ДАН. – 2010. – Т.432. – №6. – С.1-4.
3. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочник. Т.1. Кн.2. – М.: Наука, 1978. – 327 с.

4. Герасимов Г.Я. Экологические проблемы теплоэнергетики: Моделирование процессов образования и преобразования вредных веществ. – М.: Изд-во МГУ, 1998. – 210 с.
5. Варнатц Ю., Маас У., Дибба Р. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. – М.: Физматлит, 2003. – 351 с.
6. Годунов С.К., Забродин А.И., Иванов М.Я. и др. Численное решение многомерных задач газовой динамики. – М.: Наука, 1976. – 400 с.

РАСЧЕТ ПОДАВЛЕНИЯ ГАЗОВОЙ ДЕТОНАЦИИ ИНЕРТНЫМИ ЧАСТИЦАМИ В ДВУХСКОРОСТНОМ ДВУХТЕМПЕРАТУРНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ*

Тропин Д.А., Федоров А.В.

*ФГБУН Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича
Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск, Россия*

РЕЗЮМЕ

В работе численно исследуются процессы подавления и гашения детонации в смесях водорода и метана с окислителем методом вброса инертных частиц в поле течения в рамках двухскоростной, двухтемпературной модели механики гетерогенных сред. В частности определена волновая картина течения в инертном облаке частиц под воздействием детонационных волн. Показана правомерность применения односкоростной модели для описания процессов подавления и гашения детонации облаками крупных частиц. Выявлено влияние объемной концентрации и диаметра движущихся частиц на скорость ДВ, изучен предельный переход от замороженного детонационного течения, реализующегося при больших диаметрах частиц, к равновесному при малых диаметрах. Определены геометрические пределы детонации и проведено сравнение с подобными результатами расчетов по односкоростной модели.

Ключевые слова: подавление детонации; математическое моделирование; смесь реагирующих газов и инертных частиц

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование детонации привлекает большое внимание на протяжении многих лет в связи с проблемой предотвращения катастрофических взрывов. В частности, например, при добыче угля в шахтах выделяются взрывоопасные газы, которые в аэросмеси с угольной пылью могут являться источником пылевых взрывов. Взрывоопасные смеси, образующиеся в угольных шахтах, это смеси воздуха и природного газа, который состоит в основном из метана с небольшими количествами этана и других углеводородов. Хотя большинство катастрофических взрывов газа в угольных шахтах порождают волны дефлаграции, наихудший сценарий развития подобного процесса предполагает зарождение детонационных волн (ДВ), которые чрезвычайно разрушительны. Кроме того, аварийные взрывы случаются при транспортировке смесей горючих газов к местам потребления.

За последнее десятилетие происходили и до сих пор происходят десятки вспышек и взрывов метана на угольных шахтах России («Воркутинская» (2002 г.), «Зиминка» (2003 г.), «Листвяжная» (2004 г.), «Есаульская» (2005 г.), «Анжерская» (2005 г.), «Ульяновская» (2007 г.), «Распадская» (2010 г.) и др.), которые уносят жизни сотен человек. Установлено, что взрывы метана и угольной пыли из всех аварий на шахтах являются наиболее сложными и опасными. В результате часто

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, коды проектов 11-08-00144-а, 11-01-00634 и Программы фундаментальных исследований Президиума РАН №26.2.

возникают пожары, обрушения, завалы в горных выработках, отравления и другие не менее тяжелые последствия.

Одним из способов подавления неконтролируемой детонации является метод ее подавления с помощью вброса в поле течения реагирующей газовой смеси инертных твердых частиц. Добавление химически инертных твердых частиц оказывается эффективным способом для контролирования и модификации процессов горения и детонации в газовых системах. Он может быть использован и для того, чтобы уменьшить скорость детонации, то есть уменьшить катастрофическое воздействие на окружающую среду.

Тем самым задачи инициирования, распространения, ослабления и подавления детонации относятся к числу наиболее актуальных и сложных задач механики реагирующих систем.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

2.1. Физико-математическая модель распространения и подавление детонации в газозвеси реагирующих газов и твердых инертных частиц.

Рассмотрим ударную трубу, заполненную газовой смесью либо водорода и кислорода, либо метана и кислорода, а также распределенными в пространстве частицами. Пусть по смеси распространяется ударная волна (УВ). При некоторых числах Маха УВ параметры смеси за фронтом превышают критические для воспламенения и горения значения, и происходит дефлаграционно-детонационный переход. После установления детонационной волны, она входит в неподвижный фильтр частиц или облако частиц, где распадается или нет на замороженную ударную волну (ЗУВ) и отстающую волну (фронт) воспламенения/горения (ВВГ). В одномерной нестационарной постановке механики гетерогенных сред динамика смеси описывается уравнениями неравновесной газовой динамики в двухскоростном, двухтемпературном приближении

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_1 u_1)}{\partial x} &= 0, \\
 \frac{\partial (\rho_1 u_1)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_1 u_1^2 + m_1 p)}{\partial x} &= p \frac{\partial m_1}{\partial x} - f, \\
 \frac{\partial (\rho_1 E_1)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho_1 u_1 \left(E_1 + m_1 \frac{p}{\rho_1} \right) \right)}{\partial x} &= -p \frac{\partial m_1}{\partial t} - q - f(u_1 - u_2), \\
 \frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_2 u_2)}{\partial x} &= 0, \\
 \frac{\partial (\rho_2 u_2)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_2 u_2^2 + m_2 p)}{\partial x} &= p \frac{\partial m_2}{\partial x} + f, \\
 \frac{\partial (\rho_2 E_2)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho_2 u_2 \left(E_2 + m_2 \frac{p}{\rho_2} \right) \right)}{\partial x} &= -p \frac{\partial m_2}{\partial t} + q + f(u_1 - u_2).
 \end{aligned} \tag{1}$$

Индекс 1 – относится к смеси газов, 2 – к частицам. $E_i = e_i + \frac{u_i^2}{2}$ – полная энергия фазы или компоненты, ρ_i, u_i, e_i – средняя плотность, скорость и внутренняя энергия i -ой фазы, p – давление смеси, m_i – объемная концентрация i -ой фазы, $\rho_i = m_i \rho_{ii}$, где ρ_{ii} – истинная плотность i -ой фазы.

2.2. Уравнения состояния.

Внутренняя энергия реакционно-способной смеси определяется из соотношения

$$e_1 = c_{v,1}T_1 + \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} h_{0_{\alpha}} - c_{p,1}T_{00},$$

где c_p, c_v – удельные теплоемкости газовой смеси при постоянном давлении и при постоянном объеме, ξ_{α} – относительная массовая концентрация компонента α ,

$c_v = \sum_{\alpha} c_{v_{\alpha}} \xi_{\alpha}$, $h_{0_{\alpha}}$ – энтальпия образования компонента. Величина α меняется от 1 до 8 для водород-кислородной смеси и от 1 до 15 для метан-кислородной смеси, $T_{00}=298.15$ К. Внутренняя энергия частиц $e_2 = c_{v,2}T_2$.

Система (1) дополняется уравнением состояния для газовой смеси в целом

$$p = \rho_{11}T_1R\sum_{\alpha} \frac{\xi_{\alpha}}{M_{\alpha}}. \quad (2)$$

2.3. Описание силового и энергетического взаимодействия.

Законы силового взаимодействия и теплообмена между газом и частицами описываются известными формулами

$$f = \frac{3m_2\rho_{11}}{4d}C_D|u_1-u_2|(u_1-u_2), q = \frac{6m_2\lambda_1}{d^2}Nu(T_2-T_1). \quad (3)$$

При этом зависимость числа Нуссельта от чисел Рейнольдса и Прандтля принимается в виде $Nu = 2 + 0.6Re^{1/2}Pr^{1/3}$. Для коэффициента сопротивления с учетом его зависимости от числа Рейнольдса и числа Маха относительного движения частиц используется следующая формула

$$C_D = \left[1 + e^{-\frac{0.43}{M_{12}^{4.67}}} \right] \left[0.38 + \frac{24}{Re} + \frac{4}{\sqrt{Re}} \right],$$

$$\text{где } Re = \frac{\rho_{11}d|u_1-u_2|}{\mu}, M_{12} = \frac{|u_1-u_2|\sqrt{\rho_{11}}}{\sqrt{\gamma_1 p}}.$$

2.4. Кинетика воспламенения и горения реагирующей газовой смеси.

Водород-кислород. Для описания кинетики воспламенения и горения реагирующей смеси водорода и кислорода используется детальная кинетическая схема, которая учитывает 38 прямых и обратных реакций восьми компонентов (H_2 , O_2 , H_2O , OH , O , H , HO_2 , H_2O_2). В [2] приведены константы скоростей прямых и обратных реакций. В работе [3] данная кинетическая схема сравнивалась с двумя

другими (схемы с 42-мя и 60-ю реакциями) в задаче о воспламенении водорода в кислороде и была верифицирована в широком диапазоне параметров течения по зависимостям времени задержки воспламенения от температуры за фронтом инициирующей ударной волны.

Метан-кислород. Для описания кинетики воспламенения и горения реагирующей смеси метана и воздуха используется модифицированная детальная кинетическая схема [4], которая учитывает 92 прямые и обратные реакции пятнадцати компонентов (H_2 , O_2 , H_2O , OH , O , H , HO_2 , H_2O_2 , CH_4 , CH_3 , CH_3O , CH_2O , HCO , CO_2 , CO). Модификация данного метода заключалась в следующем. На рис.1 представлен механизм окисления метана, взятый из работы [5]. Здесь присутствуют две ветви: распад на более простые углеводороды с образованием угарного и углекислого газа, образование сложных углеводородов. В [6] детально описаны элементарные реакции, происходящие при окислении метана, и сделан вывод, что ветвь образования сложных углеводородов практически не влияет на процессы воспламенения и горения метана, т.к. концентрации этих углеводородов практически равны нулю. Наши расчеты подтвердили это, и поэтому мы исключили эту ветвь из кинетики [4].

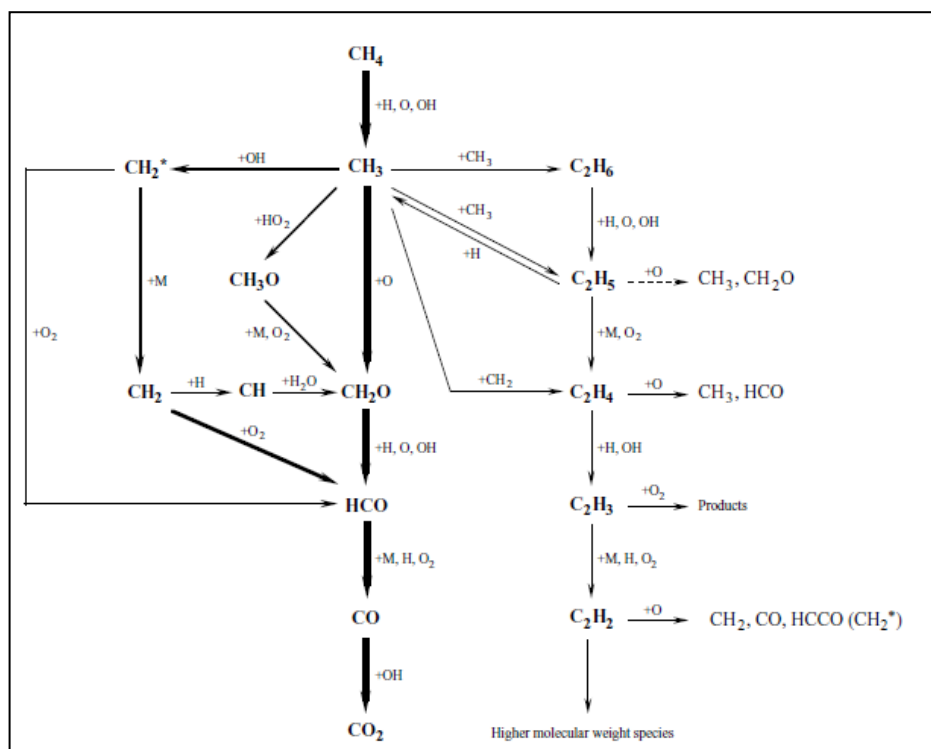


Рис.1. Механизм окисления метана.

2.5. Верификация модели воспламенения и горения метана.

Теперь проведем верификацию модифицированной кинетической схемы воспламенения и горения метана. Отметим, что в [4] была проведена верификация полной кинетической схемы по временам индукции. Показано, что рассчитанные по данной схеме периоды индукции и длины зон индукции хорошо коррелируют с экспериментальными данными независимо от типа топлива, разбавления азотом, начального давления и начальной температуры смеси. В дополнении к этим тестовым расчетам, покажем, что модифицированная кинетическая схема

удовлетворительно описывает экспериментальные данные еще и вне зависимости от количества окислителя и разбавления другим инертным газом – аргоном. На рис.2 приведены расчетные и экспериментальные зависимости времени задержки воспламенения метана от температуры за УВ. Видно, что для обоих экспериментов, отличающихся содержанием окислителя (кислорода) и инертного газа (аргона), имеем удовлетворительное соответствие расчетных данных с экспериментальными. Кроме того, расчеты для смеси с большим количеством инертного газа и малым количеством окислителя дают слегка заниженные значения времен задержки воспламенения. Расчеты же с меньшим количеством инертного газа и большим количеством окислителя дают слегка завышенные значения времен задержки воспламенения по сравнению с экспериментальными данными.

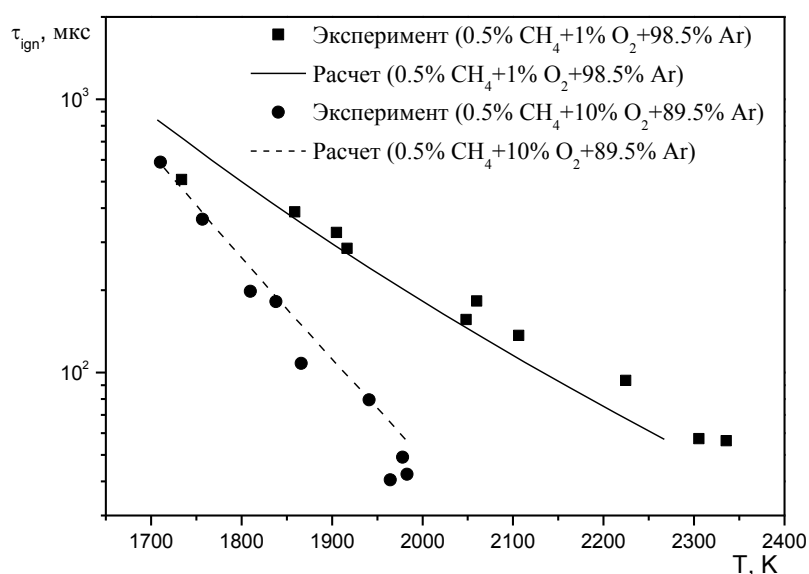


Рис.2. Зависимости времени задержки воспламенения метана от температуры за УВ. Сравнение расчетных данных с экспериментальными [7].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

3.1. Влияние массовой концентрации частиц в фильтре на скорость детонации.

В качестве инертной компоненты были взяты частицы песка SiO_2 . На рис.3 показаны интегральные характеристики процесса подавления ДВ фильтром частиц – зависимости дефицита скорости детонации – $\eta = \frac{D}{D_{CJ}}$ (D – скорость детонации в смеси газа и частиц, D_{CJ} – скорость детонации Чепмена-Жуге) от относительной массовой концентрации частиц в фильтре – ξ_2 , то есть $\eta = \eta(\xi_2)$. Было интересно сопоставить данные кривые, рассчитанные также и для реагирующей смеси с аргоном. Оказалось, что увеличение объемной концентрации частиц, также как и рост массовой концентрации аргона приводит к уменьшению скорости детонации. Кроме того, показано, что частицы с диаметром 1 мкм гасят детонацию достаточно эффективно. Эти результаты качественно близки экспериментальным результатам [8]. Показано также, что частицы с диаметром 100 мкм подавляют детонацию аналогично тому, как это происходит в реагирующей смеси с добавлением аргона. На рис.3 приведены также данные из работы [9], которые демонстрируют, что

расчеты дефицита скорости для смеси пропана с карбидом вольфрама коррелируют с нашими результатами. Перечеркнутые маркеры на данном рисунке соответствуют концентрационным по массовой концентрации частиц пределам детонации. Для 10 и 100 мкм частиц эти значения равны 0.33 и 0.88, соответственно, что соответствует объемным концентрациям, равным $m_2 = 2 \cdot 10^{-4}$ и $m_2 = 2 \cdot 10^{-3}$, соответственно.

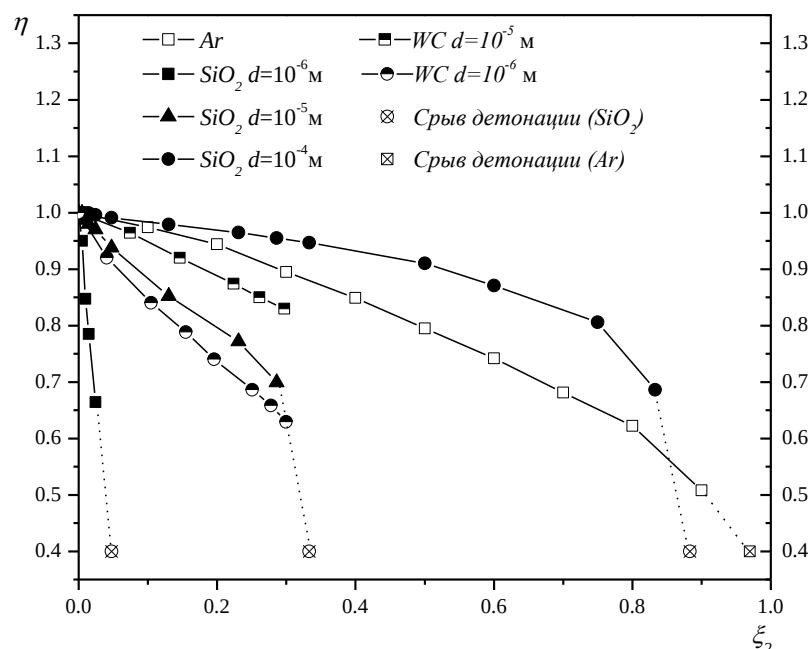


Рис.3. Зависимости скорости детонации от массовой концентрации инертных компонент.

3.2. О разгоне частиц в ДВ. Полубесконечное облако частиц.

Итак, откажемся от предположения о неподвижности частиц и проведем расчеты, показывающие, как происходит разгон частиц в ДВ. На рис.4а представлены распределения скоростей газа и частиц диаметром 100 мкм. Объемная концентрация инертных частиц в облаке была выбрана докритической - $m_2 = 10^{-4} < m_2^* = 2 \cdot 10^{-3}$. Расчеты с движущимися частицами показали, что для 100 микронных частиц этот предел изменяется в 2.5 раза и равен $5 \cdot 10^{-3}$ (рис.5), т.е. при меньших концентрациях частиц ДВ движется стационарно по газовозвеси, но при критической концентрации происходит подавление ДВ. Для подавления ДВ необходимо, чтобы химически инертные частицы попали в зону химической реакции, т.е. в область пространства, ограниченную с одной стороны фронтом УВ, а с другой — плоскостью Чепмена–Жуге. После выхода частиц за эту плоскость, значительного воздействия на процесс подавления детонации они не оказывают (см. например [10]). Из рис.4а видно, что в зоне реакции частицы остаются практически неподвижными (их скорость $u_2 \approx 50$ м/с по сравнению со скоростью газа $u_1 = 2100$ м/с, см. область структуры ДВ непосредственно примыкающую к переднему фронту ДВ), а разгоняются уже за этой зоной.

На рис.4б приведены распределения скоростей газа и частиц, а также объемная концентрация частиц диаметром 10 мкм в области течения. Очевидно, что 10 микронные частицы более интенсивно разгоняются в зоне реакции ($u_2 \approx 300$ м/с) по сравнению со 100 микронными. Концентрационный предел по объемной

концентрации частиц меняется по сравнению с пределом, полученным в неподвижном фильтре; увеличивается с $m_2^* = 10^{-4}$ до $m_2^* = 5 \cdot 10^{-4}$. Распределение объемной концентрации частиц на рис.4 демонстрирует, что за фронтом УВ их концентрация возрастает, а затем к передней кромке облака (границе облака) падает до нуля. Для частиц с диаметром в 10 мкм в отличие от 100 мкм вблизи УВ происходит довольно резкое, но не очень значительное возрастание этого параметра. Это связано с инерционными свойствами более мелких частиц, они быстрее увлекаются потоком за УВ.

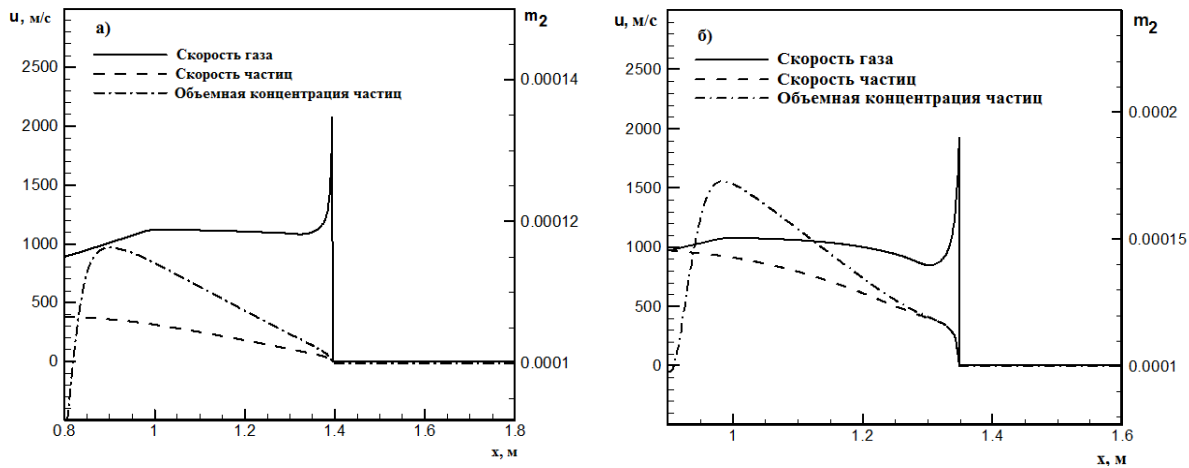


Рис.4. Сравнение распределения скоростей газа и частиц в ударной трубе. Распределение объемной концентрации частиц в ударной трубе. Начальная максимальная объемная концентрация частиц - $m_{2,0} = 10^{-4}$, момент времени $t = 5 \cdot 10^{-4}$ с. Частицы диаметром а) 100 мкм, б) 10 мкм.

На рис.5 приведены распределения дефицита скорости детонации от объемной концентрации частиц для частиц 10 и 100 мкм, рассчитанные для подвижного облака частиц и неподвижного фильтра частиц.

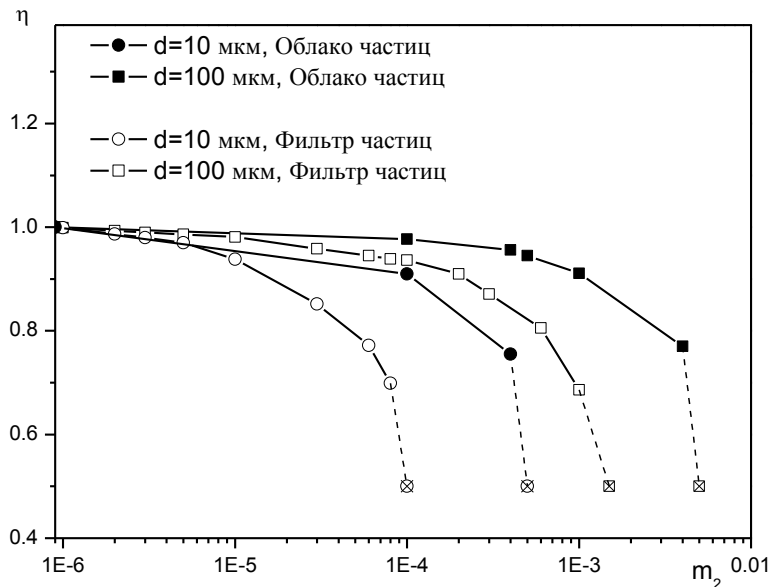


Рис.5. Зависимости дефицита скорости детонации от объемной концентрации частиц. Сравнение данных двухскоростной и односкоростной моделей.

Видно, что в областях малых объемных концентраций частиц эти зависимости не сильно отличаются, кривые идут друг по другу. Различия начинаются при приближении объемной концентрации к критическому значению. Более того, чем меньше диаметр частиц, тем сильнее отличаются концентрационные пределы. Для 100 микронных частиц пределы отличаются в 2.5 раза, для 10 микронных в 5 раз. Объясняется это следующим образом. В случае неподвижного фильтра частиц отъем импульса от газа максимален, поскольку в этом случае максимальна разница между скоростями газа и частиц. В случае подвижного облака частиц эта разница будет уже меньше, и, кроме того, будет уменьшаться по мере уменьшения диаметра частиц. Поэтому будет уменьшаться отъем импульса от газовой фазы и, следовательно, кривые дефицита скорости детонации будут лежать выше (рис.5) кривых, построенных для фильтра частиц. Кроме того, при увеличении диаметра частиц будет уменьшаться разница в концентрационных пределах, полученных для облака и фильтра частиц.

3.3. Влияние объемной концентрации и диаметра частиц на скорость ДВ.

Представляется интересным дать интегральные зависимости, характеризующие процесс подавления детонации. Так на рис.6 показаны зависимости скорости детонации от диаметра частиц для значений объемных концентраций, равных 10^{-4} , $4 \cdot 10^{-4}$, 10^{-3} . Видно, что с ростом диаметра частиц скорость детонации увеличивается, и все зависимости стремятся к определенному асимптотическому значению, соответствующему замороженному течению. Замороженное течение реализуется при больших диаметрах частиц, когда частицы не успевают разогнаться и их скорость в детонационной волне намного меньше скорости газа, как было видно выше для частиц диаметром 100 мкм. Кроме того, данные кривые в плоскости (D, d) по мере роста диаметра сближаются, но не пересекаются. И чем больше объемная концентрация частиц, тем ниже лежит соответствующая кривая. Следует отметить, что при уменьшении объемной концентрации частиц этот асимптотический предел приближается к скорости детонации в чистой водород-кислородной смеси.

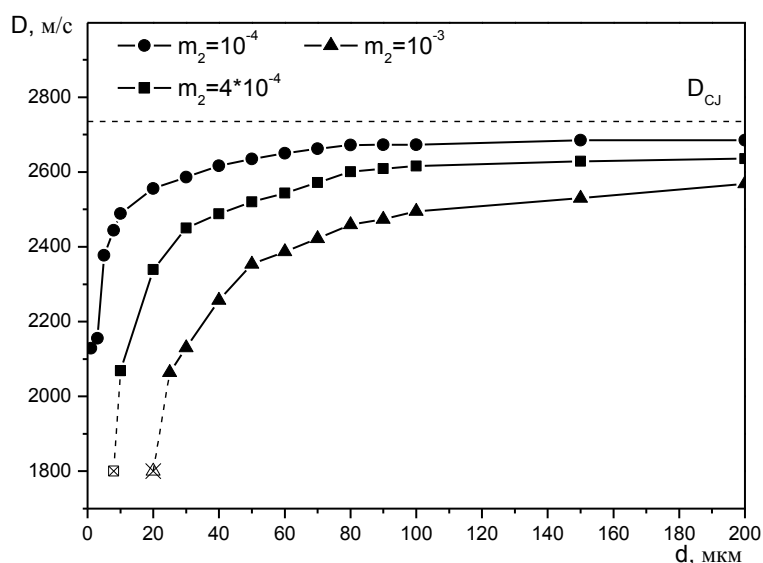


Рис.6. Зависимость скорости детонации от диаметра частиц.

Также на рисунке перечеркнутыми маркерами представлены концентрационные пределы детонации. Видно, что чем больше объемная концентрация частиц, тем все правее лежит предел детонации. Другими словами, чем больше диаметр частиц, тем большая начальная объемная концентрация частиц в облаке требуется для подавления ДВ. Эти результаты также качественно согласуются с результатами работы [8]. Можно отметить, что критическая объемная концентрация частиц сильно зависит от их диаметра. Из рис.6 видно, что увеличение диаметра частиц в 2 раза (с 10 мкм до 20 мкм) приводит к увеличению концентрационного предела в 2.5 раза. И для больших диаметров частиц ДВ распространяется по газозвеси с большими объемными концентрациями частиц.

Кроме того, при уменьшении диаметра частиц с объемной концентрацией 10^{-4} наблюдается выход на второй асимптотический предел – равновесное течение. Это течение реализуется для очень маленьких частиц (диаметром несколько микрон). В этом случае частицы успевают разогнаться, и их скорость в детонационной волне ненамного отличается от скорости газа, как это было видно выше для частиц диаметром 1 мкм.

Подобные зависимости скорости детонационной волны от диаметра частиц для различных объемных концентраций были получены в работе [11], а позднее в [12]. Полученные выше результаты коррелируют с этими данными, полученными в рамках моделей с приведенной кинетикой. В [12], с использованием модельной кинетики, было показано, что скорость ДВ монотонно увеличивается с увеличением диаметра частиц независимо от значения начальной объемной концентрации частиц. Однако, это увеличение очень мало. Например, при $m_2 = 10^{-4}$ и увеличении диаметра частиц на порядок (от 5 мкм до 50 мкм) авторы получили увеличение скорости детонации только на 5.5%. Изложенные выше результаты показывают значительное увеличение скорости ДВ (на 25%) в данном диапазоне диаметров частиц.

3.4. Определение критического размера облака частиц, гасящего ДВ.

Перейдем теперь к исследованию гашения детонации конечноразмерным облаком частиц. В работах [13], [14] описаны сценарии подавления и гашения детонации фильтром частиц и рассмотрены два возможных режима течения, реализующихся после выхода волнового комплекса, состоящего из ЗУВ и ВВГ, из фильтра: реинициирование детонации при $L < L_*$ и гашение детонации при $L \geq L_*$, где L_* – критический размер фильтра. Также было получено, что критический размер фильтра частиц, которое гасит детонацию, составляет 0.3 м. Проведенные расчеты подавления детонации облаком частиц показали, что два этих режима сохраняются. Кроме того, в случае подвижных частиц при облаке размером 0.3 м гашения детонации не происходит, однако при прохождении облака длиной 0.4 м реинициирования детонации не наблюдается. После слияния ВВГ и ЗУВ образуется УВ, которая, по мере распространения, затухает. Параметры за этой ударной волной ниже критических, температура составляет примерно 600К, что ниже критической температуры воспламенения водорода ($T_* = 850\text{K}$).

3.5. Ослабление детонации в метан-кислородной и в метан-водород-кислородной смеси облаком инертных частиц. Влияние содержания песка на скорость детонации.

Далее опишем аналогичные расчеты подавления детонации в смесях метана с кислородом облаком инертных частиц. На рис.7 представлены зависимости дефицита скорости детонации от объемной концентрации инертных частиц для частиц диаметром 10 мкм и 100 мкм. Видно, что увеличение объемной концентрации частиц приводит к уменьшению дефицита скорости детонации. Кроме того, при постоянной объемной концентрации частиц и уменьшении диаметра также имеем уменьшение дефицита скорости детонации. Таким образом, влияние концентрации и диаметра частиц на дефицит скорости детонации в метан-кислородной смеси аналогично влиянию на дефицит скорости детонации в водород-кислородной смеси.

Также, интересным представляется сопоставить зависимости $\eta(m_2)$ для водород-кислородной и метан-кислородной смеси. Данные зависимости приведены на рис.7. Видно, что зависимости для метан-кислородной смеси лежат всегда правее зависимостей для водород-кислородной смеси при одинаковых диаметрах частиц. Объясняется это следующим образом. В случае подавления детонации в смеси метан-кислород скорость детонации в этой смеси значительно меньше ($D_{CH_4-O_2} = 2440$ м/с) скорости детонации в смеси водород-кислород ($D_{H_2-O_2} = 2750$ м/с), а также меньше скорость потока за фронтом ДВ. Таким образом, меньше разница в скоростях газа и частиц, следовательно меньше отъем импульса и энергии за счет трения газа о частицы.

Кроме того, на рис.7 перечеркнутыми маркерами обозначены пределы детонации. В метан-кислородной смеси эти пределы для 10 микронных и 100 микронных частиц равны $m_2^* = 2 \cdot 10^{-3}$ и $m_2^* = 3 \cdot 10^{-2}$, соответственно.

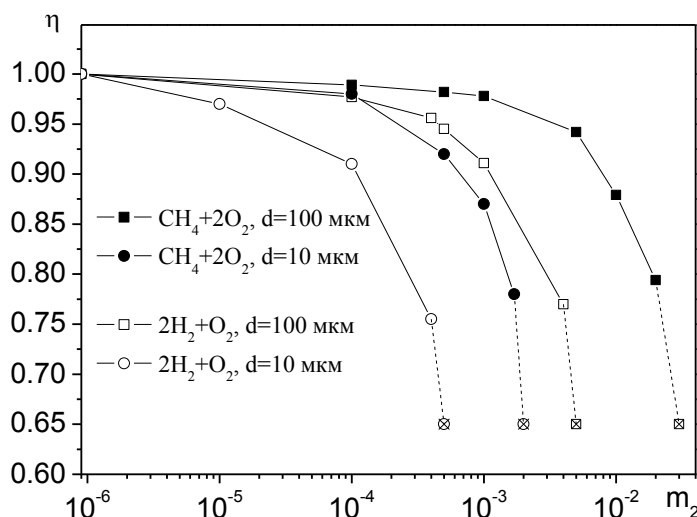


Рис.7. Зависимость дефицита скорости детонации в смесях метан-кислород и водород-кислород от объемной концентрации частиц.

Таким образом, интересным представляется посмотреть, как изменятся концентрационные пределы и зависимости дефицита скорости детонации при разбавлении метан-кислородной смеси водородом. Предположительно, эти зависимости должны сместиться влево к зависимостям для водород-кислородной

смеси. На рис.8 приведены зависимости $\eta(m_2)$ для смесей метан-водород-кислород и метан-кислород. Видно, что при разбавлении водородом зависимости сместились еще дальше вправо. Объяснить это можно следующим образом. Разбавив смесь водородом, мы, с одной стороны, увеличили отъем импульса и энергии за счет трения, но с другой стороны увеличилось тепловыделение в зоне химических реакций. Но, как оказалось, тепловыделение увеличилось на величину большую, чем отъем импульса и энергии за счет трения. Однако, различие в величинах увеличения этих параметров незначительно, т.к. зависимости не сильно сдвинулись вправо.

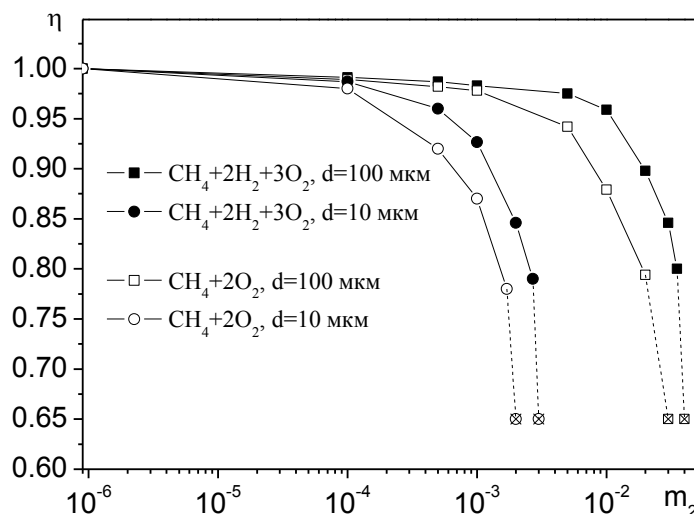


Рис.8. Зависимость дефицита скорости детонации в смесях метан-кислород и метан-водород-кислород от объемной концентрации частиц.

Кроме того, на рис.8 перечеркнутыми маркерами обозначены пределы детонации. В метан-водород-кислородной смеси эти пределы для 10 микронных и 100 микронных частиц равны $m_2^* = 3 \cdot 10^{-3}$ и $m_2^* = 4 \cdot 10^{-2}$, соответственно. Таким образом, видно, что и концентрационные пределы детонации в смеси метан-водород-кислород изменились незначительно по сравнению с пределами в смеси метан-кислород.

Из рис.7 и 8 видно, что критические объемные концентрации, подавляющие ДВ, наибольшие в смеси метан-водород-кислород и наименьшие в смеси водород-кислород.

4. ВЫВОДЫ

Разработаны физико-математические модели ослабления и подавления детонации в смесях водорода и метана с окислителем путем добавления облака инертных частиц, в двухскоростном, двухтемпературном приближении механики гетерогенных сред, основанные на детальной кинетике.

Исследовано влияние объемной концентрации и диаметра частиц на скорость ДВ. Найдены концентрационные (по массовой и объемной концентрациям частиц) пределы детонации. Показано, что критические объемные концентрации, подавляющие ДВ, наибольшие в смеси метан-водород-кислород и наименьшие в смеси водород-кислород. При сравнении результатов расчетов по подавлению детонации фильтром и облаком частиц выявлено, что зависимости скорости

детонации от объемной концентрации частиц близки при малых концентрациях и отличаются при концентрациях, близких к критическим.

Уточнены пределы применимости равновесного и замороженного подходов. Показано, что при малых диаметрах частиц (менее 5мкм) в зависимости скорости ДВ от диаметра частиц реализуется равновесное, а при больших диаметрах частиц (более 100мкм) – замороженное течение, с непрерывным переходом между ними при промежуточных значениях диаметров частиц.

Определены геометрические пределы детонации, т.е. минимальная длина облака и фильтра частиц, после выхода из которых волнового комплекса, состоящего из ЗУВ и ВВГ, не происходит реинициирование ДВ. Сравнение результатов расчетов показало, что геометрические пределы детонации при подавлении ее облаком или фильтром частиц отличаются незначительно.

ЛИТЕРАТУРА

1. Федоров А.В., Фомин П.А., Фомин В.М., Тропин Д.А., Чен Дж.-Р. Физико-математическое моделирование подавления детонации облаками мелких частиц. – Новосибирск: НГАСУ (Сибстрин), 2011. – 156 с.
2. Tien J.H., Stalker R.J. Release of chemical energy by combustion in a supersonic mixing layer of hydrogen and air // Comb. Flame. – 2002. – N130. – P.329-348.
3. Бедарев И.А., Федоров А.В. Сравнительный анализ трех математических моделей воспламенения водорода // Физика горения и взрыва. – 2006. – Т.42. – №1. – С.26-33.
4. Вестбрук Ч., Уртъев П. Применение химической кинетики для определения критических параметров газовой детонации // Физика горения и взрыва. – 1983. – Т.19. – №6. – С.65-76.
5. Warnatz J. The structure of laminar alkane-, alkene- and acetylene flames // Proc. Combust. Inst. – 1981. – Vol.18. – P.749-767.
6. Law C.K. Combustion Physics. – Cambridge: Cambridge University Press, 2006.
7. Hidaka Y., Gardiner W.C.Jr., Eubank C.S. // J. Mol. Sci. – 1982. – Vol.2. – P.141-153.
8. Wolanski P., Liu J.C., Kaufman C.W., Nicholls J.A., Sichel M. The effect of inert particles on methan-air detonations // Archivum Combustionis. – 1988. – Vol.8. – N1. – P.15-32.
9. Борисов А.А., Гельфанд Б.Е., Губин С.А., Козарко С.М. Влияние твердых инертных частиц на детонацию горючей газовой смеси // ФГВ. – 1975. – №6. – С.909-914.
10. Фомин П.А., Чен Дж.-Р. Влияние химически инертных частиц на параметры и подавление детонации в газах // Физика горения и взрыва. – 2009. – Т.45. – №3. – С.77-88.
11. Казаков Ю.В., Федоров А.В., Фомин В.М. Режимы нормальной детонации в релаксирующих средах // Физика горения и взрыва. – 1989. – №1. – С.119-127.
12. Miltiadis V. Papalexandris Numerical simulation of detonations in mixtures of gases and solid particles // J. Fluid Mech. – 2004. – Vol.507. – P.95-142.
13. Федоров А.В., Тропин Д.А. Определение критического размера облака частиц, необходимого для подавления газовой детонации // Физика горения и взрыва. – 2011. – Т.47. – №4. – С.100-108.
14. Федоров А.В., Тропин Д.А., Бедарев И.А. Прохождение детонационной волны через облако частиц // Вестник Челябинского государственного университета. – 2010. – Вып.12. – №23. – С.110-120.

МОДЕЛИРОВАНИЕ УДАРНО-ВОЛНОВЫХ И ДЕТОНАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫХ ГАЗОВЗВЕСЯХ*

Хмель Т.А., Федоров А.В.

ФГБУН Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича
Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск, Россия

1. ВВЕДЕНИЕ

Теоретические исследования ударно-волновых и детонационных процессов в газовзвесах твердых частиц проводятся, как правило, в рамках механики гетерогенных сред (МГС) [1-3]. Для смесей высокой насыщенности необходимо учитывать силы плавучести и столкновения частиц [1,4]. Последнее время активно развиваются молекулярно-кинетические подходы для описания межчастичных столкновений в рамках уравнений континуальной механики [5-7]. Развитие модели [6,7] для описания ударно-волновых и детонационных процессов в газовзвесах при наличии межчастичных столкновений представлено в [8]. В настоящей работе на основе модели [8] исследуются задачи распространения ударных и детонационных волн в газовзвесах при учете хаотического движения частиц и их столкновений.

2. СТОЛКНОВИТЕЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ДВУХФАЗНОЙ СРЕДЫ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ДИНАМИКИ ГАЗОВЗВЕСЕЙ НЕСЖИМАЕМЫХ ЧАСТИЦ

Основные уравнения в рамках механики взаимопроникающих континуумов вытекают из законов сохранения массы, импульса и энергии для смеси в целом. Одномерные уравнения Эйлера нереагирующей среды имеют вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_1 u_1)}{\partial x} &= 0, \quad \frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_2 u_2)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \rho_1 u_1}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_1 u_1^2 + m_1 p_1)}{\partial x} &= -p_1 \frac{\partial m_2}{\partial x} - f, \\ \frac{\partial \rho_2 u_2}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_2 u_2^2 + m_2 p_2)}{\partial x} &= p_1 \frac{\partial m_2}{\partial x} + f, \\ \frac{\partial \rho_1 E_1}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_1 u_1 E_1 + m_1 u_1 p_1)}{\partial x} &= -p_1 \frac{\partial u_2 m_2}{\partial x} - f u_2 - q, \\ \frac{\partial \rho_2 E_2}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_2 u_2 E_2 + m_2 u_2 p_2)}{\partial x} &= p_1 \frac{\partial u_2 m_2}{\partial x} + f u_2 + q.\end{aligned}\tag{1}$$

Соотношения для описания процессов межфазного взаимодействия (величин f, q) зависят от протекающих процессов и объемной концентрации частиц. Уравнения состояния принимаются следующими [8]

$$\begin{aligned}p_1 &= \rho_{11} R T_1, \quad m_2 p_2 = m_2 p_1 + p_c, \quad p_c = G(m_2) \rho_2 e_c, \\ G(m_2) &= \frac{1}{2} \alpha_t [1 + 2(1 + \varepsilon) m_2 g(m_2)], \quad g(m_2) = [1 - (m_2 / m_*)^{4m_*/3}]^{-1}.\end{aligned}\tag{2}$$

* Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 11-08-00144-а) и Министерства образования и науки Российской Федерации (соглашение 14.B37.21.0645).

$$E_1 = c_{v1}T_1 + u_1^2 / 2, \quad E_2 = e_c + c_{v2}T_2 + u_2^2 / 2 + Q.$$

Здесь ρ, u, p, m – соответственно средняя плотность, скорость, давление и объемная концентрация; $\rho_i = \rho_{ii}m_i$, ρ_{ii} – собственная (истинная) плотность фаз, индексы 1 и 2 относятся соответственно к газовой фазе и частицам, f – сила межфазного взаимодействия. Частицы предполагаются несжимаемыми ($\rho_{22} = \text{const}$). Полная энергия для реагирующих частиц включает энергию столкновений e_c , динамика которой, соответственно [6,7], описывается уравнением

$$\frac{\partial \rho_2 e_c}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_2 u_2 e_c)}{\partial x} = I_1 - I_0 - p_c \frac{\partial u_2}{\partial x}, \quad (3)$$

где $I_0 = \frac{6}{\pi d} C_0 \rho_2 m_2 g(m_2) (e_c)^{3/2}$ и $I_1 = \frac{1}{2} \alpha_t e_c \rho_2 [C_1 + 2C_2(1 + \varepsilon)m_2 g(m_2)] \frac{\partial u_2}{\partial x}$, выражают, соответственно, диссипацию и генерацию энергии хаотического движения частиц при их столкновениях. Коэффициенты C_0, C_1, C_2 и параметр α_t зависят от коэффициента реституции ε , коэффициента формы k (для сфер $k = 0.4$), параметра шероховатости β , d – диаметр частиц. Выражения для C_0, C_1, C_2 представлены в [6,7]. Для сред, в которых коэффициенты C_1 и C_2 не сильно отличаются, можно приближенно принять $C_1 = C_2 = C$ [8]. Тогда уравнение (3) можно записать в форме

$$\frac{\partial \rho_2 E_c}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_2 u_2 E_c + \eta m_2 u_2 p_2)}{\partial x} = \eta p_1 \frac{\partial u_2 m_2}{\partial x} - I_0 - J E_c + \eta f u_2, \quad (4)$$

где $E_c = e_c + 0.5 \eta u_2^2$, $\eta = 1 - C$. Скорость звука в дискретной фазе определяется как $c^2 = \gamma(m) \frac{p_c}{\rho_2} > 0$, где γ определяется формулой

$$\gamma = \eta G(m) + \frac{d[G(m)m]}{G(m)dm} = 1 + \eta G(m) + \frac{m}{G(m)} \frac{dG(m)}{dm}. \quad (5)$$

В [8] получены точные условия на скачках и представлена классификация типов ударных волн, которые могут быть либо с замороженным скачком в газе и непрерывным распределением параметров частиц (волны типа I), либо со скачком в дискретной фазе и непрерывным распределением параметров в газе (волны типа II). Амплитуда столкновительного скачка в дискретной фазе (с разрывом параметров e_c и p_c) при $e_{c0} = 0$ определяется условием

$$\frac{1}{2} \alpha_t \left(\frac{m}{m_0} - 1 \right) [1 + (1 + \varepsilon) m g(m)] = \frac{2}{\eta}. \quad (6)$$

3. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УДАРНО-ВОЛНОВЫХ ТЕЧЕНИЙ

Рассматривается задача о взаимодействии ударной волны, распространяющейся по газу с числом Маха M_0 , с полуограниченным облаком инертных частиц массовой концентрации ξ_0 (одномерный аналог задачи, рассмотренной в [9] для бесстолкновительной двухфазной смеси). Для решения нестационарных уравнений применялся метод расчета, используемый ранее для аналогичных задач (например, в [9]) и описанный в [10,11]. Метод основан на схеме класса TVD для газа и схеме Джентри-Мартина-Дэйли для частиц, несколько модифицированной введением соответствующих аппроксимаций членов, связанных

с хаотическим давлением, энергией столкновений, а также недивергентных членов вида $p_1 \partial m_2 / \partial x$ и $p_1 \partial u_2 m_2 / \partial x$. Замыкающие соотношения, отражающие межфазное взаимодействие, принимались аналогично [9]. Расчеты проводились для параметров частиц глинозема (оксида алюминия) в кислороде.

На рис.1 показаны типичные профили плотности газа (сплошные линии) и дискретной фазы (штриховые линии) с шагом по времени 1 мс при формировании в смеси стационарных ударных волн типа I (рис.1,а) и типа II (рис.1,б). (Принималось $\eta=1$, размер частиц 10 мкм.) Сценарий формирования волны второго типа происходит в два этапа. На первом этапе формируется структура, подобная волне первого типа (рис.1,б, $x < 3$ м), затем от лидирующего скачка отрывается скачок другой амплитуды в фазе частиц с менее резким подъемом плотности газа. Скорость распространения этого скачка превышает скорость вошедшей в облако УВ.

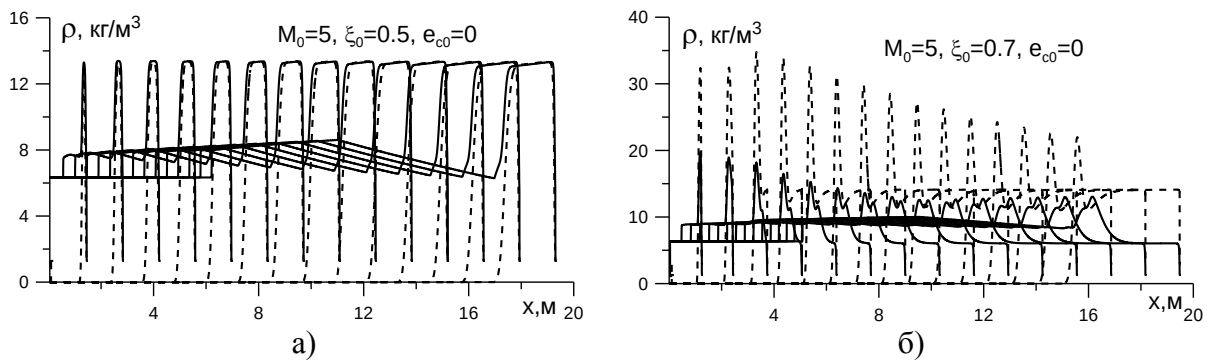


Рис.1. Сценарии формирования волн первого типа (а) и второго типа (б), $\Delta t = 1$ мс.

Ударно-волновые структуры для волн обоих типов показаны на рис.2. На рис.2,а ($M_0=5$, $\xi_0 = 0.5$, $e_{c0} = 0$) структура состоит из замороженного скачка в газе и примыкающей зоны релаксации в дискретной фазе. В зоне релаксации p_c, e_c практически нулевые, т.е. генерации хаотической энергии не происходит (волна типа I_0). Увеличение числа Маха УВ, начальной концентрации или начального уровня хаотизации частиц e_{c0} приводят к формированию волн с генерацией хаотического движения в зоне релаксации (тип I, рис.2,б, $M_0=5$, $\xi_0 = 0.5$, $e_{c0} = 0.01 \text{ м}^2/\text{мс}^2$). Здесь значки (узлы расчетной сетки) подтверждают наличие скачка в параметрах газа и плавное изменение параметров частиц. По основным параметрам газа и частиц структуры на рис.2,а и 2,б близки, совпадают также скорости распространения.

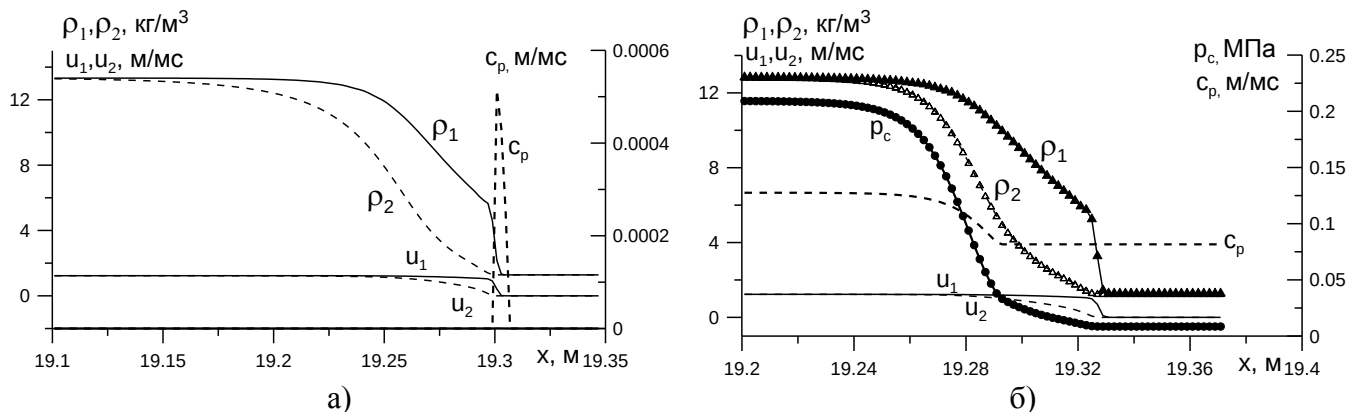


Рис.2. Стационарные структуры с лидирующим скачком в газе: $M_0=5$, $\xi_0 = 0.5$, $\eta = 1$

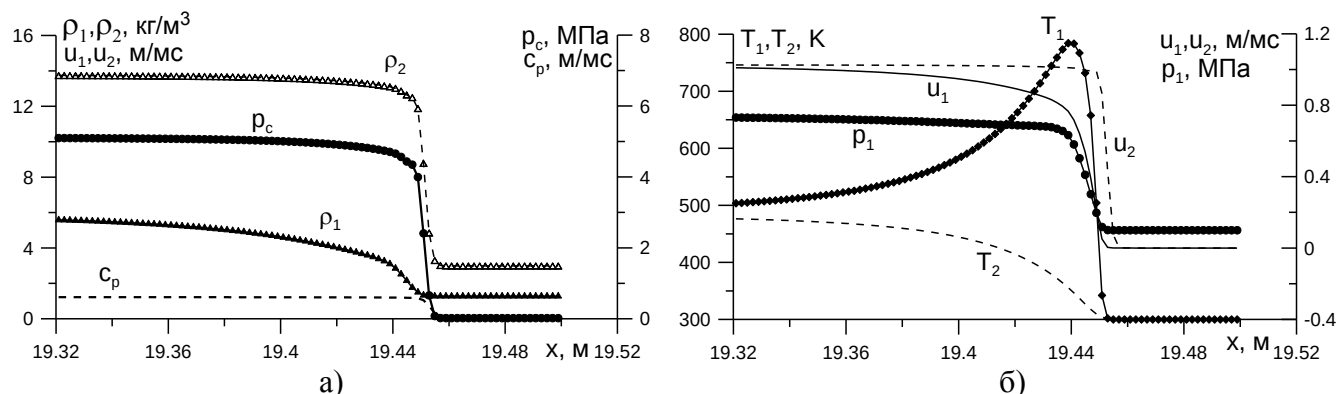


Рис.3. Стационарная структура со скачком в фазе частиц: $M_0=3$, $\xi_0 = 0.7$, $\eta = 1$.

При дальнейшем увеличении одного или нескольких из перечисленных параметров формируются волны типа II – с лидирующим скачком в дискретной фазе и более высокой скоростью распространения. Пример структуры волны в смеси частиц 20 мкм при $e_{c0} = 0.01 \text{ м}^2/\text{мс}^2$ представлен на рис.3 (скорость фронта $D=1.31$ м/мс). При $e_{c0} = 0$ в этой же смеси распространяется волна первого типа со скоростью фронта $D=1.12$ м/мс. Отметим, что наличие различных типов ударных волн является характерным для гетерогенных сред с двумя давлениями, в частности, для изотермической смеси двух твердых тел [12,13].

Таблица 1.

Типы ударных волн в столкновительной взвеси при неидеальных столкновениях неупругих шероховатых частиц.

ξ_0	$M_0=3$		$M_0=5$	
	$e_{c0}=0$	$e_{c0}=0.01 \text{ м}^2/\text{мс}^2$	$e_{c0}=0$	$e_{c0}=0.01 \text{ м}^2/\text{мс}^2$
0.5	$\eta=1$ I_0 $\eta=0.5$ I_0	$\eta=1$ I $\eta=0.5$ I_0	$\eta=1$ I_0	$\eta=1$ I/II $\eta=0.95$ I_0
0.6	$\eta=1$ I_0 $\eta=0.5$ I_0	$\eta=1$ II $\eta=0.99$ II $\eta=0.95$ I $\eta=0.9$ I_0	$\eta=1$ II $\eta=0.95$ I_0	$\eta=1$ II $\eta=0.95$ I_0
0.7	$\eta=1$ I $\eta=0.95$ I_0 $\eta=0.9$ I_0	$\eta=1$ II $\eta=0.92$ I $\eta=0.9$ I_0	$\eta=1$ II $\eta=0.95$ I_0	$\eta=1$ II $\eta=0.95$ II $\eta=0.9$ I_0
0.8	$\eta=1$ II $\eta=0.98$ II $\eta=0.975$ I $\eta=0.97$ I_0	$\eta=1$ II $\eta=0.855$ II $\eta=0.852$ I $\eta=0.85$ I_0	$\eta=1$ II $\eta=0.95$ II $\eta=0.9$ II $\eta=0.85$ I_0	$\eta=1$ II $\eta=0.9$ II $\eta=0.85$ II $\eta=0.8$ I_0
0.9	$\eta=1$ II $\eta=0.95$ II $\eta=0.92$ II $\eta=0.919$ I_0	$\eta=1$ II $\eta=0.8$ II $\eta=0.75$ I $\eta=0.7$ I_0	$\eta=1$ II $\eta=0.9$ II $\eta=0.8$ II $\eta=0.75$ I_0	$\eta=1$ II $\eta=0.8$ II $\eta=0.65$ II $\eta=0.6$ I_0

При неидеальных столкновениях неупругих и шероховатых частиц ($\eta < 1$) в зоне релаксации имеет место как неполная генерация хаотической энергии (часть кинетической энергии переходит в тепло за счет неупругости соударений), так и диссипация энергии при соударениях за счет шероховатости. Скорость распространения формируемой ударно-волновой конфигурации уменьшается с уменьшением η и с увеличением вклада диссипативного члена. Волны типа II, определенные в смеси при $\eta = 1$, могут перейти при тех же параметрах смеси и амплитуде падающей УВ, но неидеальных столкновениях ($\eta < 1$), в волны типа I. Волны типа I с генерацией хаотической энергии в зоне релаксации могут перейти в волны типа I₀ без генерации хаотической энергии (см. Таблицу 1).

Расчеты показали также, что формирующиеся в среде с неидеальными столкновениями структуры распространяются с постоянной скоростью, амплитуда лидирующего скачка не меняется (рис.4). Наличие диссипации обуславливает уменьшение за фронтом энергии хаотического движения до принятого начального (минимального) значения. В среде с неидеальными столкновениями, но без диссипации (например, для гладких частиц) уменьшение e_c происходит на границе облака частиц (рис.4). По профилям остальных параметров структуры аналогичны вышеописанным структурам для волн соответствующего типа.

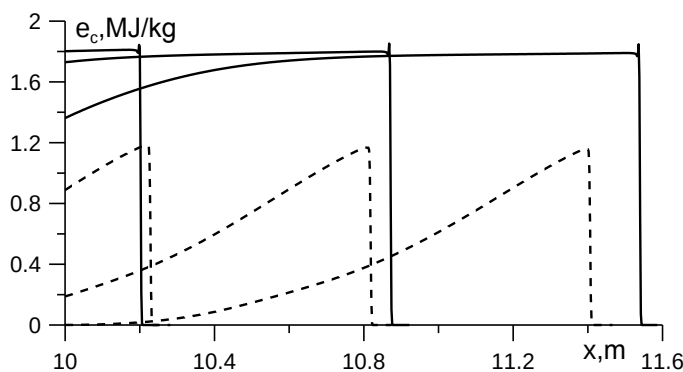


Рис.4. Распределения хаотической энергии при неидеальных столкновениях без учета диссипации (сплошные линии) и с учетом диссипации (штриховые линии), $M_0=3$, $\xi_0 = 0.8$, $\eta = 0.98$, $\Delta t = 1$ мс.

4. ДЕТОНАЦИЯ В СТОЛКНОВИТЕЛЬНОЙ СМЕСИ

В гетерогенной детонации объемная концентрация реагирующих частиц мала, даже в ρ -слоях, формируемых в зоне задержки воспламенения частиц. Влияние объема частиц также уменьшается по мере их сгорания. Поэтому для анализа влияния столкновений частиц на детонационные структуры на первом этапе рассматривается распространение гетерогенной детонации в смеси реагирующих частиц с диаметром 2 мкм (на модели стехиометрической взвеси частиц алюминия и кислорода) с добавками инертных частиц с диаметром 10 мкм (оксида алюминия). Рассматривается распространение волны развитой ячеистой детонации в плоском канале и вхождение фронта в облако инертных частиц. Концентрация и размер инертных частиц выбирались ниже предельных значений, обуславливающих срыв детонации.

На рис.5 и 6 показаны результаты численного моделирования двумерных течений ячеистой детонации в 6-см канале в рамках бесстолкновительной модели

(а), столкновительной модели с нулевой начальной хаотизацией $e_{c0} = 0$ (б) и при $e_{c0} = 0.01 \text{ м}^2/\text{мс}^2$ (в).

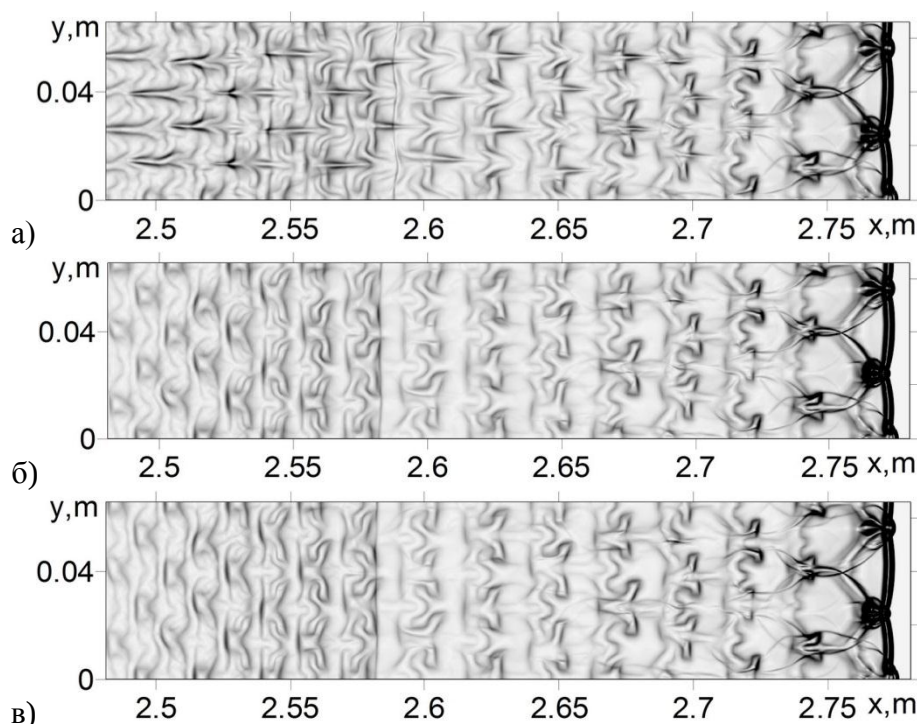


Рис.5. Ячеистая детонация в стехиометрической смеси 2-мкм Al – O₂ с инертными частицами 10-мкм Al₂O₃, численные Шлирен-изображения: бесстолкновительная модель (а); столкновительная модель с $e_{c0} = 0$ (б), $e_{c0} = 0.01 \text{ м}^2/\text{мс}^2$ (в).

На численных Шлирен-изображениях (рис.5) видно, что хаотическое движение инертной фазы не оказывает практически никакого влияния на основные параметры ячеистой детонации: скорость фронта, размер ячеек, структуры течения в окрестности фронта. Также оказалось, что поля температур газа для обеих моделей совпадают практически всюду. Наибольшие различия по температурам наблюдаются в средней зоне детонации (от 2.6 м до 2.7 м), где слои уже сформировались, но еще характеризуются собственной температурой.

Различия проявляются в распределении плотности инертных частиц в дальнем следе ячеистой детонации. В «идеальной» модели Эйлера встречные поперечные потоки в ячеистой детонации порождают скопления частиц и формирование стратообразных структур [2] (рис.6,а). В рамках столкновительной модели взаимодействия между инертными частицами в поперечных волнах обуславливают рост хаотического давления, что приводит к размазыванию формирующихся в дальней зоне слоев инертной компоненты (рис.6,б, рис.6,в). При учете возникающего хаотического давления эти структуры несколько размазываются (рис. 6,б). Результаты расчетов сильно зависят от уровня начальной хаотизации e_{c0} , т.е. наличия хаотических движений частиц в газозвеси (ср. рис.6,б и рис.6,в). При значительной начальной хаотизации распределение инертной фазы почти однородно (рис.6,в). Отметим, что здесь столкновения частиц принимались идеальными ($\eta=1$, $C_0=0$). Наличие потерь и диссипации хаотической энергии при столкновениях

неупругих шероховатых частиц несколько ослабит эффект размазывания формирующихся инертных слоевых структур.

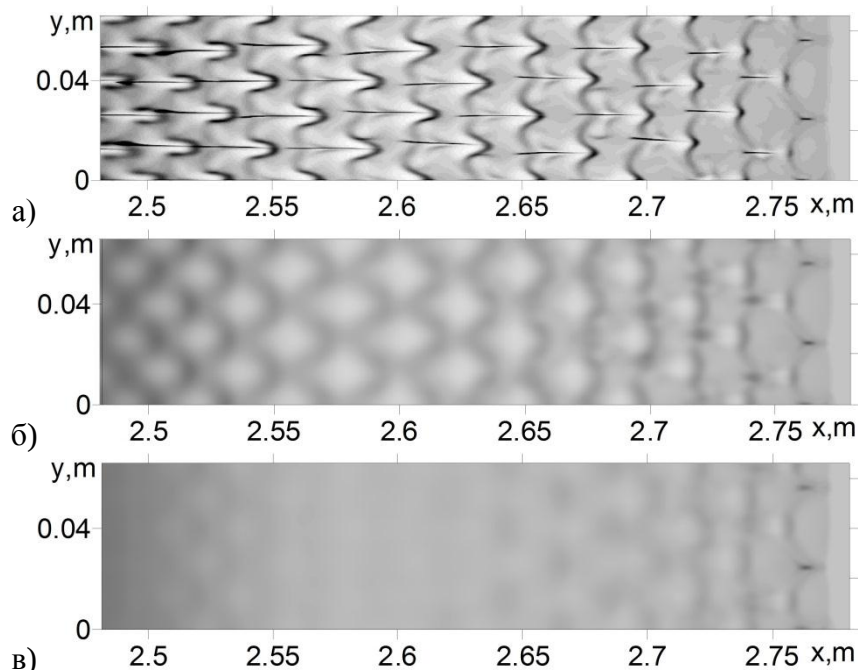


Рис.6. Ячеистая детонация в стехиометрической смеси 2-мкм Al – O₂ с инертными частицами 10-мкм Al₂O₃, поля плотности инертной компоненты: бесстолкновительная модель (а); столкновительная модель с $e_{c0} = 0$ (б), $e_{c0} = 0.01 \text{ м}^2/\text{мс}^2$ (в).

На рис.7 показаны поля давления газа для трех перечисленных выше моделей. Как видно, они практически совпадают.

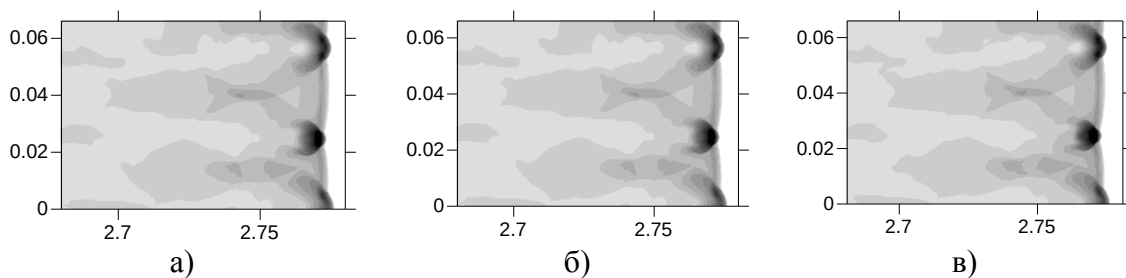


Рис.7. Поле давления газа: бесстолкновительная модель (а); столкновительная модель с $e_{c0} = 0$ (б), $e_{c0} = 0.01 \text{ м}^2/\text{мс}^2$ (в).

На рис.8 представлены соответствующие поля хаотического давления для бесстолкновительной модели и модели с $e_{c0} = 0.01 \text{ м}^2/\text{мс}^2$. Здесь отметим, что столкновительное давление принимает максимальные значения в областях, где происходят встреча и столкновение поперечных волн ячеистой детонации, обуславливающих встречное движение инертной компоненты. При этом по абсолютной величине максимальное давление даже в случае сильной начальной хаотизации не превышает 0.1 МПа (рис.8,б), т.е. меньше начального давления газа. Тогда как в ячеистой детонации при столкновениях тройных точек давление в газе может достигать 15 МПа. Однако, учитывая, что общее давление в дискретной фазе

определяется как $p_2 = p_1 + p_{2c}$, $m_2 p_{2c} = p_c$ вклад хаотического давления при малых объемных концентрациях может быть существенно больше. В таких случаях можно пренебрегать влиянием давления газа в уравнениях динамики частиц.

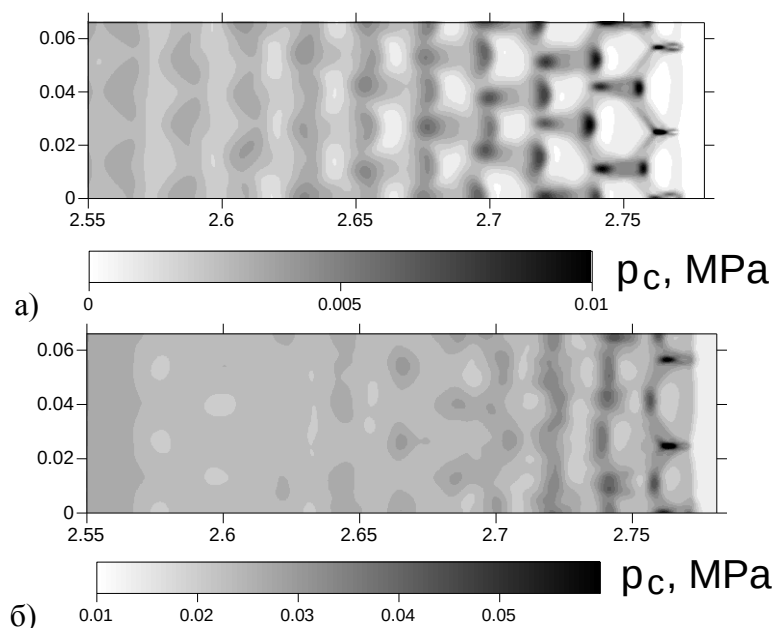


Рис.8. Поля хаотического давления в столкновительной модели: $e_{c0} = 0$ (а); $e_{c0} = 0.01 \text{ м}^2/\text{мс}^2$ (б).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлена модель реагирующей двухфазной среды газ – несжимаемые частицы. Столкновительная динамика хаотического движения частиц описывается в рамках молекулярно-кинетической теории гранулированного газа.

Методами численного моделирования нестационарных течений исследована задача о взаимодействии плоской УВ с облаком частиц. Получены установившиеся решения, отвечающие перечисленным выше типам стационарных волн для идеальных и неидеальных столкновений. Получены условия реализации того или иного типа волн в зависимости от числа Маха падающей УВ, концентрации частиц в облаке, параметра, характеризующего неидеальность столкновений.

Эффекты межчастичных столкновений продемонстрированы на задаче распространения ячеистой гетерогенной детонации в смеси реагирующих частиц, окислителя и инертных частиц. Показано, что столкновения инертных частиц не оказывают влияния на скорость детонации, размер ячейки, параметры газовой фазы. Показано, что за счет столкновений происходит размазывание (дисперсия) слоев и структур инертной фазы, формирующихся в дальней зоне ячеистой детонации. Особенно данный эффект проявляется при значительной начальной хаотизации.

ЛИТЕРАТУРА

1. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. Ч.1. – М.: Наука, 1987. – 464 с.
2. Яненко Н.Н., Солоухин Р.И., Папырин А.Н., Фомин В.М. Сверхзвуковые двухфазные течения в условиях скоростной неравновесности частиц. – Новосибирск: Наука, 1980. – 160 с.

3. *Медведев А.Е., Федоров А.В., Фомин В.М.* Описание воспламенения и горения смесей газа и твердых частиц методами механики сплошной среды // ФГВ. – 1984. – Т.20. – №2. – С.3-9.
4. *Федоров А.В.* Структура комбинированного разрыва в газовзвесах при наличии хаотического давления частиц // ПМТФ. – 1992. – №5. – С.36-41.
5. *Gidaspow D.* Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions. – Boston: Academic Press, 1994.
6. *Goldshtein A., Shapiro M.* Mechanics of collisional motion of granular materials. Part I. General hydrodynamics equations // J. Fluid Mechanics. – 1995. – Vol.282. – P.75-114.
7. *Goldshtein A., Shapiro M., Gutfinger C.* Mechanics of collisional motion of granular materials. Part 3. Self-similar shock wave propagation // J. Fluid Mechanics. – 1996. – Vol.316. – P.29-51.
8. *Fedorov A.V., Khmel T.A.* Description of Shock Wave Processes in Gas Suspensions Using the Molecular-Kinetic Collisional Model // Heat Transfer Research. – 2012. – Vol.43. – N2. – P.95-107.
9. *Хмель Т.А., Федоров А.В.* Взаимодействие ударной волны с облаком частиц алюминия в канале // ФГВ. – 2002. – Т.38. – №2. – С.89-98.
10. *Хмель Т.А.* Численное моделирование двумерных детонационных течений в газовзвеси реагирующих твердых частиц // Мат. моделирование. – 2004. – Т.16. – №6. – С.73-77.
11. *Федоров А.В., Хмель Т.А.* Численные технологии исследования гетерогенной детонации газовзвесей // Мат. моделирование. – 2006. – Т.18. – №8. – С.49-63.
12. *Федоров А.В.* Структура ударной волны в смеси двух тел (гидродинамическое приближение) // Моделирование в механике. – 1991. – Т.5. – №4. – С.135-158.
13. *Федоров А.В., Федорова Н.Н.* Структура, распространение и отражение ударных волн в смеси твердых тел (гидродинамическое приближение) // ПМТФ. – 1992. – №4. – С.10-17.

Вычислительные методы механики гетерогенных сред

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ПРЕДЕЛЬНОЙ ДЕФОРМИРУЕМОСТИ КОМПОЗИТНЫХ ОБОЛОЧЕК ВРАЩЕНИЯ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ НАГРУЖЕНИИ

Абросимов Н.А., Елесин А.В.

*НИИ механики Национального исследовательского Нижегородского
государственного университета им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород,
Россия*

РЕЗЮМЕ

Построена энергетически согласованная разрешающая системы уравнений динамики композитных оболочек вращения, ориентированная на численное решение задач оценки их предельной деформируемости в зависимости от структуры армирования и интенсивности нагружения. Численный метод решения сформулированной начально-краевой задачи основывается на явной вариационно-разностной схеме.

Приведены результаты численного анализа влияния углов армирования и схемы чередования слоев на предельную деформируемость слоистых композитных цилиндрических оболочек при взрывном нагружении различной интенсивности.

Ключевые слова: композитные материалы; оболочки вращения; предельная деформируемость; численное моделирование; импульсное нагружение

1. ВВЕДЕНИЕ

Композитные материалы на основе высокомодульных волокон характеризуется рядом замечательных свойств. В отличие от традиционных гомогенных конструкционных материалов они имеют высокую удельную прочность, малочувствительны к исходным дефектам и агрессивным средам, обладают высоким сопротивлением к распространению трещин. У крупногабаритных объектов, изготовленных из композитных материалов и подвергающихся импульсным воздействиям, отсутствуют сильные масштабные эффекты при разрушении. Кроме того, возможное разрушение носит безосколочный характер. По совокупности этих свойств композитные материалы весьма перспективны для защитных силовых оболочек химических и ядерных реакторов и других конструкций, рассчитанных на сохранение своей работоспособности не только в номинальных режимах работы, но и при экстремальных ситуациях, сопровождающихся резким увеличением нагрузок на несущие элементы [1].

Одна из ключевых задач, возникающих при проектировании подобных защитных конструкций, состоит в анализе влияния структуры армирования на их динамическую реакцию в зависимости от реализуемой схемы нагружения конструкции. Однако до настоящего времени вопросы выбора рациональных структур армирования, позволяющих использовать высокие жесткостные и прочностные характеристики армирующих волокон как за счет варьирования состава наполнителя и связующего, так и формирования соответствующей ориентации армирующих элементов и создания определенного характера их пространственной геометрической укладки, остаются пока мало исследованными. Здесь можно отметить лишь экспериментальные исследования по анализу влияния структуры

армирования на прочность слоистых композитных цилиндрических оболочек при взрывном нагружении [2].

Цель данной работы – численный анализ влияния углов армирования и схемы чередования слоев на максимальные деформации слоистых композитных оболочек вращения, нагруженных однократным импульсом внутреннего давления различной интенсивности.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Пусть оболочка вращения толщиной h занимает область V евклидова пространства E_3 и ограничена поверхностью $\partial V = S^+ \cup S^- \cup \Lambda$, где S^+ , S^- – лицевые поверхности оболочки; Λ – цилиндрическая поверхность, образующие которой перпендикулярны к поверхности $S^* = S \cup \Gamma$, выбранной в качестве основной (координатной); Γ – контур области S .

Отнесем основную поверхность S к ортогональной криволинейной системе координат α_i ($i = \overline{1,3}$), совпадающей с линиями главных кривизн и внешней нормалью к внутренней поверхности оболочки.

Коэффициенты Ламе, определяющие метрические свойства рассматриваемой оболочки равны

$$H_1 = A_1 z_1, H_2 = A_2 z_2, H_3 = 1 \quad (2.1)$$

где $z_1 = (1 + k_1 \alpha_3)$, $z_2 = (1 + k_2 \alpha_3)$, A_1, A_2, k_1, k_2 – параметры Ламе и главные кривизны внутренней поверхности S .

В дальнейшем будем считать, что правомерна гипотеза, согласно которой геометрические и механические характеристики оболочки и действующие на нее нагрузки таковы, что справедливо линейное распределение по толщине пакета тангенциальных компонент вектора перемещений, а нормальное перемещение постоянно по толщине

$$\begin{aligned} U_j(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, t) &= u_j(\alpha_1, \alpha_2, t) + \alpha_3 \varphi_j(\alpha_1, \alpha_2, t), \quad (j = \overline{1,2}) \\ U_3(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, t) &= u_3(\alpha_1, \alpha_2, t) \end{aligned} \quad (2.2)$$

Здесь величины $u_i(\alpha_1, \alpha_2, t)$ представляют собой перемещения координатной поверхности в направлениях α_i ($i = \overline{1,3}$) соответственно; $\varphi_j(\alpha_1, \alpha_2, t)$ ($j = \overline{1,2}$) – углы поворота нормали к основной поверхности.

При построении геометрических зависимостей будем исходить из соотношений квадратичного варианта нелинейной теории упругости [3], которые с учетом недеформируемости материала пластины в направлении координаты α_3 и осреднения деформаций сдвига по толщине пластины можно представить в виде [4]

$$\begin{aligned} e_{11} &= \frac{1}{z_1} (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{13}^2 / 2 + \alpha_3 \chi_{11}), \quad (1 \rightarrow 2) \\ e_{12} &= \frac{1}{z_1} [\varepsilon_{12} + \varepsilon_{13} \varepsilon_{23} / 2 + \alpha_3 \chi_{12}] + \frac{1}{z_2} [\varepsilon_{21} + \varepsilon_{13} \varepsilon_{23} / 2 + \alpha_3 \chi_{21}] \quad , \quad (1 \rightarrow 2) \quad (2.3) \\ e_{13} &= \frac{1}{z_1} (\varphi_1 + \varepsilon_{13}). \quad (1 \rightarrow 2) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{11} &= \frac{1}{A_1} \frac{\partial u_1}{\partial \alpha_1} + \frac{u_2}{A_1 A_2} \frac{\partial A_1}{\partial \alpha_2} + k_1 u_3, \quad (1 \leftrightarrow 2) \\
\chi_{11} &= \frac{1}{A_1} \frac{\partial \varphi_1}{\partial \alpha_1} + \frac{\varphi_2}{A_1 A_2} \frac{\partial A_1}{\partial \alpha_2}, \quad (1 \leftrightarrow 2) \\
\chi_{12} &= \frac{1}{A_1} \frac{\partial u_2}{\partial \alpha_1} - \frac{u_1}{A_1 A_2} \frac{\partial A_1}{\partial \alpha_2}, \quad (1 \leftrightarrow 2) \\
\chi_{12} &= \frac{1}{A_1} \frac{\partial \varphi_2}{\partial \alpha_1} - \frac{\varphi_1}{A_1 A_2} \frac{\partial A_1}{\partial \alpha_2}, \quad (1 \leftrightarrow 2) \\
\varepsilon_{13} &= \frac{1}{A_1} \frac{\partial u_3}{\partial \alpha_1} - k_1 u_1, \quad (1 \leftrightarrow 2).
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Предполагается, что оболочка получена перекрестной укладкой $\pm \varphi^k (k = \overline{1, K})$ достаточно большого числа композитных слоев. С учетом принятых гипотез физические соотношения для перекрестно-армированного композитного материала оболочки запишутся в виде

$$\begin{aligned}
\sigma_{11} &= A_{11} e_{11} + A_{12} e_{22} \\
\sigma_{22} &= A_{21} e_{11} + A_{22} e_{22} \\
\sigma_{12} &= A_{33} e_{12} \\
\sigma_{13} &= A_{44} e_{13} \\
\sigma_{23} &= A_{55} e_{23}
\end{aligned} \tag{2.5}$$

Здесь считается, что коэффициенты A_{mn} являются некоторыми гладкими или ступенчато изменяющимися (для слоистого материала) функциями переменной α_3 . Если подставить деформации (2.3), (2.4) в соотношения (2.5), то напряжения $\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23}$ можно выразить через некоторые обобщенные деформационные характеристики. $\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{12}, \varepsilon_{21}, \varepsilon_{13}, \varepsilon_{23}, \chi_{11}, \chi_{22}, \chi_{12}, \chi_{21}$. Однако для описания напряженного состояния оболочек вращения более естественной является формулировка определяющих соотношений посредством введения обобщенных силовых факторов – усилий и моментов.

$$(N_{11}, N_{12}, M_{11}, M_{12}, Q_{13}) = \int_0^h (\sigma_{11}, \sigma_{12}, \alpha_3 \sigma_{11}, \alpha_3 \sigma_{12}, \sigma_{13}) Z_2 d\alpha_3 \quad (1 \leftrightarrow 2) \tag{2.6}$$

В результате интегрирования по толщине оболочки соотношения (2.6) с учетом $H_1 \approx A_1, H_2 \approx A_2$ можно представить в виде [5]

$$\begin{aligned}
N_{11} &= B_{11} \bar{\varepsilon}_{11} + B_{12} \bar{\varepsilon}_{22} + C_{11} \chi_{11} + C_{12} \chi_{22}, \\
N_{12} &= B_{33}^{11} \bar{\varepsilon}_{12} + B_{33}^{12} \bar{\varepsilon}_{21} + C_{33}^{11} \chi_{12} + C_{33}^{12} \chi_{21}, \\
M_{11} &= C_{11} \bar{\varepsilon}_{11} + C_{12} \bar{\varepsilon}_{22} + D_{11} \chi_{11} + D_{12} \chi_{22}, \\
M_{12} &= C_{33}^{11} \bar{\varepsilon}_{12} + C_{33}^{12} \bar{\varepsilon}_{21} + D_{33}^{11} \chi_{12} + D_{33}^{12} \chi_{21}, \\
Q_{13} &= K_1 (\varepsilon_{13} + \varphi_1),
\end{aligned} \quad (1 \leftrightarrow 2) \tag{2.7}$$

где

$$\begin{aligned}\bar{\varepsilon}_{11} &= \varepsilon_{11} + \varepsilon_{13}^2/2; \bar{\varepsilon}_{12} = \varepsilon_{12} + \varepsilon_{13}\varepsilon_{23}/2, \\ B_{jj} &= I_{jj}^{(0)}, \quad B_{12} = B_{21} = J_{12}^{(0)}, \quad C_{jj} = I_{jj}^{(1)}, \quad C_{12} = C_{21} = J_{12}^{(1)} \\ B_{33}^{jj} &= I_{33,jj}^{(0)}, \quad B_{33}^{12} = B_{33}^{21} = J_{33}^{(0)}, \quad C_{33}^{jj} = I_{33,jj}^{(1)}, \quad C_{33}^{12} = C_{33}^{21} = J_{33}^{(1)}, \\ D_{jj} &= I_{jj}^{(2)}, \quad D_{12} = D_{21} = J_{12}^{(2)}, \quad D_{33}^{jj} = I_{33,jj}^{(2)}, \quad D_{33}^{12} = D_{33}^{21} = J_{33}^{(2)}\end{aligned}\quad (2.8)$$

$$K_j = h^2 \left[\sum_{\kappa=1}^K \frac{H_j^{(\kappa)} h_{\kappa}}{A_{j+3,j+3}^{(\kappa)}} \right]^{-1}, \quad H_1^{(\kappa)} = \frac{(1 + \bar{h}_{\kappa} k_1)}{(1 + \bar{h}_{\kappa} k_2)}, \quad (1 \Leftrightarrow 2) \quad (j=1,2)$$

$$h_{\kappa} = z_{\kappa} - z_{\kappa-1}, \quad \bar{h}_{\kappa} = (z_{\kappa} + z_{\kappa-1})/2,$$

$$I_{11}^{(i)} = \frac{1}{i+1} \sum_{\kappa=1}^K A_{11}^{(\kappa)} H_2^{(\kappa)} (z_{\kappa}^{i+1} - z_{\kappa-1}^{i+1}), \quad (i=0,1,2) \quad (1 \Leftrightarrow 2)$$

$$I_{33,11}^{(i)} = \frac{1}{i+1} \sum_{\kappa=1}^K A_{33}^{(\kappa)} H_2^{(\kappa)} (z_{\kappa}^{i+1} - z_{\kappa-1}^{i+1}),$$

$$J_{12}^{(i)} = \frac{1}{i+1} \sum_{\kappa=1}^K A_{12}^{(\kappa)} (z_{\kappa}^{i+1} - z_{\kappa-1}^{i+1}),$$

$$J_{33}^{(i)} = \frac{1}{i+1} \sum_{\kappa=1}^K A_{33}^{(\kappa)} (z_{\kappa}^{i+1} - z_{\kappa-1}^{i+1}), \quad (i=0,1,2)$$

$A_{ij}^{(\kappa)}$ - эффективные жесткостные характеристики слоя; z_{κ} - координаты слоев, отсчитываемые от внутренней поверхности оболочки.

При этом $A_{ij}^{(\kappa)}$ выражаются через модули упругости $E_j^{(\kappa)}, G_{12}^{(\kappa)}, G_{j3}^{(\kappa)}$ и коэффициенты Пуассона $\nu_{12}^{(k)}$ в осях ортотропии слоя с помощью зависимостей

$$\begin{aligned}A_{11}^{(k)} &= \bar{E}_1^{(k)} \cos^4 \varphi^k + \bar{E}_2^{(k)} \sin^4 \varphi^k + 2(\bar{E}_1^{(k)} \nu_{12}^{(k)} + 2G_{12}^{(k)}) \sin^2 \varphi^k \cos^2 \varphi^k \\ A_{12}^{(k)} &= A_{21}^{(k)} = \bar{E}_1^{(k)} \nu_{12}^{(k)} + [\bar{E}_1^{(k)} + \bar{E}_2^{(k)} - 2(\bar{E}_1^{(k)} \nu_{12}^{(k)} + 2G_{12}^{(k)})] \sin^2 \varphi^k \cos^2 \varphi^k \\ A_{22}^{(k)} &= \bar{E}_1^{(k)} \sin^4 \varphi^k + \bar{E}_2^{(k)} \cos^4 \varphi^k + 2(\bar{E}_1^{(k)} \nu_{12}^{(k)} + 2G_{12}^{(k)}) \sin^2 \varphi^k \cos^2 \varphi^k \\ A_{33}^{(k)} &= (\bar{E}_1^{(k)} + \bar{E}_2^{(k)} - 2\bar{E}_1^{(k)} \nu_{12}^{(k)}) \sin^2 \varphi^k \cos^2 \varphi^k + G_{12}^{(k)} \cos^2 2\varphi^k \\ A_{44}^{(k)} &= G_{13}^{(k)} \cos^2 \varphi^k + G_{23}^{(k)} \sin^2 \varphi^k \\ A_{55}^{(k)} &= G_{13}^{(k)} \sin^2 \varphi^k + G_{23}^{(k)} \cos^2 \varphi^k\end{aligned}\quad (2.9)$$

Важным свойством прикладной теории является ее энергетическая согласованность, т.е. возможность получения исходных уравнений как условий стационарности некоторого энергетического функционала. Поэтому для вывода уравнений движения оболочек вращения воспользуемся принципом возможных перемещений [6], который с учетом (2.1)-(2.7) запишется в виде [7]

$$\begin{aligned}
& \iint_S \left[\frac{N_{11}}{A_1} \frac{\partial(\delta u_1)}{\partial \alpha_1} + \frac{N_{21}}{A_2} \frac{\partial(\delta u_1)}{\partial \alpha_2} + \left(\frac{N_{22}}{A_1 A_2} \frac{\partial A_2}{\partial \alpha_1} - \frac{N_{12}}{A_1 A_2} \frac{\partial A_1}{\partial \alpha_2} - N_{13}^* k_1 \right) \delta u_1 + \right. \\
& + \frac{N_{22}}{A_2} \frac{\partial(\delta u_2)}{\partial \alpha_2} + \frac{N_{12}}{A_1} \frac{\partial(\delta u_2)}{\partial \alpha_1} + \left(\frac{N_{11}}{A_1 A_2} \frac{\partial A_1}{\partial \alpha_2} - \frac{N_{21}}{A_1 A_2} \frac{\partial A_2}{\partial \alpha_1} - N_{23}^* k_2 \right) \delta u_2 + \\
& + \frac{N_{13}^*}{A_1} \frac{\partial(\delta u_3)}{\partial \alpha_1} + \frac{N_{23}^*}{A_2} \frac{\partial(\delta u_3)}{\partial \alpha_2} + (N_{11} k_1 + N_{22} k_2) \delta u_3 + \\
& + \frac{M_{11}}{A_1} \frac{\partial(\delta \varphi_1)}{\partial \alpha_1} + \frac{M_{21}}{A_2} \frac{\partial(\delta \varphi_1)}{\partial \alpha_2} + \left(\frac{M_{22}}{A_1 A_2} \frac{\partial A_2}{\partial \alpha_1} - \frac{M_{12}}{A_1 A_2} \frac{\partial A_1}{\partial \alpha_2} + Q_{13} \right) \delta \varphi_1 + \\
& + \frac{M_{22}}{A_2} \frac{\partial(\delta \varphi_2)}{\partial \alpha_2} + \frac{M_{12}}{A_1} \frac{\partial(\delta \varphi_2)}{\partial \alpha_1} + \left(\frac{M_{11}}{A_1 A_2} \frac{\partial A_1}{\partial \alpha_2} - \frac{M_{21}}{A_1 A_2} \frac{\partial A_2}{\partial \alpha_1} + Q_{23} \right) \delta \varphi_2 \Big] A_1 A_2 d\alpha_1 d\alpha_2 + \\
& + \iint_S \left[\sum_{i=1}^2 (\bar{B}_{11} \ddot{u}_i + \bar{B}_{12} \ddot{\varphi}_i) \delta u_i + \sum_{i=1}^2 (\bar{B}_{22} \ddot{\varphi}_i + \bar{B}_{21} \ddot{u}_i) \delta \varphi_i + \bar{B}_{11} \ddot{u}_3 \delta u_3 \right] A_1 A_2 d\alpha_1 d\alpha_2 - \\
& - \iint_S \left(\sum_{i=1}^3 F_i \delta u_i + \sum_{i=1}^2 M_i \delta \varphi_i \right) d\alpha_1 d\alpha_2 - \sum_{i=1}^2 \int_{\Gamma_i^0} (N_{11}^0 \delta u_1^0 + N_{12}^0 \delta u_2^0 + Q_{13}^0 \delta u_3^0 + \\
& + M_{11}^0 \delta \varphi_1^0 + M_{12}^0 \delta \varphi_2^0) A_2 d\alpha_2 - \sum_{i=3}^4 \int_{\Gamma_i^0} (N_{22}^0 \delta u_2^0 + N_{21}^0 \delta u_1^0 + Q_{23}^0 \delta u_3^0 + \\
& + M_{21}^0 \delta \varphi_1^0 + M_{22}^0 \delta \varphi_2^0) A_1 d\alpha_1 = 0
\end{aligned} \tag{2.10}$$

где

$$N_{13}^* = Q_{13} + N_{11} \varepsilon_{13} + N_{12} \varepsilon_{23}, \quad (1 \leftrightarrow 2)$$

$$\bar{B}_{11} = \rho [h + (k_1 + k_2) h^2 / 2 + k_1 k_2 h^3 / 3],$$

$$\bar{B}_{12} = \bar{B}_{21} = \rho [h^2 / 2 + (k_1 + k_2) h^3 / 3 + k_1 k_2 h^4 / 4],$$

$$\bar{B}_{22} = \rho [h^3 / 3 + (k_1 + k_2) h^4 / 4 + k_1 k_2 h^5 / 5],$$

$$F_1 = A_1 A_2 p_1 + B_1 B_2 q_1, \quad (1 \leftrightarrow 2)$$

$$F_3 = A_1 A_2 p_3 - B_1 B_2 q_3,$$

$$M_1 = h B_1 B_2 q_1, \quad (1 \leftrightarrow 2)$$

$q_i, p_i (i = \overline{1,3})$ - нагрузки по направлениям координатных осей α_i ; S - область интегрирования на внутренней поверхности оболочки; $A_j, B_j (j = \overline{1,2})$ - коэффициенты первой квадратичной формы внутренней и внешней поверхностей; Γ_i^0 - граничные линии области S ; N_{ij}^0, M_{ij}^0 - усилия и моменты, приложенные к соответствующим граничным линиям.

Интегрируя в (2.10) по частям и учитывая произвольность вариаций, получим: уравнения движения оболочки

$$L_1(N) + N_{13}^* k_1 A_1 A_2 + F_1 = A_1 A_2 (\bar{B}_{11} \ddot{u}_1 + \bar{B}_{12} \ddot{\varphi}_1),$$

$$L_2(N) + N_{23}^* k_2 A_1 A_2 + F_2 = A_1 A_2 (\bar{B}_{11} \ddot{u}_2 + \bar{B}_{12} \ddot{\varphi}_2),$$

$$\frac{\partial(A_2 N_{13}^*)}{\partial \alpha_1} + \frac{\partial(A_1 N_{23}^*)}{\partial \alpha_2} - A_1 A_2 (N_{11} k_1 + N_{22} k_2) + F_3 = A_1 A_2 \bar{B}_{11} \ddot{u}_3,$$

$$L_1(M) - Q_{13} A_1 A_2 + M_1 = A_1 A_2 (\bar{B}_{22} \ddot{\varphi}_1 + \bar{B}_{21} \ddot{u}_1), \tag{2.11}$$

$$L_2(M) - Q_{23}A_1A_2 + M_2 = A_1A_2(\bar{B}_{22}\ddot{\varphi}_2 + \bar{B}_{21}\ddot{u}_2),$$

$$L_1(K) = \frac{\partial(A_2K_{11})}{\partial\alpha_1} - K_{22}\frac{\partial A_2}{\partial\alpha_1} + \frac{\partial(A_1K_{21})}{\partial\alpha_2} + K_{12}\frac{\partial A_1}{\partial\alpha_2} \quad (1 \leftrightarrow 2)$$

и естественные граничные условия

$$N_{11} = N_{11}^0; \quad N_{12} = N_{12}^0; \quad N_{13}^* = Q_{13}^0; \quad M_{11} = M_{11}^0; \quad M_{12} = M_{12}^0 \quad (1 \leftrightarrow 2). \quad (2.12)$$

Дополняя соотношения (2.2)-(2.4), (2.7), (2.8), (2.11), (2.12) необходимым числом начальных условий

$$u_i(\alpha_1, \alpha_2, 0) = u_i^0(\alpha_1, \alpha_2); \quad \varphi_i(\alpha_1, \alpha_2, 0) = \varphi_i^0(\alpha_1, \alpha_2);$$

$$\dot{u}_i(\alpha_1, \alpha_2, 0) = \dot{u}_i^0(\alpha_1, \alpha_2); \quad \dot{\varphi}_i(\alpha_1, \alpha_2, 0) = \dot{\varphi}_i^0(\alpha_1, \alpha_2), \quad (i = \overline{1,3}; j = \overline{1,2}) \quad (2.13)$$

получим полную систему уравнений для анализа нелинейных процессов деформации произвольных оболочек вращения, выполненных из композиционных материалов, при импульсных нагрузках.

3. МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ

Численный метод решения сформулированной задачи основывается на явной вариационно-разностной схеме [7]. В результате преобразования вариационного уравнения динамики (2.10) с использованием известных разностных процедур [7] придем к системам сеточных уравнений, описывающим движение внутренних и граничных узлов:

$$\bar{B}_{11}\ddot{u}_j + \bar{B}_{12}\ddot{\varphi}_j = F_{u_j}, \quad \bar{B}_{11}\ddot{u}_3 = F_{u_3}$$

$$\bar{B}_{22}\ddot{\varphi}_j + \bar{B}_{21}\ddot{u}_j = F_{\varphi_j} \quad (3.1)$$

где F_{u_i}, F_{φ_j} - разностные аналоги левых частей системы (2.11).

Разрешая систему алгебраических уравнений (3.1) относительно обобщенных ускорений $\ddot{u}_i, \ddot{\varphi}_j$, получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка по времени, для интегрирования которой применяется явная схема «крест» [7]. В результате решение системы (3.1) сводится к рекуррентному счету по формулам

$$\dot{u}_j \left(t^{\kappa + \frac{1}{2}} \right) = \dot{u}_j \left(t^{\kappa - \frac{1}{2}} \right) + \frac{\Delta t}{\bar{B}_{11}\bar{B}_{22} - \bar{B}_{12}\bar{B}_{21}} (F_{u_j} \bar{B}_{22} - F_{\varphi_j} \bar{B}_{12}),$$

$$\dot{u}_3 \left(t^{\kappa + \frac{1}{2}} \right) = \dot{u}_3 \left(t^{\kappa - \frac{1}{2}} \right) + \frac{\Delta t}{\bar{B}_{11}} (F_{u_3}),$$

$$\dot{\varphi}_i \left(t^{\kappa + \frac{1}{2}} \right) = \dot{\varphi}_i \left(t^{\kappa - \frac{1}{2}} \right) + \frac{\Delta t}{\bar{B}_{11}\bar{B}_{22} - \bar{B}_{12}\bar{B}_{21}} (F_{\varphi_i} \bar{B}_{11} - F_{u_i} \bar{B}_{21}),$$

$$u_i(t^{\kappa+1}) = u_i(t^\kappa) + \Delta t \dot{u}_i \left(t^{\kappa + \frac{1}{2}} \right); \quad (i = \overline{1,3}; j = \overline{1,2}), \quad (\kappa = \overline{0, \infty})$$

$$\varphi_i(t^{\kappa+1}) = \varphi_i(t^\kappa) + \Delta t \dot{\varphi}_i \left(t^{\kappa + \frac{1}{2}} \right),$$

При этом шаг интегрирования по времени Δt определяется на основе спектрального признака Неймана [8], который приводит к условию [7]

$\Delta t \leq 2/\omega_{\max}$ ($\omega_{\max}$ - максимальная собственная частота полудискретной системы (3.1).

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО АНАЛИЗА ВЛИЯНИЯ СТРУКТУРЫ АРМИРОВАНИЯ НА ПРЕДЕЛЬНУЮ ДЕФОРМИРУЕМОСТЬ КОМПОЗИТНЫХ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ОБОЛОЧЕК ПРИ ОДНОКРАТНОМ НАГРУЖЕНИИ

Для верификации рассматриваемой методики было проведено сравнение численных расчетов с экспериментальными данными [2] по однократному нагружению изнутри цилиндрической оболочки импульсом давления, вызванным подрывом в ее геометрическом центре заряда взрывчатого вещества (ВВ) массой $m=0,064$ кг. В расчетах импульс давления задавался с помощью эмпирической зависимости

$$P_3(\alpha_1, t) = \begin{cases} 0,35mq/l^3 & \text{при } t \leq 0,35l/\sqrt{q} \\ 0 & \text{при } t > 0,35l/\sqrt{q} \end{cases},$$

где q - теплотворная способность ВВ; l - расстояние от центра заряда до точки внутренней поверхности оболочки. Оболочка получена намоткой восьми спиральных угол армирования $\varphi = \pm 45^\circ$ и кольцевых ($\varphi = 90^\circ$) слоев с отношением их толщин 1:1 (структура пакета $[90^\circ_2/\pm 45^\circ]_4$).

Оболочка имела следующие размеры: радиус внутренней поверхности $R=0,15$ м, толщина $h=0,00833$ м, длина $L=4R$.

Физико-механические характеристики однонаправленного композитного материала были равны: $E_1=54,1$ ГПа, $E_2=9,9$ ГПа, $\nu_{12}=0,281$, $G_{12}=G_{13}=3,57$ ГПа, $G_{23}=3,42$ ГПа, $\rho = 2,013 \cdot 10^3$ кг/м³.

В Таблице 1 представлены результаты сравнения численных расчетов с экспериментальными данными по максимальным значениям кольцевой деформации e_{22}^* в центральном сечении оболочки на ее внешней поверхности и периоду радиальных колебаний T . Здесь в числителе приведены экспериментальные значения, а в знаменателе – численные.

Таблица 1.

Результаты сравнения численных расчетов и экспериментальных данных.

$e_{22}^*, \%$	$T \cdot 10^{-6}, \text{с}$
1,00	230
0,92	240

Из приведенных результатов следует, что максимальная ошибка по амплитуде колебаний составила 8%, а по периоду колебаний - 5%. При этом следует заметить, что погрешность экспериментальных измерений достигала 10% [2].

Результаты численного анализа влияния углов армирования и схемы чередования слоев на окружные деформации в центральном сечении на внешней поверхности оболочки для массы заряда ВВ $m=0,135$ кг представлены на рис.1-4.

На рис.1 приведены осциллограммы окружных деформаций на внешней поверхности оболочки в зависимости от углов армирования в диапазоне $\pm 30^\circ \div 90^\circ$.

Наблюдается существенное влияние угла армирования, как на амплитуду колебаний окружных деформаций, так и на их периодичку.

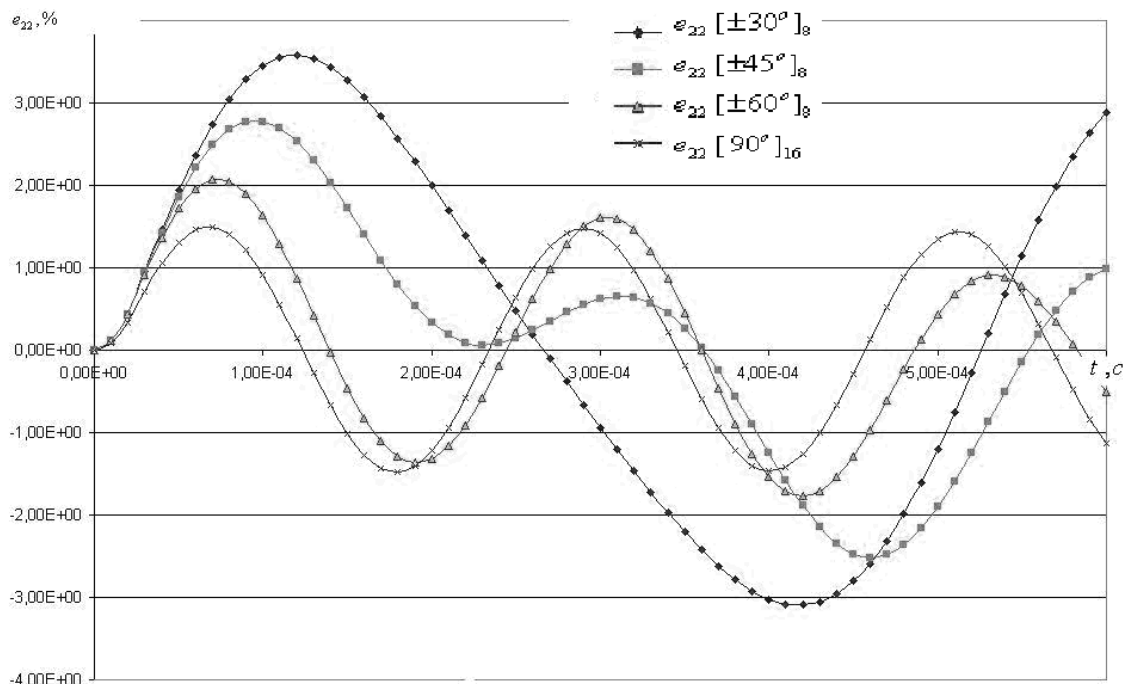


Рис.1.

На рис.2 и 3 показаны временные зависимости, отражающие влияние схемы чередования слоев на величину окружных деформаций. Графики на рис.2 и 3 получены для структур армирования $[90^\circ_2 / \pm\varphi^\circ]_4$ и $[(\pm\varphi^\circ / 90^\circ)_5 / \pm\varphi^\circ]$, соответственно. Здесь также следует констатировать зависимость, как амплитуды, так и фазы колебаний окружных деформаций оболочки, от последовательности укладки слоев.

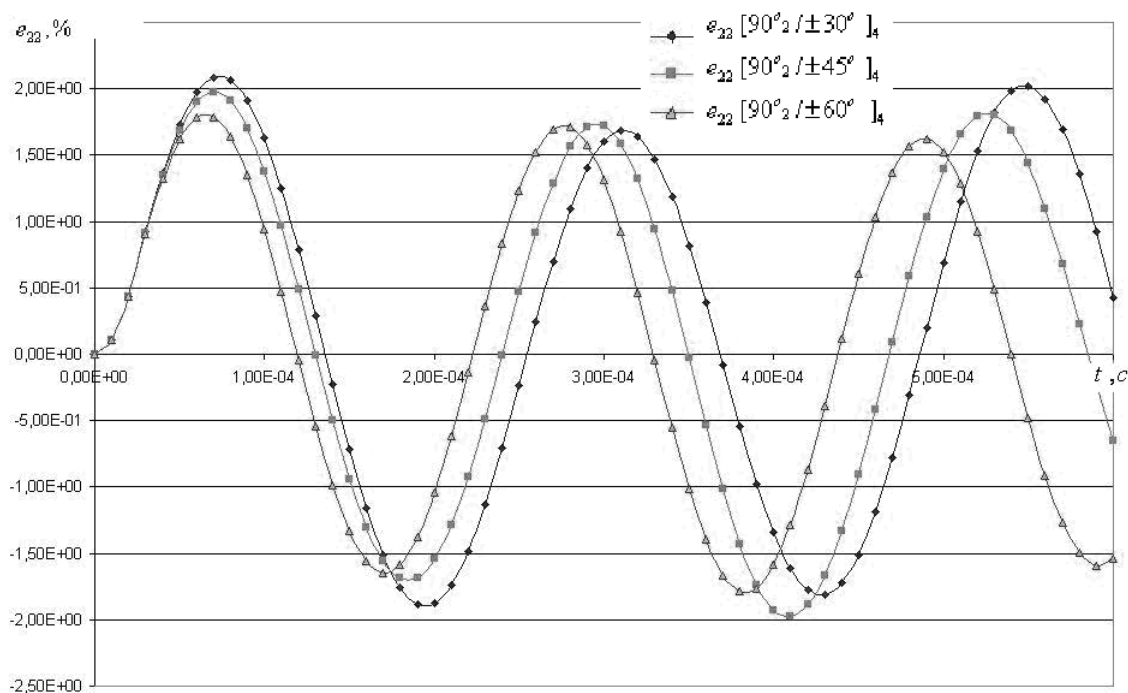


Рис.2.

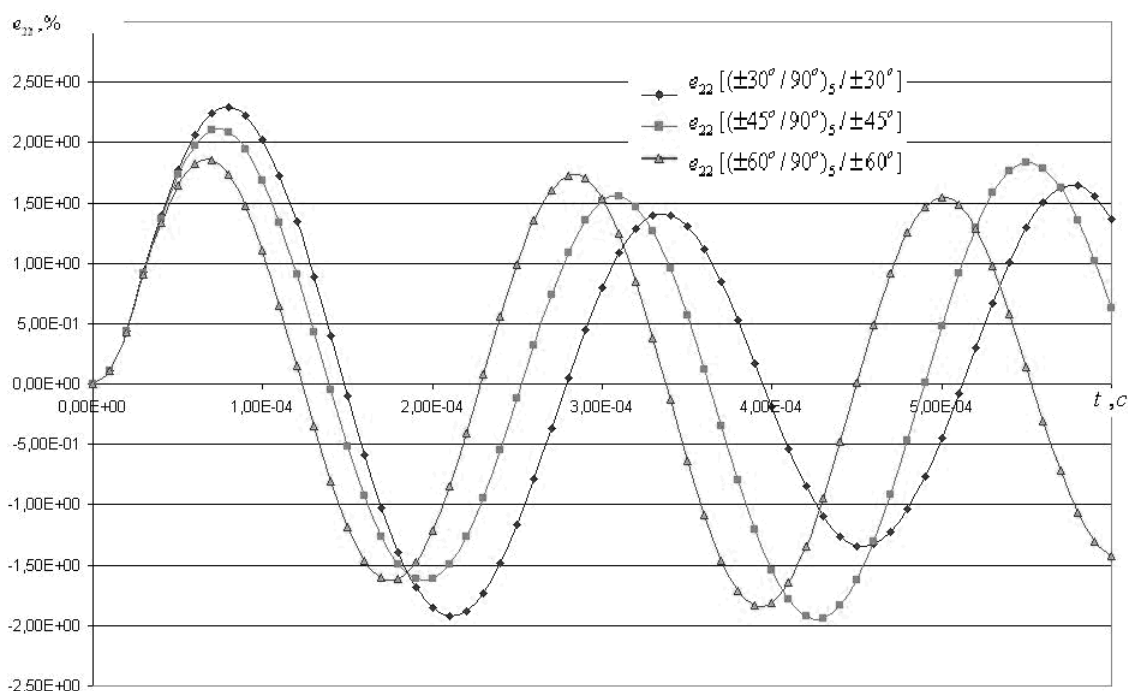


Рис.3.

Зависимости, характеризующие влияние массы заряда на величину окружных деформаций приведены на рис.4 для структуры армирования $[90_2/\pm 45^\circ]_4$. Видно, что с увеличением массы заряда максимальные окружные деформации в фазах растяжения и сжатия достигают предельного значения, которое для данного типа композитного материала составляет около 2,3%.

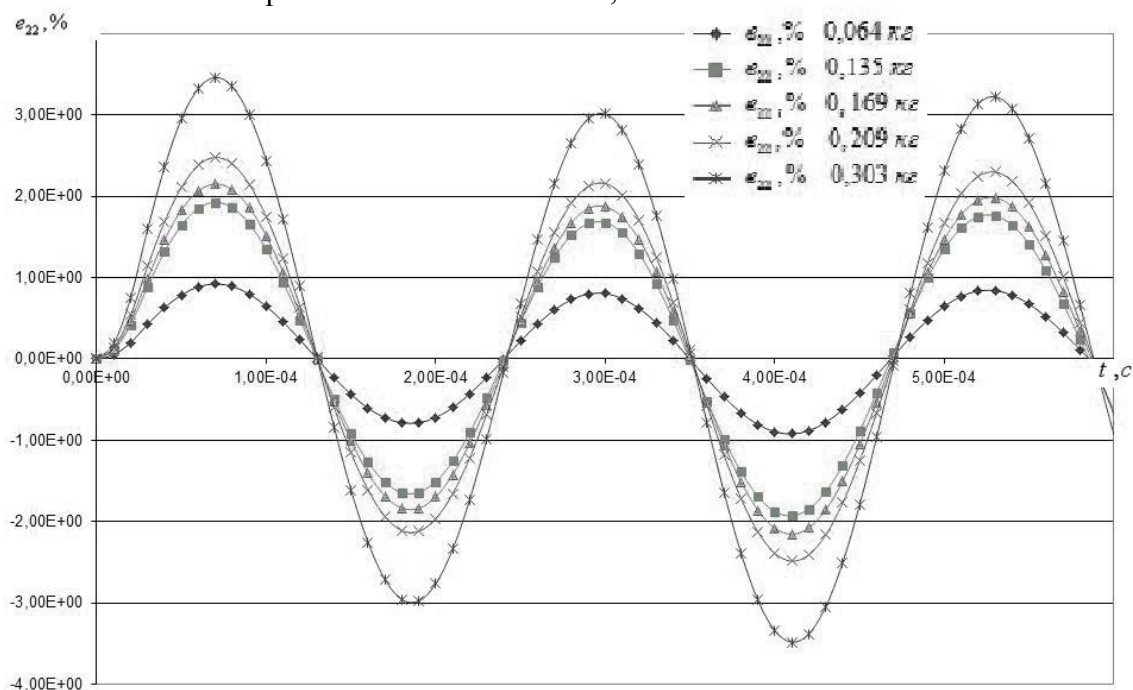


Рис.4.

Анализ полученных расчетных данных показал, что динамическая реакция оболочки намоточного типа существенно зависит как от угла, так и от схемы чередования слоев. Варьируя эти параметры можно в разы уменьшить величину

максимальных окружных деформаций на внешней и внутренней поверхностях оболочки и тем самым повысить ее предельную несущую способность. Видно также, что с этой точки зрения наиболее рациональной структурой обладают оболочки, полученные намоткой чередующихся спиральных и кольцевых слоев.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Построена энергетически согласованная разрешающая система уравнений динамики композитных оболочек вращения, ориентированная на численное решение задач оценки их предельной деформируемости в зависимости от структуры армирования и интенсивности нагружения. Численный метод решения сформулированной начально-краевой задачи основывается на явной вариационно-разностной схеме.

Предлагаемая методика была верифицирована путем сравнения численных расчетов с экспериментальными данными по однократному нагружению изнутри цилиндрической оболочки импульсом давления, вызванным подрывом в ее геометрическом центре заряда взрывчатого вещества (ВВ).

Проведен анализ влияния структуры армирования на максимальные окружные деформации цилиндрических оболочек намоточного типа при внутреннем взрывном нагружении, позволяющий сделать вывод о предпочтительности комбинированных структур армирования для повышения их несущей способности и возможности решения соответствующих задач рационального проектирования.

ЛИТЕРАТУРА

1. Федоренко А.Г., Сырунин М.А., Иванов А.Г. Критерии выбора композитных материалов для оболочечных конструкций, локализирующих взрыв (обзор) // ФГиВ. – 2005. – Т.41. – №5. – С.3-13.
2. Федоренко А.Г., Сырунин М.А., Иванов А.Г. Влияние структуры армирования ориентированных стеклопластиков на прочность круговых цилиндрических оболочек при взрывном нагружении изнутри // Механика композитных материалов. – 1991. – №4. – С.631-640.
3. Новожилов В.В. Основы нелинейной теории упругости. – М.: Гостехиздат, 1948. – 211 с.
4. Шаповалов Л.А. Об учете поперечного обжатия в уравнениях нелинейной динамики оболочек // Известия РАН. МТТ. – 1997. – №3. – С.156-168.
5. Васильев В.В. Механика конструкций из композиционных материалов. – М.: Машиностроение, 1988. – 272 с.
6. Васидзу К. Вариационные методы в теории упругости и пластичности. – М.: Мир, 1987. – 512 с.
7. Абросимов Н. А., Баженов В. Г. Нелинейные задачи динамики композитных конструкций. – Н.Новгород: Изд-во ННГУ, 2002. – 400 с.
8. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. – Л.; М.: Наука, 1980. – 535 с.

ИДЕНТИФИКАЦИЯ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ЕЛМАНА НАПРЯЖЁННО-ДЕФОРМАЦИОННОМУ СОСТОЯНИЮ ВЯЗКОУПРУГОЙ СРЕДЫ

Басистов Ю.А.¹, Яновский Ю.Г.^{1,2}

¹ФГБУН Институт прикладной механики Российской академии наук, г. Москва, Россия

²Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), г. Москва, Россия

1. ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] была разработана нелинейная модель вязкоупругой среды с наследственной и ассоциативной памятью. Были доказаны теоремы об устойчивости эволюционного развития этой модели во времени. Модель синтезирована на нелинейном вязкоупругом элементе с ассоциативной и наследственной памятью, впервые предложенным авторами и представленном на рис.1.

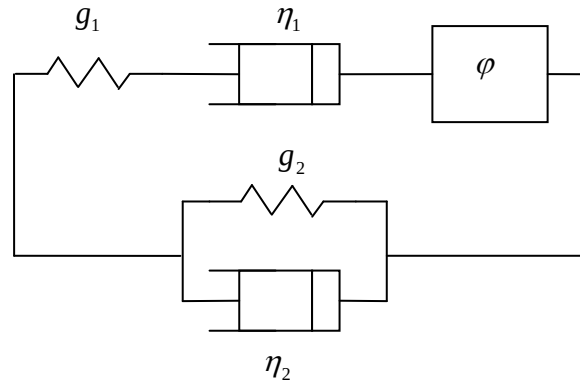


Рис.1 Нелинейный вязкоупругий элемент с наследственной и ассоциативной памятью, g - упругость, η - вязкость.

Вязкоупругие свойства элемента рис.1 описываются интегро-дифференциальным уравнением

$$\frac{d\gamma(t)}{dt} = -\frac{2\gamma(t)}{\lambda} + \varphi \left(\frac{1}{\lambda^2} \int_{-\infty}^t \exp\left(-\frac{t-\tau}{\lambda}\right) \gamma(\tau) d\tau + Const \right) \quad (1)$$

$-\infty < \tau \leq t \leq T, \gamma(-\infty) = \gamma_0, \lambda > 0.$

Объединяя эти элементы с помощью интегральных операторов Вольтерра, выполняющих функции синаптических связей, система уравнений модели примет вид

$$\frac{d\gamma_j(t)}{dt} = -\frac{2\gamma_j(t)}{\lambda_j} + \varphi_j \left(\sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^t \frac{k_i}{\lambda_j \lambda_i} \exp\left\{-\tau \frac{\lambda_j + \lambda_i}{2\lambda_j \lambda_i}\right\} \gamma_i(t-\tau) d\tau + b_i \right), \quad (2)$$

$\{\lambda_i\}_{i=1}^N > 0, \{\lambda_j\}_{j=1}^N > 0, -\infty < \tau \leq t \leq T < \infty, \gamma(-\infty) = \gamma_0, j = 1, \dots, N, k_i = 1$ при $i = j$

где $\gamma_i(t)$ – градиенты деформации вязкоупругих элементов, окружающих элемент с индексом j , λ_i, λ_j – соответствующие времена релаксации. Коэффициент $k \in \{-1, 1\}$,

определяющий знак ядра оператора, определяет возбуждение при $k=1$, или торможение ($k=-1$) синаптических связей между элементами рис.1.

Система (2) определяет эволюцию во времени градиента деформации вязкоупругой среды в точках $i=1, \dots, N$, $j=1, \dots, N$. Анализ (2) [1] показывает, что предлагаемая модель обобщает известную нейронную сеть Хопфилда с ассоциативной памятью на пространство L_2 , а также обладает дополнительной наследственной памятью, которой нейронная сеть Хопфилда не обладает. Поскольку наследственная память вязкоупругой среды обсуждалась авторами ранее в работах [2-4], то в данной работе будем рассматривать лишь ассоциативную память.

Перейдя в (2) из Гильбертова пространства L_2 в конечномерное евклидово R_N и удалив наследственную память, получим описание модели в виде конечно-разностной аппроксимации

$$\gamma(n) = \varphi(W\gamma(n-1) + b), \quad \gamma(0) = \gamma_0, \quad n=1, 2, \dots, N \quad (3)$$

где $\varphi_i(x) = \begin{cases} -1, & x < -1, \\ x, & -1 \leq x \leq 1, \\ 1, & x > 1 \end{cases}$ для всех $i=1, \dots, N$ – функции активации.

В (3), согласно системе уравнений (2), матрица W и вектор b состоят из различных комбинаций времён релаксации вязкоупругой среды. Для идентификации этой модели требуется оценка этих параметров по экспериментальным данным.

Соотношение (3) можно назвать модернизированной сетью Хопфилда, т.к. в отличие от классической сети Хопфилда оно имеет другую функцию нелинейности и синаптические связи типа «один ко всем».

2. НЕЙРОННАЯ СЕТЬ ЕЛМАНА (Elman)

Уравнение (3) описывает лишь релаксацию вязкоупругой среды, подразумевая при этом, что модель (3) была ранее идентифицирована к реальной вязкоупругой среде. Для осуществления процесса идентификации (оценки матрицы W и вектора b) необходимо иметь вход модели, на который с помощью лабораторного прибора подаётся, например, градиент деформации, и выход модели, на котором наблюдается реакция модели, например, касательные напряжения. С учётом входа и выхода модель (3) заменяется моделью в пространстве состояний (4)

$$\begin{aligned} \gamma(k) &= \varphi_1(W_a \gamma(k-1) + W_b \sigma(k) + b_1) \\ \hat{\gamma}(k) &= \varphi_2(W_c \gamma(k) + b_2) \end{aligned} \quad (4)$$

Первое соотношение в уравнениях (4) определяет не просто релаксацию вязкоупругой среды, но эволюцию среды во времени под действием напряжения $\sigma(n)$. Здесь матрица W_a и вектор b_1 суть комбинации времён релаксации, которые подлежат оцениванию. Матрица W_b описывают линейный оператор реовискозиметра. Он также подлежат оцениванию.

Второе соотношение в уравнениях в (4) описывает процедуру наблюдения за процессом эволюции градиента деформации во времени под действием заданного напряжения. Матрица W_c и вектор b_2 тоже необходимо оценить по экспериментальным данным, т.к. они неизвестны.

Сравнивая уравнение (3) и систему уравнений (4), видим, что основная рекуррентная часть модели (4) повторяет уравнение (3) и определяет вязкоупругую среду. Уравнения состояния, записанные в виде (4), образуют рекуррентную нейронную сеть Елмана.

3. ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ В РЕЖИМЕ КОНЕЧНЫХ ДЕФОРМАЦИЙ

На рис.2 приведена функциональная схема процесса идентификации нейросетевой модели.

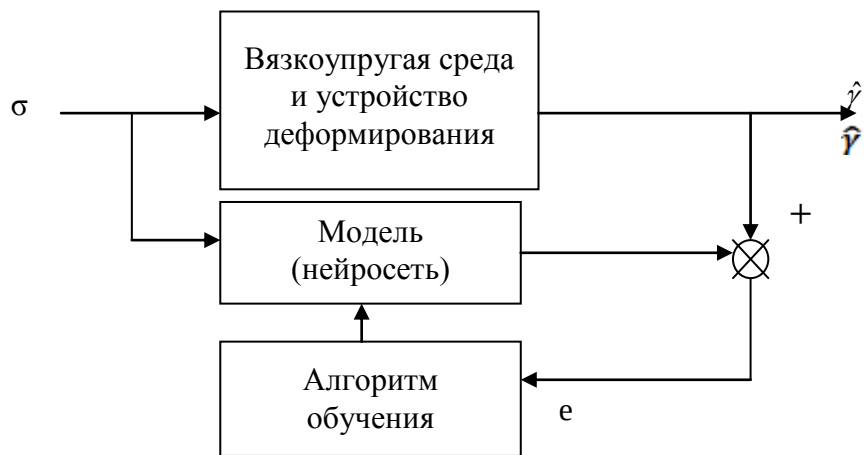


Рис.2. Структурная схема эксперимента.

Поскольку задача состоит в идентификации вязкоупругого поведения гетерогенной среды при ее деформировании в режиме конечных деформаций, объектом был выбран материал на основе классического эластомера – полиизопренового каучука (ПИ-330), наполненного техническим углеродом марки N330. Экспериментальные данные получали на реовискозиметре RS-150 (Германия). Обучение модели состоит из трёх этапов:

1. формирование обучающей выборки,
2. выбор целевого функционала,
3. выбор алгоритма минимизации (алгоритма обучения).

Рассмотрим эти этапы подробнее.

3.1. Формирование обучающей выборки.

На рис.3 приведены экспериментальные результаты динамических испытаний композита ПИ-330 в режиме малоамплитудного периодического синусоидального деформирования в виде зависимостей модулей упругостей G' и потерь G'' от частоты деформирования f [Гц].

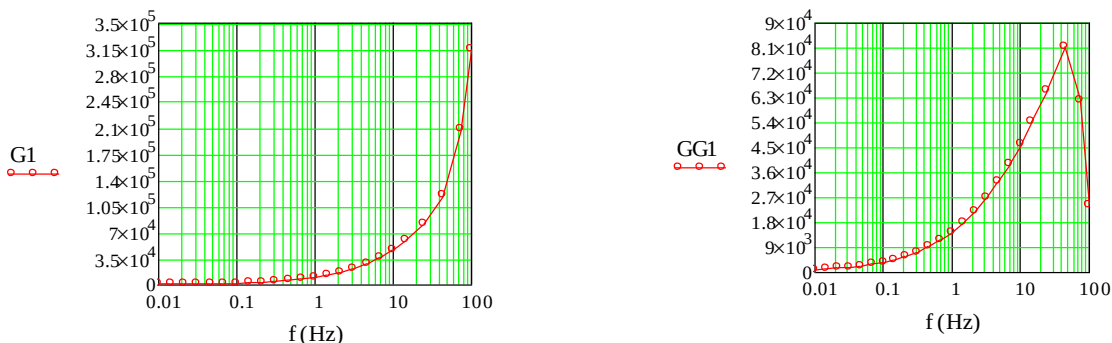


Рис.3. Зависимости модулей упругости G' (слева) и потерь G'' (справа) от частоты (ω) в режиме малоамплитудного синусоидального деформирования. Образец ПИ-330.

Амплитуда градиента деформации составляла 0.001 при числе отсчётов $n=24$. Эксперименты получены на реовискозиметре RS-150 (HAAKE, Германия).

Затем решением обратных задач методом минимакса [2-4] для уравнений

$$G''(\omega) = \int_0^{\infty} h_1(\lambda) \frac{\omega\lambda}{1 + \omega^2\lambda^2} d(\ln \lambda); \quad G'(\omega) = \int_0^{\infty} h_2(\lambda) \frac{\omega^2\lambda^2}{1 + \omega^2\lambda^2} d(\ln \lambda) \quad (5)$$

$$h(\lambda) = \beta h_1(\lambda) + (1 - \beta) h_2(\lambda) \quad \beta \in (0,1)$$

вычисляем релаксационный спектр $h(\lambda)$. Подставляя этот спектр в соотношение

$$G(t) = G_e + \int_0^{\infty} h(\lambda) \exp\left(-\frac{t}{\lambda}\right) d(\ln \lambda), \quad G_e = 0. \quad (6)$$

получаем линейную модель типа «вход-выход», обладающей наследственной памятью.

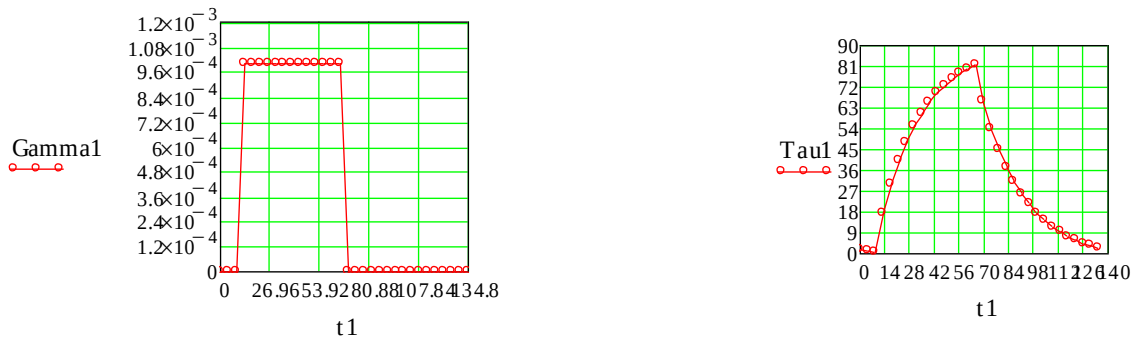


Рис.4. Левый график – импульс градиента деформации $\gamma = 0.001$ (вход модели), правый график – соответствующие касательные напряжения (реакция модели).

Проводя подобный эксперимент многократно для различных значений градиента деформации, мы получаем обучающую выборку для модели (4) в режиме конечных деформаций.

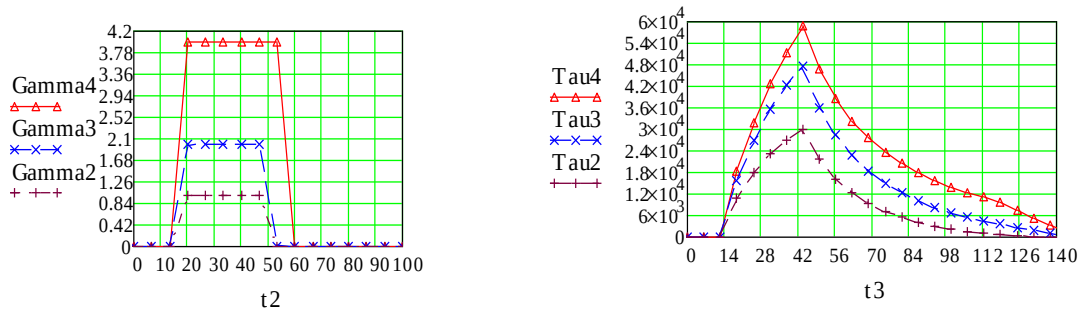


Рис.5. Касательные напряжения (правые графики) как реакция на импульсы градиента деформации (левые графики). Графики 1-3 градиента деформации обозначены $\gamma=1(+)$, $\gamma=2(x)$ и $\gamma=3(\Delta)$.

Из рис.6 видно, что образец ПИ-330 работает в нелинейном режиме (режим конечных деформаций). Приведённые данные мы принимаем в качестве обучающего материала для нейронной сети (4).

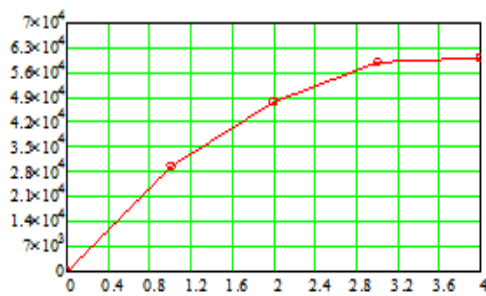


Рис.6. Нелинейная зависимость амплитуды касательных напряжений от амплитуды градиента деформации.

3.2. Выбор целевого функционала.

В качестве целевого функционала можно выбрать один из следующих типов [5]

1. $SSE = \sum_{i=1}^N e_i^2$
2. $MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_i^2$
3. $MSEREG = \frac{\alpha}{N} \sum_{i=1}^N e_i^2 + \frac{1-\alpha}{N} \sum_{j=1}^N x_j^2, \alpha \in (0,1)$

Мы выбрали критерий качества MSE. Конечно, желательно выбрать функционал Тихонова MSEREG, но алгоритм выбора параметра регуляризации для изучаемой модели авторам неизвестен.

3.3. Выбор алгоритмов обучения.

Мы выбрали последовательный режим обучения, в котором настройка параметров модели выполняется после подачи каждого примера обучения. В качестве метода обучения для вычисления производных критерия качества по переменным веса и смещения используем метод обратного распространения ошибки [5]. Проверим три алгоритма [5]:

1. Градиентный спуск с возмущением, где параметр скорости спуска выполняет адаптивную функцию. Он увеличивается, если значение целевого функционала уменьшается. Это реализуется на каждом цикле обучения. Однако, если значение целевого функционала увеличивается в определённое число раз, то параметр скорости уменьшается.
2. Алгоритм Левенберга-Марквардта

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - (\mathbf{J}^T \mathbf{J} + \mu \mathbf{I})^{-1} \mathbf{J}^T \mathbf{e}, \mathbf{e} - \text{вектор ошибок.}$$

При $\mu=0$ получаем Ньютонский метод минимизации функционала, использующую аппроксимацию матрицы Гессе. Когда μ большое число, алгоритм становится градиентным спуском с малыми размерами шага. Таким образом, μ уменьшается после каждого успешного шага итерации, и увеличивается тогда, когда шаг итерации приводит к увеличению целевого функционала.

3. Алгоритм Левенберга-Марквардта, дополненный регуляризацией по Байесу [6].

3.4. Обучение в линейном режиме деформации.

В этом режиме градиент деформации не превышает значения $0.001 - \max \gamma(t) = 0.001$.

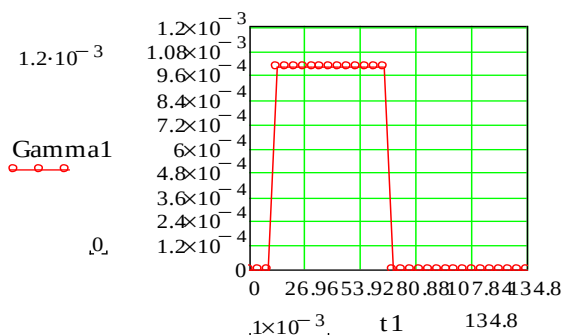


Рис.7. Входной сигнал нейросети – импульс $\gamma = 0.001$.

На рис.8 представлены касательные напряжения на выходе нейронной сети при 100 нейронах в промежуточном слое, причём каждый нейрон связан со всеми нейронами весовой обратной связи. Для обучения применялся градиентный спуск с возмущением и адаптацией параметра скорости спуска. На рис.8 видно сглаженное воспроизведение верхнего пика выходного сигнала, что свидетельствует о низкой полосе пропускания частот.

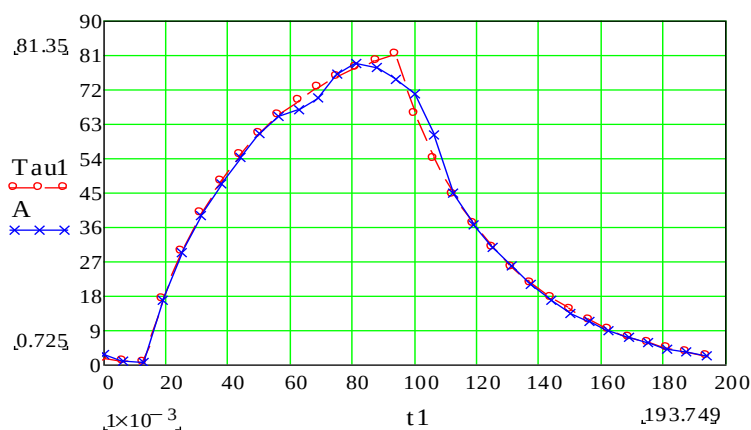


Рис.8. Выходной сигнал нейросети после обучения график (+), тестовый сигнал - касательные напряжения график (o).

Следующий эксперимент содержит ту же нейронную сеть, но уже при 1000 нейронах в рекуррентном слое. Однако при начальных значениях весовой матрицы и векторе смещения, предлагаемых в [6], градиентный спуск с возмущением и адаптацией параметра скорости спуска с задачей не справился. В случае нулевых начальных значениях $W=0$ и $b=0$ алгоритм достиг минимального значения СКО=0.1. Для достижения заданного качества обучения равного 0.1 алгоритм произвёл 8574 итерации. Рис.9 показывает совпадения тестового и выходного сигналов нейронной сети.

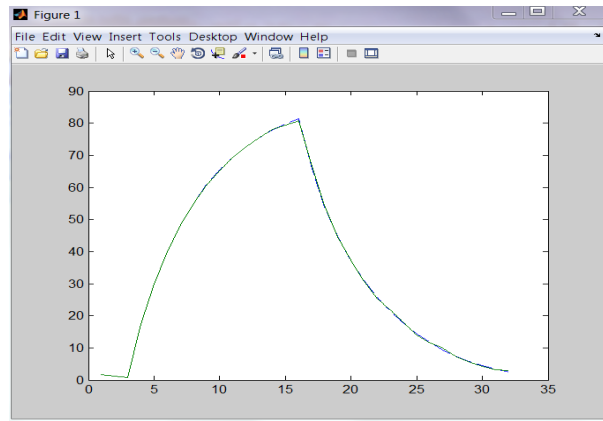


Рис.9. Тестовый и выходной сигналы нейросетевой модели при 1000 нейронах в промежуточном слое нейросети в режиме малых деформаций.

Следующий эксперимент состоит из той же нейронной сети. Функционал тот же СКО, но используется алгоритм минимизации Левенберга-Марквардта. На рис.10 приведён график минимизации среднеквадратичной ошибки обучения при заданной границе ошибки равной 0.1. Алгоритм достиг заданного качества обучения при числе итераций равном 3034, что существенно меньше 8574. Начальные значения весовой матрицы и вектора смещения также приняты нулевыми. Число нейронов в рекуррентном слое также равно 1000. Рис.11 свидетельствует о совпадении тестового и выходного сигналов нейросети.

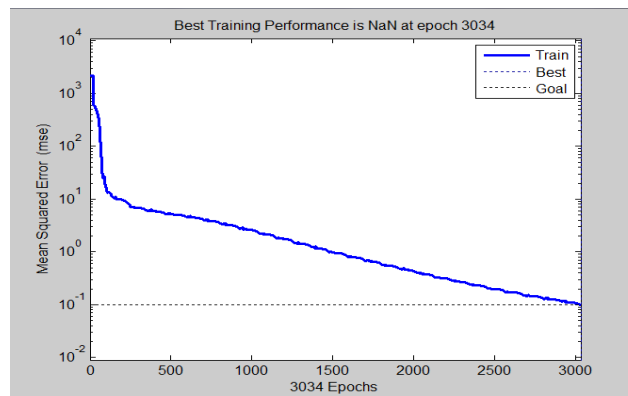


Рис.10. График зависимости ошибок обучения от числа итераций.

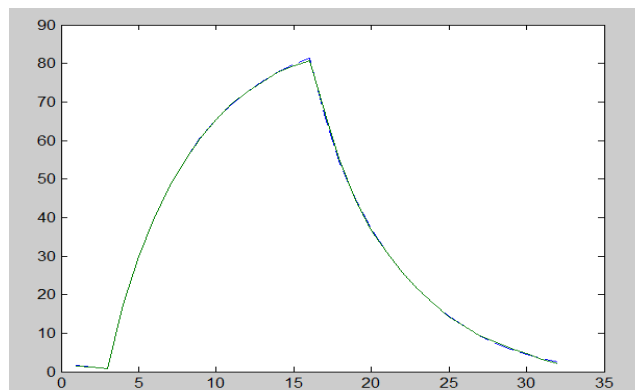


Рис.11. Графики тестового и выходного сигналов нейросети при числе нейронов в промежуточном слое равно 1000 и при алгоритме обучения Левенберга-Марквардта.

Следующий эксперимент совпадает с предыдущим только при числе нейронов в рекуррентном слое равном 500. Здесь обучение не достигло заявленного качества, равного 0.1 и оказалось равным 0.562 при 7000 итераций. Это видно на приведённом графике рис.12. Срез вершины тестового сигнала (см. рис.13) свидетельствует о недостаточном числе нейронов в рекуррентном слое нейронной сети.

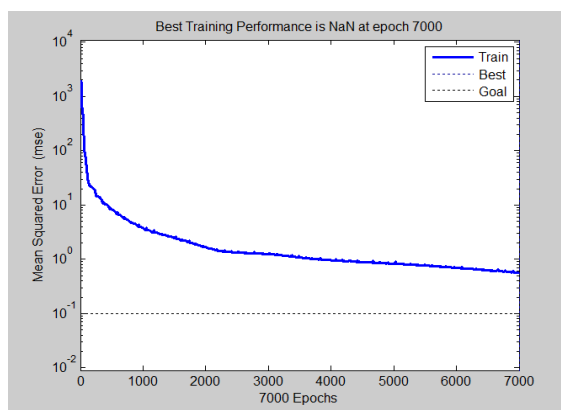


Рис.12. График обучения нейросети при числе нейронов в промежуточном слое равном 500 и при алгоритме обучения Левенберга-Марквардта.

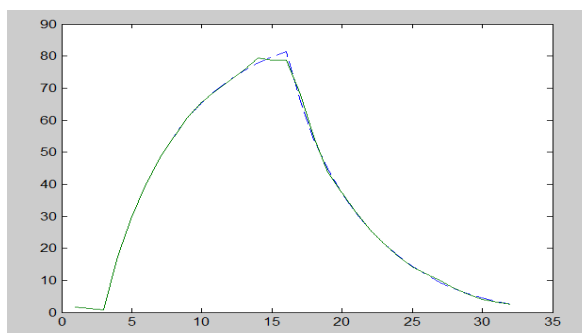


Рис.13. Графики эталонного и выходного сигналов нейросети, содержащей 500 нейронов в промежуточном слое при использовании алгоритма обучения Левенберга-Марквардта.

3.5. Обучение в режиме конечных деформаций.

В режиме конечных деформаций алгоритм Левенберга-Марквардта показал худшее качество обучения, т.к. происходил резкий рост параметра адаптации μ и останов алгоритма из-за превышения значения $\mu_{\max} = 1.0e+10$. То же самое происходит с алгоритмом Левенберга-Марквардта, дополненным регуляризацией по Байесу. Причина такого поведения алгоритма Левенберга-Марквардта авторами не найдена. Возможно, это связано с требованием большого коэффициента усиления для нейронной сети. Действительно, на вход подаётся сигнал с амплитудой, равной единице, а выходной тестовый сигнал имеет амплитуду, равную от $3 \cdot 10^4$ до $6 \cdot 10^4$. В дальнейшем будем тестировать градиентный спуск с возмущением и адаптацией параметра скорости спуска. Исследуем следующее предложение. Входной и тестовый сигналы трансформируем в диапазон значений $[-1, 1]$ с помощью соотношения

$$z = \frac{2(x - \min(x))}{\max(x) - \min(x)} - 1,$$

где x – вектор, элементы которого имеют большие числа, а z – вектор, элементы которого сосредоточены на отрезке $[-1,1]$. Затем обучаем сеть с трансформированными векторами. Потом с помощью соотношения

$$x = \frac{(z+1) * (\max(x) - \min(x))}{2} + \min(x)$$

после обучения нейросети трансформируем обратно выходные векторы в исходную область значений.

Этот эксперимент представлен ниже, причём начальные значения весовой матрицы и вектора смещения были отличны от нуля.

На рис.14 видно, что сеть достигла качества обучения 0.00105 за 10000 итераций, потратив на это 34 мин. 05 сек. на 4-х ядерном процессоре CORE i7. Процесс обучения был остановлен при достижении заданного числа итераций 10000.

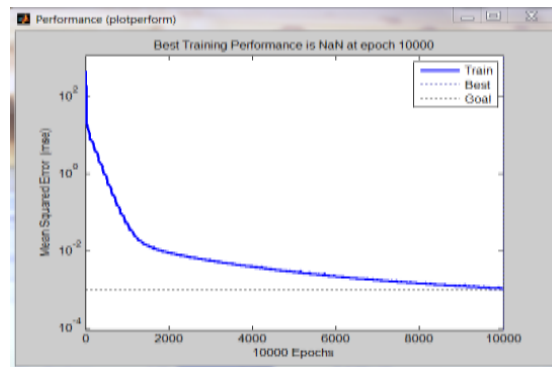


Рис.14. График зависимости ошибки обучения нейросети от числа итераций для режима конечных деформаций при трансформации значений элементов весовой матрицы и вектора смещения на отрезок $[-1,1]$.

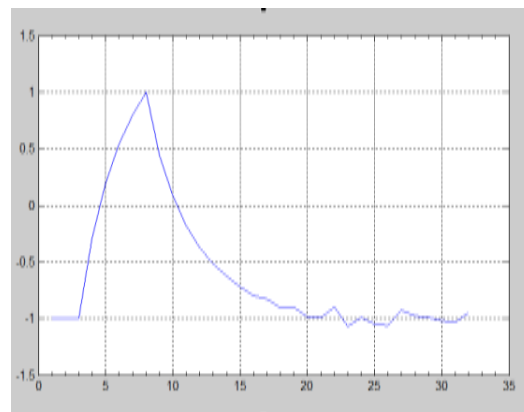


Рис.15. Выходной сигнал нейросети после обучения для режима конечных деформаций при трансформации значений элементов весовой матрицы и вектора смещения на отрезок $[-1,1]$.

На рис.15 видно, что форма выходного сигнала совпадает с тестовым сигналом, но сосредоточена на отрезке $[-1,1]$. Кроме того, в этом эксперименте видны малые флуктуации на «хвосте» графика, т.к. при трансформации тестового сигнала в отрезок $[-1,1]$ малые флуктуации уже соизмеримы с этим отрезком. Без трансформации максимум тестового сигнала должен быть равен $3.004 \cdot 10^4$, а минимум - $1.509 \cdot 10^{-12}$. Естественно, что при таком размахе значений эти флуктуации на графике не видны.

После восстановления сигнала с выхода нейросети наблюдается совпадение тестового и выходного сигналов (см. рис.16). Однако флуктуации тоже возросли и стали заметны на рис.16.

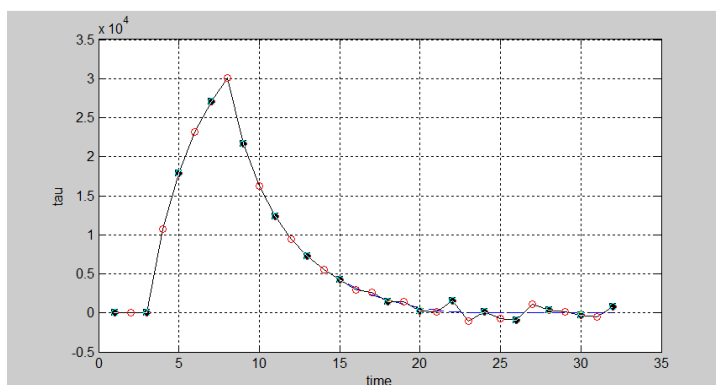


Рис.16. Сравнение тестового сигнала с сигналом на выходе нейросети после обучения для режима конечных деформаций при трансформации сигналов в исходную область значений. Здесь о – тестовый сигнал, x – сигнал с выхода нейросети после обучения.

4. ВЫВОДЫ

Приведена нейросетевая модель вязкоупругой среды с ассоциативной и наследственной памятью. Показано, что модель является обобщением нейронной сети Хопфилда.

Показано, что для идентификации модели нужно дополнительно использовать входной и выходной не рекуррентные слои, моделирующие реовискозиметр и регистрирующее устройство. Таким образом, мы анализируем нелинейную модель в пространстве состояний. Если в этой модели пренебречь наследственной памятью, то модель становится нейронной сетью Елмана.

На примере образца вязкоупругой среды Пи-330 показано, что нейронную сеть Елмана можно идентифицировать к данному образцу даже в режиме конечных деформаций, используя при этом градиентный спуск с возмущением и адаптацией параметра скорости спуска. Однако, вследствие большого требуемого коэффициента усиления для нейронной сети в режиме конечных деформаций, обучение необходимо производить в диапазоне значений сигналов $[-1,1]$. В противном случае ошибка обучения не достигает заданного удовлетворительного значения. При тестировании с трансформацией сигналов замечены также паразитные флуктуации при малых значениях выходного сигнала.

ЛИТЕРАТУРА

1. Басистов Ю.А., Яновский Ю.Г. Нейродинамическая модель вязкоупругих сред с ассоциативной памятью // Доклады Академии наук. – 2010. – Т.430. – №4. – С.494-497.
2. Басистов Ю.А. Минимаксное решение уравнения первого рода // ДАН СССР. – 1983. – Т.268. – №5. – С.1035-1038.
3. Yanovsky Yu.G., Basistov Yu.A. and Siginer D.A. Linear inverse problems in viscoelastic continua and a minimax method for Fredholm equation of the first kind // Int. J. Engng Sci. – 1996. – Vol.34. – N11. – P.1221-1245.

4. *Басистов Ю.А., Яновский Ю.Г.* Некорректные задачи в механике (реологии) вязкоупругих сред и их регуляризация // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2010. – Т.16. – №1. – С.117-143.
5. *Хайкин С.* Нейронные сети (полный курс). – Москва-Санкт-Петербург-Киев, 2006.
6. Neural Network Toolbox (Version 5), The MathWorks.

УДК 512.64+534.2+539.3

МЕТОД СИММЕТРИЧЕСКИХ МНОГОЧЛЕНОВ В РАСЧЁТАХ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКОЙ МАТРИЦЫ МНОГОСЛОЙНОЙ СРЕДЫ*

Беляев Ю.Н.

Сыктывкарский государственный университет, г. Сыктывкар, Россия

РЕЗЮМЕ

Метод симметрических многочленов (МСМ) применён к вычислению фундаментальной матрицы системы дифференциальных уравнений. Демонстрация МСМ выполнена на примере матрицы, характеризующей термоупругое состояние слоистой среды. Метод масштабирования развит для характеристической матрицы слоя. Получена аналитическая оценка величины масштабирующего параметра, позволяющего проводить вычисления матричной экспоненты с требуемой надёжностью и точностью. Этот параметр зависит от порядка матрицы n , величины элементов матрицы и толщины слоя.

Ключевые слова: слоистые среды; матрица; экспонента; симметрические многочлены; ошибка округления; ошибка усечения; масштабирование; термоупругость

1. ВВЕДЕНИЕ

Среда, свойства которой постоянны на каждой плоскости, перпендикулярной к фиксированному направлению, называется *плоско слоистой средой*. Если выбрать это специальное направление за ось z декартовой системы координат, то параметры среды, характеризующие упругие, электромагнитные и другие физические свойства вещества среды, будут функциями одной этой координаты z .

Естественными средами, имеющими хорошо выраженную горизонтальную стратификацию, являются океан и атмосфера. Во многих случаях земная кора также успешно может быть аппроксимирована слоистой средой, и это используется в теории распространения сейсмических волн. Широким спектром физических свойств обладают слоистые среды искусственного происхождения, в частности, слоистые композиционные материалы. Класс таких объектов постоянно расширяется, и области их применения уже в настоящее время исключительно велики.

Модель одномерного изменения параметров, хорошо аппроксимирующая многие слоистые среды, а также линейность используемых уравнений обусловили широкое использование матричных методов в расчётах напряжённого состояния слоистых структур. Общим для этих методов, библиографические описания которых имеются в книгах [1-3], является следующее. Компоненты тензора напряжений, вектора смещения, а также составляющие электромагнитного и теплового полей (при наличии влияния последних на деформацию) составляют вектор-функцию $\Psi(z)$. Значения этой вектор-функции на противоположных границах слоя связаны друг с другом матрицей n -го порядка M , называемой *характеристической матрицей* (ХМ) слоя. Так, для пластины, ограниченной плоскостями $z = 0$ и $z = d$,

$$\Psi(0) = M\Psi(d). \quad (1)$$

*Работа выполнена при поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы (ГК № 02.740.11.0618).

Если пластина состоит из N слоёв, первый из которых занимает область $0 \leq z \leq z_1$, второй - $z_1 \leq z \leq z_2, \dots$, N -й слой - $z_{N-1} \leq z \leq z_N = d$, а слои характеризуются матрицами $M_1, M_2, \dots, M_N$, то ХМ всей пластины M равна произведению ХМ отдельных слоёв, образующих пластину

$$M = M_1(z_1)M_2(z_2 - z_1) \dots M_N(z_N - z_1). \quad (2)$$

Ассоциативность произведения (2) предопределяет наиболее значительные преимущества метода характеристической матрицы. Так как парциальные характеристические матрицы M_j ($j=1, \dots, N$) зависят каждая только от структуры своего слоя, то изменение толщины и (или) физических параметров j -го слоя оказывает влияние только на ХМ M_j , а произведения $\prod_{g=1}^{j-1} M_g$ и $\prod_{g=j+1}^N M_g$ остаются неизменными. Поэтому, если при расчёте напряжённого состояния многослойной среды необходимо учесть изменение структуры j -го слоя, то это не влечёт за собой полного перерасчёта произведения (2).

Устоявшийся подход (см., например, [1,2,4]) к нахождению элементов m_{gl} матрицы M_j , характеризующей свойства j -го слоя, включает в себя: 1) получение из исходной системы дифференциальных уравнений первого порядка по координатам (относительно компонент тензора напряжений, вектора смещений, напряжённостей электрического и магнитного полей, температуры и др.) уравнений второго (или более высокого) порядка для каждой из компонент ψ_l ($l=1, \dots, n$) вектор-столбца $\Psi_j(z)$ или соответствующих потенциалов; 2) решение полученных уравнений для каждого слоя структуры; 3) составление из полученных решений элементов матрицы M_j .

Более естественный подход к расчёту характеристической матрицы слоя состоит в решении системы дифференциальных уравнений первого порядка

$$\frac{d\Psi}{dz} = W\Psi, \quad (3)$$

которая может быть получена из исходных уравнений, например с помощью Фурье-преобразования компонент поля по времени и одной (или двух) координат.

Один из способов решения системы уравнений (3) для неоднородного по толщине слоя состоит в аппроксимации последнего достаточно большим числом однородных слоёв и использовании для каждого из этих слоёв известного соотношения

$$\Psi(z_{j+1}) = \exp[W_j(z_{j+1} - z_j)]\Psi(z_j), \quad (4)$$

где $(z_{j+1} - z_j) = d_j$ - толщины слоёв.

В теории дифференциальных уравнений матрица $T = \exp(Wd)$, выражающая значение неизвестной вектор-функции $\Psi(d)$ через начальные данные $\Psi(0)$, а именно, $\Psi(d) = T\Psi(0)$, называется *фундаментальной*. В теории дифракции T , «транслирующая» вектор Ψ на расстояние d , известна как *матрица переноса*. Значения элементов этой матрицы определяются свойствами слоя рассматриваемой среды, то есть матрицей W коэффициентов системы дифференциальных уравнений (3). Поэтому матрицу $W \equiv \|w_{ij}\|$ будем называть *определяющей*.

Из сравнения соотношений (1) и (4) очевидно, что матрица, обратная T_j , является характеристической: $M_j = T_j^{-1} = \exp(-W_j d_j)$.

В данной работе для вычисления характеристической матрицы слоя M_j развивается метод [5,6], основанный на применении симметрических многочленов матрицы W_j .

2. ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ МЕТОДА СИММЕТРИЧЕСКИХ МНОГОЧЛЕНОВ

2.1. Определение симметрических многочленов.

Если $A \equiv \|a_{gi}\|$ - квадратная матрица порядка n , то $\det A$ - определитель матрицы A . Обозначим символами $\sigma_j(A)$ сумму главных миноров j -го порядка ($j=1, \dots, n$) определителя матрицы A , т.е.

$$\sigma_1(A) = a_{11} + a_{22} + \dots + a_{nn}, \quad \sigma_2(A) = \sum_{j>i} \begin{vmatrix} a_{ii} & a_{ij} \\ a_{ji} & a_{jj} \end{vmatrix} \equiv \sum_{j>i} (a_{ii}a_{jj} - a_{ij}a_{ji}), \quad \dots, \quad \sigma_n(A) = \det A.$$

Как известно, $\sigma_j(A)$ являются элементарными симметрическими многочленами относительно собственных значений λ_g , $g=1, \dots, n$, матрицы A . Симметрическими многочленами n -го порядка матрицы A называются функции $B_j(A) \equiv B_j(\sigma_1(A), \sigma_2(A), \dots, \sigma_n(A))$ элементарных симметрических многочленов $\sigma_j(A)$, определяемые следующими рекуррентными соотношениями [7, стр.274]

$$B_j(A) = \begin{cases} 0, & \text{если } j = 0, 1, \dots, n-2, \\ 1, & \text{если } j = n-1, \\ p_1(A)B_{j-1}(A) + p_2(A)B_{j-2}(A) + \dots + p_n(A)B_{j-n}(A), & \text{если } j \geq n, \end{cases} \quad (5)$$

где

$$p_j(A) = (-1)^{j-1} \sigma_j(A), \quad j = 1, \dots, n. \quad (6)$$

Отметим здесь, что симметрические многочлены $\sigma_j(A)$ и, следовательно, $B_j(A)$, не смотря на свои названия, не требуют для своего вычисления нахождения собственных значений матрицы A . Один из алгоритмов вычисления $\sigma_j(A)$ будет представлен ниже в разделе 2.4.

2.2. Представление характеристической матрицы с помощью симметрических многочленов.

Как известно, любая аналитическая функция квадратной матрицы n -го порядка A может быть представлена сходящимся рядом степеней матрицы A . В частности, для матричной экспоненты справедливо разложение

$$\exp A = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{A^j}{j!}. \quad (7)$$

Теорема Гамильтона-Кэли (см., например [8]) позволяет выразить каждую целочисленную степень матрицы A как линейную функцию от n различных положительных целочисленных степеней матрицы A , т.е. свести ряд (7) к

некоторому многочлену n -й степени от A . Известные полиномиальные представления $\exp A$ [9] используют для этого собственные значения матрицы A . Более эффективный подход основан на применении симметрических многочленов матрицы.

По теореме о кратных линейных операциях [7], *целочисленная степень $j > 0$ любой матрицы A порядка n может быть выражена через её первые n степеней с помощью симметрических многочленов формулой*

$$\begin{aligned} A^j &= I \left(B_{j+n-1}(A) - p_1(A)B_{j+n-2} - \dots - p_{n-1}(A)B_j(A) \right) + \\ &+ A \left(B_{j+n-2}(A) - p_1(A)B_{j+n-3}(A) - \dots - p_{n-2}(A)B_j(A) \right) + \\ &+ \dots + \\ &+ A^{n-3} \left(B_{j+2}(A) - p_1(A)B_{j+1}(A) - p_2(A)B_j(A) \right) + \\ &+ A^{n-2} \left(B_{j+1}(A) - p_1(A)B_j(A) \right) + \\ &+ A^{n-1} B_j(A) = \\ &= \sum_{l=0}^{n-1} A^l \sum_{g=0}^l p_{n-l+g}(A) B_{j-1-g}(A). \end{aligned} \quad (8)$$

Эти соотношения легко проверяются для значений $j = 0, 1, \dots, n-1$, и доказываются по индукции для значений $j \geq n$.

Подставляя представление (8) в разложение (7) и используя определение (5), несложно показать, что

$$\begin{aligned} \exp A &= \sum_{j=n}^{\infty} \frac{1}{j!} \sum_{l=0}^{n-1} A^l \sum_{g=0}^l p_{n-l+g}(A) B_{j-1-g}(A) = \\ &= \sum_{l=0}^{n-1} A^l \frac{1}{l!} \left[1 + l! \sum_{g=0}^l p_{n-l+g}(A) \sum_{j=n}^{\infty} \frac{1}{j!} B_{j-1-g}(A) \right]. \end{aligned} \quad (9)$$

Для матриц 2,3,4 порядков суммирование по j в правой части равенства (9) может быть выполнено аналитически. Примеры, получающихся при таком преобразовании формул, представлены в работах [5,6].

Соотношение (9) позволяет представить характеристическую матрицу M однородного слоя толщиной d в виде:

$$M = \exp(-Wd) = \sum_{l=0}^{n-1} (-Wd)^l \frac{1}{l!} \left[1 + l! \sum_{g=0}^l p_{n-l+g}(-Wd) \sum_{j=n}^{\infty} \frac{1}{j!} B_{j-1-g}(-Wd) \right], \quad (10)$$

где W - определяющая матрица.

2.3. Пример вычисления характеристической матрицы.

Найдём матрицу, характеризующую распространение термоупругих волн в изотропном слое. Влияние тепловых возмущений на механические движения проявляются при $(P-SV)$ -поляризации вектора упругих перемещений. Выберем декартову систему координат таким образом, чтобы ненулевыми компонентами вектора упругих перемещений были u_x и u_z . Уравнения движения в этом случае имеют вид

$$\rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = \frac{\partial p_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial p_{xz}}{\partial z},$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = \frac{\partial p_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial p_{zz}}{\partial z}, \quad (11)$$

где p_{xx} , p_{xz} , p_{zz} - компоненты тензора напряжений, ρ - плотность слоя. Обозначим через λ и μ коэффициенты упругости Ламе, α_T - коэффициент линейного расширения, $A = 2\mu + \lambda$, $A_T = (3\lambda + 2\mu)\alpha_T$, $\theta = T - T_0$ - отклонение температуры тела T от его температуры T_0 при нулевых деформациях и напряжениях. Тогда, используя определение линейного тензора деформаций и закон Дюамеля-Неймана, получаем следующие три уравнения

$$\begin{aligned} p_{xx} &= A \frac{\partial u_x}{\partial x} + \lambda \frac{\partial u_z}{\partial z} - A_T \theta, \\ p_{xz} &= \mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right), \\ p_{zz} &= \lambda \frac{\partial u_x}{\partial x} + A \frac{\partial u_z}{\partial z} - A_T \theta. \end{aligned} \quad (12)$$

Уравнения (11) и (12) будем решать совместно с уравнениями

$$q_x = -\lambda_T \frac{\partial \theta}{\partial x}, \quad q_z = -\lambda_T \frac{\partial \theta}{\partial z}, \quad (13)$$

выражающим закон Фурье, и уравнением теплопроводности

$$\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_z}{\partial z} + A_T T_0 \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial u_z}{\partial t} \right) + c_T \frac{\partial \theta}{\partial t} = 0. \quad (14)$$

Здесь q_x и q_z - компоненты вектора плотности теплового потока, λ_T - коэффициент теплопроводности, c_T - теплоёмкость.

Если деформации в слое порождаются падающей на него плоской волной вида $\exp[i(k_x x + k_z z - \omega t)]$, то функции p_{xz} , p_{zz} , p_{xx} , u_x , u_z , θ , q_z , q_x имеют одинаковую функциональную зависимость от координаты x и времени t :

$$\|p_{xz} \ p_{zz} \ u_x \ u_z \ \theta \ q_z \ p_{xx} \ q_x\| = \|\psi_1 \ \psi_2 \ \psi_3 \ \psi_4 \ \psi_5 \ \psi_6 \ \psi_7 \ \psi_8\| \exp[i(k_x x - \omega t)].$$

Из восьми неизвестных $\psi_i = \psi_i(z)$ независимыми являются шесть. Функции $\psi_i = \psi_i(z)$, $i = 1, \dots, 6$, находятся в результате решения уравнения вида (3), определяющая матрица которого равна

$$W = \begin{vmatrix} 0 & -i \frac{k_x \lambda}{A} & \frac{k_x^2 4\mu(\mu + \lambda)}{A} - \rho \omega^2 & 0 & ik_x 2\mu \frac{A_T}{A} & 0 \\ -ik_x & 0 & 0 & -\rho \omega^2 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\mu} & 0 & 0 & -ik_x & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{A} & -i \frac{k_x \lambda}{A} & 0 & \frac{A_T}{A} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\lambda_T} \\ 0 & \frac{i\omega T_0 A_T}{A} & -2\omega k_x \mu T_0 \frac{A_T}{A} & 0 & i\omega \left(\frac{T_0 A_T^2}{A} + c_T \right) - k_x^2 \lambda_T & 0 \end{vmatrix}. \quad (15)$$

А функции ψ_7 и ψ_8 выражаются через ψ_2 , ψ_3 и ψ_5 равенствами:

$$\psi_7 = \frac{\lambda}{A} \psi_2 + i k_x \left(A - \frac{\lambda^2}{A} \right) \psi_3 + A_T \left(\frac{\lambda}{A} - 1 \right) \psi_5, \quad \psi_8 = -i k_x \lambda_T \psi_5.$$

Нетрудно получить значения элементарных симметрических многочленов матрицы $(-Wd)$:

$$\begin{aligned} \sigma_1(-Wd) &= 0, & \sigma_3(-Wd) &= 0, & \sigma_5(-Wd) &= 0, \\ \sigma_2(-Wd) &= \left[\frac{\omega^2 \rho}{\mu} - k_x^2 + \frac{\omega^2 \rho}{2\mu + \lambda} + i \frac{\omega}{\lambda_T} \left(\frac{T_0 A_T^2}{A} + c_T \right) - 2k_x^2 \right] d^2, \\ \sigma_4(-Wd) &= \left(\frac{\omega^2 \rho}{\mu} - k_x^2 \right) \left[\frac{\omega^2 \rho}{A} + i \frac{\omega}{\lambda_T} \left(\frac{T_0 A_T^2}{A} + c_T \right) - 2k_x^2 \right] d^4 + k_x^4 d^4 - \\ &\quad - \left(\frac{\omega^2 \rho}{A} + i \frac{\omega}{\lambda_T} \left(\frac{T_0 A_T^2}{A} + c_T \right) \right) k_x^2 d^4 + i \frac{\rho \omega^2}{A} \frac{\omega c_T}{\lambda_T} d^4, \\ \sigma_6(-Wd) &= \left(\frac{\omega^2 \rho}{\mu} - k_x^2 \right) \left[k_x^4 - \frac{\omega^2 \rho}{A} k_x^2 - i \frac{\omega}{\lambda_T} \left(\frac{T_0 A_T^2}{A} + c_T \right) k_x^2 + i \frac{\rho \omega^2}{A} \frac{\omega c_T}{\lambda_T} \right] d^6. \end{aligned} \quad (16)$$

Из определения (5) и равенств (16) следует, что все симметрические многочлены n -го порядка с чётными индексами равны нулю, а $B_j(-Wd)$ с нечётными индексами выражаются равенствами:

$$B_1(-Wd) = B_3(-Wd) = 0; \quad B_5(-Wd) = 1; \quad B_j(-Wd) = - \sum_{l=1}^3 \sigma_{2l}(-Wd) B_{j-2l}(-Wd), \quad j \geq 7.$$

Дальнейшее вычисление характеристической матрицы по формуле (10) не представляет труда.

Рассмотрим сначала частный случай. Обозначим λ_0 - длину волны, и будем считать, что выполняется условие:

$$\Omega = \frac{2\pi d}{\lambda_0} < 1. \quad (17)$$

Очевидно, что в этом случае модули симметрических многочленов $|B_j(-Wd)|$ с индексами $j = 5, 7, \dots$, являются величинами $(j-5)$ -го порядка малости по безразмерному параметру Ω , определённому соотношением (17). Поэтому

$$l! \left| \sum_{g=0}^l p_{n-l+g}(-Wd) \sum_{j=n}^{\infty} \frac{1}{j!} B_{j-1-g}(-Wd) \right| < \Omega^3$$

и, с точностью до членов третьего порядка малости по величинам Ω , характеристическая матрица для термоупругих волн может быть аппроксимирована формулой

$$M \simeq \sum_{j=0}^5 \frac{(-Wd)^j}{j!}.$$

Алгоритм применения симметрических многочленов для вычисления матричной экспоненты в общем случае и его сравнение с (8) представлен ниже.

2.4. Оценка точности вычисления матричной экспоненты.

При сравнении различных методов вычисления матричной экспоненты следует различать погрешность, вызванную усечением ряда (7) (или (9)), и погрешности, обусловленные методом вычисления каждого из слагаемых ряда и связанные с округлением результатов расчётов.

Относительная погрешность при аппроксимации ряда (7) первыми J слагаемыми, а именно

$$\exp A = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{A^j}{j!} \cong \sum_{j=0}^{J-1} \frac{A^j}{j!},$$

характеризуется величиной

$$\varepsilon_J(A) = 1 - \frac{\sum_{j=0}^{J-1} A^j / (j!)}{\sum_{j=0}^{\infty} A^j / (j!)} . \quad (18)$$

Оценим точность вычисления $\exp A$ по формулам (7) и (9) при одинаковом числе членов ряда. Операции сложения не влияют на погрешности округления. Поэтому сравним алгоритмы (7) и (9) по числу операций умножения.

Для умножения матрицы на число нужно перемножить n^2 чисел, а для перемножения двух матриц n -го порядка - n^3 . Следовательно, при аппроксимации ряда (7) первыми J слагаемыми

$$\exp A \cong I + A + A \frac{A}{2} + A \frac{A}{2} \frac{A}{3} + \dots + A \frac{A}{2} \frac{A}{3} \dots \frac{A}{J-2} .$$

потребуется $N_1 = (n^3 + n^2)(J-2)$ умножений.

Используя в соотношении (9) ту же точность аппроксимации ряда первыми J слагаемыми, что и в (8), получаем следующую расчётную формулу

$$\exp A = \sum_{l=0}^{n-1} A^l \left[\frac{1}{l!} + \sum_{g=0}^l p_{n-l+g}(A) \Sigma_g \right] . \quad (19)$$

где

$$\Sigma_g \equiv \sum_{j=n}^{J-2} \frac{1}{j!} B_{j-1-g}(A) = \begin{cases} \frac{1}{n!} + \frac{1}{(n+1)!} p_1(A) + \dots + \frac{1}{(J-2)!} B_{s-3}(A), & g=0, \\ \frac{1}{(n+1)!} + \frac{1}{(n+2)!} p_1(A) + \dots + \frac{1}{(J-2)!} B_{s-4}(A), & g=1, \\ \vdots \\ \frac{1}{(2n-1)!} + \dots + \frac{1}{(J-2)!} B_{s-2-n}(A), & g=n-1. \end{cases} \quad (20)$$

Суммы Σ_g в формуле (20) выписаны в предположении, что $J \geq 2n+1$ (случай $J < 2n+1$ требует меньшего числа элементарных операций).

Один из возможных алгоритмов вычислений $\exp A$ по формулам (19)-(20) состоит из следующих пяти шагов.

1. Последовательное вычисление чисел $\frac{1}{2!}, \dots, \frac{1}{(J-2)!}$ - это $J-1$ умножение.

2. Нахождение коэффициентов p_j , $j=1, \dots, n$, можно выполнить по формуле Ньютона [8]

$$gp_g = s_g - p_1 s_{g-1} - \dots - p_{g-1} s_1, \quad j=1, 2, \dots, n, \quad (21)$$

где s_j - след матрицы A^j . Это потребует $n^3(n-1)$ элементарных умножений при вычислении матриц $A^2, A^3, \dots, A^n$ и $2+3+\dots+n = (n-1)(2+n)/2$ умножений при последовательном вычислении коэффициентов p_j по формуле (21)

$$p_1 = s_1, \quad p_2 = (s_2 - p_1 s_1)/2, \quad \dots, \quad p_n = (s_n - p_1 s_{n-1} - \dots - p_{n-1} s_1)/n.$$

3. Далее, используя определение (5), находятся симметрические многочлены n -го порядка $B_l(A)$ с индексами $l = n, n+1, \dots, S-2$. На это затрачивается $n(J-n-1)$ элементарных умножений.

4. Вычисление сумм Σ_g по формуле (20) содержит не более чем

$$(J-n-2) + (J-n-3) + \dots + (J-2n-1) = nJ - \frac{3n(n+1)}{2}$$

умножений.

5. Подстановка найденных в предыдущих четырёх этапах величин в соотношение (19) и вычисление

$$\begin{aligned} \exp A = & I[1 + p_n \Sigma_0] + A[1 + (p_{n-1} \Sigma_0 + p_n \Sigma_1)] + \dots + \\ & + A^{n-1} \left[\frac{1}{(n-1)!} + (p_1 \Sigma_0 + p_2 \Sigma_2 + \dots + p_n \Sigma_{n-1}) \right]. \end{aligned}$$

Последняя процедура содержит следующее число умножений

$$(n^2 + 1) + (n^2 + 2) + \dots + (n^2 + n) = n^3 + \frac{n(n+1)}{2}.$$

Таким образом, общее число элементарных умножений, необходимых для вычисления $\exp A$ по формулам (19)-(20) составляет

$$N_2 = J(2n-1) + n^4 - 2 - \frac{3n(n+1)}{2}.$$

Метод вычисления матричной экспоненты по формуле (9) является менее затратным по числу операций умножения, и, следовательно, более точным, чем расчёт по формуле (7), если

$$\frac{N_1}{N_2} > 1. \quad (22)$$

Разрешая это неравенство относительно числа слагаемых J , находим, что (22) выполняется при $J > n+1$.

Следует отметить, что увеличение числа J , с одной стороны, уменьшает погрешность вычислений, обусловленную усечением ряда, а с другой – приводит к накоплению ошибок, вызванных округлением чисел при выполнении операций умножения. При вычислении характеристической матрицы число членов суммы, аппроксимирующих ряд $\sum_{j=n}^{\infty} B_{j-1-g}(-Wd)/(j!)$ в (10) с достаточной точностью, существенным образом зависит от величин элементов определяющей матрицы W и от толщины слоя d . Для более надёжного вычисления характеристической матрицы при больших значениях d целесообразно использовать метод масштабирования.

3. МЕТОД МАСШТАБИРОВАНИЯ

Метод масштабирования при вычислении матричной экспоненты основан на использовании фундаментального свойства

$$\exp A = \left[\exp \left(\frac{A}{k} \right) \right]^k. \quad (23)$$

Воспользуемся соотношением (23) и представим характеристическую матрицу (10) следующим образом

$$M = X^k, \quad (24)$$

где

$$X = \exp \left(-\frac{Wd}{k} \right) = \sum_{l=0}^{n-1} \left(-\frac{Wd}{k} \right)^l \frac{1}{l!} [1 + S], \quad (25)$$

$$S = l! \sum_{g=0}^l p_{n-l+g} \left(-\frac{Wd}{k} \right) \sum_{j=n}^{\infty} \frac{1}{j!} B_{j-1-g} \left(-\frac{Wd}{k} \right). \quad (26)$$

Величина S , определяемая равенством (26), имеет простой смысл. Легко заметить, что

$$S = \frac{\varepsilon_n(-Wd/k)}{1 - \varepsilon_n(-Wd/k)} \approx \varepsilon_n(-Wd/k).$$

Последнее равенство выполняется тем точнее, чем меньше относительная погрешность $\varepsilon_n(-Wd/k)$.

Выберем такое целое k , для которого обеспечивается быстрая сходимость ряда

$$\sum_{j=n}^{\infty} \frac{1}{j!} B_{j-1-g} \left(-\frac{Wd}{k} \right), \quad (27)$$

и, следовательно, величина S и матрица (25) могут быть надёжно и эффективно вычислены. После этого расчёт характеристической матрицы слоя по формуле (24) не представляет труда. Если $k > n + 2$, последнюю операцию целесообразно выполнять по формуле (7)

$$M = X^k = \sum_{l=0}^{n-1} X^l \sum_{g=0}^l p_{n-l+g}(X) B_{k-1-g}(X).$$

Оценим необходимую величину масштабирующего параметра k .

3.1. Оценка модуля симметрического многочлена.

Элементарный симметрический многочлен $\sigma_j(A)$ матрицы A n -го порядка равен сумме главных миноров j -го порядка определителя матрицы A . Таких миноров C_n^j . Минор j -го порядка содержит $j!$ слагаемых, каждое из которых является произведением j элементов матрицы A . Обозначим наибольшее по модулю значение элемента a_{jl} матрицы A через $\max |a_{jl}|$. Очевидно, что модуль $|\sigma_j(A)|$ элементарного симметрического многочлена $\sigma_j(A)$ не превосходит $C_n^j j! (\max |a_{jl}|)^j$. Поэтому, в соответствии с определением (6) коэффициентов $p_j(A)$, получаем следующие соотношения

$$|p_j(A)| \leq p_{jm}(A) = \frac{n!}{(n-j)!} \left(\max |a_{gl}| \right)^j, \quad j=1,2,\dots,n. \quad (28)$$

Используем эти условия и рекуррентные соотношения (5) для оценки модулей $|B_j(A)|$ симметрических многочленов n -го порядка матрицы A .

$$\begin{aligned} |B_j(A)| &= \left| \sum_{l=1}^n p_l(A) B_{j-l}(A) \right| \leq \sum_{l=1}^n |p_l(A)| |B_{j-l}(A)| \leq \\ &\leq p_{1m}(A) |B_{j-1}(A)| + p_{2m}(A) |B_{j-2}(A)| + \dots + p_{nm}(A) |B_{j-n}(A)|. \end{aligned} \quad (29)$$

Аналогичное неравенство можно записать для симметрических многочленов с индексами на единицу меньше

$$|B_{j-1}(A)| \leq p_{1m}(A) |B_{j-2}(A)| + p_{2m}(A) |B_{j-3}(A)| + \dots + p_{nm}(A) |B_{j-n-1}(A)|. \quad (30)$$

Последнее неравенство в соотношении (29) не нарушится, если заменить $|B_{j-1}(A)|$ в его правой части на правую часть неравенства (30). В результате такой подстановки получаем

$$\begin{aligned} |B_j(A)| &\leq p_{1m}(A) \left(p_{1m}(A) |B_{j-2}(A)| + p_{2m}(A) |B_{j-3}(A)| + \dots + p_{nm}(A) |B_{j-n-1}(A)| \right) + \\ &+ p_{2m}(A) |B_{j-2}(A)| + \dots + p_{(n-1)m}(A) |B_{j-n+1}(A)| + p_{nm}(A) |B_{j-n-1}(A)| = \\ &= \frac{p_{1m}^2(A) + p_{2m}(A)}{p_{1m}(A)} \sum_{l=1}^n c_l |B_{j-1-l}(A)|. \end{aligned} \quad (31)$$

Здесь

$$c_l = p_{lm}(A) \frac{p_{1m}^2(A) + \frac{p_{1m}(A)p_{(l+1)m}(A)}{p_{1m}(A)}}{p_{1m}^2(A) + p_{2m}(A)}, \quad l=0,1,\dots,n-1; \quad c_n = p_{nm}(A) \frac{p_{1m}^2(A)}{p_{1m}^2(A) + p_{2m}(A)}.$$

Применяя (28), находим

$$\frac{p_{1m}^2(A) + p_{2m}(A)}{p_{1m}(A)} = \frac{2n-1}{n} p_{1m}(A); \quad \frac{p_{1m}(A)p_{(l+1)m}(A)}{p_{1m}(A)} < p_{2m}(A) \Rightarrow c_l < p_{lm}(A), \quad l=0,\dots,n.$$

Эти соотношения позволяют переписать формулу (31) в виде

$$|B_j(A)| \leq \sum_{l=1}^n p_{lm}(A) |B_{j-l}(A)| < \frac{2n-1}{n} p_{1m}(A) \sum_{l=1}^n p_{lm}(A) |B_{j-1-l}(A)|. \quad (32)$$

Сравнивая неравенства (32) и продолжая процесс понижения индекса у симметрических многочленов n -го порядка в правой части последнего неравенства, приходим к следующему результату

$$|B_j(A)| < \left(\frac{2n-1}{n} p_{1m}(A) \right)^{j-n} \sum_{l=1}^n p_{lm}(A) |B_{n-l}(A)| = p_{1m}(A) \left(\frac{2n-1}{n} p_{1m}(A) \right)^{j-n}. \quad (33)$$

3.2. Оценка погрешности аппроксимации ряда (27) конечной суммой.

Применительно к матрице $(-Wd/k)$ формулы (28) и (33) дают

$$\left| B_j \left(-\frac{Wd}{k} \right) \right| < p_{1m} \left(-\frac{Wd}{k} \right) \left(\frac{2n-1}{n} p_{1m} \left(-\frac{Wd}{k} \right) \right)^{j-n}, \quad p_{1m} \left(-\frac{Wd}{k} \right) = n \frac{\max |w_{gl}| d}{k}.$$

Используем эти соотношения для оценки величины суммы (26). Получаем

$$\begin{aligned}
 S &\leq l! \sum_{g=0}^l \left| p_{n-l+g} \left(-\frac{Wd}{k} \right) \right| \sum_{j=n}^{\infty} \frac{1}{j!} \left| B_{j-1-g} \left(-\frac{Wd}{k} \right) \right| < \\
 &< l! \sum_{g=0}^l \frac{n!}{(l-g)!} \left(\frac{\max |w_{ij}| d}{k} \right)^{n-l+g} \sum_{j=n}^{\infty} \frac{1}{j!} p_{1M} \left(-\frac{Wd}{k} \right) \left(\frac{2n-1}{n} p_{1M} \left(-\frac{Wd}{k} \right) \right)^{j-n-1-g} = \\
 &= \frac{n}{(2n-1)^{n-l+1}} \sum_{g=0}^l \frac{l!}{(l-g)!(2n-1)^g} \times \\
 &\times \xi^{n-l} \left(1 + \frac{\xi}{n+1} + \frac{\xi^2}{(n+1)(n+2)} + \frac{\xi^3}{(n+1)(n+2)(n+3)} + \dots \right).
 \end{aligned} \tag{34}$$

Здесь и далее

$$\xi = (2n-1) \frac{\max |w_{ij}| d}{k}, \tag{35}$$

а l может принимать значения $0, 1, \dots, n-1$.

Нетрудно убедиться, что

$$\frac{n}{(2n-1)^{n-l+1}} \sum_{g=0}^l \frac{l!}{(l-g)!(2n-1)^g} < \frac{n}{(2n-1)^2} \sum_{g=0}^l \frac{(n-1)^g}{(2n-1)^g} < \frac{1}{2n-1}.$$

Поэтому

$$|S| < \frac{\xi^{n-l}}{2n-1} \left(1 + \frac{\xi}{n+1} + \left(\frac{\xi}{n+1} \right)^2 \frac{(n+1)}{(n+2)} + \left(\frac{\xi}{n+1} \right)^3 \frac{(n+1)^2}{(n+2)(n+3)} + \dots \right).$$

Дальнейшие преобразования этого соотношения выполним в предположении, что

$$\frac{\xi}{n+1} < 1. \tag{36}$$

В результате получаем следующую оценку

$$|S| < \frac{\xi^{n-l}}{2n-1} \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{\xi}{n+1} \right)^j = \frac{\xi^{n-l}}{2n-1} \frac{1}{1 - \frac{\xi}{n+1}} < \frac{n+1}{n(2n-1)} \xi^{n-l}, \tag{37}$$

где величина ξ , определяемая равенством (35), должна удовлетворять условию (36).

В частности

$$|S| < 0.5, \quad \text{если} \quad \xi < 1. \tag{38}$$

Возвращаясь к соотношению (34), перепишем его, используя неравенства (37) и (38), следующим образом

$$|S| < \frac{(n+1)\xi^{n-l}}{(2n-1)^{n-l+1}} \sum_{g=0}^l \frac{l!}{(l-g)!(2n-1)^g} < \frac{1}{2}, \quad \xi < 1. \tag{39}$$

Отсюда находим

$$|1+S| > 1-|S| > \frac{1}{2} > \frac{(n+1)\xi^{n-l}}{(2n-1)^{n-l+1}} \sum_{g=0}^l \frac{l!}{(l-g)!(2n-1)^g}, \quad x < 1. \tag{40}$$

Найдём теперь погрешность, которую порождает в равенстве (26) аппроксимация ряда (27) конечной суммой

$$\sum_{j=n}^{\infty} \frac{1}{j!} B_{j-1-g} \left(-\frac{Wd}{k} \right) \approx \sum_{j=n}^{n+N} \frac{1}{j!} B_{j-1-g} \left(-\frac{Wd}{k} \right).$$

При такой аппроксимации, величина, выделенная в формуле (25) квадратными скобками, будет вычисляться с абсолютной погрешностью, не превосходящей

$$|\Delta S_N| = \left| l! \sum_{g=0}^l p_{n-l+g} \left(-\frac{Wd}{k} \right) \sum_{j=n+N+1}^{\infty} \frac{1}{j!} B_{j-1-g} \left(-\frac{Wd}{k} \right) \right|.$$

Выполнив оценку данного выражения подобно тому, как это было уже сделано для $|S|$, несложно показать, что

$$|\Delta S_N| < \frac{n!n(n+N+2)\xi^{n-l+1+N}}{(n+N+1)!(2n-1)^{n-l+1}(N+1)} \sum_{g=0}^l \frac{l!}{(l-g)!(2n-1)^g}, \quad (41)$$

где ξ - это параметр, определённый равенством (35), и удовлетворяющий условию (36).

Неравенства (39) и (40) используем для оценки относительной погрешности вычислений, обусловленной усечением ряда, при условии $\xi < 1$

$$\varepsilon = \left| \frac{\Delta S_N}{1+S} \right| < \frac{|\Delta S_N|}{1-|S|} < \frac{n(n+N+2)\xi^{N+1}}{(n+1)\dots(n+N)(n+N+1)(n+1)(N+1)}.$$

Легко убедиться, что

$$\frac{n(n+N+2)}{(n+1)(n+N+1)} < 1,$$

поэтому относительная погрешность не превосходит величины

$$\varepsilon < \frac{\xi^{N+1}}{(n+1)\dots(n+N)(N+1)}. \quad (42)$$

Пример. Пусть коэффициент масштабирования k матрицы четвёртого порядка равен наименьшему целому, удовлетворяющему условию $k \geq 10(2n-1)\max|w_{gl}|d$. В этом случае $\xi \leq 0.1$ и аппроксимация ряда (27) суммой первых трёх слагаемых обеспечивает проведение вычислений с относительной погрешностью ε менее $2 \cdot 10^{-6}$.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В отличие от других полиномиальных методов, и методов преобразования матриц [9], используемых для вычисления матричной экспоненты, метод симметрических многочленов не требует для своей реализации нахождения собственных значений λ_g , $g=1, \dots, n$, определяющей матрицы. Именно это обстоятельство обеспечивает более высокую точность вычислений по МСМ. Даже в тех случаях, когда для λ_g могут быть получены аналитические формулы, вычисление матрицы $\exp A$ порядка $n > 2$ с использованием симметрических многочленов представляется более предпочтительным. Пример матрицы, описывающей распространение термоупругих волн, является в этом смысле характерным. Собственные значения определяющей матрицы (15) равны:

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{\rho\omega^2}{\mu} - k_x^2}, \quad \lambda_{3,4,5,6} = \pm \sqrt{K^2 \pm \sqrt{K^4 - i \frac{\rho\omega^2}{2\mu + \lambda} \frac{\omega c_T}{\lambda_T} - k_x^2}},$$

где использовано обозначение: $K^2 = \frac{\rho\omega^2}{4\mu + 2\lambda} + i \frac{\omega}{2\lambda_T} \left(\frac{T_0 A_T^2}{A} + c_T \right)$. Очевидно, применение этих значений λ_g для вычисления $\exp(-\lambda_g d)$, $g=1, \dots, n$, и использование последних для формирования $\exp(-Wd)$, например по интерполяционной формуле Лагранжа-Сильвестра, является процедурой значительно менее точной и надёжной и более трудоёмкой с точки зрения программирования, чем расчёт по формулам (16)-(5)-(10).

ЛИТЕРАТУРА

1. Шульга Н.А. Основы механики слоистых сред периодической структуры. – Киев: Наукова думка, 1981. – 198 с.
2. Молотков Л.А. Матричный метод в теории распространения волн в слоистых упругих и жидких средах. – Ленинград: Наука, 1984. – 201 с.
3. Беляев Ю. Матричный подход теории волн к слоистым средам. – Saarbrücken: LAMBERT Academic Publishing. – 156 с.
4. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. – М.: Наука, 1970. – 856 с.
5. Беляев Ю.Н. Применение симметрических многочленов в решении задачи Коши / Международная конференция «Алгебра и линейная оптимизация». Сборник тезисов докладов (Екатеринбург, 14-19 мая 2012). – Екатеринбург: УМЦ-УПИ, 2012. – С.20-22.
6. Belyayev Yu.N. Calculations of transfer matrix by means of symmetric polynomials / International Conference «Days on Diffraction 2012». Proceedings (May 28 - June 1 2012). – Saint Petersburg, 2012. – P.36-41.
7. Беляев Ю.Н. Векторный и тензорный анализ. – Сыктывкар: СыктГУ, 2010. – 298 с.
8. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. – М.: Наука, 1988. – 552 с.
9. Moler C., Van Loan C. Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix, Twenty-five years later // SIAM Review. – 2003. – Vol.45. – N1. – P.3-49.

ЭКСТРУЗИЯ КОМПОЗИТНОГО МАТЕРИАЛА В УСЛОВИЯХ ВОЛНОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Беляева Н.А.¹, Прянишникова Е.А.¹, Столин А.М.², Кобзев Д.Е.³

¹Сыктывкарский государственный университет, г. Сыктывкар, Россия

²ФГБУН Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения
Российской академии наук, г. Черноголовка, Россия

³Тамбовский государственный технический университет, г. Тамбов, Россия

РЕЗЮМЕ

Представлены результаты численного анализа влияния ультразвуковой волны на динамику течения структурированного сжимаемого композитного материала в процессе экструзии. Изменение вязкости среды и плотности материала приводят к изменению времени выдавливания материала. Результаты подтверждаются экспериментальными данными.

Ключевые слова: экструзия; ультразвук; композит; вязкость; плотность; пористость

1. ВВЕДЕНИЕ

Традиционные методы переработки органических и неорганических материалов в изделия используют длительные технологические операции внешнего нагрева для перевода их в вязко-текучее состояние с последующим охлаждением. Применение методов твердофазной экструзии для получения длинномерных изделий из полимерных и композитных материалов, порошков тугоплавких соединений приводит к значительной экономии энергии и материальных ресурсов. В настоящее время активно ведутся работы по математическому моделированию указанных процессов. В работах [1-3] рассмотрена одномерная модель твердофазной экструзии пористого вязкоупругого материала с учетом реального реологического поведения указанных материалов и процесса структурных превращений. Следуя указанным работам и модели горячей экструзии [4], в работах [5-7] представлена неизотермическая структурная модель экструзии, проведен широкий численный эксперимент на основе алгоритма и программы [8].

Для расширения возможностей твердофазных способов формования изделий часто используют ультразвуковое воздействие, которое оказывает значительное влияние на процесс пластического деформирования материалов [9]. Ультразвуковые колебания при экструзии, как отмечает ряд исследователей [10,11], позволяют снизить пористость и повысить качество изделий. Однако в теоретическом плане применение ультразвука при прессовании и экструзии порошковых материалов изучено недостаточно. Представленная в настоящей работе математическая модель позволяет качественно оценить влияние ультразвукового воздействия на свойства экструдруемого материала.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Известно, что ультразвуковые, также как и механические колебания, часто используют для интенсификации различных технологических процессов. Однако

некоторые экспериментальные исследования [12] показывают, что ультразвуковое воздействие приводит к увеличению времени экструзии, а не к его уменьшению (Табл.1).

Таблица 1.
Влияние ультразвука на время выдавливания.

N опыта	t_{ext}	
	без УЗ	с УЗ
1	31,5	35
2	32	34,5
3	30,6	35,2

Можно предложить следующее объяснение этому «странному» экспериментальному факту. При экструзии пористых материалов возможны случаи последовательного протекания процессов уплотнения и выдавливания. Поскольку ультразвук оказывает воздействие на оба эти процесса, то скорость выдавливания материала по мере его уплотнения замедляется, и время экструзии увеличивается. Для подтверждения представленного объяснения экспериментальных результатов проведено математическое моделирование процесса твердофазной экструзии порошковых материалов.

Рассмотрим твердофазную экструзию в условиях ультразвуковых воздействий вязкоупругого пористого структурированного материала из цилиндрической камеры через круглое отверстие в направляющий калибр того же радиуса. Начало координат $z = 0$ свяжем с центром отверстия основания камеры. Вся область течения разделяется на два отдельных участка: движение внутри камеры между перемещающимся поршнем $z = H(t)$ и отверстием и течение внутри калибра между отверстием и свободной поверхностью $z = -L(t)$. Возмущениями в обеих областях при переходе из камеры в калибр через указанное отверстие пренебрегаем. Движение смеси в каждой из областей считаем одномерным с одной ненулевой компонентой скорости $V_z = V$. Ось симметрии заготовки примем в качестве оси z , положительное направление которой противоположно направлению движения поршня. Обычно выдавливание происходит в матрицу, имеющую коническую форму, которая в данном рассмотрении не учитывается. Это допущение справедливо при относительно короткой конической части длиной $l \ll H(0)$. В рамках одномерного подхода движение материала в конической матрице характеризуется двумя характеристиками: относительным изменением плотности и гидравлическим сопротивлением, зависящим от приложенного усилия.

Введем обобщенные (лагранжевы) координаты (q, t) , t – реальное время; массовая координата q имеет смысл относительной массы материала, находящейся между переменным сечением z и свободной поверхностью $z = -L(t)$

$$q = M / S_0 \rho_1 = \int_0^z \rho(\xi, t) d\xi + \frac{S_1}{S_0} \int_{-L(t)}^0 \rho(\xi, t) d\xi.$$

Заметим, что на плунжере, то есть при осевой координате $z = H(t)$, относительная масса равна полной относительной массе материала $q = q_0$, и в начальный момент времени

$$t = 0: \quad q = q_0, \quad H(0) = H_0,$$

причем полная относительная масса удовлетворяет соотношению

$$q_0 = \int_0^{H_0} \rho(\xi, 0) d\xi = \int_0^{H(t)} \rho(\xi, t) d\xi + \frac{S_1}{S_0} \int_{-L(t)}^0 \rho(\xi, t) d\xi \equiv \int_0^{H(t)} \rho(\xi, t) d\xi + q^*,$$

где $q = q^*$ – относительная масса, находящаяся на отверстии в рассматриваемый момент времени t , $\rho = \rho(q; t)$ – относительная плотность материала (отношение текущей плотности материала к плотности несжимаемой основы ρ_1), S_0 , S_1 – площади поперечных сечений камеры и калибра, соответственно.

Введем в рассмотрение эффективный параметр – коэффициент ультразвукового давления k_y , равный отношению давления формования при воздействии ультразвука к давлению без данного воздействия. Данный коэффициент определялся экспериментально для различных полимерных композиций [12].

Воспользуемся неизотермической структурной моделью экструзии [5-7], предполагая, что вязкость движущегося в камере материала определяется формулой

$$\mu = \mu(a, T, \rho; t) = \mu_0 \exp \left[-\beta(T - T^*) - k_a(1 - a) \right] \rho^4 k_y, \quad (1)$$

соответственно, вторая вязкость определяется соотношением

$$\xi = \xi(a, T, \rho; t) = \frac{4}{3} \mu \frac{\rho}{1 - \rho}$$

$a = a(q; t)$ – степень структурных превращений, $T = T_1(q; t)$, T^* – текущая и начальная температура материала в камере, соответственно, μ_0 – начальная вязкость материала. Система уравнений, описывающая рассматриваемый процесс, имеет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho^2 \frac{\partial V}{\partial q} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \sigma_{qq}}{\partial q} = 0, \quad (3)$$

$$\sigma_{qq} = \left(\frac{4}{3} \mu + \xi \right) \rho \frac{\partial V}{\partial q}, \quad \sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = \left(-\frac{2}{3} \mu + \xi \right) \rho \frac{\partial V}{\partial q}, \quad (4)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} + V \rho \frac{\partial a}{\partial q} = D \left(\rho^2 \frac{\partial^2 a}{\partial q^2} + \rho \frac{\partial a}{\partial q} \frac{\partial \rho}{\partial q} \right) + k_2 \left[1 - a - a \chi \exp(\rho \sigma_q) \right], \quad (5)$$

$$\frac{\partial T_1}{\partial t} + V \rho \frac{\partial T_1}{\partial q} = \frac{1}{c \rho_1} \frac{\partial}{\partial q} \left(\rho \lambda(\rho) \frac{\partial T_1}{\partial q} \right) - \frac{2\alpha}{c \rho_1 r_1 \rho} (T_1 - T_0), \quad (6)$$

$$\frac{\partial T_2}{\partial t} + V \rho \frac{\partial T_2}{\partial q} = \frac{1}{c \rho_1} \rho \lambda(\rho) \frac{\partial^2 T_2}{\partial q^2} - \frac{2\alpha}{c \rho_1 r_2 \rho} (T_2 - T_0); \quad (7)$$

начальные и граничные условия

$$T_1(q, 0) = T^*(q), \quad \rho|_{t=0} = \rho_0(q), \quad a|_{t=0} = 0; \quad (8)$$

$$\rho \lambda(\rho) \frac{\partial T_1}{\partial q} \Big|_{q=q_0} = -h_1 (T_1 - T_0) \Big|_{q=q_0}, \quad \rho \lambda(\rho) \frac{\partial T_2}{\partial q} \Big|_{q=0} = h_2 (T_2 - T_0) \Big|_{q=0}, \quad (9)$$

$$T_1|_{q=q^*} = T_2|_{q=q^*}, \quad -\rho \lambda(\rho) \frac{\partial T_2}{\partial q} \Big|_{q=q^*} = \frac{S_2}{S_1} \rho \lambda(\rho) \frac{\partial T_1}{\partial q} \Big|_{q=q^*}, \quad (10)$$

$$V(q^*, t) = -\frac{S_2}{S_1} \frac{k_1 |\sigma_q|^v}{\rho_1 \rho(q^*, t)}, \quad V(q^*, t) = -\frac{k_1 |\sigma_q|^v}{\rho_1 \rho(q^*, t)}, \quad (11)$$

$$\left. \frac{\partial a}{\partial q} \right|_{q=q_0} = \left. \frac{\partial a}{\partial q} \right|_{q=q^*} = 0, \quad (12)$$

$$\sigma_q|_{q=q_0} = \sigma_0. \quad (13)$$

В записанной выше системе соотношение (2) – это уравнение неразрывности, где $V = V(q, t)$ – скорость течения материала в камере. Уравнение равновесия (3) заменяет уравнение движения в силу малости числа Рейнольдса (вязкость материала велика $\mu > 10^5 \text{ Pa} \cdot \text{с}$). Соотношения (4) выражают осевую, радиальную и окружную компоненты тензора напряжения вследствие обобщенного закона Ньютона; (5) – диффузионно-кинетическое уравнение относительно степени структурирования среды $a = a(q, t)$; (6), (7) – уравнения теплопроводности в камере и калибре, $T_1 = T_1(q, t)$ – температура в камере, $T_2 = T_2(q, t)$ – в калибре, c – удельная теплоемкость материала, $\lambda = \lambda(\rho)$ – коэффициент теплопроводности, α – коэффициент теплообмена через боковые стенки. В начальный момент времени задана температура материала, распределение плотности и степени структурированности (8). Теплообмен с окружающей средой через плунжер и свободную поверхность выдавленного в калибр стержня учитывается условиями (9), h_1, h_2 – коэффициенты теплообмена на плунжере и отверстии, соответственно. Соотношения (10) означают непрерывность температурного поля и равенство тепловых потоков в камере и калибре на отверстии. Граничные условия (11) – следствие закона гидравлического сопротивления отверстия – определяют скорость материала на отверстии в камере и калибре, соответственно. Соотношения (12) означают непроникивание вещества через плунжер и отсутствие изменения структуры материала при переходе из камеры в калибр; (13) – условие заданного напряжения на плунжере.

3. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ТЕЧЕНИЯ

Система (2)-(13) допускает частично аналитическое решение, а именно, удастся выписать формулы для плотности и скорости в камере в виде квадратур

$$\rho(q, t) = \rho_0 \exp \left[- \int_0^t \frac{\sigma_{qq}(\tau)}{\frac{4}{3} \mu(q, \tau) + \xi(q, \tau)} d\tau \right], \quad q^* \leq q \leq q_0;$$

$$V(q, t) = V(q^*, t) + \sigma_{qq}(t) \cdot \int_{q^*}^q \frac{ds}{\rho(s, t) \left(\frac{4}{3} \mu(s, t) + \xi(s, t) \right)}, \quad q^* \leq q \leq q_0.$$

Доуплотнения материала в калибре не происходит, поэтому в области $0 \leq q \leq q^*$, соответствующей калибру, плотность зависит лишь от массовой координаты q

$$\rho(q) = \rho_0(q) \exp \left[- \int_0^{t^*} \frac{\sigma_{qq}(\tau)}{\frac{4}{3} \mu(q, \tau) + \xi(q, \tau)} d\tau \right]. \quad (14)$$

Здесь t^* – момент прохождения указанной массы q через отверстие.

Выдавленный в калибр стержень движется с переменной скоростью того элементарного объема, который в рассматриваемый момент времени находится на отверстии. Указанная скорость в момент времени t определяется из закона сопротивления отверстия (11) и имеет вид

$$V(q^*, t) = - \frac{k_1 |\sigma_{qq}|^V}{\rho_1 \rho(q^*, t)}.$$

Длина выдавленного в калибр стержня в момент времени t находится по формуле

$$L(t) = \int_0^t V(q^*, \tau) d\tau,$$

где $V(q^*, \tau)$ – скорость элементарного объема, находящегося на отверстии в момент времени τ .

Степень структуризации и температура экструдированного материала определяются численно на основе уравнений (5), (6) с соответствующими начальными и граничными условиями методом прогонки.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Численный анализ процесса горячей экструзии выполнен с использованием программы [8].

На рис.1-3 представлена динамика распределения плотности материала в камере при различных значениях волнового коэффициента k_y .

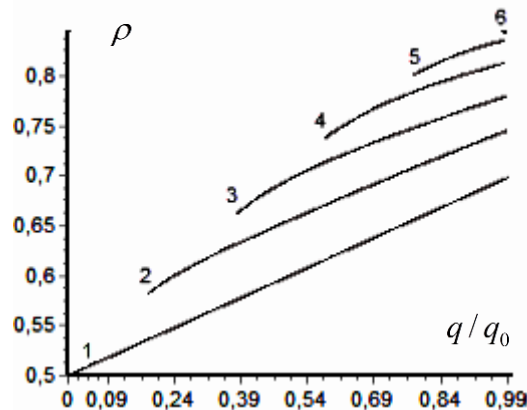


Рис.1. Динамика плотности $\rho = \rho(q, t)$ в камере, $k_y = 1$; $t(c)$: 1(0), 2(5.31), 3(9.41), 4(14), 5(19.04), 6(24.4).

Значения плотностей относительных масс левых концов кривых соответствуют плотностям масс, лежащих на отверстии в соответствующие моменты времени. Таким образом, плотностями этих масс в калибре будут именно плотности (14), т.к. доуплотнения в калибре не происходит.

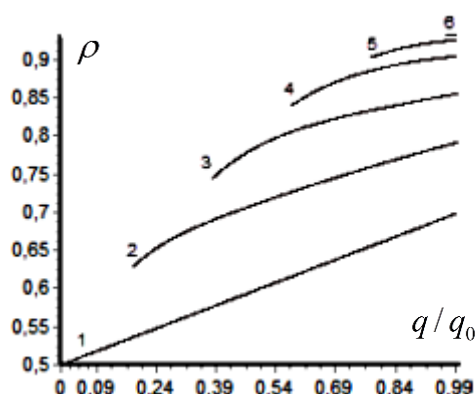


Рис.2. Динамика плотности $\rho = \rho(q, t)$ в камере, $k_y = 0.5$; $t(c)$: 1(0), 2(5,49), 3(10,02), 4(15,22), 5(20,93), 6(26,91).

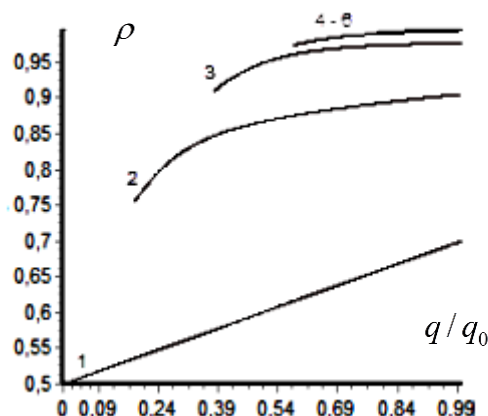


Рис.3. Динамика плотности $\rho = \rho(q, t)$ в камере, $k_y = 0.2$; $t(c)$: 1(0), 2(6.00), 3(11.53), 4(17.72), 5(24.14), 6(30.6).

Рис.1 соответствует экструзии материала без воздействия звуковой волны. С уменьшением значения k_y объемная вязкость материала (1) уменьшается за счет возрастания во времени скорости деформирования, но увеличивается за счет снижения пористости. Конкуренция процессов сдвигового деформирования и объёмного уплотнения материала приводит к увеличению времени экструзии материала. Так, в отсутствии звукового воздействия полное время выдавливания составляет $t_{ext} = 24.96$ с. Воздействие звуковой волны приводит к следующим результатам: при значении волнового коэффициента $k_y = 0.5$ (рис.2) соответствующее время равно $t_{ext} = 27.52$ с, а при значении $k_y = 0.2$ – $t_{ext} = 31.34$ с (рис.3).

На рис.4 показаны кривые распределения плотности выдавленного в калибр стержня после воздействия на движущийся в камере материал звуковой волной с различными волновыми коэффициентами k_y . Взаимное расположение кривых подтверждает, что плотность готового изделия увеличивается с уменьшением k_y . Наиболее уплотненным является стержень, соответствующий кривой 3, т.е. при значении $k_y = 0.2$.

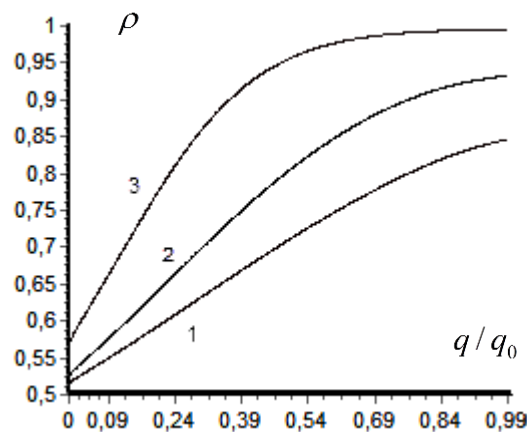


Рис.4. Распределение плотности $\rho = \rho(q)$ в калибре; 1 – $k_y = 1$, 2 – $k_y = 0.5$, 3 – $k_y = 0.2$.

Важнейшей характеристикой готового композитного изделия является его пористость (рис.5). Воздействие ультразвука приводит к уменьшению пористости изделия на большей части готового изделия, выравниванию ее градиента.

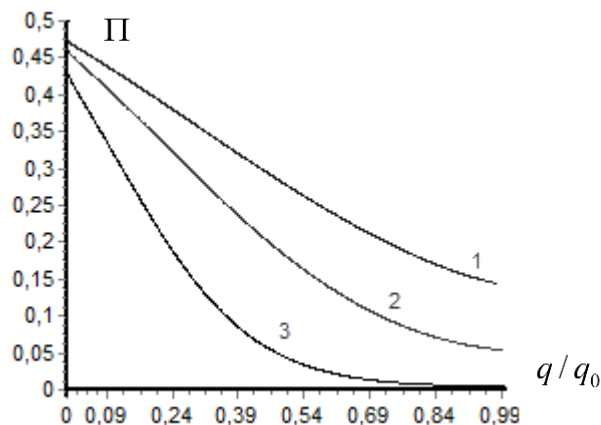


Рис.5. Распределение пористости $\Pi = 1 - \rho(q)$ в калибре; условия на рис.4.

В случае изотермической модели экструзии [1-3] результат влияния ультразвуковой волны аналогичен. Численный анализ осуществлён с помощью программы [15]. В этом случае рассматривается твердофазная экструзия, поэтому порядок времени выдавливания иной: в отсутствии звукового воздействия полное время выдавливания составляет $t_{ext} = 1595.15 \text{ с}$, а при значении волнового коэффициента $k_y = 0.2$ соответствующее время равно $t_{ext} = 2509.5 \text{ с}$.

Таким образом, влияние звуковой волны приводит к снижению пористости и уменьшению ее градиентности, что благоприятно должно сказаться на качестве изделий. Воздействие звуковой волной на процесс экструзии может быть использовано для регулирования уровня пористости формируемого композитного изделия из исходной порошковой композиции.

Теоретическим обоснованием наблюдаемому экспериментально возможному повышению времени экструзии при ультразвуковом воздействии является, как показали проведенные выше исследования, конкурентное взаимодействие процессов

уплотнения и сдвигового деформирования. Подробно эффекты этого взаимодействия исследованы в работах [13,14].

Значения параметров: $q_0 = 0.04 \text{ (m)}$ – полная относительная масса материала, $r_0 = 0.2 \text{ (m)}$ – радиус основания цилиндрической камеры, $r_0 = 0.04 \text{ (m)}$ – радиус основания калибра; $\rho_1 = 1500 \text{ (kg/m}^3\text{)}$ – плотность несжимаемой основы материала, $\rho_0 = 0.5$, $\rho_m = 0.7$ – начальное значение плотности на отверстии и плунжере, $\rho_0(q) = \rho_0 + (\rho_m - \rho_0)q/q_0$ – начальное распределение плотности в камере; $D = 10^{-5} \text{ (m/c}^2\text{)}$ – коэффициент диффузии, $\chi = 10^{-5}$ – отношение констант скоростей разрушения и восстановления структуры, $k_2 = 0.011 \text{ (c}^{-1}\text{)}$ – константа скорости восстановления структуры, $p = 0.02 \text{ (Pa}^{-1}\text{)}$ – константа, характеризующая интенсивность процесса деформации связей; $\mu_0 = 10^9 \text{ (Pa} \cdot \text{c)}$ – начальная вязкость материала, $\beta = 0.2 \text{ (K}^{-1}\text{)}$ – коэффициент пропорциональности в экспоненциальной зависимости сдвиговой вязкости от температуры, $k_a = -0.02$ – коэффициент пропорциональности в экспоненциальной зависимости объемной вязкости от степени структуризации; $k_1 = 0.05 \text{ (c}^{-1}\text{)}$ – коэффициент пропорциональности закона сопротивления отверстия, $\nu = 1/3$ – степенная зависимость закона сопротивления отверстия; $\sigma_0 = -5 \cdot 10^7 \text{ (Pa)}$ – начальное напряжение на плунжере, $\sigma_{qq} = \sigma_0(2 - 1/(1+t))$ – зависимость осевого напряжения от времени; $T_0 = 293 \text{ (K)}$ – температура окружающей среды, $T^* = 2000 \text{ (K)}$ – начальная температура заготовки, $c = 1000 \left(\frac{\text{J}}{\text{K} \cdot \text{kg}} \right)$ – удельная теплоёмкость материала, $\alpha = -0.25 \cdot 10^{-2} \left(\frac{\text{J}}{\text{K} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{c}} \right)$, $h_1 = 12 \text{ (K}^{-1}\text{)}$, $h_2 = 80 \text{ (K}^{-1}\text{)}$, $\lambda(\rho) = \lambda_0 \rho / \rho_0$, $\lambda_0 = 25 \left(\frac{\text{J}}{\text{K} \cdot \text{c} \cdot \text{m}} \right)$

ЛИТЕРАТУРА

1. Беляева Н.А., Столин А.М., Пугачев Д.В., Стельмах Л.С. Неустойчивые режимы деформирования при твердофазной экструзии вязкоупругих структурированных систем // ДАН. – 2008. – Т.420. – №6. – С.777-780.
2. Беляева Н.А., Столин А.М., Стельмах Л.С. Динамика твердофазной плунжерной экструзии вязкоупругого структурированного материала // Теоретические основы химической технологии. – 2008. – №5. – С.579-589.
3. Беляева Н.А. Математические модели деформируемых структурированных материалов. – Сыктывкар: Изд-во СыктГУ, 2008. – 116 с.
4. Стельмах Л.С., Жилиева Н.Н., Столин А.М. Реодинамика и теплообмен горячего компактирования порошковых материалов // ИФЖ. – 1992. – Т.63. – №5. – С.612-622.
5. Беляева Н.А., Прянишникова Е.А. Структурирование в неизотермической модели экструзии композитного материала // Вестн. Сыктывкарского ун-та. Сер.1. – 2010. – Вып.12. – С.97-108.

6. *Беляева Н.А., Прянишникова Е.А.* Структурно-температурная модель экструзии композитного материала // В мире научных открытий. Математика. Механика. Информатика. – 2011. – №1. – С.131-139.
7. *Беляева Н.А.* Деформирование вязкоупругих структурированных систем. – Germany: Lap Lambert Academic Publishing GmbH & Co., 2011. – 200 с.
8. *Прянишникова Е.А., Беляева Н.А.* Структурная неизотермическая математическая модель экструзии сжимаемого композитного материала / Федеральная служба по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам РФ. Реестр программ для ЭВМ. – Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ № 2010616996, 19 октября 2010 г.
9. *Благовещенский В.В., Панин И.Г.* Исследование воздействия ультразвука на деформацию кристаллических материалов // ФТТ. – 2011. – Т.53. – Вып.10. – С.2005-2010.
10. *Северденко В.П.* Ультразвуковая обработка металлов. – М.: Наука, 1967. – 217 с.
11. *Шаталова И.Г., Горбунов Н.С., Лихтман В.И.* Физико-химические основы вибрационного уплотнения материалов. – М.: Наука, 1966. – 246 с.
12. *Кобзев Д.Е., Баронин Г.С., Полуектов В.Л.* Твердофазная плунжерная экструзия полимерных нанокомпозитов с применением ультразвука // Перспективные материалы. – 2011. – №12. – С.449-455.
13. *Беляева Н.А.* Математическое моделирование твердофазной плунжерной экструзии вязкоупругих структурированных композитных систем / Международная научно-техническая конференция “Современные металлические материалы и технологии” (СММТ'2009). Сборник трудов. – С.-Петербург: Изд-во Политехнического университета, 2009. – С.33-42.
14. *Бажин П.М., Стельмах Л.С., Столин А.М., Костицина Е.В.* О конкуренции процессов сдвигового деформирования и объемного уплотнения металлокерамических материалов при СВС-экструзии // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2012. – Т.18. – №2. – С.226-233.
15. *Беляева Н.А., Прянишникова Е.А.* Структурная математическая модель экструзии пористого вязкоупругого композитного материала на основе обобщенной модели Максвелла с учетом влияния звуковой волны / Федеральная служба по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам РФ. Реестр программ для ЭВМ. – Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ № 2011660240, 29 февраля 2012 г.

О МОДЕЛИРОВАНИИ КОНТАКТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УПРУГИХ ТЕЛ С ТОНКИМИ ПОКРЫТИЯМИ ВИНКЛЕРОВСКОГО ТИПА

Бобылёв А.А.¹, Белашова И.С.²

¹*Государственное высшее учебное заведение «Национальный горный университет»,
г. Днепрпетровск, Украина*

²*Московский авиационный институт (национальный исследовательский
университет), г. Москва, Россия*

РЕЗЮМЕ

Рассмотрена задача о контактном взаимодействии жесткого штампа и упругого тела конечных размеров с тонким покрытием винклеровского типа. Получены формулировки задачи в виде вариационного неравенства и эквивалентной ему экстремальной задачи. Разработан вычислительный алгоритм решения задачи на основе метода конечных элементов.

1. ВВЕДЕНИЕ

Современное машиностроение предъявляет повышенные требования к износостойкости материалов узлов трения. В настоящее время путь получения новых материалов в основном исчерпан. В связи с этим, в последнее десятилетие наметилась тенденция решать проблемы повышения триботехнических характеристик материалов за счёт совершенствования существующих и разработки новых методов нанесения покрытий на взаимодействующих поверхностях [1-5]. Под покрытием понимается такое образование на поверхности материала, которое существенно отличается по своим физико-механическим (износостойкость, прочность, микротвердость, трещиностойкость), кристаллохимическим и теплофизическим свойствам от соответствующих свойств конструкционного материала (основы).

Реальные условия эксплуатации, реализуемые в узлах трения, характеризуются сложным комплексом различных факторов воздействия. Экспериментальное исследование износостойкости покрытий с учетом этих факторов требует больших материальных и временных затрат. Поэтому перспективным подходом является использование методов компьютерного моделирования, возможности которого позволяют анализировать влияние различных параметров на механическое поведение покрытия нагруженного узла сопряжения и вскрыть тонкие механизмы процессов, происходящих на рабочих поверхностях. Основой для разработки методов компьютерного моделирования являются математические модели процессов деформирования и изнашивания покрытий.

Существует большое число технологий получения покрытий на рабочих поверхностях [5]. Покрытия различаются по методам их нанесения на подложку, материалами, количеством слоёв и их толщиной. Это приводит к разнообразию математических моделей, используемых для описания физико-механических свойств покрытий [6].

Выбор модели для описания механических свойств покрытия имеет большое значение. В общем случае тело с покрытием можно рассматривать как неоднородное тело с непрерывно меняющимися свойствами поверхностных слоёв. Получить

аналитические решения задач контактного взаимодействия таких тел весьма затруднительно [7]. Применение стандартных вариантов численных методов, например, метода конечных элементов, также сталкивается с серьёзными затруднениями, вызванными малой толщиной покрытия. Поэтому требуется разработка специальных методов моделирования контактного взаимодействия тел с тонкими покрытиями.

Построен ряд прикладных теорий [8], опирающихся на феноменологические упрощающиеся предположения о характере деформирования покрытия, и уточненные теории [9], описывающие напряженно-деформированное состояние упругих покрытий, которые одновременно учитывают как их продольные и поперечные деформации растяжения и сдвига, так и деформации поперечного изгиба и сжатия. Обзор современного состояния математических моделей и методов решения контактных задач для тел с покрытиями приведен в [10].

Одной из первых моделей, предложенных для учета свойств поверхностных слоёв, отличных от свойств материала основы, была модель комбинированного основания [11], согласно которой толщиной покрытия можно пренебречь, а перемещения точек границы тела представить в виде суммы двух слагаемых, первое из которых обусловлено деформациями основы, а второе – деформациями покрытия. Простейшей моделью, описывающей деформацию покрытия, является модель винклеровского слоя. В [8] показано, что такая модель может быть использована в случаях, когда жесткость покрытия соизмерима или меньше жесткости основного упругого тела.

Многие задачи о контактном взаимодействии тел с покрытиями рассматриваются как задачи с односторонними связями, постановки которых содержат нелинейные граничные условия в виде неравенств. Одной из простейших задач такого класса является задача о вдавливании в упругое тело с тонким покрытием гладкого жесткого штампа. Если штамп или тело являются выпуклыми, то фактическая область контакта заранее неизвестна и подлежит определению в процессе решения задачи.

Эффективным подходом к решению задач с односторонними связями является использование вариационного метода и аппарата вариационных неравенств [12-15]. Цель настоящей работы – получить вариационную формулировку задачи о вдавливании гладкого жесткого штампа в упругое тело с тонким покрытием винклеровского типа и разработать алгоритм численного решения задачи на основе метода конечных элементов.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим упругое тело конечных размеров, занимающее область $\Omega \in R^3$, ограниченную замкнутой поверхностью Γ с внешней нормалью $\vec{n}$. Введём неподвижную декартову систему координат $Ox_1x_2x_3$. Далее через x будем обозначать точку пространства с координатами $x = (x_1, x_2, x_3)$. Под $u_i(x)$, $\varepsilon_{ij}(x)$, $\sigma_{ij}(x)$ будем понимать соответственно компоненты вектора перемещений и тензоров деформации и напряжений в точке $x \in \Omega$. Перемещения и деформации считаются малыми. Напряжения в упругом теле в недеформированном состоянии отсутствуют.

Напряженно-деформированное состояние упругого тела Ω описывается системой уравнений:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}(x)}{\partial x_j} + F_i(x) = 0, \quad x \in \Omega; \quad (1)$$

$$\varepsilon_{ij}(x) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i(x)}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j(x)}{\partial x_i} \right), \quad x \in \Omega; \quad (2)$$

$$\sigma_{ij}(x) = a_{ijkl}(x) \varepsilon_{kl}(x), \quad x \in \Omega, \quad (3)$$

где $\vec{F}(x)$ – интенсивность объёмных сил; $a_{ijkl}(x)$ – компоненты тензора модулей упругости.

Поверхность упругого тела Γ состоит из трёх непересекающихся частей $\Gamma = \Gamma_u \cup \Gamma_q \cup \Gamma_p$. На части Γ_u заданы перемещения

$$u_i(x) = g_i(x), \quad (4)$$

а на части поверхности Γ_q действуют поверхностные усилия

$$\sigma_{ij}(x) n_j(x) = q_i(x). \quad (5)$$

Через Γ_p обозначена часть поверхности Γ , по которой возможен контакт тела с жестким штампом. Форма и предельные размеры Γ_p определяются исходя из геометрических соображений. Фактические площадки контакта упругого тела и жесткого штампа считаются заранее неизвестными и подлежат определению в процессе решения задачи.

Часть поверхности Γ_p имеет тонкое упругое покрытие. Для учета влияния покрытия используем модель комбинированного основания [11], согласно которой толщиной покрытия можно пренебречь, а перемещения точек границы тела представить в виде суммы двух слагаемых, первое из которых обусловлено деформациями основы, а второе – деформациями покрытия.

Покрытие моделируется упругим слоем винклеровского типа, т. е. учитывается только поперечное обжатие $w(x)$ покрытия вдоль направления нормали к поверхности тела, величина которого связана с нормальными напряжениями σ_n соотношением

$$\sigma_n(x) = k(x)w(x), \quad (6)$$

где $k(x)$ – коэффициент постели винклеровского слоя. Отметим, что деформации винклеровского слоя имеют локальный характер и зависят только от величины контактного давления в данной точке.

Форма и положение жесткого штампа описываются функцией $\Phi(x)$, значение которой в точке $x \in \Gamma_p$ равно расстоянию от этой точки до поверхности штампа, измеренному вдоль направления внешней нормали $\vec{n}(x)$. Подчеркнем, что расстояние $\Phi(x)$ отсчитывается по отношению к недеформированному состоянию упругого тела.

Учитывая, что в первом приближении искажение формы поверхности деформируемого тела определяется нормальными перемещениями лежащих на поверхности частиц [15], контактное взаимодействие упругого тела Ω с жестким штампом описывается следующими линеаризованными условиями идеального одностороннего контакта:

$$u_n(x) + w(x) \leq \Phi(x), \quad x \in \Gamma_p, \quad (7)$$

$$\sigma_n(x) \leq 0, \quad x \in \Gamma_p, \quad (8)$$

$$\vec{\sigma}_t(x) = 0, \quad x \in \Gamma_p, \quad (9)$$

$$\sigma_n(x) \{u_n(x) + w(x) - \Phi(x)\} = 0, \quad x \in \Gamma_p, \quad (10)$$

где $u_n = u_i n_i$; $\sigma_n = \sigma_{ij} n_i n_j$; $\vec{\sigma}_t = \vec{\sigma} - \sigma_n \vec{n}$.

Таким образом, задача состоит в определении полей перемещений $u_i(x)$, деформаций $\varepsilon_{ij}(x)$ и напряжений $\sigma_{ij}(x)$ в занимаемой упругим телом области Ω , а также поперечного обжатия $w(x)$ тонкого покрытия, удовлетворяющих уравнениям (1)-(3) с граничными условиями (4)–(10). Необходимо также определить фактические площадки контакта упругого тела с жестким штампом.

Вопросы существования и единственности контактных задач теории упругости с односторонними связями подробно рассмотрены в [13-15]. Далее будем предполагать, что решение контактной задачи (1)-(10) существует и единственно.

3. ВАРИАЦИОННАЯ ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ

Перемещения $\vec{u}$ упругого тела и поперечное обжатие $w(x)$ покрытия будем рассматривать как элементы $U = (\vec{u}, w)$ прямого произведения функциональных пространств $K = [W_2^1(\Omega)]^3 \otimes L_2(\Gamma_p)$. Для корректности вариационной формулировки задачи будем предполагать, что функции, характеризующие упругие свойства тела, внешние воздействия и условия контактного взаимодействия, являются ограниченными по нормам соответствующих пространств и обладают следующими свойствами гладкости:

$$a_{ijkl} \in L_\infty(\Omega), \quad k \in L_2(\Gamma_p),$$

$$\vec{g} \in [H^{1/2}(\Gamma_u)]^3, \quad \vec{q} \in [H^{-1/2}(\Gamma_q)]^3, \quad \Phi \in H^{1/2}(\Gamma_p).$$

Кроме того, компоненты тензора модулей упругости удовлетворяют условиям симметричности и эллиптичности

$$a_{ijkl} = a_{ijlk} = a_{klij}, \quad a_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} \geq C \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl}, \quad \forall \{\varepsilon_{ij}\} \in L_2(\Omega), \quad C = \text{const} > 0,$$

а коэффициент постели винклеровского слоя – условию положительности

$$k(x) \geq C_k, \quad C_k = \text{const} > 0.$$

Введем множество кинематически допустимых перемещений и допустимых поперечных обжатий

$$K_0 = \left\{ V = (\vec{v}, s) \in K : \begin{aligned} &\vec{v}(x) = \vec{g}(x), \quad x \in \Gamma_u; \\ &v_n(x) + s(x) \leq \Phi(x), \quad s(x) \leq 0, \\ &s(x)(v_n(x) + s(x) - \Phi(x)) = 0, \quad x \in \Gamma_p \end{aligned} \right\},$$

а также билинейную $a(\cdot, \cdot) : K \otimes K \rightarrow R$ и линейную $b(\cdot) : K \rightarrow R$ формы

$$a(U, V) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \sigma_{ij}(\vec{u}) \varepsilon_{ij}(\vec{v}) d\Omega + \frac{1}{2} \int_{\Gamma_p} k w s d\Gamma_p,$$

$$b(V) = \int_{\Omega} F_i v_i d\Omega + \int_{\Gamma_q} q_i v_i d\Gamma_q.$$

Утверждение 1. Решение $U = (\vec{u}, w)$ задачи в дифференциальной постановке (1)–(10) удовлетворяет вариационному неравенству

$$a(U, V - U) - b(V - U) \geq 0 \quad \forall V \in K_0. \quad (11)$$

Доказательство. Из (1)–(10) следует, что $U \in K_0$. Используя для области Ω первую формулу Бетти (Грина) [13–14], из уравнений (1)–(3) и граничного условия (5) для произвольного $V = (\vec{v}, s) \in K_0$ получим

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \sigma_{ij}(\vec{u})(\varepsilon_{ij}(\vec{v}) - \varepsilon_{ij}(\vec{u})) d\Omega &= \int_{\Omega} F_i(v_i - u_i) d\Omega + \int_{\Gamma_q} q_i(v_i - u_i) d\Gamma_q + \\ &+ \int_{\Gamma_p} \sigma_{ij} n_i(v_i - u_i) d\Gamma_p. \end{aligned} \quad (12)$$

Для последнего слагаемого в правой части (12), используя (6)–(10), получим оценку

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_p} \sigma_{ij} n_i(v_i - u_i) d\Gamma_p &= \int_{\Gamma_p} \sigma_n(v_n - u_n) d\Gamma_p = \int_{\Gamma_p} \sigma_n(v_n + s - \Phi) d\Gamma_p - \\ &- \int_{\Gamma_p} \sigma_n(u_n + w - \Phi) d\Gamma_p - \int_{\Gamma_p} \sigma_n(s - w) d\Gamma_p \geq - \int_{\Gamma_p} kw(s - w) d\Gamma_p. \end{aligned} \quad (13)$$

Утверждение вытекает из соотношения (12) и неравенства (13).

Используя результаты [13–15], можно показать, что справедливы следующие утверждения.

Утверждение 2. Решение вариационного неравенства (11), если оно существует и обладает вторыми производными (хотя бы обобщенными), удовлетворяет всем уравнениям и условиям задачи в дифференциальной постановке (1)–(10).

Утверждение 3. Вариационное неравенство (11) эквивалентно задаче минимизации: найти элемент $U = (\vec{u}, w) \in K_0$ такой, что

$$J(U) = \inf_{V \in K_0} \left\{ J(V) = \frac{1}{2} a(V, V) - b(V) \right\}. \quad (14)$$

4. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ

Для дискретизации задачи минимизации (14) используем метод конечных элементов. Выберем тип конечных элементов и произведем разбиение области Ω . Узлы МКЭ-сетки обозначим P_l , $l = \overline{1, L}$. Перемещения $\vec{u}(x)$ интерполируются по узловым значениям $\vec{u}(P_l) = \{u_1(P_l), u_2(P_l), u_3(P_l)\}$, при этом в узлах $P_l \in \Gamma_p$ в качестве компонент вектора узловых перемещений выбираются нормальные и тангенциальные (относительно поверхности Γ_p) компоненты вектора $\vec{u}(P_l) = \{u_n(P_l), u_{t_1}(P_l), u_{t_2}(P_l)\}$.

Обозначим через $I_p = \{i_m\}$, $m = \overline{1, M}$, множество номеров узлов МКЭ-сетки, расположенных на Γ_p . Поперечные обжатия $w(x)$ тонкого покрытия интерполируются по соответствующим узловым значениям $w(P_i)$, $i \in I_p$, используя следы базисных функций конечных элементов на их границах.

В результате получим конечномерную задачу квадратичного программирования: найти вектор обобщенных узловых перемещений и поперечных обжатий $y^* = (\vec{u}(P_1), \dots, \vec{u}(P_L), w(P_{i_1}), \dots, w(P_{i_M}))$ такой, что

$$J_1(y^*) = \min_{y \in Y} \left\{ J_1(y) = \frac{1}{2} y^T A_1 y - B_1^T y \right\}, \quad (15)$$

где $A_1 = \begin{pmatrix} A_u & 0 \\ 0 & A_w \end{pmatrix}$ – блочная матрица размера $(3L + M) \times (3L + M)$; A_u – квадратная симметричная положительно полуопределенная матрица размера $3L \times 3L$, матрица жесткости упругого тела Ω ; A_w – квадратная симметричная положительно определенная матрица размера $M \times M$, матрица жесткости тонкого покрытия винклеровского типа; $B_1 = (B_u, 0) \in R^{3L+M}$; $B_u \in R^{3L}$ – вектор эквивалентных внешних узловых нагрузок для тела Ω ; $Y \subset R^{3L+M}$ – множество кинематически допустимых узловых перемещений и допустимых поперечных обжатий.

При использовании коллокационного метода [12] аппроксимации граничных условий множество Y имеет вид

$$Y = \left\{ \begin{array}{l} y \in R^{3L+M} : y_j = d_j, j \in I_1; \\ y_{3i_m-2} + w_m \leq \Phi(P_{i_m}), w_m \leq 0, \\ w_m(y_{3i_m-2} + w_m - \Phi(P_{i_m})), i_m \in I_p, m = \overline{1, M} \end{array} \right\},$$

где I_1 – множество номеров компонент вектора y , соответствующих перемещениям узлов, принадлежащих поверхности Γ_u ; d_i – коэффициенты, равные значениям соответствующих функций $g_r(x)$ в граничных узлах $P_i \in \Gamma_u$.

Основная сложность, возникающая при разработке алгоритмов численного решения задачи (15), состоит в том, что каждое ограничение в виде линейного неравенства содержит несколько переменных. Для упрощения вида ограничений предложено линейное преобразование переменных $z = Cy$ такое, что

$$z_j = \begin{cases} y_j, & j \notin I_2; \\ y_j + y_m, & j = 3i_m - 2, i_m \in I_p, m = \overline{1, M}, \end{cases}$$

где $I_2 = \{j : j = 3i_m - 2, i_m \in I_p, m = \overline{1, M}\}$.

Нетрудно видеть, что матрица C является невырожденной и выражения для элементов матриц C^{-1} и C^{-T} несложно получить в явном виде.

В результате преобразования переменных получим следующую задачу квадратичного программирования: найти элемент $z^* \in R^{3L+M}$, такой что

$$J_2(z^*) = \min_{z \in Z} \left\{ J_2(z) = \frac{1}{2} z^T A_2 z - B_2^T z \right\}, \quad (16)$$

$$Z = \left\{ \begin{array}{l} z \in R^{3L+M} : z_j = d_j, j \in I_1; \\ z_{3i_m-2} \leq \Phi(P_{i_m}), w_m \leq 0, \\ w_m(z_{3i_m-2} - \Phi(P_{i_m})), i_m \in I_p, m = \overline{1, M} \end{array} \right\},$$

где $A_2 = C^{-T} A_1 C^{-1}$; $B_2 = C^{-T} B_1$.

Матрицы жесткости A_u и A_w являются сильно разреженными блочными матрицами. Для их хранения в памяти ЭВМ используется разреженный блочно-строчный формат [16]. Такая схема хранения матриц предъявляет минимальные требования к памяти, объем которой пропорционален первой степени количества неизвестных, и в то же время позволяет эффективно организовать вычисление произведения матриц на вектора. Поэтому для численного решения задачи квадратичного программирования (16) целесообразно применять градиентные методы, не требующие формирования в явном виде матрицы Гессе минимизируемой

функции. Достаточно программно реализовать эффективный расчет ее произведения на вектор. В настоящей работе для численного решения задачи (16) используется вариант метода сопряженных градиентов, предложенный в [17].

5. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Разработанный вычислительный алгоритм реализован в виде отдельного модуля пакета прикладных программ для решения контактных задач. В качестве примера ниже приведены результаты численного решения задачи о вдавливании жесткого штампа с заданным усилием в однородное изотропное упругое тело, занимающее область

$$\Omega = \{x = (x_1, x_2, x_3) \in R^3 : -L \leq x_1 \leq L, -2L \leq x_2 \leq 0\}.$$

Предполагалось, что тело Ω находится в условиях плоской деформации. В качестве предельно возможной области контакта с жестким штампом принималась грань $x_2 = 0$, имеющая тонкое упругое покрытие. Коэффициент постели покрытия вычислялся по формуле [8]

$$k = \frac{E_p(1-\nu_p)}{h_p(1-2\nu_p)(1+\nu_p)},$$

где E_p , ν_p – модуль Юнга и коэффициент Пуассона материала покрытия соответственно; h_p – толщина покрытия.

Поверхности $x_1 = \pm L$ тела Ω считались свободными от внешних нагрузок, а на грани $x_2 = -2L$ задавались условия: $u_2 = 0$, $\sigma_{12} = 0$. Для исключения смещения тела как жесткого целого дополнительно задавалось условие $u_1 = 0$ при $x_1 = 0$.

Функция $\Phi(x)$, описывающая положение и форму жесткого штампа, выбиралась в виде

$$\Phi(x) = \delta + (x_1/L)^2.$$

где δ – глубина внедрения штампа в упругое тело. При проведении расчетов величина δ выбиралась таким образом, чтобы контактное усилие было равно $0,001E^*L$. Здесь через E^* обозначен приведенный модуль упругости пары контактирующих тел, который в рассматриваемом случае вычислялся по формуле

$$E^* = E/(1-\nu^2)$$

где E , ν – модуль Юнга и коэффициент Пуассона материала тела Ω .

На рис.1 изображено распределение контактного давления на поверхности возможного контакта Γ_p . Ввиду симметрии распределений изображены только их половины. Кривая 1 соответствует распределению контактного давления при отсутствии покрытия, кривая 2 – покрытию с коэффициентом постели $k = 100E^*/L$, кривая 3 – $k = 10E^*/L$, кривая 4 – $k = E^*/L$.

Нетрудно видеть, что с уменьшением коэффициента постели тонкого покрытия увеличивается ширина площадки контакта, а распределение контактного давления становится более равномерным.

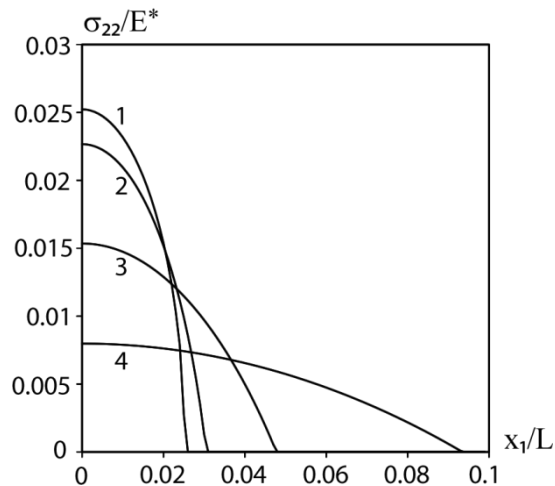


Рис.1. Распределение контактного давления.

6. ВЫВОДЫ

Для контактной задачи о вдавливании жесткого штампа в упругое тело конечных размеров с тонким покрытием винклеровского типа получено вариационное неравенство и эквивалентная ему задача минимизации с ограничениями в виде равенств и неравенств. Дискретизация задачи произведена методом конечных элементов. Применение линейного преобразования переменных позволило упростить вид ограничений. Для численного решения полученной задачи квадратичного программирования использован вариант метода сопряженных градиентов, учитывающий специфику ограничений задачи. Отметим, что разработанный вычислительный алгоритм позволяет получить численное решение контактной задачи с заранее неизвестной зоной контакта без использования внешних итераций.

В дальнейшем полученная вариационная формулировка и разработанный на её основе вычислительный алгоритм могут быть обобщены для задач о контактом взаимодействии системы упругих тел с тонкими упругими покрытиями винклеровского типа.

ЛИТЕРАТУРА

1. Чичинадзе А.В. Трение, износ и смазка (трибология и триботехника). – М.: Машиностроение, 2003. – 576 с.
2. Основы трибологии (трение, износ, смазка) / Под ред. А.В. Чичинадзе. – М.: Машиностроение, 2001. – 664 с.
3. Гаркунов Д.Н. Триботехника (износ и безызносность). – М.: Изд-во МСХА, 2001. – 616 с.
4. Современная трибология: Итоги и перспективы / Отв. ред. К.Ф. Фролов. – М.: Изд-во ЛКИ, 2008. – 480 с.
5. Мышкин Н.К., Петроковец М.И. Трение, износ и смазка. Физические основы и технические приложения трибологии. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. – 368 с.
6. Муравьев И.В. Выбор математической модели метода нанесения покрытий на рабочие поверхности деталей // Вестник МГТУ «Станкин». – 2009. – Т.5. – №1. – С.82-86.

7. Айзикович С.М., Александров В.М., Белоконов А.В., Кренев Л.И., Трубчик И.С. Контактные задачи теории упругости для неоднородных сред. – М.: Физматлит, 2006. – 240 с.
8. Александров В.М., Мхитарян С.М. Контактные задачи для тел с тонкими покрытиями и прослойками. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1983. – 488 с.
9. Коваленко Е.В. О контакте твердого тела с упругим полупространством через тонкое покрытие // Прикладная математика и механика. – 1999. – Т.63. – Вып.1. – С.119-127.
10. Коваленко Е.В. Контактные задачи для тел с покрытиями // Механика контактных взаимодействий. – М.: Физматлит, 2001. – С.459-475.
11. Штаерман И.Я. Контактная задача теории упругости. – М.-Л.: Гостехиздат, 1949. – 270 с.
12. Гловински Р., Лионс Ж.-Л., Тремольер Р. Численное исследование вариационных неравенств. – М.: Мир, 1979. – 574 с.
13. Дюво Г., Лионс Ж.-Л. Неравенства в механике и физике. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1980. – 383 с.
14. Панагитопулос П. Неравенства в механике и их приложения. Выпуклые и невыпуклые функционалы энергии. – М.: Мир, 1989. – 496 с.
15. Кравчук А.С. Вариационные и квазивариационные неравенства в механике. – М.: МГАПИ, 1997. – 340 с.
16. Писсанецки С. Технология разреженных матриц. – М.: Мир, 1988. – 410 с.
17. Бобылев А.А. Об одном варианте численного решения контактных задач теории упругости // Решение прикладных задач математической физики и дискретной математики. – Днепропетровск: ДГУ, 1987. – 23-29 с.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УЕДИНЕННЫХ ВОЛН В ТОНКОМ СЛОЕ СРЕДЫ

Бошенятов Б.В., Левин Ю.К., Лисин Д.Г., Попов В.В., Семянистый А.В.,
Яновский Ю.Г.

*ФГБУН Институт прикладной механики Российской академии наук, г. Москва,
Россия*

РЕЗЮМЕ

Рассмотрены эксперименты, проведенные на гидродинамическом лотке, предназначенном для исследования волн на мелкой воде, в том числе, типа цунами. Приведены технические характеристики установки, даны моделируемые параметры волн типа цунами и результаты испытаний установки, подтверждающие её технические характеристики. Отмечена особенность сформированной волны – наличие осцилляций амплитуды на ее вершине. Разработана математическая модель, адекватно отображающая результаты эксперимента на гидродинамическом лотке. Рассчитано изменение поля скоростей жидкости в ходе формирования и распространения волны, что позволяет детально проследить эволюцию ее формирования. Определена эмпирическая зависимость частоты осцилляций на вершине волны от глубины воды.

Изучение свойств цунами проводят путем измерения амплитуды длинных волн малой (менее 1 мм) амплитуды на водной поверхности в лабораторных условиях [1,2]. Для понимания наблюдаемых явлений целесообразно также привлекать методы математического моделирования процессов формирования и распространения волн «на мелкой воде» в гидродинамическом лотке.

В данной работе с использованием методов физического эксперимента (гидродинамический лоток) показана адекватность разработанной математической модели (пакет Open FOAM, модель VOF), определены особенности формы образованной волны и дано ее эмпирически обоснованное аналитическое представление.

Эксперименты проводились на гидродинамическом лотке ИПРИМ РАН, имеющем следующие параметры:

$L=15\text{ м}$ – длина рабочей части лотка, $D=0.25\text{ м}$ – ширина лотка, $H=0.1\text{ м} - 0.3\text{ м}$ – глубина воды в лотке, $A_0=10\text{ мм} - 50\text{ мм}$ – начальный перепад уровней, $\lambda=1\text{ м} - 3\text{ м}$ – длина волны, A – амплитуда волны, a – длина генератора волны, $A_{\text{макс}}$ – максимальное значение амплитуды волны. Безразмерные параметры моделирования: $A/H=H/\lambda=0.01-0.1$; $A/\lambda=0.001-0.25$; $a/H=2-15$; $(L-a)/a=10-15$.

Установка оснащена 10-ти канальной автоматизированной системой прецизионных измерений уровня волны (до ± 10 мкм) и скоростной цифровой видеокамерой Photron FASTCAM SA4 500K. Скорость съемки до 3600 кадр/сек при полном разрешении 1024*1024 пс. В данных экспериментах для регистрации сигналов с измерительного блока использовались цифровым четырехканальным осциллографом и двухканальной приставкой Velleman PCS 500.



Рис.1. Гидродинамический лоток ИПРИМ РАН.

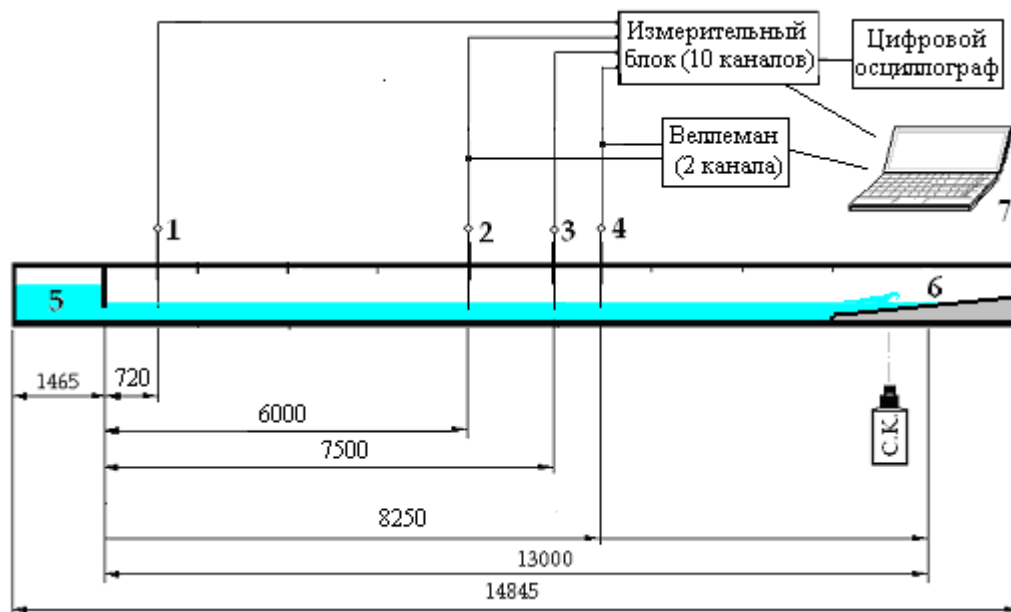


Рис.2. Принципиальная схема экспериментов: 1-4 – датчики уровня волны, 5 – генератор волны, 6 – береговой склон, 7 – компьютер.

Начальная волна формировалась генератором волны «кессонного» типа, который представляет собой отсек лотка длиной $a_{max}=1465$ мм с герметичной верхней крышкой, имеющей патрубок для откачки или наполнения воздухом верхнего объема генератора. Передняя часть генератора, обращенная к рабочему объему лотка, выполнена в виде неподвижной стенки, герметично закрывающей

верхнюю часть генератора, нижняя часть которого, высотой 90 мм, сообщается с рабочим объемом лотка. Герметичная задняя стенка имеет возможность перемещения с целью установки заданного размера a рабочей длины генератора. Перед работой лоток заполняется водой до заданного уровня $H_0 > 90$ мм. Затем, откачкой воздуха через патрубок в верхней части генератора устанавливается заданный перепад уровней воды η_0 в генераторе и рабочей части лотка. После разгерметизации верхней части кессона в рабочей части лотка формируется волна с длиной $\lambda \approx 2a$ и амплитудой $\eta \approx \eta_0 / 2$.

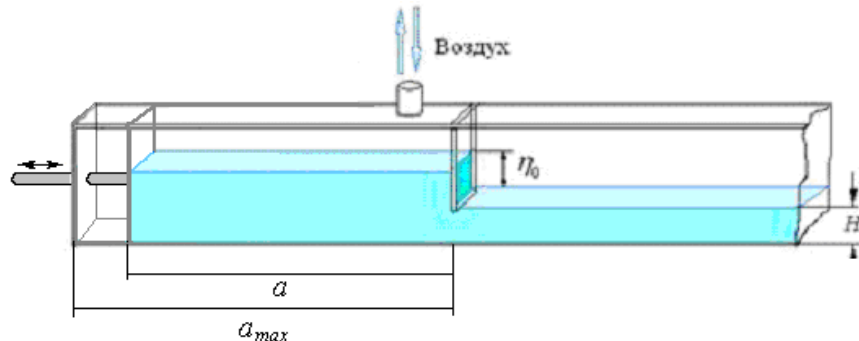


Рис.3. Конструкция кессонного генератора волны.

Скорость и профиль волны в данных экспериментах измерялись системой из 4 датчиков, размещенных вдоль длины лотка на разных расстояниях (0.72м, 6м, 7.5м и 8.25м) от генератора. Как показали эксперименты, профиль сформированной волны имеет вид одиночной трапеции с осцилляцией амплитуды на плоской вершине.

Как показано в работе [3], возможность моделирования крупномасштабных природных процессов обеспечена высокой точностью измерений резистивным датчиком уровня волны, который имеет простую конструкцию. Однако с использованием оригинальной электрической схемы [4], он дает точность измерения уровня воды до 10 мкм.

Сигналы датчиков приведены на осциллограммах при глубине воды в лотке 0.1м и 0.28м (рис.4). Отметим уже упомянутый необычный факт - затухающие осцилляции на вершине волны.

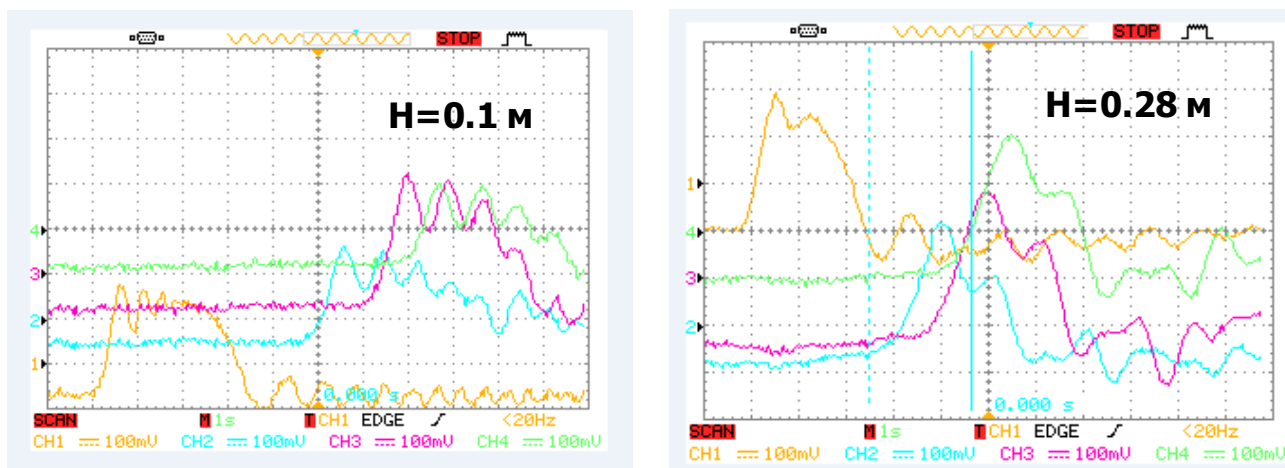


Рис.4. Осциллограммы волн при разных начальных глубинах H воды в лотке. (Кривым 1-4 соответствуют измерительные каналы с 1 по 4, соответственно при $x=0,72$ м; 6,0 м; 7,5 м и 8,25 м. x – расстояние от передней стенки генератора до датчика).

Также было проведено двумерное численное моделирование нестационарного распространения гравитационной волны на поверхности раздела двух сред (воды и воздуха) с помощью открытого под лицензией GNU пакета OpenFOAM [5], который представляет собой набор написанных на C++ библиотек и макросов с открытым кодом, и, по сути, является своеобразным языком программирования и удобным инструментом для численных симуляций физических процессов. Использовалась модель VOF (Volume of Fluid) [6], предназначенная для описания течений двух и более несмешивающихся, несжимаемых, изотермических жидкостей, имеющих общую поверхность раздела.

Сетка имела длину 15м, высоту от 0.1 до 0.6м. Размер ячейки – 2 мм. Сходимость по сетке проверялась 4-х кратным загрублением ее размеров. Использована 8-ядерная станция с 64-разрядной архитектурой. Сопоставление результатов численного моделирования с экспериментом на гидролотке ИПРИМ РАН приведено на рис.5, где видно, что профиль волны, прописанный в физическом эксперименте (реальная осциллограмма) идентичен расчетному (результату математического моделирования).

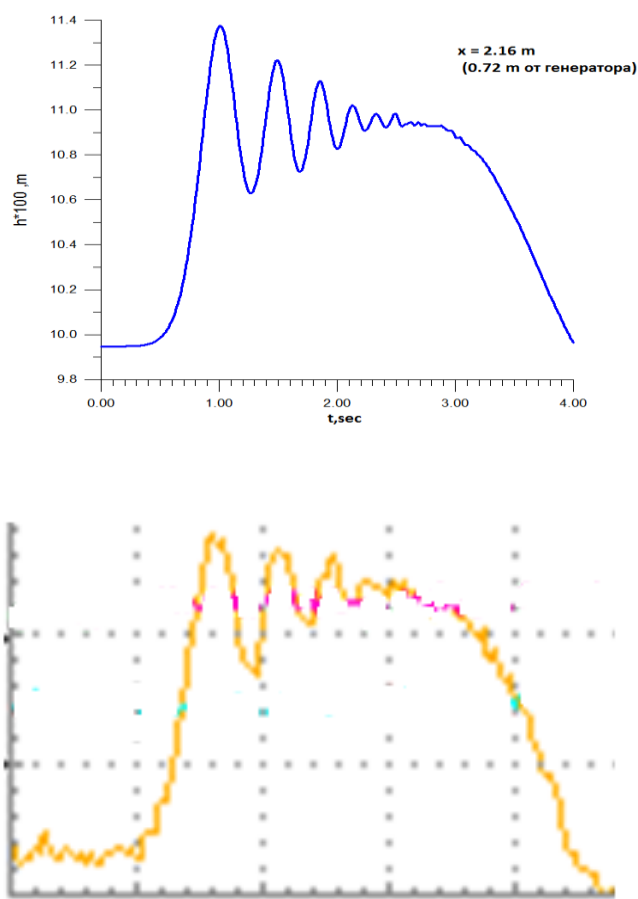


Рис.5. Сопоставление результатов численного моделирования (a) с экспериментом (b) по измерению формы волны в гидролотке ИПРИМ РАН при глубине воды $H=0,1$ м.

В физическом эксперименте датчиками определено временное положение 1-го и 2-го пиков волны. Результаты эксперимента, как показано на рис.6, хорошо соответствуют полученным на математической модели.

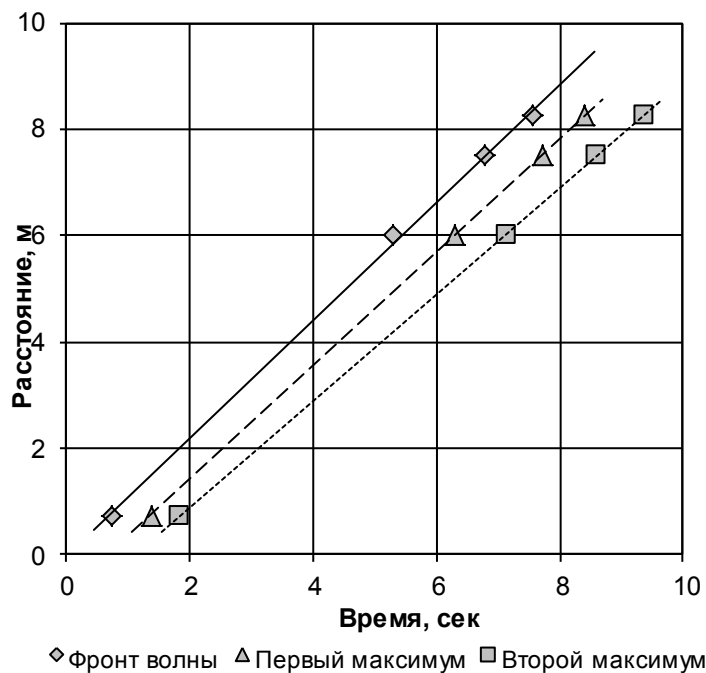


Рис.6. Сравнение результатов численного моделирования (линии) с экспериментальным определением скорости перемещения фронта волны (ромбы), первого и второго максимума (треугольники, квадраты) колебаний на гребне волны при амплитуде $A=7,5$ мм и глубине воды в лотке $H=0,1$ м.

Возможности математической модели полностью проявились при анализе эволюции поля скоростей элементарных объемов жидкости в ходе формирования и распространения волны. Наиболее показателен начальный этап формирования волны, который позволяет детально проследить фазы ее формирования.

На кинограмме рис.7 представлено поле скоростей на начальном временном интервале (0.1 – 0.4 с) на выходе кессонного генератора.

Следует отметить, что в эксперименте реализован кессонный генератор, при котором формируемая УВ «подныривает» под неподвижную перегородку генератора, что может влиять на свойства волны. Поэтому целесообразно сравнить этот метод со свободным распадом водной ступени (так называемый, режим «идеального генератора»). Поэтому необходимая проверка идентичности волн, формируемых кессонным и «идеальным» генераторами, была сделана на математической модели с учетом полученного ранее вывода о ее адекватном отображении реальных процессов.

При численном моделировании процесса формирования и распространения волны сравнивался профиль этой волны в координатах «высота волны – время» на расстоянии 2,985 м от генератора волны для случая «идеального генератора» (распад произвольного разрыва) и генератора кессонного типа (рис.8).

Видно, что волна, формируемая генератором кессонного типа (тонкая черная линия) уже на расстоянии порядка длины волны генератор, где проводилось измерение, практически не отличается от волны «идеального» генератора. На расстоянии $L \approx 3\lambda$ (8 м) эти волны, как показали эксперименты, идеально совпадают друг с другом.

Далее был проведен анализ частоты осцилляций на плоской вершине волны методом численного моделирования и в натурном эксперименте. Период колебаний

T выбирали равным расстоянию между 1-м и 2-м пиками, а частота определялась соотношением $f=1/T$.



Рис.7. Результаты расчета поля скоростей вблизи передней стенки генератора волны в начальные моменты времени от 0.1 до 0.4 с.

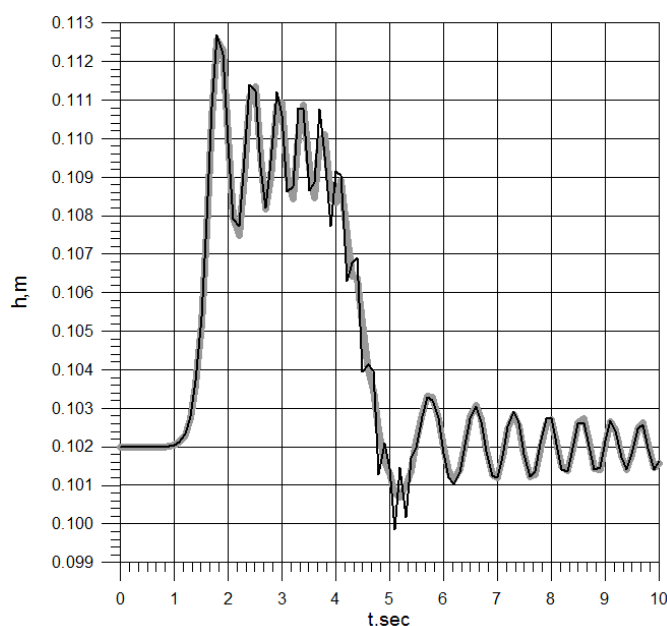


Рис.8. Сравнение работы генератора волны кессонного типа (тонкая черная линия) и «идеального» генератора, в котором волна формируется в результате мгновенного распада произвольного разрыва уровней воды (толстая серая линия). Численное моделирование профилей волны выполнено на расстоянии $L \approx \lambda$ от начала генератора.

Естественно предположить, что природа этих колебаний аналогична наблюдаемым в сообщающихся сосудах. Поэтому, взяв за основу известную зависимость частоты осцилляций уровня воды от глубины сообщающихся сосудов [7] и дополнив ее подкоренное выражение сомножителем $k(h)$, получим следующую формулу

$$f(h) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{k(h) \frac{g}{h}} \quad (1)$$

Зависимость величины $k(h)$ от глубины h , рассчитанная для датчика на расстоянии $x=6\text{ м}$ от начала лотка, приведена на графике рис.9.

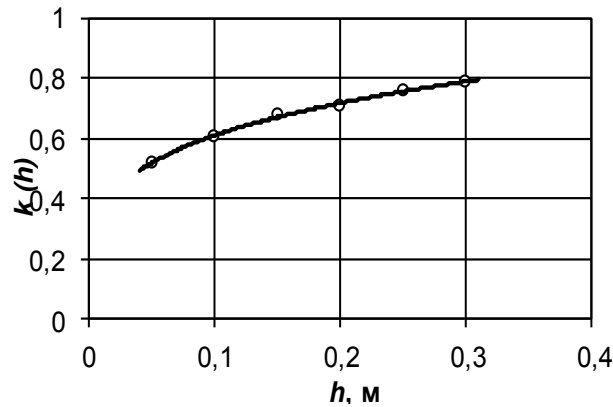


Рис.9. Расчетная зависимость коэффициента k в формуле (1) от глубины воды h .

Полученная зависимость показывает, что уменьшение глубины воды сопровождается более заметным снижением частоты осцилляций на гребне волны по сравнению с процессом колебаний в сообщающихся сосудах.

Результаты математического моделирования частоты осцилляций за фронтом волны были также проверены экспериментально. На рис.10 представлена расчетная зависимость $f(h)$ частоты осцилляций на гребне волны от глубины h для датчика на расстоянии $x=6\text{ м}$ от генератора волны. Там же приведены экспериментальные точки – результаты измерения частоты осцилляций от глубины воды в лотке при различных расстояниях датчиков.

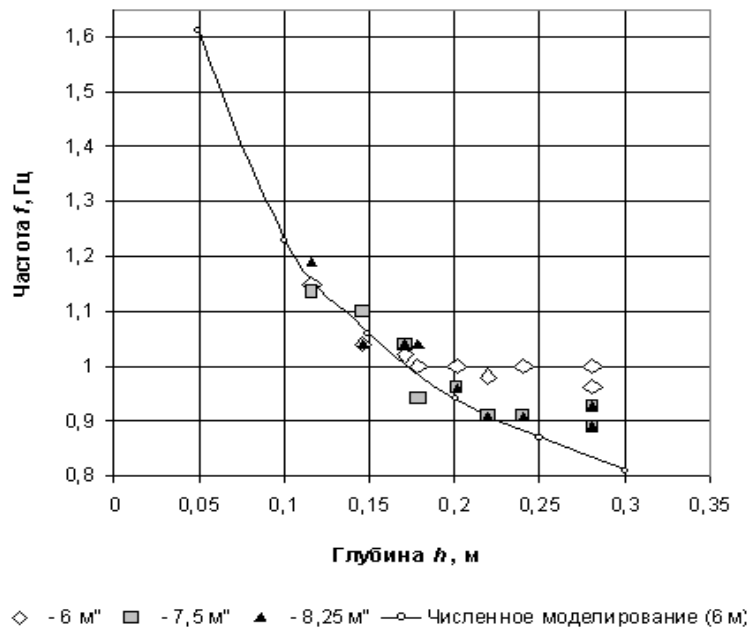


Рис.10. Зависимость частоты осцилляций $f(h)$ на гребне волны от глубины h . Экспериментальные точки (ромбы, квадраты, треугольники) соответствуют измерениям на различных расстояниях от генератора. Численное моделирование соответствует расстоянию $x=6\text{ м}$.

ВЫВОДЫ

Разработан метод численного анализа процесса формирования и распространения длинномасштабных волн в тонкослойной среде, адекватно отображающий реальные эксперименты.

Показано, что волна формируемая генератором кессонного типа идентична свободному распаду перепада уровня воды.

Адекватность результатов численного моделирования волны подтверждена экспериментально.

Экспериментально обнаружены затухающие осцилляции на вершине одиночной волны, на математической модели установлена зависимость частоты этих осцилляций от глубины слоя жидкости.

Это позволит адекватно моделировать и предсказывать поведение крупномасштабных природных систем и повысит безопасность при контакте с ними.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Левин Б.В., Носов М.А.* Физика цунами и родственных явлений в океане. – М.: «Янус-К», 2005. – С.78.
2. www.acamina.com
3. *Бошенятов Б.В., Левин Ю.К., Попов В.В., Семянистый А.В.* Метод измерения волн малой амплитуды на водной поверхности // ПТЭ. – 2011. – №2. – С.116-117.
4. *Бошенятов Б.В., Левин Ю.К., Попов В.В.* Устройство измерения уровня воды, Патент РФ №2010141060 от 07.10.2010.
5. <http://openfoam.org/>
6. http://en.wikipedia.org/wiki/Volume_of_fluid_method
7. *Исаков А.Я., Исакова В.В.* Колебательные и волновые процессы. Руководство по самостоятельной работе. – Петропавловск-Камчатский: КамчатГТУ, 2008.

МОДЕЛИРОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ КОНВЕКТИВНОГО ПЕРЕНОСА ТЕПЛА В СТРУКТУРНО-НЕОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ МЕТОДОМ ДВУХМАСШТАБНОГО УСРЕДНЕНИЯ

Волков-Богородский Д.Б., Власов А.Н.

ФГБУН Институт прикладной механики Российской академии наук, г. Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

Рассматривается модель распространения тепла в структурно-неоднородных материалах, имеющих внутреннюю микроструктуру, обусловленную наличием периодической системы включений с промежуточным межфазным слоем. При этом предполагается, что в области между включениями конвективный перенос тепла осуществляется за счёт течения жидкости, подчиняющегося уравнению фильтрации Бринкмана. Дополнительный межфазный слой выполняет в данной модели одновременно роль “смазки” для течения жидкости, а также теплоизолирующей или теплопроводящей (в разных ситуациях) прокладки для включений. На границе между различными фазами материала ставится контактное условие Биверса-Джозефа для течения жидкости, и идеального контакта для уравнения теплопроводности.

Для моделирования физического процесса используется метод асимптотического усреднения Бахвалова в двухмасштабной среде с характерным микромасштабом ε . Представлен полный асимптотический анализ течения жидкости в двухмасштабной пористой среде с учетом конвективного распространения тепла в трехфазной модели с промежуточным слоем. Для решения вспомогательных задач на ячейке периодичности был разработан специальный аналитико-численный метод, основанный на аппроксимациях решения функциями формы высокого порядка, точно воспроизводящими все условия сопряжения на границах раздела фаз. Такой метод решения задач на ячейке позволяет с высокой точностью определить глобальные (эффективные) и локальные характеристики неоднородной среды со сложной внутренней микроструктурой.

Ключевые слова: многофазные среды; конвективный перенос тепла; уравнение теплопроводности; уравнение фильтрации Бринкмана; многомасштабное асимптотическое усреднение уравнений конвективного теплопереноса; аналитические методы решения задачи на ячейке; эффективные теплофизические свойства пористой среды

ВВЕДЕНИЕ

При описании процесса распространения тепла в структурно-неоднородных средах необходимо учитывать различные механизмы передачи тепла. Прежде всего, это кондуктивный механизм передачи тепла, который не сопровождается переносом вещества, и конвективный механизм, при котором перенос тепла обусловлен движением жидкой или газообразной фазы вещества в порах твёрдого тела. Многие структурно-неоднородные материалы имеют в среднем периодическую структуру, что даёт возможность при решении подобных задач использовать асимптотический метод усреднения [1,2].

В данной работе макроскопические свойства и поведение материала выводятся, исходя из его структурного строения и понимания процессов, происходящих на микроуровне – ячейке периодичности. Была принята усложнённая двухмасштабная

модель теплопередачи и течения жидкой фазы, предполагающие наличие на микроуровне дополнительной фазы материала, обусловленной промежуточным фильтрующим слоем на границе зерен или пор.

Для численного моделирования течения жидкости с конвективным теплообменом в пористых средах с частицами (и каналами) различной геометрической формы, и, в частности, для решения вспомогательных задач на ячейке периодичности в работе развивается специальный аналитико-численный метод, основанный на аппроксимации решения фундаментальными решениями уравнения Гельмгольца с учётом геометрии включений. Этот метод позволяет аналитически описать процессы, происходящие на границе между разными фазами течения, и получить решение и эффективные теплофизические и фильтрационные характеристики пористой среды с высокой степенью точности.

1. КОНВЕКТИВНЫЙ ПЕРЕНОС ТЕПЛА В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ

Рассматривается течение вязкой несжимаемой жидкости в пористой среде, образованной периодической системой включений сфероидальной, цилиндрической или сферической формы с промежуточным межфазным слоем (рис.1,2), за счёт которой осуществляется передача или отвод тепла. В случае включений цилиндрической формы считаем, что образующая всех включений параллельна оси Z . Рассматривается задача конвективного переноса тепла с естественными контактными условиями для теплообмена с препятствиями и контактными условиями Биверса-Джозефа [3] для течения жидкости, предполагающими разрыв скорости течения на межфазной границе.

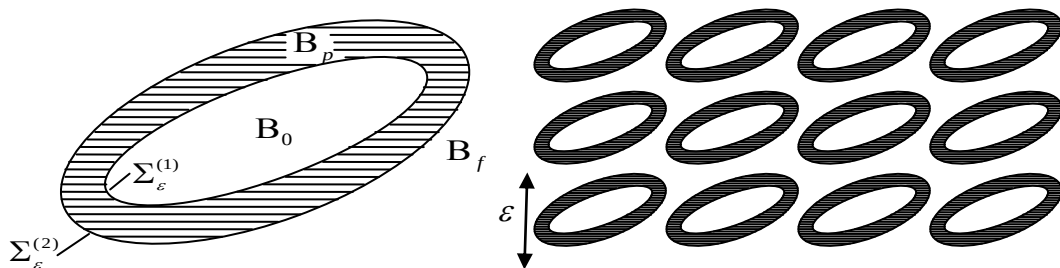


Рис.1. Характерный компонент пористой среды.

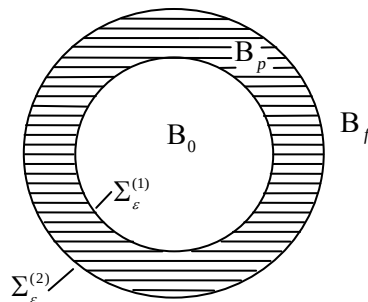


Рис.2. Включения цилиндрической и сферической формы.

Свободное течение жидкости в области B_f описывается уравнением Бринкмана, определяющим связь между давлением $p^{(f)}$ и скоростью течения жидкости $\mathbf{V}^{(f)}$ в следующей форме

$$\eta \nabla^2 \mathbf{V}^{(f)} - \epsilon^{-2} \alpha \mathbf{V}^{(f)} = \nabla p^{(f)}, \quad (1.1)$$

где η – коэффициент динамической вязкости, $\varepsilon^{-2}\alpha$ – инерционный коэффициент, ε^{-2} – масштабный множитель структурно-неоднородной среды [4]. В промежуточной области B_p течение жидкости подчиняется закону фильтрации Дарси

$$\eta \mathbf{V}^{(p)} = -\varepsilon^2 k \nabla p^{(p)}, \quad (1.2)$$

где k – коэффициент проницаемости фильтрующей среды.

В занимаемой препятствием области B_0 течение отсутствует, и на границе $\Sigma_\varepsilon^{(1)}$ задается условие непротекания жидкости

$$V_n^{(p)} = 0, \quad x \in \Sigma_\varepsilon^{(1)}. \quad (1.3)$$

а на границе $\Sigma_\varepsilon^{(2)}$ между свободной и фильтрующей фазой течения задается условие Биверса-Джозефа для вязких касательных напряжений с масштабным множителем ε^{-1} , а также условие непрерывности нормальных напряжений и скоростей в области B_f и B_p

$$\mathbf{p}_s(\mathbf{V}^{(f)}) + \varepsilon^{-1} \frac{\beta \eta}{\sqrt{k}} (\mathbf{V}_s^{(f)} - \mathbf{V}_s^{(p)}) = 0, \quad (1.4)$$

$$V_n^{(f)} - V_n^{(p)} = 0, \quad p_n(\mathbf{V}^{(f)}) + p^{(p)} = 0, \quad x \in \Sigma_\varepsilon^{(2)}. \quad (1.5)$$

Здесь $\mathbf{p}(\mathbf{V}^{(f)})$ – вектор вязких напряжений на поверхности $\Sigma_\varepsilon^{(2)}$ с компонентами $p_i = \sigma_{ik} n_k$, где n_k – компоненты внешней к области B_f нормали $\mathbf{n}$; σ_{ik} – тензор вязких напряжений в несжимаемой жидкости, β – коэффициент вязкого трения, $p_n(\mathbf{V}^{(f)})$ – нормальное напряжение, $\mathbf{p}_s(\mathbf{V}^{(f)})$ – касательное напряжение

$$\sigma_{ik} = -p^{(f)} \delta_{ik} + \eta \left(\frac{\partial V_i^{(f)}}{\partial x_k} + \frac{\partial V_k^{(f)}}{\partial x_i} \right); \quad (1.6)$$

$$p_n(\mathbf{V}^{(f)}) = -p^{(f)} + 2\eta \left(\mathbf{n} \frac{\partial \mathbf{V}^{(f)}}{\partial n} \right), \quad \mathbf{p}_s(\mathbf{V}^{(f)}) = \mathbf{p}(\mathbf{V}^{(f)}) - \mathbf{n} p_n(\mathbf{V}^{(f)}). \quad (1.7)$$

Мы можем объединить уравнения (1.1), (1.2) в одно, считая, что двухфазное течение несжимаемой жидкости в области $B_\varepsilon = B_f \cup B_p$ описывается уравнением несжимаемости и уравнением фильтрации Бринкмана [4,5] с масштабным множителем ε^{-2} и кусочно-постоянными коэффициентами $\eta(x/\varepsilon)$, $\alpha(x/\varepsilon)$

$$\eta(x/\varepsilon) \nabla^2 \mathbf{V}(x) - \varepsilon^{-2} \alpha(x/\varepsilon) \mathbf{V}(x) = \nabla p(x), \quad (1.8)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{V}(x) = 0. \quad (1.9)$$

Наличие масштабного множителя ε^{-1} и ε^{-2} в уравнениях (1.4), (1.8) связано с тем обстоятельством, что коэффициент проницаемости в среде с характерным размером представительной ячейки ε имеет порядок $O(\varepsilon^2)$.

Температурное поле $T(x)$ в системе нагретых препятствий, обтекаемых потоком жидкости описывается уравнением теплопроводности с учетом конвективного переноса тепла

$$\rho c(x/\varepsilon) \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{V}, \nabla) T \right) = \lambda(x/\varepsilon) \nabla^2 T, \quad (1.10)$$

где ρ и c – соответственно удельная плотность и теплоемкость вещества, в котором происходит процесс теплопередачи, λ – коэффициент теплопроводности; считаем, что $\mathbf{V} = 0$ в области $B_0 \cup B_p$ и $\mathbf{V} = \mathbf{V}^{(f)}$ в области свободного течения жидкости.

На границах $\Sigma_\varepsilon^{(2)}$ между свободной и фильтрующей фазой течения и на поверхности включений $\Sigma_\varepsilon^{(1)}$ выполняется условие идеального контакта при теплопередаче (условие непрерывности температуры и теплотока $q = -\lambda \partial T / \partial n$)

$$T^{(p)} = T^{(f)}, \quad q^{(p)} = q^{(f)}, \quad x \in \Sigma_\varepsilon^{(1)} \cup \Sigma_\varepsilon^{(2)}. \quad (1.11)$$

Заметим, что в рассматриваемой модели может отсутствовать промежуточный слой B_p , и тогда контакт нагретых включений и свободной жидкости происходит непосредственно по поверхности $\Sigma_\varepsilon^{(1)} = \Sigma_\varepsilon^{(2)}$ с контактными условиями полного прилипания для скорости

$$\mathbf{V}^{(f)} = 0, \quad x \in \Sigma_\varepsilon^{(1)}, \quad (1.12)$$

и условиями конвективного теплообмена (1.11) для температуры.

2. ПРОЦЕДУРА АСИМПТОТИЧЕСКОГО УСРЕДНЕНИЯ УРАВНЕНИЙ КОНВЕКТИВНОГО ТЕПЛОПЕРЕНОСА

Решение уравнений (1.8)-(1.10) в периодической среде с характерным размером ячейки периодичности ε ищется в виде асимптотических разложений по функциям “быстрых” ξ и “медленных” переменных

$$\mathbf{V}(x) = \hat{\mathbf{V}}(x, \xi) = \sum_{l=0}^{\infty} \varepsilon^l \mathbf{V}^{(l)}(x, \xi), \quad \xi = x/\varepsilon, \quad (2.1)$$

$$p(x) = \hat{p}(x, \xi) = \sum_{l=0}^{\infty} \varepsilon^l p^{(l)}(x, \xi), \quad (2.2)$$

$$T(x) = \hat{T}(x, \xi) = \sum_{l=0}^{\infty} \varepsilon^l T^{(l)}(x, \xi); \quad (2.3)$$

при этом индекс (f) или (p) , указывающий принадлежность фазе течения опускаем. По быстрым переменным выполняется условие периодичности с периодом равным 1, поскольку коэффициенты уравнений (1.8), (1.10) фактически зависят только от быстрых переменных ξ и являются периодическими.

“Быстрые” и “медленные” переменные разделяются в процессе построения асимптотики с помощью формулы дифференцирования сложной функции

$$\frac{\partial}{\partial x_k} = \varepsilon^{-1} \frac{\partial}{\partial \xi_k} + D^k, \quad D^k = \frac{\partial}{\partial x_k}. \quad (2.4)$$

Таким образом, уравнения (1.8)-(1.9) с учётом (2.1)-(2.4) преобразуются к виду

$$\eta \nabla^2 \mathbf{V} - \varepsilon^{-2} \alpha \mathbf{V} - \nabla p = \sum_{l \geq 0} \varepsilon^{l-2} \left[\eta \nabla_\xi^2 \mathbf{V}^{(l)} - \alpha \mathbf{V}^{(l)} - \nabla_\xi p^{(l-1)} + \right. \\ \left. + 2\eta (\nabla_\xi, \nabla) \mathbf{V}^{(l-1)} - \nabla p^{(l-2)} + \eta \nabla^2 \mathbf{V}^{(l-2)} \right] = 0,$$

$$\operatorname{div} \mathbf{V} = \sum_{l \geq 0} \varepsilon^{l-1} \left[\operatorname{div}_\xi \mathbf{V}^{(l)} + \operatorname{div} \mathbf{V}^{(l-1)} \right] = 0,$$

$$\lambda \nabla^2 T - \rho c \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{V}, \nabla) T \right) = \sum_{l \geq 0} \varepsilon^{l-2} \left[\lambda \nabla_{\xi}^2 T^{(l)} + 2 \lambda (\nabla_{\xi}, \nabla) T^{(l-1)} + \lambda \nabla^2 T^{(l-2)} - \right. \\ \left. - \rho c (\mathbf{V}^{(0)}, \nabla_{\xi}) T^{(l-1)} - \rho c \frac{\partial T^{(l-2)}}{\partial t} - \rho c \sum_{p=0}^{l-2} [(\mathbf{V}^{(l-p-1)}, \nabla_{\xi}) + (\mathbf{V}^{(l-p-2)}, \nabla)] T^{(p)} \right] = 0.$$

Построим также асимптотические разложения для вектора вязких напряжений, теплопотока и температуры, и распишем условия сопряжения (1.4), (1.5), (1.11) на поверхности двух фаз течения $\Sigma_{\varepsilon}^{(1)}$ и $\Sigma_{\varepsilon}^{(2)}$

$$p_i(\mathbf{V}^{(f)}) = \sum_{l \geq 0} \varepsilon^{l-1} \left[\eta \left(\frac{\partial V_i^{(l,f)}}{\partial \xi_k} + \frac{\partial V_k^{(l,f)}}{\partial \xi_i} \right) n_k(\xi) - \right. \\ \left. - p^{(l-1,f)} n_i + \eta \left(\frac{\partial V_i^{(l-1,f)}}{\partial x_k} + \frac{\partial V_k^{(l-1,f)}}{\partial x_i} \right) n_k \right]; \\ p_s(\mathbf{V}^{(f)}) + \frac{\beta \eta}{\sqrt{k}} \sum_{l=0}^{\infty} \varepsilon^{l-1} (\mathbf{V}_s^{(l,f)} - \mathbf{V}_s^{(l,p)}) = 0; \\ p_n(\mathbf{V}^{(f)}) + p^{(p)} = \sum_{l \geq 0} \varepsilon^{l-1} \left\{ 2 \eta \left[\left(\mathbf{n}_{\xi} \frac{\partial \mathbf{V}^{(l,f)}}{\partial n_{\xi}} \right) + \left(\mathbf{n} \frac{\partial \mathbf{V}^{(l-1,f)}}{\partial n} \right) \right] - (p^{(l-1,f)} - p^{(l-1,p)}) \right\} = 0 \\ q^{(f)} - q^{(p)} = - \sum_{l \geq 0} \varepsilon^{l-1} \left[\lambda_f \left(\frac{\partial T^{(l,f)}}{\partial n_{\xi}} + \frac{\partial T^{(l-1,f)}}{\partial n} \right) - \lambda_p \left(\frac{\partial T^{(l,p)}}{\partial n_{\xi}} + \frac{\partial T^{(l-1,p)}}{\partial n} \right) \right] = 0; \\ T^{(f)} - T^{(p)} = \sum_{l=0}^{\infty} \varepsilon^{l-1} (T^{(l-1,f)} - T^{(l-1,p)}) = 0,$$

где $\mathbf{n}_{\xi}$ и $\mathbf{n}$ – вектор-строки.

Неизвестные функции $\mathbf{V}^{(l)}(x, \xi)$, $p^{(l)}(x, \xi)$ и $T^{(l)}(x, \xi)$ определяются согласно методике асимптотического усреднения [1] из условия независимости членов полученных асимптотических рядов от быстрых переменных и равенства нулю членов, соответствующих отрицательным степеням ε , а именно

$$\eta \nabla_{\xi}^2 \mathbf{V}^{(l)} - \alpha \mathbf{V}^{(l)} - \nabla_{\xi} p^{(l-1)} + 2 \eta (\nabla_{\xi}, \nabla) \mathbf{V}^{(l-1)} - \quad (2.5)$$

$$- \nabla p^{(l-2)} + \eta \nabla^2 \mathbf{V}^{(l-2)} = \mathbf{H}^{(l)}(x), \quad \mathbf{H}^{(0)} = \mathbf{H}^{(1)} \equiv 0,$$

$$\operatorname{div}_{\xi} \mathbf{V}^{(l)} + \operatorname{div} \mathbf{V}^{(l-1)} = h^{(l)}(x), \quad h^{(0)} \equiv 0, \quad (2.6)$$

$$\lambda \nabla_{\xi}^2 T^{(l)} + 2 \lambda (\nabla_{\xi}, \nabla) T^{(l-1)} - \rho c (\mathbf{V}^{(0)}, \nabla_{\xi}) T^{(l-1)} + \lambda \nabla^2 T^{(l-2)} - \rho c \frac{\partial T^{(l-2)}}{\partial t} -$$

$$- \rho c \sum_{p=0}^{l-2} [(\mathbf{V}^{(l-p-1)}, \nabla_{\xi}) + (\mathbf{V}^{(l-p-2)}, \nabla)] T^{(p)} = W^{(l)}(x, t), \quad W^{(0)} = W^{(1)} \equiv 0. \quad (2.7)$$

Анализ уравнений (2.5), (2.6) с учётом граничных условий (1.3)-(1.5) приводит к следующему заключению о структуре функций $\mathbf{V}^{(l)}(x, \xi)$, $p^{(l)}(x, \xi)$ и $T^{(l)}(x, \xi)$ в асимптотических разложениях (2.1)-(2.3)

$$\mathbf{V}^{(l)}(x, \xi) = - \sum_{i_1, i_2, \dots, i_{l-2}} N_{i_1, i_2, \dots, i_{l-2}}^{(1)}(\xi) D_{i_1, i_2, \dots, i_{l-2}} (\nabla p_0(x)), \quad l \geq 2, \quad \mathbf{V}^{(0)} = \mathbf{V}^{(1)} = 0,$$

$$p^{(l)}(x, \xi) = - \sum_{i_1, i_2 \dots i_{l-1}} m_{i_1, i_2 \dots i_{l-1}}(\xi) D^{i_1, i_2 \dots i_{l-1}}(\nabla p_0(x)), \quad l \geq 1, \quad p^{(0)}(x, \xi) = p_0(x), \quad (2.8)$$

$$T^{(l)}(x, \xi) = \sum_{i_1, i_2 \dots i_l} N_{i_1, i_2 \dots i_l}^{(2)}(\xi) D^{i_1, i_2 \dots i_l} T_0(x) + F^{(l)}(\xi, T_0, \nabla p_0), \quad l \geq 1, \quad (2.9)$$

$$T^{(0)}(x, \xi) = T_0(x), \quad F^{(l)} = 0, \quad l \leq 2. \quad (2.10)$$

Здесь $N_{i_1, i_2 \dots i_l}^{(1)}(\xi)$ – матрицы-функции, $m_{i_1, i_2 \dots i_l}(\xi)$ – вектор-строки, $N_{i_1, i_2 \dots i_l}^{(2)}(\xi)$ – просто функции быстрых переменных, $p_0(x)$, $T_0(x)$ – скалярные функции медленных переменных, $F^{(l)}(\xi, T_0, \nabla p_0)$ – поправка к температуре; пределы изменения индексов: $0 \leq i_l \leq 3$; $D^{i_1, i_2 \dots i_l} = D^{i_1} D^{i_2} \dots D^{i_l}$, $D^0 f(x) = f(x)$. Процедура асимптотического усреднения позволяет получить рекуррентную цепочку уравнений для определения всех функций быстрых переменных $N_{i_1, i_2 \dots i_l}^{(1)}(\xi)$, $m_{i_1, i_2 \dots i_l}(\xi)$, $N_{i_1, i_2 \dots i_l}^{(2)}(\xi)$, $F^{(l)}(\xi, T_0, \nabla p_0)$ и сформулировать усредненное уравнение для функций $p_0(x)$ и $T_0(x)$.

Матрица-функция $N^{(1)}(\xi)$ и вектор-функция $m(\xi)$ – главные члены разложений (2.1), (2.2), (2.8), (2.9) – определяются следующими уравнениями в предположении, что $H^{(2)}(x) = h^{(2)}(x) = 0$

$$\eta \nabla_{\xi}^2 N^{(1, f)}(\xi) - \alpha N^{(1, f)}(\xi) - \nabla_{\xi} m^{(f)}(\xi) + E = 0, \quad \xi \in B_f, \quad (2.12)$$

$$\operatorname{div}_{\xi} N^{(1, f)}(\xi) = 0, \quad (2.13)$$

$$-\frac{\eta}{k} N^{(1, p)}(\xi) - \nabla_{\xi} m^{(p)}(\xi) + E = 0, \quad \xi \in B_p, \quad (2.14)$$

$$\operatorname{div}_{\xi} N^{(1, p)}(\xi) = 0, \quad (2.15)$$

$$m(\xi) = m^{(f, p)}(\xi), \quad N^{(1)}(\xi) = N^{(1, f, p)}(\xi), \quad \xi \in B_{f, p}, \quad \langle m \rangle = 0. \quad (2.16)$$

Здесь $\langle m \rangle$ означает среднее значение по объему представительной ячейки (среднее по периоду)

$$\langle m(\xi) \rangle = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 m(\xi) d\xi. \quad (2.17)$$

На поверхности $\Sigma^{(2)}$ между двумя фазами течения из условий сопряжения (1.4), (1.5) получаем граничные уравнения следующего вида

$$n_{\xi} N^{(1, f)}(\xi) = 0, \quad p_s(N^{(1, f)}) + \frac{\beta \eta}{\sqrt{k}} (N^{(1, f)} - N^{(1, p)}) = 0, \quad (2.18)$$

$$2\eta \frac{\partial (e_i N^{(1, f)})}{\partial n_{\xi}} n_i - m^{(f)} + m^{(p)} = 0, \quad (2.19)$$

где $p_s(N)$ и $p(N, m)$ – матрицы, e_i – единичный орт i -й оси (вектор-строка),

$$p_s(N) = p(N, m) - n_{\xi} p(N, m) n_{\xi}^T,$$

$$p(N, m) = \left[\eta \left(\frac{\partial(\mathbf{e}_i N)}{\partial \xi_k} + \frac{\partial(\mathbf{e}_k N)}{\partial \xi_i} \right) n_k - m n_i \right] \mathbf{e}_i^T.$$

Для набора вектор-столбцов матрицы $N^{(1,f)}(\xi)$ граничные условия (2.18), (2.19) представляют собой граничные условия скользящего контакта с твердой стенкой, при котором касательные вязкие напряжения пропорциональны разности касательных скоростей в двух фазах течения, т.е. – граничные уравнения Биверса-Джозефа (1.4), (1.5) для функций быстрых переменных.

Функции быстрых переменных $N_i^{(2)}(\xi)$, входящие в члены первого порядка разложений (2.3), (2.10), (2.11), определяются следующими уравнениями на ячейке периодичности с контактными условиями на поверхности включения $\Sigma^{(1)}$ и межфазного слоя $\Sigma^{(2)}$

$$\nabla_\xi^2 N_i^{(2)}(\xi) = 0, \quad \xi \in B_0 \cup B_p \cup B_f, \quad \langle N_i^{(2)} \rangle = 0; \quad (2.20)$$

$$\left[N_i^{(2)}(\xi) \right] = \left[\lambda \frac{\partial(N_i^{(2)} + \xi_i)}{\partial n_\xi} \right] = 0, \quad \xi \in \Sigma^{(1)} \cup \Sigma^{(2)}. \quad (2.21)$$

Функции $N^{(1)}(\xi)$, $m(\xi)$ и $N_i^{(2)}(\xi)$ являются периодическими, а уравнения (2.12), (2.14) и контактные условия (2.21) – неоднородными. Мы можем рассматривать задачу на ячейке как однородную задачу с однородными контактными условиями, если вместо функций $m(\xi)$ и $N_i^{(2)}(\xi)$ перейдем к функциям $m(\xi) + \xi_l \mathbf{e}_l$ и $N_i^{(2)} + \xi_i$; эти функции отвечают условиям периодического скачка на границе ячейки и удовлетворяют однородным уравнениям.

Условие нормировки (2.16), (2.20) обеспечивает нормировку асимптотических разложений (2.2), (2.3), имеющую физический смысл среднего давления и средней температуры по объему представительной ячейки:

$$p_0(x) = \langle \hat{p}(x, \xi) \rangle, \quad T_0(x) = \langle \hat{T}(x, \xi) \rangle. \quad (2.22)$$

Отметим, что условие $\langle m_{i_1, i_2, \dots, i_l}(\xi) \rangle = 0$, $\langle N_{i_1, i_2, \dots, i_l}^{(2)}(\xi) \rangle = 0$ может быть выполнено для всех членов асимптотического ряда (2.3), (2.8), поэтому неизвестные средние по периоду функции $p_0(x)$ и $T_0(x)$ всегда имеют физический смысл средних давления и температуры.

Уравнение для $T_0(x)$ получаем из условия разрешимости задач для функций второго порядка; формальное усреднение (2.7) при $l=2$ дает нам форму представления $W^{(2)}(x, t)$, которая приравнивается нулю, чтобы обеспечить асимптотику для уравнения теплопроводности:

$$W^{(2)}(x, t) = \left\langle \lambda \frac{\partial(N_i^{(2)} + \xi_i)}{\partial \xi_i} \right\rangle \frac{\partial^2 T_0}{\partial x_{i_1} \partial x_{i_2}} - \langle \rho c \rangle \frac{\partial T_0}{\partial t} = 0. \quad (2.23)$$

Коэффициенты при вторых производных имеют физический смысл эффективного тензора теплопроводности рассматриваемого материала:

$$\hat{\lambda}_{i_1 i_2} = \left\langle \lambda(\xi) \frac{\partial (N_{i_1}^{(2)}(\xi) + \xi_{i_1})}{\partial \xi_{i_1}} \right\rangle. \quad (2.24)$$

Форма представления решения (2.1), (2.8) имеет вид закона фильтрации Дарси [6] для функции средней скорости $V_0(x)$ по объёму представительной ячейки:

$$V_0(x) = \langle \hat{V}(x, \xi) \rangle, \quad V_0(x) = -B \nabla p_0(x), \quad B = \varepsilon^2 \langle N(\xi) \rangle. \quad (2.25)$$

Таким образом, для средней скорости получаем в рассматриваемом случае уравнение (2.25). Здесь матрица $K = \eta B$ является эффективным тензором проницаемости в усреднённой гомогенной среде; она имеет порядок ε^2 и вычисляется на основе решения задачи (2.12)-(2.15), (2.18), (2.19).

Уравнение для среднего давления $p_0(x)$ получаем формально из рассмотрения функций $V^{(3)}(x, \xi)$ и $p^{(3)}(x, \xi)$ в асимптотическом разложении. Из условий разрешимости уравнений (2.5), (2.6) при $l=3$ получаем выражение для функции $h^{(3)}(x) = \operatorname{div} V_0(x)$, которое приравниваем нулю для выполнения асимптотики условия несжимаемости. Отсюда получаем усреднённое уравнение для давления:

$$\operatorname{div}(-B \nabla p_0(x)) = 0. \quad (2.26)$$

Заметим, что фильтрующий слой B_p в нашей структурной модели играет роль скользящей и теплоизолирующей/теплопроводящей прокладки, усиливающей фильтрационное течение и оказывающей заметное влияние на эффективные характеристики теплопроводящей среды.

3. АППРОКСИМИРУЮЩАЯ СИСТЕМА ФУНКЦИЙ ДЛЯ ЗАДАЧИ НА ЯЧЕЙКЕ СО СФЕРИЧЕСКИМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ

Предложенный метод асимптотического усреднения уравнений конвективного теплопереноса основывается на решении рекуррентной последовательности задач на ячейке периодичности. Эти задачи формулируются в быстрых переменных и представляют собой полноценное описание течения жидкости и распространения тепла на микроуровне – в окрестности одного периодически распространяемого включения. Первая среди последовательности этих задач является самой главной, поскольку она определяет функции, необходимые для вычисления эффективных теплофизических характеристик пористой среды, а также определяет главный член асимптотики в распределении температуры, давления и скорости течения с учетом поведения на микроуровне. Эта задача была сформулирована явно в п.2, см. (2.12)-(2.21).

В случае течения жидкости в пористой среде, составленной из дисперсных частиц сферической, цилиндрической или сфероидальной формы, задача на ячейке периодичности не имеет простого решения. Для нее разрабатывается специальный аналитико-численный метод [7,8] на основе аппроксимации решения с помощью вспомогательных потенциалов и базисных функций, аналитически учитывающих геометрическую форму включений.

Общее решение уравнения Бринкмана (1.1), (2.12), (2.14) представляем через вспомогательные векторные потенциалы, удовлетворяющие уравнению Гельмгольца и Лапласа

$$V(P) = \frac{f(P)}{\eta} + \frac{\nabla \operatorname{div}(f^* - f)}{\alpha}, \quad p = -\operatorname{div} f(P), \quad \nabla^2 f - \frac{\alpha}{\eta} f = 0, \quad \nabla^2 f^* = 0, \quad (3.1)$$

где P – точка в пространстве, f – векторный гельмгольцевский потенциал, f^* – векторный гармонический потенциал. Это представление является удобным для построения решений, потому что условие несжимаемости (1.9) выполняется автоматически формой представления скорости, и оно описывает течение в обеих фазах течения V_p и V_f в единой форме.

При устремлении $\alpha \rightarrow 0$ представление (3.1) переходит в несколько иную форму для общего решения уравнения Стокса

$$V(P) = \frac{f(P)}{\eta} + \frac{\nabla(\phi - r f)}{2\eta}, \quad p = -\operatorname{div} f(P), \quad \nabla^2 f(P) = 0, \quad \nabla^2 \phi(P) = 0, \quad (3.2)$$

где r – радиус-вектор из начала координат в точку P , f – векторный гармонический потенциал, ϕ – скалярный гармонический потенциал.

Для фильтрационного течения в области V_p уравнение (1.2) само по себе является формой представления (3.2), поскольку в области фильтрации давление удовлетворяет уравнению Лапласа, и тем самым, следующим образом выражается через скалярный потенциал ϕ

$$p^{(p)} = -\frac{\phi(P)}{2k}. \quad (3.3)$$

Таким образом, решение уравнений (2.12) – (2.16) сводится к нахождению вспомогательных гармонических потенциалов f , f^* и ϕ в области течения. Для уравнений (2.20) не требуется вводить вспомогательных потенциалов, поскольку решения этого уравнения сами по себе являются гармоническими функциями.

На основе представлений (3.1), (3.2) в настоящей работе для включений сферической, цилиндрической и сфероидальной формы строится специальная система функций для аппроксимации потенциалов в решении задачи (2.12)-(2.21), удовлетворяющая условиям полноты, и тем самым подходящая для аппроксимации функций быстрых переменных $N^{(1)}(\xi)$, $m(\xi) + \xi_l e_l$ и $N_i^{(2)}(\xi) + \xi_{i_l}$ в решении задачи на ячейке периодичности.

Построение необходимых аппроксимирующих функций основывается на системе однородных гармонических полиномов $\Phi_n^m(P)$, построенных с помощью полиномиального продолжения комплекснозначной функции $\psi_0(w) = w^m$ во все пространство [13]

$$\Phi_n^m(P) = \sum_p \frac{(-1)^p \bar{w}^p}{4^p p!} \psi_0^{(-p)}(w) U_0^{(2p)}(z), \quad \psi_0(w) = w^m, \quad U_0(z) = z^{n-m}. \quad (3.4)$$

Здесь n – степень однородного гармонического полинома, m – “угловая” степень осцилляций по координате $\varphi = \arctan(y/x)$. Общее число вещественных степеней свободы в (3.4) при фиксированном n равно $(n+1)^2$.

Система функций $\{\Phi_n^m(P)\}$, $m \leq n$ образует полную систему функций для аппроксимации регулярной гармонической функции. Наряду с системой (3.4) определяются с помощью радиальных множителей дополнительные системы

сингулярных гармонических $\{\hat{\Phi}_n^m(P)\}$ и гельмгольцевских $\{\hat{\Phi}_n^{*(\pm)m}(P)\}$ базисных функций для аппроксимации потенциалов f , f^* , ϕ и непосредственно гармонических функций $N_{i_1}^{(2)}$

$$\hat{\Phi}_n^m(P) = r^{-2n-1} \Phi_n^m(P), \quad r^{-2n-1} = A_n \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right)^{(n)} \left(\frac{1}{r} \right), \quad (3.5)$$

$$\hat{\Phi}_n^{*(\pm)m}(P) = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right)^{(n)} \left(\frac{e^{\pm \kappa r}}{r} \right) \Phi_n^m(P), \quad \kappa = \sqrt{\frac{\alpha}{\eta}}. \quad (3.6)$$

Форма представления базисных функций (3.4)-(3.6) отвечает необходимому требованию гармоничности или гельмгольцевости в (3.1)-(3.3). Непосредственно проверяется, что любая комбинация вида

$$\hat{\Phi}_n^*(P) = H_n(r) \Phi_n(P), \quad H_n(r) = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right)^{(n)} \left(\frac{A e^{\kappa r} + B e^{-\kappa r}}{r} \right),$$

где $\Phi_n(P)$ – однородный гармонический полином степени n , удовлетворяет уравнению Гельмгольца или Лапласа (как частный случай при $\kappa = 0$)

$$\begin{aligned} \nabla^2 \hat{\Phi}_n^*(P) - \kappa^2 \hat{\Phi}_n^*(P) &= \nabla^2 H_n \Phi_n + 2 H_n' \frac{\partial \Phi_n}{\partial r} + H_n \nabla^2 \Phi_n - \kappa^2 H_n \Phi_n = \\ &= \nabla^2 H_n \Phi_n + 2 H_n' \frac{n}{r} \Phi_n - \kappa^2 H_n \Phi_n = \left(H_n'' + \frac{2(n+1)}{r} H_n' - \kappa^2 H_n \right) \Phi_n(P) = 0. \end{aligned}$$

Таким образом, функции (3.4)-(3.6) удовлетворяют всем необходимым условиям, чтобы представлять поле скоростей, давлений и температур в нашей задаче.

4. АППРОКСИМИРУЮЩАЯ СИСТЕМА ФУНКЦИЙ ДЛЯ ЗАДАЧИ НА ЯЧЕЙКЕ С ЦИЛИНДРИЧЕСКИМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ

В случае включений цилиндрической формы аппроксимирующая система функций строится при помощи ряда (см. [7]), обобщающего представление (3.4) для уравнения Гельмгольца

$$\hat{\Phi}_n^{*m}(P) = \sum_p \frac{(-1)^p \bar{w}^p}{4^p p!} \psi_0^{(-p)}(w) \left(\frac{d^2}{d z^2} - \kappa^2 \right)^{(p)} U_0(z), \quad \psi_0(w) = w^m, \quad U_0(z) = z^{n-m}. \quad (4.1)$$

Для пористых сред с частицами цилиндрической формы практически важен класс функций, в котором $\psi_0 = w^m$, $m \geq 0$, в этом случае ряд (4.1) может быть преобразован и выражен через модифицированные функции Бесселя первого рода, где $(m+1)_p$ обозначает символ Похгаммера [9]

$$\hat{\Phi}_n^{*(+m)}(P) = \sum_p \phi_p^{(m)}(w, \bar{w}) \frac{d^{2p}}{d z^{2p}} (z^{n-m}), \quad (4.2)$$

$$\phi_p^{(m)}(w, \bar{w}) = \frac{m!}{(\kappa/2)^{m/2}} \frac{(-1)^p w^{p+m/2} \bar{w}^{p-m/2}}{4^p p! (m+1)_p} I_{m+p}(\kappa r), \quad r = \sqrt{w \bar{w}}. \quad (4.3)$$

Вторую линейно-независимую систему функций $\{\hat{\Phi}_n^{*(-)m}\}$ для аппроксимации решений уравнения Гельмгольца в слое и во внешности включения, получаем при

отрицательном показателе степенной функции. Эту систему функций, соответствующую модифицированным функциям Макдональда $K_m(\kappa r)$, лучше всего вычислять непосредственно при помощи ряда (4.1)

$$\hat{\Phi}_n^{*(-)m}(P) = \sum_p \frac{(-1)^p \bar{w}^p}{4^p p!} \chi_p^{(m)}(w, \bar{w}) \left(\frac{d^2}{d z^2} - \kappa^2 \right)^{(p)} z^{n-m}, \quad \chi_p^{(0)} = \frac{w^p}{p!} (\ln w + \ln \bar{w} - 2h_p),$$

$$\chi_p^{(m)}(w, \bar{w}) = \frac{w^{-m+p}}{(-m+1)_p}, \quad p < m, \quad \chi_p^{(m)}(w, \bar{w}) = \frac{w^{-m+p} (\ln w + \ln \bar{w} - h_p - h_{p-m})}{(-m+1)_{m-1} (p-m)!}, \quad p \geq m,$$

где $h_m = \sum_{k=1}^m 1/k$. Вспомогательные величины $U_p^{(n)} = \left(d^2/d z^2 - \kappa^2 \right)^{(p)} z^n$, входящие в определение $\hat{\Phi}_n^{*(\pm)m}$ алгоритмически вычисляются по рекуррентному правилу: $U_p^{(n)} = z U_p^{(n-1)} + 2p(n-1) U_p^{(n-2)}$, $U_p^{(0)} = -\kappa^2 U_{p-1}^{(0)}$, $U_0^{(0)} = 1$.

Гармонические системы функций $\{\Phi_n^m(P)\}$ и $\{\hat{\Phi}_n^m(P)\}$ для аппроксимации решений уравнения Лапласа получаем при $\kappa = 0$. Для плоского течения поперек цилиндрических волокон аппроксимирующая система функций является подсистемой (4.1) при $n = m$:

$$\hat{\Phi}_m^{*(+)m}(P) = \frac{m!}{(\kappa/2)^{m/2}} I_m(\kappa r) e^{im\varphi}, \quad \hat{\Phi}_m^{*(-)m}(P) = \sum_p \frac{\bar{w}^p \kappa^{2p} \chi_p^{(m)}(w, \bar{w})}{4^p p!},$$

$$\Phi_m^m(P) = w^m, \quad \hat{\Phi}_m^m(P) = w^{-m}, \quad m > 0, \quad \hat{\Phi}_0^0(P) = 2 \ln r.$$

5. АППРОКСИМИРУЮЩАЯ СИСТЕМА ФУНКЦИЙ ДЛЯ ЗАДАЧИ НА ЯЧЕЙКЕ СО СФЕРОИДАЛЬНЫМ ВКЛЮЧЕНИЕМ (ТЕЧЕНИЕ СТОКСА)

Рассмотрим случай, когда задача полностью описывается гармоническими потенциалами, и включения имеют вытянутую сфероидальную форму, т.е. рассматривается конвективный теплообмен с течением по закону Стокса.

Сфероидальная система координат (вытянутые сфероиды) определяется при помощи вспомогательного конформного отображения $z + ir = \text{ch}(\alpha + i\beta)$, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, где переменные α и β определяют координатные линии – систему софокусных эллипсов и гипербол. Причем функция $\hat{r} = r \text{cth} \alpha$ определяет отображение системы софокусных эллипсов и гипербол на систему концентрических окружностей и прямых (см. рис.3), а отношение полуосей сфероиды, соответствующего координатной линии $\alpha = \text{const}$, определяется формулой $\delta = \text{th} \alpha$.

Связь между декартовыми координатами x, y, z и сфероидальными координатами α, β устанавливается на основе решения квадратного уравнения:

$$\frac{x^2 + y^2}{\delta^2} + z^2 = \frac{1}{1 - \delta^2}, \quad \delta = \text{th} \alpha, \quad \cos \beta = \frac{z}{\text{ch} \alpha}.$$

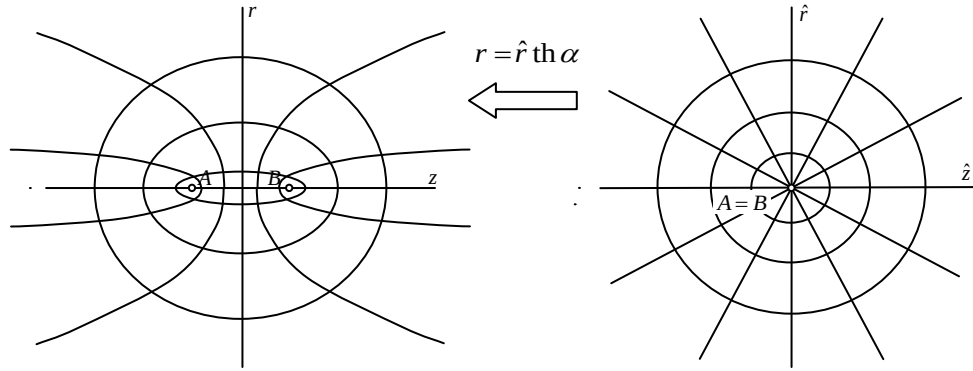


Рис.3. Сфероидальная система координат.

Аппроксимирующая система функций в этом случае строится при помощи гармонических полиномов и радиальных функций $\chi_n^m(\text{ch } \alpha)$, зависящих от параметра α сфероидальной системы координат.

Разделение переменных (α, β, φ) для уравнения Лапласа приводит к общему решению следующего вида

$$\Phi(\alpha, \beta, \varphi) = u_1(\text{ch } \alpha) u_2(\cos \beta) e^{im\varphi}, \quad (5.1)$$

где функции $u_{1,2}(\zeta)$ являются решениями дифференциального уравнения Лежандра [9] с параметрами разделения переменных n и m

$$(1 - \zeta^2)u''(\zeta) - 2\zeta u'(\zeta) + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{1 - \zeta^2} \right] u(\zeta) = 0. \quad (5.2)$$

Покажем, что среди множества решений (5.1), (5.2) имеются решения в виде гармонического полинома в исходной системе координат. Для этого определим последовательность решений $P_n^m(\zeta)$ уравнения (5.2) с целочисленными параметрами $n \geq 0$ и $m \leq n$ по рекуррентным формулам

$$P_n^m(\zeta) = \frac{(2n-1)\zeta P_{n-1}^m - (n-m-1)P_{n-2}^m}{n+m}, \quad P_m^m(\zeta) = \sqrt{1-\zeta^2} P_{m-1}^{m-1}, \quad P_0^0(\zeta) = 1;$$

и составим функцию разделения переменных в виде (5.1) с нормирующим множителем

$$\Phi_n^m(\alpha, \beta, \varphi) = (-i)^m P_n^m(\text{ch } \alpha) P_n^m(\cos \beta) e^{im\varphi}. \quad (5.3)$$

В переменных (x, y, z) функция (5.3) имеет вид комплекснозначного гармонического полинома.

Таким образом, среди фундаментальных решений уравнения Лапласа в сфероидальной системе координат имеется решение в виде обычного гармонического полинома исходной системы координат. Это решение имеет вид (5.3), $\Phi_n^m(\alpha, \beta, \varphi) = P_n^m(x, y, z)$, и может быть положено в основу для получения второго линейно-независимого решения (5.1).

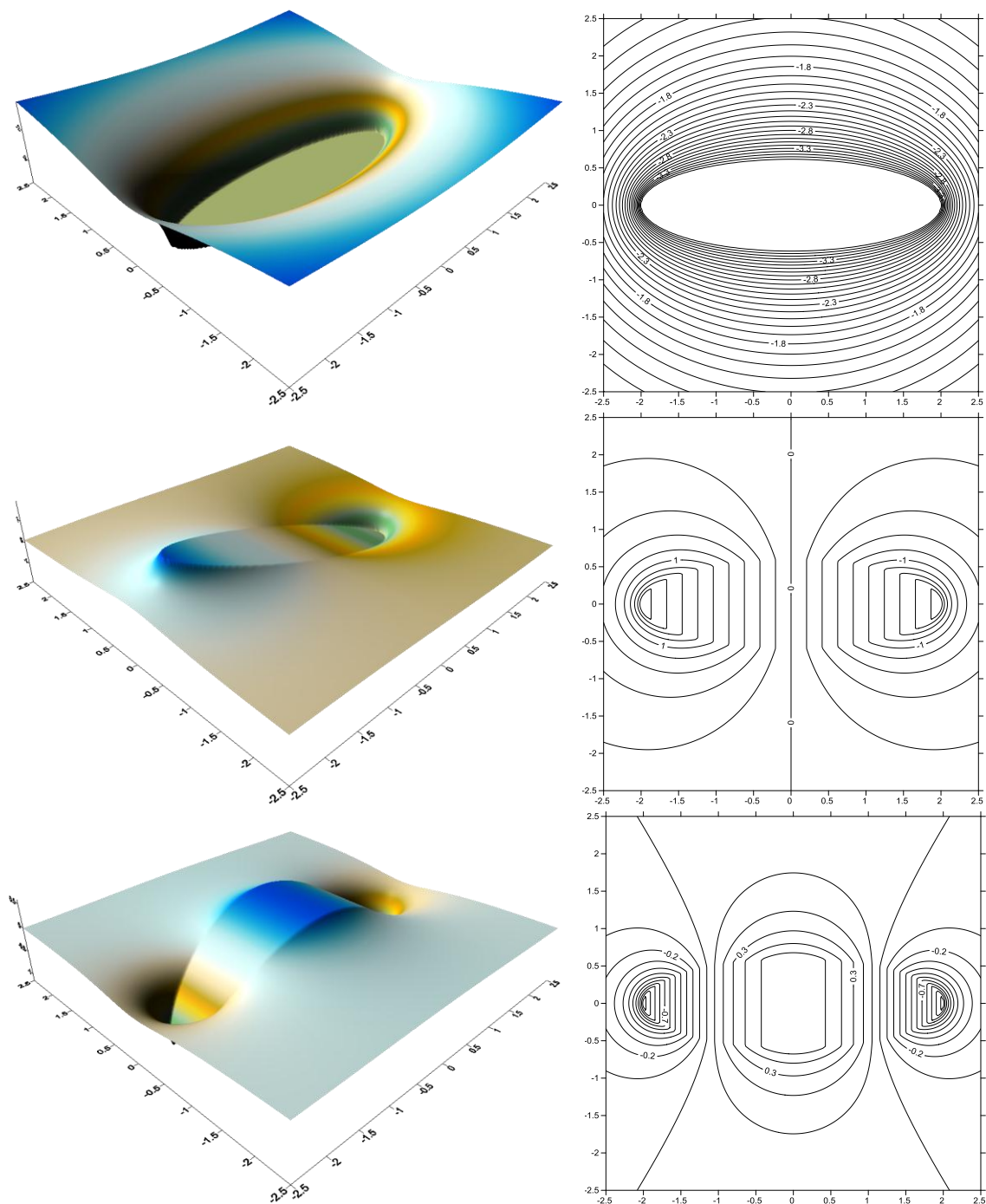


Рис.4. Базисная система функций в сферической системе координат.

Оно строится с помощью второго линейно-независимого решения уравнения Лежандра (5.2), называемого функциями Лежандра второго рода $Q_n^m(\zeta)$

$$\hat{\Phi}_n^m(\alpha, \beta, \varphi) = \chi_n^m(\text{ch } \alpha) P_n^m(x, y, z), \quad \chi_n^m(\zeta) = \frac{Q_n^m(\zeta)}{\hat{P}_n^m(\zeta)}, \quad \zeta = \text{ch } \alpha. \quad (5.4)$$

Функции $\hat{P}_n^m(\zeta)$ и $Q_n^m(\zeta)$, определяющие множители $\chi_n^m(\zeta)$, вычисляются по рекуррентным формулам

$$\hat{P}_n^m(\zeta) = \frac{(2n-1)\zeta \hat{P}_{n-1}^m - (n-m-1)\hat{P}_{n-2}^m}{n+m}, \quad \hat{P}_m^m(\zeta) = \sqrt{\zeta^2 - 1} \hat{P}_{m-1}^{m-1}(\zeta), \quad \hat{P}_0^0(\zeta) = 1,$$

$$Q_n^m(\zeta) = \frac{(2n-1)\zeta Q_{n-1}^m - (n-m-1)Q_{n-2}^m}{n+m}, \quad n \neq m, \quad n \neq m+1, \quad Q_0^0(\zeta) = \ln\left(\frac{\zeta-1}{\zeta+1}\right),$$

$$Q_{m+1}^m(\zeta) = \frac{(\zeta^2-1)Q_m^{m'} + (m+1)\zeta Q_m^m}{2m+1}, \quad Q_m^m(\zeta) = \sqrt{\zeta^2-1} Q_m^{m-1'} - (m-1) \frac{\zeta}{\sqrt{\zeta^2-1}} Q_m^{m-1}.$$

На рис.4 приведён вид функций $\hat{\Phi}_0^0$, $\hat{\Phi}_1^0$, $\hat{\Phi}_2^0$ в среднем сечении $\{y=0\}$ для сфероида с соотношением полуосей $b/a = 0.3$.

6. АППРОКСИМАЦИЯ ВКЛЮЧЕНИЙ ПРОИЗВОЛЬНОЙ ФОРМЫ

Построенные в п.п. 3-5 системы специальных функций используется для аппроксимации решений задачи на ячейке (2.12)-(2.21), а также для решения усредненного уравнения (2.23), (2.26) для среднего давления и температуры. Аналитическая форма представления решения позволяет с высокой точностью получить распределение скоростей, давлений и температур на микроуровне, а также вычислить эффективные характеристики пористой среды в случае включений сферической, цилиндрической и сфероидальной формы.

Для аппроксимации используется блочный вариант метода наименьших квадратов. Для этого область разбивается на блоки в соответствии с фазами течения V_0 , V_1 , V_2 , т.е. рассматривается трехфазная модель конвективного теплообмена. При решении задачи на ячейке температура $\Phi(P)$ и вспомогательные потенциалы f , f^* , ϕ из представлений (3.1), (3.2), удовлетворяющие уравнению Лапласа и Гельмгольца, представляются в виде суперпозиции базисных систем функций $\{\Phi_n^m\}$, $\{\hat{\Phi}_n^m\}$, $\{\hat{\Phi}_n^{*(\pm)m}\}$, построенных в предыдущих пунктах.

Аппроксимация условий периодичности для $V(P)$ и условий периодического скачка для давлений $p(P)$ на границе ячейки периодичности, а также сшивка скоростей и давлений на границе между фазами течения осуществляется с помощью функционала метода наименьших квадратов

$$F_1(V, p) = \|V_n^{(p)}\|_{L_2(\Sigma^{(1)})}^2 + \|V_n^{(p)} - V_n^{(f)}\|_{L_2(\Sigma^{(2)})}^2 + \|p^{(p)} + p_n(V^{(f)})\|_{L_2(\Sigma^{(2)})}^2 \rightarrow \min,$$

$$F_2 = \sum_l \left(\|V(P + e_l) - V\|_{L_2(S_l)}^2 + \left\| \frac{\partial}{\partial n} (V(P + e_l) - V) \right\|_{L_2(S_l)}^2 + \|p(P + e_l) - p + \xi_j\|_{L_2(S_l)}^2 \right) +$$

$$+ \|V_n^{(f)} - V_n^{(p)}\|_{L_2(\Sigma^{(2)})}^2 + \|p_n(V^{(f)}) + p^{(p)}\|_{L_2(\Sigma^{(2)})}^2 + \left\| p_s(V^{(f)}) + \frac{\beta \eta}{\sqrt{k}} (V_s^{(f)} - V_s^{(p)}) \right\|_{L_2(\Sigma^{(2)})}^2 \rightarrow \min.$$

Одновременная минимизация $F_1(V, p)$ и $F_2(V, p)$ позволяет выполнить (с некоторой точностью) краевые условия (2.18), (2.19) и условия периодического скачка для функций быстрых переменных $N^{(1)}(\xi)$ и $m(\xi) + \xi_l e_l$. Удовлетворение уравнениям (2.12)-(2.15) обеспечивается формой представления (3.1)-(3.3) квазискоростей и квазидавлений на ячейке (вектор-столбцов матрицы $N^{(1)}$ и элементов $m_j + \xi_j$).

Аналогичным образом записывается функционал для определения квазitemпературы $\Phi(P)$ в ячейке периодичности (т.е. элементов $N_j^{(2)} + \xi_j$)

$$\begin{aligned}
 F_0(\Phi) &= \|\Phi^{(0)} - \Phi^{(p)}\|_{L_2(\Sigma^{(1)})}^2 + \|q^{(0)} - q^{(p)}\|_{L_2(\Sigma^{(1)})}^2 \rightarrow \min, \\
 F_1(\Phi) &= \|\Phi^{(0)} - \Phi^{(p)}\|_{L_2(\Sigma^{(2)})}^2 + \|q^{(0)} - q^{(p)}\|_{L_2(\Sigma^{(2)})}^2 + \\
 &\quad + \|\Phi^{(p)} - \Phi^{(f)}\|_{L_2(\Sigma^{(2)})}^2 + \|q^{(p)} - q^{(f)}\|_{L_2(\Sigma^{(2)})}^2 \rightarrow \min, \\
 F_2(\Phi) &= \sum_l \left(\left\| \Phi^{(f)}(P + \mathbf{e}_l) - \Phi^{(f)} + \xi_j \right\|_{L_2(S_l)}^2 + \left\| \frac{\partial}{\partial n} (\Phi^{(f)}(P + \mathbf{e}_l) - \Phi^{(f)}) \right\|_{L_2(S_l)}^2 \right) + \\
 &\quad + \|\Phi^{(f)} - \Phi^{(p)}\|_{L_2(\Sigma^{(2)})}^2 + \|q^{(f)} - q^{(p)}\|_{L_2(\Sigma^{(2)})}^2 \rightarrow \min.
 \end{aligned}$$

В случае, когда геометрия границы области течения в ячейке произвольная, применяется модификация метода наименьших квадратов для произвольной системы блоков [8]. Вся область разбивается на множество конечных элементов, представляющих собой подобласти-блоки $\bar{G} = \cup \bar{B}_k$, $B_k \cap B_l = \emptyset$, $k \neq l$, рис.5.

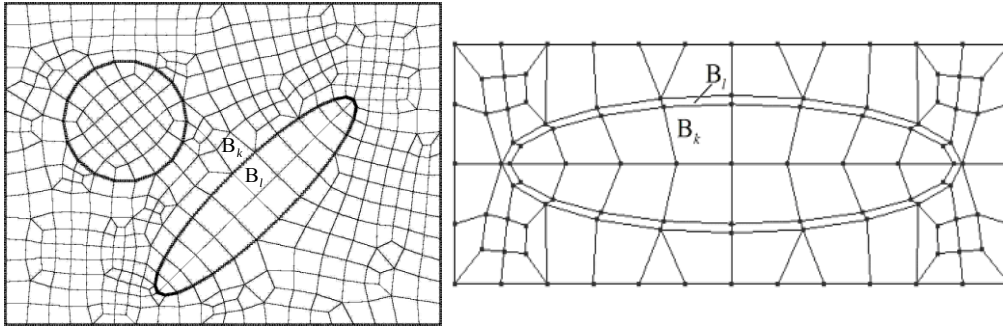


Рис.5. Разбиение ячейки периодичности на систему подобластей-блоков.

В каждом из этих элементов-блоков решение представляется набором вспомогательных потенциалов, которые приближаются рядами по системам специальных функций $\{\Phi_n^m\}$, $\{\hat{\Phi}_n^m\}$, $\{\hat{\Phi}_n^{*(\pm)m}\}$. Неизвестные коэффициенты в локальных разложениях находятся из условия минимизации функционала, обеспечивающего одновременную сшивку температур, давлений, скоростей и их нормальных производных на границах блоков, а также выполнение граничных условий на межфазных границах и условий периодичности на границе ячейки.

Минимизация функционала реализуется в этом случае в виде блочной системы линейных алгебраических уравнений для неизвестных коэффициентов, имеющей разреженную структуру и плотно заполненные матрицы-блоки.

7. ЧИСЛЕННЫЕ ПРИМЕРЫ

На основе функций первого порядка $\{\Phi_n^m\}$ и $\{\hat{\Phi}_n^m\}$ выполняется оценка эффективного модуля теплопроводности в модели четырех цилиндрических или сферических тел [10-12]

$$\hat{\lambda}_{cyl} = \lambda_M \frac{\left(c_M c_L + (2 - c_M)(2c_I + c_L) \frac{\lambda_L}{\lambda_M} \right) + \frac{\lambda_L}{\lambda_I} \left(c_M (2c_I + c_L) + (2 - c_M)c_L \frac{\lambda_L}{\lambda_M} \right)}{\left((2 - c_M)c_L + c_M (2c_I + c_L) \frac{\lambda_L}{\lambda_M} \right) + \frac{\lambda_L}{\lambda_I} \left((2 - c_M)(2c_I + c_L) + c_M c_L \frac{\lambda_L}{\lambda_M} \right)},$$

$$\hat{\lambda}_{sph} = \lambda_M \frac{\left(c_M c_L + (3 - 2c_M) \frac{3c_I + c_L}{2} \frac{\lambda_L}{\lambda_M} \right) + \frac{\lambda_L}{\lambda_I} \left(c_M (3c_I + 2c_L) + (3 - 2c_M)c_L \frac{\lambda_L}{\lambda_M} \right)}{\left(\frac{3 - c_M}{2} c_L + c_M \frac{3c_I + c_L}{2} \frac{\lambda_L}{\lambda_M} \right) + \frac{\lambda_L}{\lambda_I} \left(\frac{3 - c_M}{2} (3c_I + 2c_L) + c_M c_L \frac{\lambda_L}{\lambda_M} \right)}.$$

Здесь c_I , c_L , c_M – коэффициенты объёмного наполнения для фаз материала, $c_I + c_L + c_M = 1$; λ_I , λ_L , λ_M – соответственно модули теплопроводности для включения, межфазного слоя и матрицы. Правило смеси $\hat{\lambda} = c_I \lambda_I + c_L \lambda_L + c_M \lambda_M$ и правило смеси обратных величин $1/\hat{\lambda} = c_I/\lambda_I + c_L/\lambda_L + c_M/\lambda_M$ (правило усреднения Фойгта и Рейсса) дают соответственно оценку сверху и снизу, которые могут давать сильно расходящуюся вилку.

На основе точного решения задачи на ячейке (2.20), (2.21) блочным методом с использованием полной системы функций $\{\Phi_n^m\}$ и $\{\hat{\Phi}_n^m\}$ эффективная теплопроводность вычисляется для включений произвольной формы с учетом межфазного слоя; примеры распределения квазitemпературы на ячейке с включением приведены на рис.6 для случая $\lambda_I/\lambda_M = 20$, $\lambda_L/\lambda_M = 0.01$.

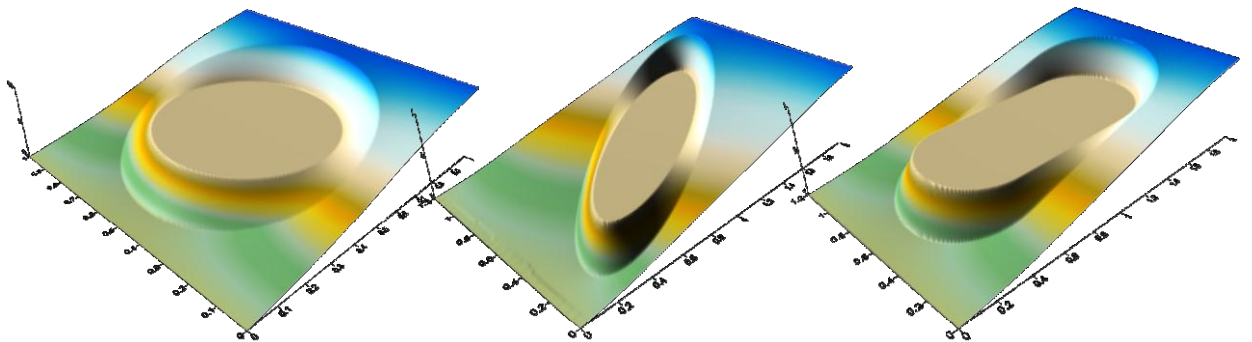


Рис.6. Распределение квазitemпературы в ячейке с включением и межфазным слоем.

Можно провести сопоставительный анализ эффективных характеристик, вычисленных разными методами; на рис.7 приведена эффективная теплопроводность для включений без межфазного слоя ($c_L = 0$) при $\lambda_I/\lambda_M = 20$, вычисленная блочным методом, по трехфазной модели и по правилу смеси. Расчет блочным методом проводился до момента полного заполнения пористого пространства включениями ($c_I = 1$), предполагалось геометрическое объединение пересекающихся включений при большой концентрации (взаимопроникающие включения).

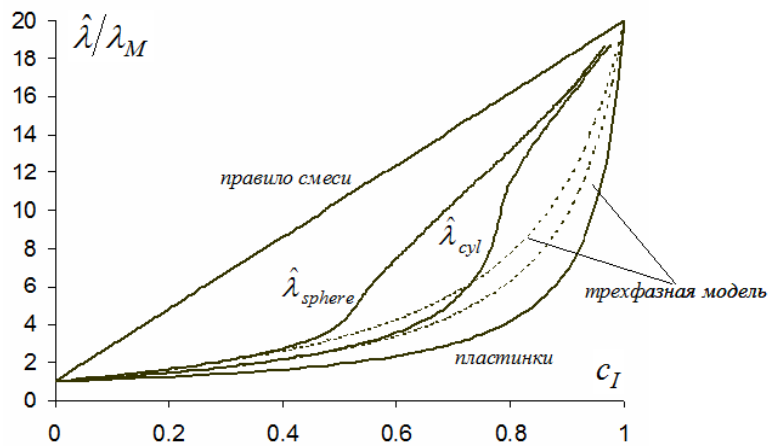


Рис.7. Эффективные теплофизические характеристики периодических структур.

И, наконец, на рис.8 приведена эффективная проницаемость в пористой структуре периодических взаимопроникающих сферических препятствий, цилиндрических каналов и трещин при различном инерционном коэффициенте в уравнении Бринкмана (соответствует уравнению Стокса); на левом рис.7а приведена зависимость эффективной проницаемости $\hat{k}$ в зависимости от пористости σ для включений и цилиндрических каналов без межфазного слоя; на правом рис.7б приведена эффективная проницаемость для цилиндрических каналов и трещин в модели течения Стокса с промежуточным слоем, выполняющим роль “смазки” (верхние графики) и с относительной долей свободного течения $c_M = 0.9$; без промежуточного слоя зависимости рассчитываются по обычным формулам $\hat{k}_{pore} = \sigma^2/(8\pi)$ и $\hat{k}_{crack} = \sigma^3/12$.

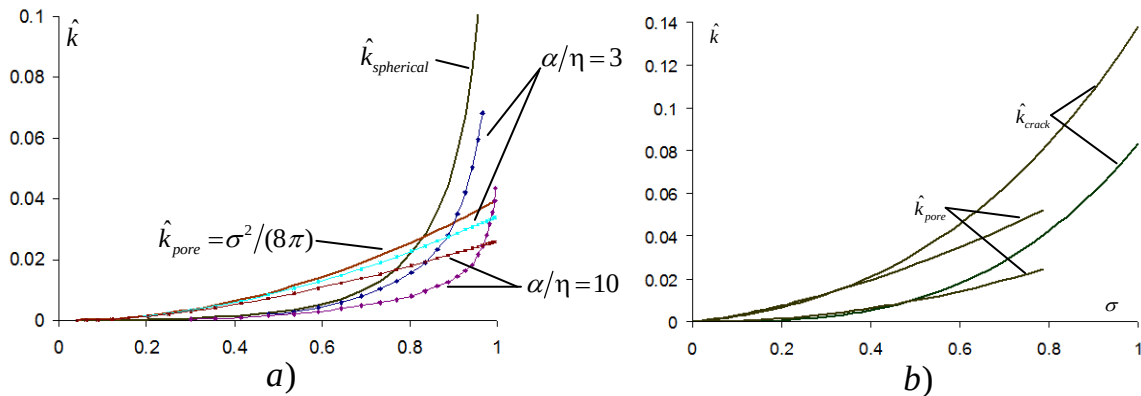


Рис.8. Эффективная проницаемость пористой среды.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлен полный асимптотический анализ конвективного теплообмена при течении вязкой несжимаемой жидкости в пористой среде, имеющей усложненную внутреннюю структуру, характеризующуюся наличием дополнительного межфазного слоя на границе частиц или каналов. Было показано, что эффективная среда характеризуется уравнением теплопроводности для средней температуры и уравнением фильтрации Дарси для среднего давления. Были сформулированы задачи на ячейке, необходимые для вычисления эффективного

тензора теплопроводности и проницаемости, и разработан аналитический метод решения этих задач в областях с включениями сферической, цилиндрической и сфероидальной формы с помощью вспомогательных потенциалов. Для включений произвольной формы разработан численно-аналитический метод, позволяющий определять глобальные (эффективные) и локальные теплофизические и фильтрационные характеристики пористой среды со сложной внутренней микроструктурой.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П. Осреднение процессов в периодических средах. – М.: Наука, 1984. – 352с.
2. Bensoussan A., Lions J.L., Papanicolaou G. Asymptotic analysis for periodic structures. – Amsterdam: North-Holland Publ. Comp., 1978. – 700 p.
3. Beavers G.S., Joseph D.D. Boundary conditions at a naturally permeable wall // J. Fluid Mech. – 1967. – Vol.30. – P.197-207.
4. Власов А.Н., Волков-Богородский Д.Б. Аналитико-численный метод усреднения уравнений фильтрации Бринкмана в пористых и трещиноватых средах / Всероссийская конференция "Механика композиционных материалов и конструкций, сложных и гетерогенных сред". Сборник трудов. – М.: ИПРИМ РАН, 2010. – С.81-97.
5. Волков-Богородский Д.Б., Власов А.Н. Асимптотическое усреднение уравнений фильтрации Бринкмана в многофазных средах с периодической структурой // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2012. – Т.18. – №1. – С.92-110.
6. Полубаинова-Кочина П.Я. Теория движения грунтовых вод. – М.: Наука, 1977. – 664 с.
7. Волков-Богородский Д.Б. Применение аналитических расчетов на основе метода блоков в связанных задачах механики сплошных сред / Всероссийская научно-практическая конференция "Инженерные системы - 2008". Сборник трудов. – М.: Изд-во РУДН, 2008. – С.123-138.
8. Волков-Богородский Д.Б. Разработка блочного аналитико-численного метода решения задач механики и акустики / Школа-семинар "Композиционные материалы". Сборник трудов. – М.: ИПРИМ РАН, 2000. – С.44-56.
9. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Т.1. – М.: Наука, 1973. – 296 с.
10. Власов А.Н., Волков-Богородский Д.Б., Талонов А.В., Саваторова В.Л. Усреднение нелинейного уравнения теплопроводности при моделировании распространения тепла в материалах со слоистой структурой / Всероссийская конференция "Механика наноструктурированных материалов и систем". Сборник трудов. – М.: ИПРИМ РАН, 2011. – Т.II. – С.77-88.
11. Саваторова В.Л., Талонов А.В., Волков-Богородский Д.Б., Власов А.Н. Математическое моделирование процесса теплопроводности в периодической среде с цилиндрическими включениями, отделенными от матрицы тонким слоем // Вестник Нижегородского университета. Серия: Математическое моделирование и оптимальное управление. – 2010. – №6. – С.168-179.
12. Кристенсен Р. Введение в механику композитов. – М.: Мир, 1982. – 334 с.

ИНТЕРЬЕРНЫЕ ГРАНИЦЫ КОМПОЗИТОВ: ПОЛИМАСШТАБНОСТЬ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВА СИЛОВЫХ ПОЛЕЙ

Гергега А. Н., Выровой В. Н.

*Одесская государственная академия строительства и архитектуры, г. Одесса,
Украина*

РЕЗЮМЕ

Предложена модель полимасштабной сети интерьерных границ композиционных материалов. В рамках модели аналитически определено силовое поле, создаваемое предфракталом Серпинского произвольного поколения и его модификацией.

Исследована стохастическая модель взаимного влияния разномасштабных неоднородностей материала, описаны возможные сценарии их взаимодействия.

Ключевые слова: интерьерные границы; полимасштабность структуры; сети границ; моделирование; итерационные соотношения; силовое поле; предфрактал Серпинского

1. ВВЕДЕНИЕ

Интерьерные границы (ИГ), как известно, является атрибутивной составляющей композиционных материалов. Включение ИГ в состав структурных параметров материала имеет несколько причин. Во-первых, материал представляет собой сложную систему, и, следовательно, должен иметь внутренние границы, существование которых является общесистемной закономерностью [1,2]. Во-вторых, образование ИГ следует рассматривать как механизм реализации одной из целевых функций системы – сохранения целостности: появление внутренних поверхностей раздела в материале, как известно, нивелирует избыточное напряжения. Кроме того, ИГ являются неизбежным следствием процессов самоорганизации физического тела, обусловлены произвольностью формы кластеров и макроскопических структурных блоков [3].

В статье описаны некоторые аспекты формирования композитов в результате взаимодействия внутренних границ различных масштабов.

2. ХАРАКТЕРНАЯ СТРУКТУРА СЕТЕЙ ИНТЕРЬЕРНЫХ ГРАНИЦ

В процессе эволюции в различных частях материала спонтанно возникают условия нарушения однородности. Ориентации линейных неоднородностей (ЛН), возникающих на ранней стадии образования материала, конечно, неслучайны, но и не скоррелированы. По мере роста их плотности в материале, в ориентации вновь формирующихся ЛН возникают преимущественные направления: поля деформаций ЛН локально активизируют генерацию параллельных им дефектов, и в наименьшей степени препятствуют росту дефектов в перпендикулярном направлении. Статистическое самоподобие в расположении границ приводит (в результате интерференции) к некой «кратности» в конфигурации полей, к возникновению в локальных областях физического тела энергетических предпосылок для образования более крупных границ. В свою очередь, поля деформаций больших границ,

воздействуя на неоднородности меньших масштабов, провоцируют их дальнейшее развитие. Это происходит синхронно во всех масштабах, и является, по сути, осцилляторным взаимодействием между разномасштабными внутренними границами [4].

Таким образом, возникает характерная пространственная закономерность (см. рис.1 из [5]) – самоаффинный мультифрактальный «узор» внутренних границ, простейшими аналогами которого на плоскости и в объёме соответственно, могут быть модифицированные фракталы типа ковра Серпинского, губки Менгера и их дополнений [6,7]. (Важно, что они с очевидностью позволяют учесть и такой существенный аспект процесса как множественность взаимодействующих очагов образования новых структурных блоков).

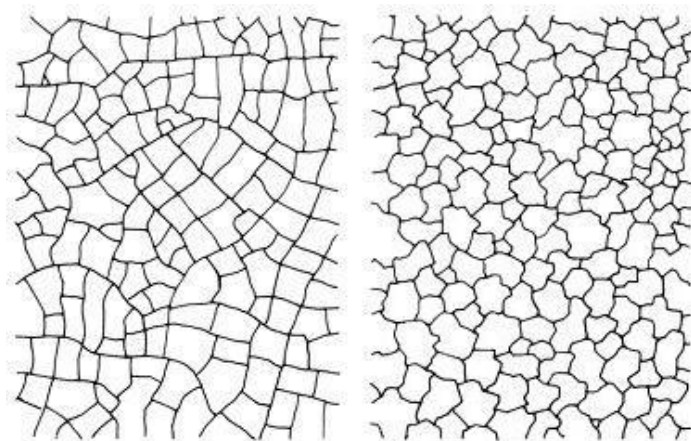


Рис.1. Сетки поверхностных трещин [5].

3. СТОХАСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ РАЗНОМАСШТАБНЫХ ИНТЕРЬЕРНЫХ ГРАНИЦ

Пусть физическое тело представляет собой автономную распределённую неконсервативную колебательную систему. Если предположить, что в системе действует обобщённая сила сопротивления, пропорциональная скорости распространения энергии в системе между линейными неоднородностями (ЛН) разных масштабных уровней, то в линейном приближении уравнение движения будет иметь стандартный вид

$$x'' + 2\gamma x' + \omega^2 x = 0$$

где γ – обобщённый коэффициент затухания, ω – циклическая частота.

Оценку условного периода можно получить, определив логарифмический декремент затухания через последовательные (с интервалом в период) значения энергии системы W_n [8,9]

$$T = (1/\gamma)(W_n - W_{n+1}) / (W_n + W_{n+1}).$$

В работах [10,11] представлена математическая модель эволюции абстрактных систем, которые состоят из взаимодействующих по произвольным законам частей. Модель сформулирована как универсальная, и ее возможности продемонстрированы на описании процессов самоорганизации, возникающих в сепарирующихся циклических двухфазных потоках.

Опишем самоорганизацию разномасштабных неоднородностей в гетерогенном материале как взаимодействие частей системы.

Пусть структура материала представляет собой открытую динамическую систему. Рассмотрим три взаимодействующих масштабных уровня неоднородностей, и положим, что их эволюция описывается системой билинейных итерационных уравнений [10,11]

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n - (k_{xy} + k_{low}) p x_n^2 + k_{yx} q y_n^2 + x_{in} \\ y_{n+1} = y_n + k_{xy} p x_n^2 - (k_{yx} + k_{yz}) q y_n^2 + k_{zy} r z_n^2 \\ z_{n+1} = z_n + k_{yz} q y_n^2 - (k_{zy} + k_{over}) r z_n^2 \end{cases} \quad (1)$$

где x, y, z – динамические переменные, определяющие потенциальную энергию ИГ определенного масштабного уровня, а x_{in} – энергию внешнего воздействия; коэффициенты k_{low} и k_{over} задают долю рассеиваемой, k_{ij} – долю переходящей между неоднородностями разных масштабов энергии, а коэффициенты p, q, r – долю утилизируемой для перестройки энергии, причём, $\{k_{ij}\}$ и $\{p, q, r\} \in (0,1)$, $\{x, y, z\} \in R$.

Система уравнений в общем виде не интегрируется, но имеет стационарное решение, получаемое аналитически

$$\begin{cases} x_{st} = \sqrt{\frac{x_{in}}{k_{xy} + k_{low} \left(\frac{k_{yx}}{k_{yz}} \left(\frac{k_{zy}}{k_{over}} + 1 \right) + 1 \right)}} p \left(\frac{k_{yx}}{k_{yz}} \left(\frac{k_{zy}}{k_{over}} + 1 \right) + 1 \right) \\ y_{st} = \sqrt{\frac{x_{in} - k_{low} p \cdot x_{st}^2}{k_{yz} q} \left(\frac{k_{zy}}{k_{over}} + 1 \right)} \\ z_{st} = \sqrt{\frac{x_{in} - k_{low} p \cdot x_{st}^2}{k_{over} r}} \end{cases}$$

С ростом x_{in} возможны два варианта эволюции системы. В первом – возникает каскад бифуркаций удвоений периода, и реализуется сценарий Фейгенбаума [12,13] перехода к хаосу. При этом в фазовом пространстве потенциальных энергий масштабных уровней наблюдаются аттракторы, состоящие из 2^n точек. Во втором случае, после периодического режима возникает ситуация, аналогичная бифуркации Хопфа [13,14], приводящей, как известно, к возникновению квазипериодического режима. Дальнейшее увеличение x_{in} приводит к бифуркации, в результате которой наступает хаотический режим, приводящий к возникновению в фазовом пространстве странного аттрактора [10,11].

Помимо рассмотренных сценариев развития хаоса в системе могут наблюдаться их комбинации, когда хаотическое поведение системы на какой-то промежуток времени сменяется периодическим.

Как известно, странные аттракторы являются стохастическими автоколебаниями, поддерживаемыми в динамической системе за счёт внешнего источника. Возникающие в фазовом пространстве энергий, в котором исследуется система (1), аттракторы можно интерпретировать как фигуры Лиссажу квазиколебательных процессов, что открывает возможность визуального определения характера и особенностей взаимодействия разномасштабных неоднородностей.

Коэффициенты в системе уравнений характеризуют особенности строения материала. В основу определения их численных значений в первом приближении могут быть положены максимально общие предположения, основанные на анализе

физической ситуации. Уточнение этих значений для конкретных композиционных материалов видится на пути использования знаний о структуре и свойствах силовых полей внутренних границ [15].

4. СИЛОВЫЕ ПОЛЯ ФРАКТАЛЬНЫХ СЕТОК

Положим, что прямолинейные отрезки квадрата Серпинского соответствуют квазилинейным внутренним границам материала. Определим аналитически силовое поле, создаваемое полимасштабной сетью внутренних границ предфрактала Серпинского на произвольном шаге разбиения m .

Рассмотрим «проволочную» модель ковра Серпинского [15]. Пусть исходная квадратная рамка разделена четырьмя «проводами» на девять равных квадратов. Процедура многократно повторяется на каждой из 8^m получаемых на очередном шаге рамок (за исключением центральных). Пусть также на каждой образующей рамок любого «поколения» с линейной плотностью λ содержатся точечные источники, создающие поля с напряженностью $E \sim 1/r^2$.

Пусть ковёр Серпинского с длиной стороны образующего квадрата, равной $2H$, расположен так, что его центр совпадает с началом координат, а стороны параллельны осям. Составляющие вектора напряжённости, создаваемой отрезком, определяются соотношениями

$$\begin{cases} E_x = \lambda (\sin \alpha_2 - \sin \alpha_1) / r \\ E_y = \lambda (\cos \alpha_2 - \cos \alpha_1) / r \end{cases}$$

где α_i – угол между перпендикуляром длиной r , опущенным из точки, в которой определяется напряжённость, на отрезок или его продолжение, и соответствующим направлением на концевые точки отрезка.

Обозначим

$$A(u, v) = (u^2 + v^2)^{-1/2}, \quad B(u, v) = v / [u(u^2 + v^2)^{1/2}]$$

$$\xi(n, p) = -\xi + (-1)^n p, \quad \eta(n, p) = -\eta + (-1)^n p$$

тогда составляющие вектора напряжённости, создаваемой ковром m -го поколения в произвольных точках, не лежащих на прямых, которые содержат отрезки сети, можно вычислить по рекуррентным соотношениям

$$\begin{aligned} E_x = X_m(\xi, \eta) = \sum_{i=1}^2 \{ & X_{m-1}(\xi, \eta(i, H'')) + X_{m-1}(\xi(i, H'), \eta) + \\ & + \sum_{j=1}^2 [X_{m-1}(\xi(j, H''), \eta(i, H'')) + \lambda(-1)^j (A(\xi(j, H'), \eta(i, H')) - \\ & - A(\xi(j, H'), \eta(i, H')) + B(\xi(i, H'), \eta(j, H')) - B(\xi(i, H'), \eta(j, H')))] \} \\ E_y = Y_m(\xi, \eta) = & X_m(\eta, \xi) \end{aligned}$$

где $H' = H/3$, $H'' = 2H/3$

$$X_0(\xi, \eta) = \lambda \sum_{j=1}^2 \sum_{i=1}^2 [(-1)^i A(\xi(i, H), \eta(j, H)) + (-1)^{j+1} B(\xi(i, H), \eta(j, H))]$$

$$Y_0(\xi, \eta) = X_0(\eta, \xi) = \lambda \sum_{j=1}^2 \sum_{i=1}^2 [(-1)^i A(\eta(i, H), \xi(j, H)) + (-1)^{j+1} B(\eta(i, H), \xi(j, H))]$$

Полученные соотношения – модификация результатов, описанных в [15].

Рассмотрим аналог ковра Серпинского с одной осью симметрии второго порядка (рис.2). С использованием тех же обозначений, и с учетом $h = H / 3^m$, поле такого ковра определяется соотношениями

$$\begin{aligned}
 X_n(\xi; \eta) &= X_{n-1}(\xi - 2h_{n-1}; \eta) + \sum_{i=1}^2 \left\{ (-1)^{i+1} B(\xi + h_n; \eta(i, h_{n-1})) + \right. \\
 &\quad \left. + \sum_{j=1}^2 \left[X_{n-1}(\xi(i, 2h_{n-1}); \eta(j, 2h_{n-1})) + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + (-1)^i \left\{ A(\xi(i, h_{n-1}); \eta(j, h_n)) - A(\xi(i, h_{n-1}) - 2h_{n-1}; \eta(j, h_{n-1})) \right\} \right] \right\} \\
 Y_n(\xi; \eta) &= Y_{n-1}(\xi - 2h_{n-1}; \eta) + \sum_{i=1}^2 \left\{ (-1)^i A(\xi + h_n; \eta(i, h_{n-1})) + \right. \\
 &\quad \left. + \sum_{j=1}^2 \left[Y_{n-1}(\xi(i, 2h_{n-1}); \eta(j, 2h_{n-1})) + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + (-1)^i \left\{ B(\eta(j, h_{n-1}); \xi(i, h_{n-1}) - 2h_{n-1}) - B(\eta(j, h_n); \xi(i, h_{n-1})) \right\} \right] \right\}
 \end{aligned}$$

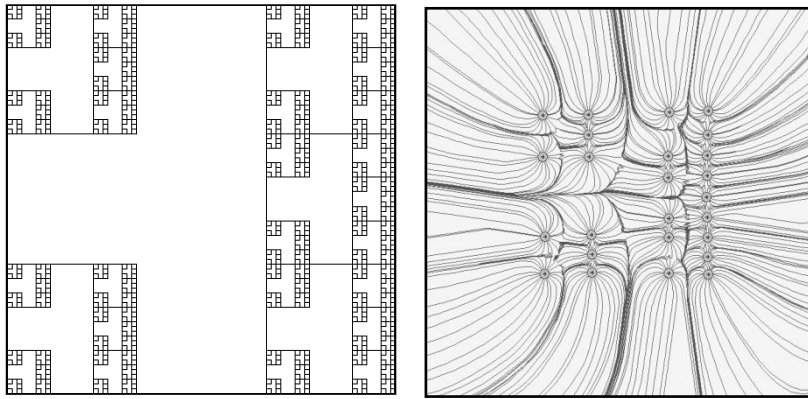


Рис.2. Модификация ковра Серпинского и его силовое поле.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена математическая модель взаимодействия разномасштабных структур, позволяющая рассматривать композит в виде открытой нелинейной стохастической динамической системы.

Проведен расчет и визуализация силовых полей нескольких модификаций ковра Серпинского. Это позволяет, в соответствии с принципом суперпозиции, использовать модели регулярных фракталов для описания полей механических напряжений произвольных сетей внутренних границ.

Предложенный подход открывает возможность с единых позиций описать характер распределения и взаимодействия ИГ в различных асимптотиках гетерогенного материала.

ЛИТЕРАТУРА

1. Уёмов А.И. Системы и системные параметры. /Проблемы формального анализа систем. – М.: Высшая школа, 1968. – 170 с.

2. Берталанфи Л. Общая теория систем: критический обзор. /Исследования по общей теории систем. – М.: Прогресс, 1969. – С.23-82.
3. Соломатов В.И., Выровой В.Н., Бобрышев А.Н. Полиструктурная теория композиционных строительных материалов. – Ташкент: ФАН, 1991. – 345 с.
4. Выровой В.Н., Герега А.Н., Коробко О.А. Осцилляторное взаимодействие иерархически соподчинённых структур гетерогенного материала / Конференция «Моделирование-2010». Сборник трудов. – Киев: ИПМЭ им. Г.Е. Пухова НАН Украины, 2010. – С.253-260.
5. Уолкер Дж. Сетки поверхностных трещин // В мире науки. – 1986. – №12. – С.158-164.
6. Божокин С.В., Паршин Д.А. Фракталы и мультифракталы. – Ижевск: НИЦ РХД, 2001. – 128 с.
7. Мандельброт Б. Фрактальная геометрия природы. – М.: ИКИ, 2002. – 656 с.
8. Мандельштам Л.И. Лекции по теории колебаний. – М.: Наука, 1972. – 470 с.
9. Андронов А.А., Витт А.А., Хайкин С.Э. Теория колебаний. – М.: Наука, 1981. – 568 с.
10. Герега А.Н., Лозовский Т.Л. Моделирование самоорганизации динамических дисперсных систем. I. Спонтанная организация двухфазного потока // Электронное моделирование. – 2008. – Т.30. – №3. – С.3-12.
11. Bekker M., Herega A., Lozovskiy T. Strange Attractors and Chaotic Behavior of a Mathematical Model for a Centrifugal Filter with Feedback // Advances in Dynamical Systems and Applications. – 2009. – Vol.4. – N2. – P.179-194.
12. Фейгенбаум М. Универсальность в поведении нелинейных систем //УФН. – 1983. – Т.141. – Вып.2. – С.343-374.
13. Берже П., Помо И., Видаль К. Порядок в хаосе. – М.: Мир, 1991. – 368 с.
14. Лихтенберг А., Либерман М. Регулярная и стохастическая динамика. – Череповец: Меркурий-пресс, 2000. – 528 с.
15. Герега А.Н., Дрик Н.Г., Угольников А.П. Ковер Серпинского с гибридной разветвленностью: перколяционный переход, критические показатели, силовое поле // УФН. – 2012. – Т.182. – Вып.5. – С.555-557.

**ПРИМЕНЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ, ОСНОВАННЫХ
НА ТЕОРИИ МНОГОЗНАЧНЫХ ОТОБРАЖЕНИЙ
ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРЕДЕЛЬНЫХ ВОЗМОЖНОСТЕЙ
КОМПОЗИЦИОННЫХ СТРУКТУР ПРИ ВОЛНОВЫХ
ВОЗДЕЙСТВИЯХ РАЗЛИЧНОЙ ФИЗИЧЕСКОЙ ПРИРОДЫ***

Гусев Е.Л.

*ФГБУН Институт проблем нефти и газа Сибирского отделения Российской
академии наук, г. Якутск, Россия*

РЕЗЮМЕ

Для исследования предельных возможностей композиционных структур при волновых воздействиях различной физической природы разработана методика, основанная на теории многозначных отображений и методах продолжения по параметру. Разработанная методика позволяет осуществлять эффективное конструирование слоисто-неоднородных структур со сложными характеристиками при волновых воздействиях. Приведены примеры расчета.

Широкий круг проблем современного приборостроения, возникающих в авиа- и космической технике, связанных со все возрастающим применением композиционных материалов, конструкций приводит к необходимости исследования, как в прикладном, так и в теоретическом аспектах, возможности наиболее эффективного управления энергетическими характеристиками волновых процессов на основе направленного выбора геометрической и физической структуры структурно-неоднородных композиционных систем.

В качестве соответствующих моделей исследованы модели распространения упругих волн в сложнопостроенных структурно-неоднородных средах, в достаточной мере отражающих основные особенности взаимодействия волновых процессов с конструкциями сложных технических систем различного назначения.

Наиболее распространенным типом неоднородных структур являются слоистые среды. При волновом воздействии на слоистую структуру возникает система отраженных и преломленных волн, которые, взаимодействуя с падающей волной, образуют сложную интерференционную картину, в значительной мере зависящую от физической и геометрической структуры неоднородной среды, т.е. от геометрических размеров слоев, физико-механических свойств материалов слоев, числа слоев, общей толщины системы слоев, а также от порядка сочленения слоев с различными физико-механическими свойствами в конструкции. Изменяя физико-механическую и геометрическую структуру слоисто-неоднородной среды можно на основе явления многолучевой интерференции управлять волновой картиной процесса в широких пределах. На этом основана работа многих приборов и устройств в различных областях физики, техники, приборостроения, применяемых для управления энергетикой волнового процесса.

При исследовании волновых процессов в неоднородных структурах центральной проблемой является проблема направленного конструирования

* Работа выполнена при поддержке Российского Фонда фундаментальных исследований - гранты №№10-08-01301-а, 09-08-98501-а.

слоисто-неоднородной композиции с заранее заданными энергетическими характеристиками. Данная проблема заключается в таком направленном выборе физико-механической и геометрической структуры композиционной конструкции, при котором ее энергетические характеристики будут предельно близки к требуемым зависимостям. От решения этой проблемы зависят не только эффективность применяемых слоисто-неоднородных композиционных структур, но и расширение возможностей их эффективного использования в новых областях физики и техники.

Широкое распространение слоисто-неоднородных композиционных структур в различных областях физики, техники, приборостроения, общность их математического описания приводят к необходимости создания единого подхода к задачам исследования предельных возможностей неоднородных структур по достижению требуемого комплекса свойств. Возникающие при этом задачи оптимизации обладают целым рядом специфических особенностей. К ним относятся: дискретность области значений варьируемых параметров, которыми являются физико-механические свойства материалов слоев (т.к. набор материалов при проектировании, как правило, конечен); разрывность решений краевых задач, описывающих распространение волновых процессов в слоисто-неоднородных структурах; существенная многоэкстремальность волновых задач синтеза [1,2].

Задачи синтеза как обратные задачи математической физики относятся к числу некорректно-поставленных задач математической физики [3]. Анализ существующих методов оптимизации и синтеза слоисто-неоднородных композиционных структур при волновых воздействиях показывает, что большинство из них малоэффективно или малопригодно для решения исследуемых задач в рассматриваемой постановке. Многоэкстремальность волновых задач синтеза существенно затрудняет исследования предельных возможностей и характеристик слоисто-неоднородных композиционных структур. Дискретность варьируемых переменных приводит к невозможности построения вариаций, малых в равномерной метрике. Это приводит к неэффективности большинства известных методов. Разрывность решений краевых задач вызывает дополнительные трудности при поиске оптимального решения. Отмеченные трудности приводят к необходимости разработки новых методов исследования предельных возможностей. Это позволит повысить эффективность применения слоисто-неоднородных композиционных структур в различных областях физики, техники, приборостроения.

В вариационной постановке данная проблема связана с разработкой эффективных методов нелокального оптимального синтеза, позволяющих осуществлять построение глобально-оптимальных решений или в определенной мере близких к ним. В качестве показателя эффективности решений в исследуемой вариационной постановке выбрана среднеквадратическая мера близости зависимости энергетического коэффициента пропускания $T(\omega)$ к требуемой зависимости $\tilde{T}(\omega)$ в заданном диапазоне частот $[\omega_{\min}, \omega_{\max}]$

$$J = \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} [T(\omega) - \tilde{T}(\omega)]^2 d\omega \Rightarrow \min. \quad (1)$$

В этих обозначениях

$$T(\omega) = \Pi_z^{np} / \Pi_z^{nad}, \quad (2)$$

где Π_z^{np}, Π_z^{nad} - проекции вектора Пойнтинга на ось z в прошедшей и падающей волнах соответственно.

Одними из наиболее эффективных методов построения решений с требуемым комплексом свойств в вариационной постановке являются методы, основанные на принципе максимума Л.С.Понтрягина [1,2,4]. Применение методики оптимального синтеза, основанной на принципе максимума Л.С.Понтрягина, и связанной с игольчатым варьированием допустимого решения, позволяет осуществлять синтез композиционных структур, для которых функциональные зависимости энергетических характеристик от частоты являются более эффективными во всем фильтруемом диапазоне частот по сравнению с соответствующими зависимостями энергетических коэффициентов, построенными с помощью известных подходов.

Однако, несмотря на то, что методы оптимального синтеза, основанные на необходимых условиях оптимальности, связанными с нелокальными вариациями параметров, типа принципа максимума Л.С.Понтрягина, позволяют строить эффективные решения, тем не менее, получаемые результирующие решения являются локально-оптимальными. Поэтому применение методологии принципа максимума Л.С.Понтрягина не позволяет исследовать предельные возможности слоисто-неоднородных композиционных структур по достижению требуемого комплекса свойств. Для исследования предельных возможностей многослойных интерференционных систем необходима разработка методов оптимального синтеза на качественно иной основе.

Отсутствие эффективных методов исследования предельных возможностей приводит к тому, что с одной стороны, отсутствует возможность оптимального конструирования слоисто-неоднородных конструкций с характеристиками предельно близкими к требуемым. А с другой стороны, отсутствует возможность оценить насколько существенно многослойные конструкции, функционирующие в различных областях физики и техники, отличаются по своим характеристикам от предельно-достижимых.

Одним из наиболее эффективных подходов к решению данной проблемы является разрабатываемый подход, основанный на установленном свойстве внутренней симметрии в структуре оптимальных решений и теории многозначных отображений [5-9]. Показано, что данный подход позволяет исследовать предельные возможности слоисто-неоднородных композиционных структур по достижению требуемого комплекса свойств при волновых воздействиях различной физической природы [2].

Для определенного круга волновых задач синтеза показано, что во взаимосвязи параметров в слоисто-неоднородных композициях, реализующих предельные возможности, существует внутренняя симметрия, что позволяет существенно уменьшить размерность задачи [5-9]. В таких задачах, которые мы в дальнейшем будем называть опорными, совокупность всех вариантов многослойных структур, реализующих предельные возможности по управлению параметрами волнового поля, оказывается принадлежащей узкому компактному множеству Q . Разработана методика аналитического описания границ выделяемого компактного множества Q . Для опорных задач оптимального синтеза может быть эффективно выделена совокупность всех вариантов слоистых структур, параметры которых доставляют глобальный минимум функционалу качества (1), характеризующему близость функциональных характеристик к требуемым.

Тем не менее, существует широкий круг волновых задач синтеза в различных областях физики и техники, для которых не представляется возможным аналитически описать границы компактных множеств, содержащих всю совокупность оптимальных решений. Однако эти задачи могут быть некоторым

образом связаны с опорными задачами синтеза. Например, при определенных способах введения параметра в модель они могут оказаться в одном параметрическом семействе, таком, что одному значению параметра соответствует исходная задача синтеза, а другому - опорная задача. При этом возникает проблема как на основе знания оптимальных решений опорных задач синтеза разработать эффективные методы исследования предельных возможностей для широкого круга волновых задач синтеза, возникающих в различных областях физики и техники.

Погрузим исходную задачу оптимального синтеза в параметрическое семейство задач оптимального синтеза, зависящее от вещественного параметра δ ($\delta_0 \leq \delta \leq \delta_1$). При этом значению параметра $\delta = \delta_0$ соответствует опорная задача синтеза, для которой эффективно может быть выделена вся совокупность оптимальных решений, реализующих предельные возможности по достижению заданного комплекса свойств $U^*(\delta_0)$. Значению же параметра $\delta = \delta_1$ соответствует исходная задача оптимального синтеза. Множество глобально-оптимальных решений в исходной задаче синтеза обозначим через U^* . При этом $U^* = U^*(\delta_1)$. На основе теории многозначных отображений [10,11] разработана методика продолжения решения по параметру, позволяющая осуществлять эффективное продолжение множества глобально-оптимальных решений опорной задачи синтеза по параметру.

Разработанная методика исследования предельных возможностей, основанная на теории многозначных отображений и методах продолжения по параметру, позволяет осуществлять эффективное конструирование слоисто-неоднородных структур со сложными характеристиками при волновых воздействиях.

Рассмотрим применение разработанной методики оптимального синтеза для проектирования многослойного фильтра, обеспечивающего высокое пропускание волновой энергии в узкой области спектра и высокое отражение в остальной области рассматриваемого диапазона длин волн $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$, для которого отношение верхней границы к нижней равно: $\lambda_{\max}/\lambda_{\min}=3,4$. Общая толщина слоистой структуры $l=9,78\lambda_{\min}$. Допустимый набор состоит из двух материалов с показателями преломления $n_{\min}=1,46$; $n_{\max}=2,0$. Показатели преломления сред, окружающих многослойную структуру равны соответственно: $n_0=1$; $n_{N+1}=1$. Требуется обеспечить высокое пропускание электромагнитной волны в узкой области спектра $[\lambda_n, \lambda_k]$: $[\lambda_n, \lambda_k] \subset [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$ и высокое отражение в остальной части рассматриваемой области спектра $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$; $\lambda_n=1,2\lambda_{\min}$, $\lambda_k=1,36\lambda_{\min}$. Требуемая зависимость энергетического коэффициента пропускания от длины волны в рассматриваемом примере имеет вид

$$\tilde{T}(\lambda) = \begin{cases} 1, \lambda \in [\lambda_n, \lambda_k] \\ 0, \lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}] \end{cases}$$

Зависимость энергетического коэффициента пропускания $T(\lambda)$ от длины волны для результирующего покрытия, построенного по методике, основанной на теории многозначных отображений и продолжении по параметру, приведена на рис.1 (сплошная кривая). Число слоев результирующей многослойной структуры $N^*=34$. Пунктирная кривая - зависимость энергетического коэффициента пропускания $T(\lambda)$ от длины волны для результирующего покрытия, построенного на основе применения методологии принципа максимума Л.С.Понтрягина.

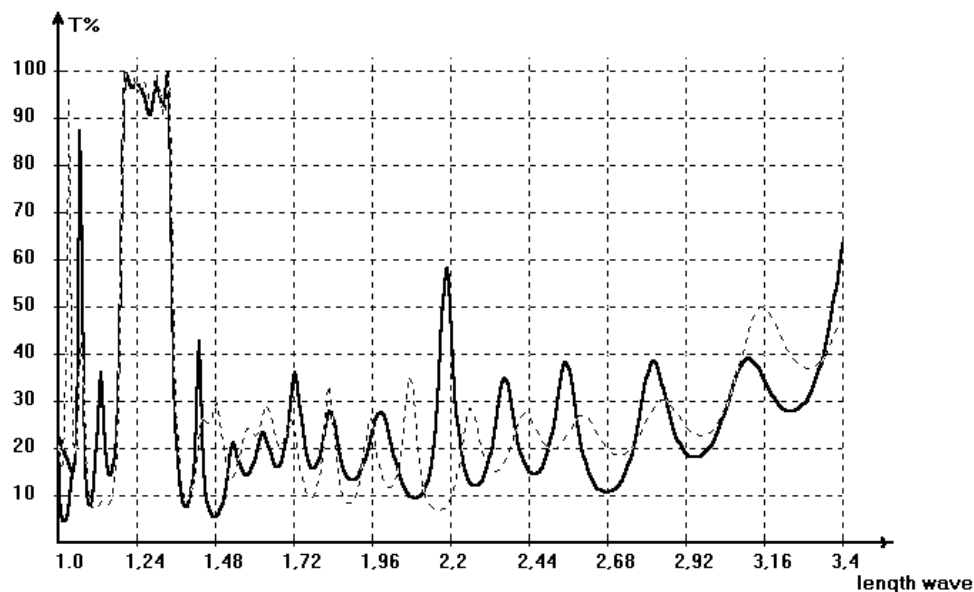


Рис.1. Зависимость энергетического коэффициента пропускания оптимальной многослойной структуры от длины волны.

Таким образом, применение разработанной методики позволяет осуществлять направленное конструирование эффективных слоисто-неоднородных структур со сложными энергетическими характеристиками при волновых воздействиях, превосходящих по своим характеристикам неоднородные структуры, синтезированные с помощью известных методов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гусев Е.Л. Математические методы синтеза слоистых структур. – Новосибирск: Наука, 1993. – 262 с.
2. Гусев Е.Л., Бакулин В.Н., Марков В.Г. Методы оптимального проектирования и расчета композиционных конструкций. – М.: Наука. Физматлит, 2008. – 277 с.
3. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1986. – 286 с.
4. Понтрягин Л.С., Болтянский В.Г., Гамкрелидзе Р.В., Мищенко Е.Ф. Математическая теория оптимальных процессов. – М.: Наука, 1983. – 392 с.
5. Гусев Е.Л. Качественные закономерности взаимосвязи параметров в оптимальных структурах в задачах оптимального синтеза неоднородных структур из дискретного набора материалов при волновых воздействиях // Доклады РАН. – 1996. – Т.346. – №3. – С.324-326.
6. Гусев Е.Л. Об априорном сужении допустимого набора материалов в задачах оптимального синтеза неоднородных структур из дискретного набора материалов при волновых воздействиях // Доклады РАН. – 1996. – Т.349. – №3. – С.329-331.
7. Gusev E.L. Mathematical methods of investigation limit possibilities of interference coatings for the reaching of the given complex of properties // Optical Interference Coatings. Technical Digest Series (Optical Society of America). – 1998. – Vol.9. – P.286-287.
8. Гусев Е.Л. Свойство внутренней симметрии во взаимосвязи параметров в оптимальных структурах в задачах оптимального синтеза неоднородных

- структур при волновых воздействиях / Международная конференция “Симметрия в естествознании”. Труды. – Красноярск, 1998. – С.47-48.
9. *Gusev E.L.* Optimal synthesis methodology of nonhomogeneous structures under the influence of electromagnetic waves // *Int. J. of Applied Electromagnetics and Mechanics*. – 1999. – N10. – P.405-416.
10. *Иванов В.К.* О некорректно поставленных задачах // Математический сборник. – 1963. – Т.61. – №2. – С.211-224.
11. *Лисковец О.А.* Некорректные задачи с замкнутым необратимым оператором // Дифференциальные уравнения. – 1967. – №4. – С.636-646.

**ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАТЕМАТИЧЕСКОГО
И КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ
СИСТЕМ ТРУБОПРОВОДНОГО ТРАНСПОРТА
В ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ГЕОЛОГО-КЛИМАТИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ***

Гусев Е.Л.

*ФГБУН Институт проблем нефти и газа Сибирского отделения Российской
академии наук, г. Якутск, Россия*

РЕЗЮМЕ

Методами математического и компьютерного моделирования проведено исследование прямых и обратных задач функционирования систем трубопроводного транспорта при воздействии экстремальных факторов внешней среды

В последние десятилетия значительное внимание уделяется проблемам повышения эффективности, интенсификации систем трубопроводного транспорта, что непосредственно связано с повышением их прочности, надежности, ресурса, сейсмостойкости [1-10]. Современные подходы к решению данных проблем связаны с развитием методов математического и компьютерного моделирования на основе адекватных моделей функционирования трубопроводного транспорта при воздействии экстремальных геолого-климатических факторов внешней среды и принятия на этой основе оптимальных решений [11-16]. Разработка адекватных математических моделей функционирования трубопроводного транспорта является основой для разработки эффективных методов численного расчета и оптимизации режимов трубопроводного транспорта [17-20].

Одним из перспективных направлений повышения эффективности функционирования трубопроводных систем в условиях большой их протяженности, многообразия климатических и геофизических условий эксплуатации, является применение при их проектировании и эксплуатации полимерных и композиционных материалов. В последние десятилетия, в связи с разработкой новых композиционных материалов с широким разнообразием физико-механических и химических свойств возникает проблема разработки физической и геометрической структуры трубопроводной системы, обеспечивающей наиболее эффективный режим транспорта в условиях экстремальных факторов внешней среды.

При проектировании и эксплуатации трубопроводных систем, прокладываемых по территориям, характеризующимся широким разнообразием экстремальных факторов, высокой сейсмической активностью, значительными экстремальными перепадами температур, необходимо предусматривать дополнительные возможности обеспечения требуемых режимов транспортировки сред. В условиях значительного перепада экстремальных температур необходимо также учитывать зависимость основных параметров транспортируемых сред от температуры, а также влияние такой зависимости на режимы транспортировки.

*Работа выполнена при поддержке Российского Фонда фундаментальных исследований - гранты №№10-08-01301-а, 09-08-98501-а.

Задача обеспечения заданных режимов трубопроводного транспорта может решаться как на стадии проектирования трубопроводной системы, так и на последующей стадии эксплуатации. В связи с большой протяжённостью трубопроводных систем различного назначения, многообразием климатических и геофизических условий эксплуатации, одним из перспективных направлений повышения эффективности трубопроводной системы является применение при их проектировании и эксплуатации полимерных и композиционных материалов. В последние десятилетия, в связи с разработкой новых композиционных материалов с широким разнообразием физико-механических и химических свойств возникает проблема разработки физической и геометрической структуры трубопроводной системы, обеспечивающей наиболее эффективный режим транспорта в условиях экстремальных факторов внешней среды [21-26].

Конструкция стенок трубопроводов проектируется согласно полю действующих нагрузок и, как правило, является многослойной. При этом показано, что физическая и геометрическая структура слоисто-неоднородной трубопроводных систем оказывает существенное влияние на режимы транспортировки. Разработка многослойных покрытий из композиционных материалов позволяет создавать композиции, одновременно сочетающие высокие химические и механические свойства, не достижимые для однослойных покрытий. Направленный выбор физической и геометрической структуры покрытий из композиционных материалов позволяет достичь существенного синергетического эффекта в улучшении свойств слоисто-неоднородных покрытий по сравнению с однослойными. Увеличение числа слоев покрытия может позволить существенно улучшить его физико-механические свойства, а также разрабатывать композиционные покрытия, в которых отсутствуют характерные недостатки покрытий, имеющих меньшее число слоев.

В соответствии с этим, возникает важная проблема направленного выбора физической и геометрической структуры, как самой трубопроводной системы, так и физической и геометрической структуры внешних и внутренних композиционных покрытий, обеспечивающей наиболее эффективный режим функционирования трубопроводных систем в условиях неблагоприятных сочетаний экстремальных факторов внешней среды [23-26].

Проведено математическое моделирование процессов функционирования трубопроводного транспорта в рамках сформулированной вариационной постановки, к которой могут быть сведены задачи оптимального проектирования физической и геометрической структуры трубопроводной системы при воздействии экстремальных факторов внешней среды. В качестве математической модели функционирования трубопроводной системы в условиях экстремальных факторов внешней среды, в рассматриваемой вариационной постановке, принята система уравнений неразрывности, состояния, сохранения энергии и импульса. Теплообмен транспортируемой по трубопроводной системе среды с окружающей внешней средой считается происходящим по закону Ньютона [17,27]

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho\omega v) = m^*, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega v) + \frac{\partial}{\partial x}[(p + \rho v^2)\omega] = \\ & = p \frac{d\omega}{dx} - \rho g \omega \frac{dy}{dx} - \frac{m^* v^*}{2} \frac{dD}{dx} - \frac{\pi}{8} D \rho v |v|, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \omega \left(gy + u + \frac{v^2}{2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho \omega v \left(gy + u + \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2} \right) \right] =$$

$$= \pi D \alpha (T_n - T) + m^* \left(gy + u^* + \frac{p^*}{\rho^*} + \frac{v^{*2}}{2} \right), \quad (3)$$

$$F(p, T, \rho) = 0, \quad (4)$$

$$di = c_p dT + \left[V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p \right] dp. \quad (5)$$

Система дифференциальных уравнений в частных производных (1)-(5) содержит 5 неизвестных функций: давление $p(x,t)$, температуру $T(x,t)$, плотность $\rho(x,t)$, внутреннюю энергию $u(x,t)$ и скорость жидкости (газа) $v(x,t)$. В этих обозначениях: ρ – плотность; ω – поперечное сечение трубы; v – скорость движения жидкости или газа (средняя по сечению величина скорости); $m^*(x,t)$ – распределенный приток массы через боковую поверхность на единицу длины за единицу времени; $p(x,t)$ – давление; $y(x)$ – высота некоторого сечения трубы, отсчитываемая от фиксированной горизонтальной плоскости; $v^*(x,t)$ – скорость присоединившихся частиц; D – диаметр трубопровода; ψ – коэффициент гидравлического сопротивления; $u(x,t)$ – удельная внутренняя энергия; α – суммарный коэффициент теплообмена; T_n – температура окружающей среды; $T(x,t)$ – температура движущейся в трубе среды; i – энтальпия; c_p , c_v – удельные теплоемкости

$$c_v = \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_p, c_p = \left(\frac{\partial i}{\partial T} \right)_p.$$

Вариационная постановка связана с проблемой направленного выбора физической и геометрической структуры как самой трубопроводной системы, так и физической и геометрической структуры внешних и внутренних композиционных покрытий, обеспечивающей наиболее эффективный режим функционирования трубопроводной системы в условиях неблагоприятных сочетаний экстремальных факторов внешней среды. Вводимая система критериев качества $R_0, R_1, \dots, R_k$ формулирует комплекс требований, обеспечивающих наиболее эффективный режим функционирования трубопроводной системы в условиях экстремальных факторов внешней среды.

На основе математического и компьютерного моделирования проведено исследование функционирования трубопроводных систем при воздействии экстремальных факторов внешней среды. Проведено исследование влияния зависимости основных параметров транспортируемой среды от температуры на режимы функционирования трубопроводных систем. На основе математических моделей функционирования трубопроводных систем в условиях экстремально низких температур внешней среды проведены вычислительные эксперименты при различных значениях параметров, описывающих трубопроводную систему. На основе проведенных вычислительных экспериментов установлены закономерности зависимости оптимальной структуры трубопроводной системы от определяющих параметров.

Исследованы качественные закономерности функциональных распределений основных характеристик нефти в трубопроводной системе при различном уровне ее теплоизолирующей способности. Проведен сравнительный анализ установленных качественных закономерностей с качественными закономерностями

функциональных распределений основных характеристик нефти в трубопроводной системе при оптимальном уровне теплоизолирующей способности.

Разработанная методика математического и компьютерного моделирования функционирования трубопроводного транспорта в условиях экстремальных факторов внешней среды позволяет проводить всестороннее исследование особенностей функционирования трубопроводного транспорта в условиях экстремальных климатических факторов с учетом зависимости определяющих параметров транспортируемой среды от температуры; изучать распределение температуры и давления в трубопроводе в зависимости от параметров задачи, а также исследовать влияние на режимы транспортировки экстремальных факторов внешней среды.

Разработанные вариационные постановки многокритериальных задач оптимизации трубопроводного транспорта, методы их решения позволяют осуществлять эффективное управление режимами функционирования трубопроводного транспорта на основе оптимального выбора физической и геометрической структуры трубопроводных систем. Это открывает новые потенциальные возможности достижения наиболее эффективных режимов транспорта на стадии функционирования трубопроводной системы в условиях действия экстремальных факторов внешней среды.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Харионовский В.В.* Повышение прочности трубопроводов в сложных условиях. – Л.: Недра, 1990. – 180 с.
2. *Харионовский В.В.* Надежность и ресурс конструкций газопроводов. – М.: Недра, 2000. – 467 с.
3. *Галиуллин З.Т., Леонтьев Е.В.* Интенсификация магистрального транспорта газа. – М.: Недра, 1991. – 272 с.
4. *Шаммазов А.М.* Расчет и обеспечение прочности трубопроводов в сложных инженерно-геологических условиях. т.1,2. – М.: Интер, 2005. – 706 с.
5. Методы расчета надежности магистральных газопроводов. / *Ставровский Е.А., Сухарев М.Г., Карасевич А.М.* – Новосибирск: Наука, 1982. – 125 с.
6. *Айнбиндер А.Б.* Расчет магистральных промысловых трубопроводов на прочность и устойчивость / Справочное пособие. – М.: Недра, 1991. – 287 с.
7. *Завойчинский Б.И.* Долговечность магистральных и технологических трубопроводов. Теория, методы расчета, проектирование. – М.: Недра, 1992. – 282 с.
8. *Ясин Э.М., Березин В.А., Раценкин К.Е.* Надежность магистральных трубопроводов. – М.: Недра, 1972. – 184 с.
9. *Зайнуллин Р.С.* Ресурс элементов трубопроводных систем. – Уфа, 2005. – 836 с.
10. *Азметов Х.А.* Анализ напряженного состояния подземных трубопроводов // Трубопроводный транспорт нефти. – 1999. – №1. – С.40-42.
11. *Рекач Ф.В.* Расчет допустимых динамических нагрузок на трубопровод // Строительная механика инженерных конструкций и сооружений. – 2008. – №1. – С.62-63.
12. *Гусейнзаде М.А.* Математические модели волнового течения в сложной трубопроводной системе. – М.: Нефть и газ, 1989.
13. *Гусейнзаде М.А., Другина Л.И., Петрова О.Н., Степанова М.Ф.* Гидродинамические процессы в сложных трубопроводных системах. – М.: Недра, 1991. – 164 с.

14. *Гусейнзаде М.А.* Особенности волнового течения жидкости в трубах. Гидравлический удар. – М.: Нефть и газ, 1999. – 163 с.
15. *Балышев О.А., Таиров Э.А.* Анализ переходных и стационарных процессов в трубопроводных системах. – Новосибирск: Наука, 1998. – 164 с.
16. *Темпель Ф.Г.* Моделирование газоснабжающих систем. – Л.: Недра, 1986. – 183 с.
17. *Лурье М.В.* Математическое моделирование процессов трубопроводного транспорта нефти, нефтепродуктов и газа – М.: Нефть и газ, 2003. – 336 с.
18. *Андрющенко О.В., Джунисбеков Т.М., Кериштейн И.М.* Конечно-разност-ный расчет напряженно-деформированного состояния в трубе из ортотропного композита при транспортировке нефти / Международная конференция «Нелинейные задачи теории гидродинамической устойчивости и турбулентность». Сборник трудов. – М., 2004. – Т.2. – С.202-205.
19. *Сухарев М.Г.* Оптимизация систем транспорта газа. – М.: Недра, 1975. – 277 с.
20. *Азизов Б.Б., Федосеев А.В.* Задачи многокритериальной оптимизации планирования добычи газа и построения сети трубопроводов. – М.: ВЦ АН СССР, 1988.
21. *Богомольный В.М.* Оптимальное проектирование оболочек машин, трубопроводов, агрегатов. – М.: МГУС, 2003. – 223 с.
22. Рекомендации по расчету трубопроводов из многослойных труб на динамические нагрузки. – М.:ВНИИСТ, 1982.
23. *Борисов Б.И.* Защитная способность изоляционных покрытий подземных трубопроводов. – М.: Недра, 1987. – 201 с.
24. *Гусев Е.Л.* Качественные закономерности взаимосвязи параметров в оптимальных структурах в задачах оптимального синтеза неоднородных структур из дискретного набора материалов при волновых воздействиях // Доклады РАН. – 1996. – Т.346. – №3. – С.324-326.
25. *Гусев Е.Л.* Качественные закономерности структуры оптимальных решений в задачах оптимального синтеза многослойных конструкций при воздействии упругих волн // Доклады РАН. – 1998. – Т.368. – №1. – С.53-56.
26. *Гусев Е.Л., Бакулин В.Н., Марков В.Г.* Оптимальное проектирование конструкций из композиционных и традиционных материалов. – М.: Наука. Физматлит, 2008. – 256 с.
27. *Бондарев Э.А. и др.* Термогидродинамика систем добычи и транспорта газа. – Новосибирск: Наука, 1988. – 272 с.

УДК 519.8

МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ЧИСЛЕННОГО АНАЛИЗА И ОПТИМАЛЬНОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ НЕОДНОРОДНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ ОБОЛОЧЕК И ПЛАСТИН С ТРЕБУЕНЫМ И РЕГУЛИРУЕМЫМ КОМПЛЕКСОМ СВОЙСТВ

Гусев Е.Л.¹, Бакулин В.Н.²

¹*ФГБУН Институт проблем нефти и газа Сибирского отделения Российской академии наук, г. Якутск, Россия*

²*ФГБУН Институт прикладной механики Российской академии наук, г. Москва, Россия*

РЕЗЮМЕ

На основе математического и компьютерного моделирования проведено исследование задач численного анализа и оптимального проектирования структуры композиционных материалов, конструкций с требуемым и регулируемым комплексом свойств, имеющих как плоскую, так и криволинейную симметрию.

Проведено исследование вариационной постановки задач численного анализа и оптимального синтеза композиционных конструкций с требуемым и регулируемым комплексом свойств при волновых воздействиях. На основе необходимых условий оптимальности разработаны эффективные нелокальные методы численного расчета и оптимального синтеза.

Широкое распространение композиционных конструкций в различных областях физики, техники, приборостроения, общность их математического описания приводят к необходимости создания единого подхода к задачам исследования предельных возможностей неоднородных структур по достижению требуемого комплекса свойств. Возникающие при этом задачи оптимизации обладают целым рядом специфических особенностей. К ним относятся: дискретность области значений варьируемых параметров, которыми являются физико-механические свойства материалов слоев (т.к. набор материалов при проектировании, как правило, конечен); разрывность решений краевых задач, описывающих распространение волновых процессов в слоисто-неоднородных структурах; существенная многоэкстремальность волновых задач синтеза и т.п., что существенно затрудняет их решение. Отмеченные трудности приводят к необходимости разработки новых методов исследования предельных возможностей. Это позволит повысить эффективность применения слоисто-неоднородных композиционных структур в различных областях физики, техники, приборостроения.

В вариационной постановке одними из наиболее эффективных методов построения оптимальных решений в задачах оптимизации, модели в которых описываются системами дифференциальных уравнений, являются методы, основанные на принципе максимума Л.С.Понтрягина [1-2]. Тем не менее методы, основанные на принципе максимума Л.С.Понтрягина, позволяют строить лишь локально-оптимальные решения, т.е. носят лишь локальный характер.

В соответствии с этим возникает необходимость в разработке новых эффективных методов численного анализа и оптимального синтеза композиционных структур с требуемым комплексом свойств, которые были бы свободными от

перечисленных недостатков. В вариационной постановке данная проблема связана с разработкой эффективных методов нелокального оптимального синтеза, позволяющих осуществлять построение глобально-оптимальных решений или в определенной мере близких к ним [1-3].

Для случая электромагнитных волн внутри слоев распространение волн будет описываться системой уравнений Максвелла

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{H}_s - \frac{\varepsilon_s}{c} \frac{\partial \vec{E}_s}{\partial t} &= 0, \\ \operatorname{rot} \vec{E}_s + \frac{\mu_s}{c} \frac{\partial \vec{H}_s}{\partial t} &= 0, \\ b_{s-1} \leq z \leq b_s, \quad s &= 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (1)$$

В этих обозначениях $\vec{H}_s, \vec{E}_s$ – векторы электрической и магнитной напряженности электромагнитного поля в s -м слое, ε_s, μ_s – диэлектрическая и магнитная проницаемости s -го слоя; b_s – координаты границ раздела слоев с различными физическими свойствами, N – число слоев.

На границах раздела слоев будут выполняться условия сопряжения решений, заключающиеся в непрерывности нормальной и тангенциальной составляющей векторов электрической и магнитной напряженности

$$E_{s,\tau} \Big|_{z=b_{s-1}} = E_{s-1,\tau} \Big|_{z=b_{s-1}}, \quad H_{s,\tau} \Big|_{z=b_{s-1}} = H_{s-1,\tau} \Big|_{z=b_{s-1}} \quad (2)$$

Граничные условия, отражают взаимосвязь падающей и отраженной волн на внешней и внутренней поверхностях конструкции.

При воздействии упругих волн на композиционную конструкцию, распространение упругих волн в системе слоев с различными физическими свойствами будет описываться системой уравнений динамической теории упругости

$$\mu_s \Delta u_s + (\lambda_s + 2\mu_s) \operatorname{grad} \operatorname{div}(u_s) = \rho_s \frac{\partial^2 u_s}{\partial t^2}, \quad (s = 1, \dots, N). \quad (3)$$

В этих обозначениях: $u_s(x, y, z, t)$ – вектор смещения частиц в s -ой среде, ρ_s – плотность s -го слоя, λ_s, μ_s – параметры Ламэ s -го слоя.

В качестве показателя эффективности решений в исследуемой вариационной постановке выбрана среднеквадратическая мера близости зависимости энергетического коэффициента пропускания $T(\omega)$ к требуемой зависимости $\tilde{T}(\omega)$ в заданном диапазоне частот $[\omega_{\min}, \omega_{\max}]$

$$J = \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} [T(\omega) - \tilde{T}(\omega)]^2 d\omega \Rightarrow \min \quad (4)$$

В этих обозначениях

$$T(\omega) = \Pi_z^{np} / \Pi_z^{pad}$$

Π_z^{np}, Π_z^{pad} – проекции вектора Пойнтинга на ось z в прошедшей и падающей волнах, соответственно.

Одними из наиболее эффективных методов построения решений с требуемым комплексом свойств в вариационной постановке являются методы, основанные на принципе максимума Л.С.Понтрягина [1-4]. Применение методики оптимального синтеза, основанной на принципе максимума Л.С.Понтрягина и связанной с игольчатым варьированием допустимого решения, позволяет осуществлять синтез композиционных структур, для которых функциональные зависимости

энергетических характеристик от частоты являются более эффективными во всем фильтруемом диапазоне частот по сравнению с соответствующими зависимостями энергетических коэффициентов, построенными с помощью известных подходов.

Однако, несмотря на то, что методы оптимального синтеза, основанные на необходимых условиях оптимальности, связанными с нелокальными вариациями параметров, типа принципа максимума Л.С.Понтрягина, позволяют строить эффективные решения, тем не менее, получаемые результирующие решения являются локально-оптимальными. Поэтому применение методологии принципа максимума Л.С.Понтрягина не позволяет исследовать предельные возможности слоисто-неоднородных композиционных структур по достижению требуемого комплекса свойств. Для исследования предельных возможностей многослойных интерференционных систем необходима разработка методов оптимального синтеза на качественно иной основе.

Отсутствие эффективных методов исследования предельных возможностей приводит к тому, что, с одной стороны, отсутствует возможность оптимального конструирования слоисто-неоднородных конструкций с характеристиками предельно близкими к требуемым, а с другой стороны, отсутствует возможность оценить, насколько существенно многослойные конструкции, функционирующие в различных областях физики и техники, отличаются по своим характеристикам от предельно-достижимых.

Одним из наиболее эффективных подходов к решению данной проблемы является разрабатываемый подход, основанный на установленном свойстве внутренней симметрии в структуре оптимальных решений и теории многозначных отображений [3-10]. Установлено, что данный подход позволяет исследовать предельные возможности слоисто-неоднородных композиций по достижению заданного комплекса свойств.

Проблема синтеза слоисто-неоднородных композиций в рассматриваемой постановке может быть отнесена к числу проблем, связанных с организацией взаимосогласованного кооперативного поведения составляющих систему элементов, при котором реализуются ее предельные возможности. Достижение предельных возможностей связано с одновременным взаимосогласованием всех параметров, определяющих структуру многослойной системы. Вследствие этого можно предположить, что предельные возможности реализуются лишь при строго определенном характере согласованного, кооперативного взаимодействия элементов, составляющих систему. Взаимосвязь элементов, составляющих систему, в этом случае может характеризоваться некоторым внутренним порядком или внутренней симметрией.

Существование такой внутренней симметрии в задачах оптимального синтеза может говорить о том, что структуры, реализующие предельные возможности, будут группироваться только внутри узкого компактного множества Q . Внутренний порядок или внутренняя симметрия во взаимосвязи элементов, составляющих систему, может приводить к тому, что структуры, реализующие предельные возможности, будут удовлетворять дополнительным связям. Выявление таких связей позволяет существенно уменьшить размерность задачи, т.е. может оказаться, что структуры, реализующие предельные возможности, дополнительно удовлетворяют некоторой системе m уравнений $M_j(u^*) = 0$. Множество решений этой системы и есть искомое компактное множество

$$Q = \{u : Q_j(u) = 0, j = 1, \dots, m\}$$

Выделение этой системы уравнений может позволить в ряде случаев полностью решить проблему синтеза. Главная проблема здесь заключается в разработке методики аналитического описания границ выделяемого компактного множества. Поэтому представляет значительный интерес выделение задач синтеза слоистых систем, в которых структуры, реализующие предельные возможности по управлению параметрами волнового поля, обладают внутренней симметрией. С исследованием возможности выделения узкого компактного множества Q , содержащего всю совокупность вариантов, реализующих предельные возможности, связан качественно новый путь сжатия множества допустимых вариантов структур и разработке на этой основе эффективных методов синтеза.

Для определенного круга волновых задач синтеза показано, что во взаимосвязи параметров в слоисто-неоднородных композициях, реализующих предельные возможности, существует внутренняя симметрия, что позволяет существенно уменьшить их размерность [3-7]. В таких задачах, которые мы в дальнейшем будем называть опорными, совокупность всех вариантов многослойных интерференционных покрытий, реализующих предельные возможности по управлению параметрами волнового поля, оказывается принадлежащей узкому компактному множеству.

Разработана методика аналитического описания границ выделяемого компактного множества. Для опорных задач оптимального синтеза может быть эффективно выделена совокупность всех вариантов слоистых структур, параметры которых доставляют глобальный минимум функционалу качества, характеризующему близость функциональных характеристик к требуемым.

Тем не менее, существует широкий круг волновых задач синтеза в различных областях физики и техники, для которых не представляется возможным аналитически описать границы компактных множеств, содержащих всю совокупность оптимальных решений. Однако эти задачи могут быть некоторым образом связаны с опорными задачами синтеза. Например, при определенных способах введения параметра в модель они могут оказаться в одном параметрическом семействе, таком, что одному значению параметра соответствует исходная задача синтеза, а другому - опорная задача. При этом возникает проблема как на основе знания оптимальных решений опорных задач синтеза разработать эффективные методы исследования предельных возможностей для широкого круга волновых задач синтеза, возникающих в различных областях физики и техники.

Погрузим исходную задачу оптимального синтеза в параметрическое семейство задач оптимального синтеза, зависящее от вещественного параметра δ ($\delta_0 \leq \delta \leq \delta_1$). При этом значению параметра $\delta = \delta_0$ соответствует опорная задача синтеза, для которой эффективно может быть выделена вся совокупность оптимальных решений, реализующих предельные возможности по достижению заданного комплекса свойств $U^*(\delta_0)$. Значению же параметра $\delta = \delta_1$ соответствует исходная задача оптимального синтеза. Множество глобально-оптимальных решений в исходной задаче синтеза обозначим через U^* . При этом $U^* = U^*(\delta_1)$.

На основе теории многозначных отображений [9,10] разработана методика продолжения решения по параметру, позволяющая осуществлять эффективное продолжение множества глобально-оптимальных решений опорной задачи синтеза по параметру.

На основе развития теории методов продолжения по параметру, конструктивного анализа дифференциальных уравнений, описывающих динамику

композиционных конструкций, разработана эффективная методика нелокальной оптимизации, позволяющая осуществлять эффективное проектирование композиционных материалов, конструкций с требуемым и регулируемым комплексом свойств.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Гусев Е.Л.* Математические методы синтеза слоистых структур. – Новосибирск: Наука, 1993. – 262 с.
2. *Понтрягин Л.С., Болтянский В.Г., Гамкрелидзе Р.В., Мищенко Е.Ф.* Математическая теория оптимальных процессов. – М.: Наука, 1983. – 392 с.
3. *Гусев Е.Л.* Качественные закономерности взаимосвязи параметров в оптимальных структурах в задачах оптимального синтеза неоднородных структур из дискретного набора материалов при волновых воздействиях // Доклады РАН. – 1996. – Т.346. – №3. – С.324-326.
4. *Гусев Е.Л.* Об априорном сужении допустимого набора материалов в задачах оптимального синтеза неоднородных структур из дискретного набора материалов при волновых воздействиях // Доклады РАН. – 1996. – Т.349. – №3. – С.329-331.
5. *Gusev E.L.* Mathematical methods of investigation limit possibilities of interference coatings for the reaching of the given complex of properties // Optical Interference Coatings. Technical Digest Series (Optical Society of America). – 1998. – Vol.9. – P.286-287.
6. *Гусев Е.Л.* Свойство внутренней симметрии во взаимосвязи параметров в оптимальных структурах в задачах оптимального синтеза неоднородных структур при волновых воздействиях / Международная конференция “Симметрия в естествознании”. Сборник трудов. – Красноярск, 1998. – С.47-48.
7. *Gusev E.L.* Optimal synthesis methodology of nonhomogeneous structures under the influence of electromagnetic waves // Int. J. of Applied Electromagnetics and Mechanics. – 1999. – N10. – P.405-416.
8. *Бакулин В.Н., Гусев Е.Л., Марков В.Г.* Методы оптимального проектирования и расчета композиционных конструкций. – М.: Наука. Физматлит, 2008. – 256 с.
9. *Иванов В.К.* О некорректно поставленных задачах // Математический сборник. – 1963. – Т.61. – №2. – С.211-224.
10. *Лисковец О.А.* Некорректные задачи с замкнутым необратимым оператором // Дифференциальные уравнения. – 1967. – №4. – С.636-646.

ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПОЛОСЫ И БАЛКИ ИЗ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ ПРИНЦИПА СЖАТЫХ ОТОБРАЖЕНИЙ

Зверьяев Е.М.

ФГБУН Институт прикладной математики им М.В. Келдыша РАН, г. Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

В качестве исходных общих уравнений взяты уравнения плоской задачи теории упругости для длинной упругой полосы. Модуль упругости и коэффициент Пуассона считаются функциями высоты поперечного сечения. Уравнения приводятся к безразмерному виду, и в них выделяется малый параметр, равный отношению высоты полосы к ее длине. Интегрирование системы из семи уравнений с семью неизвестными производится с помощью метода простых итераций, позволяющего установить вид асимптотических разложений по малому параметру и показатели весовых коэффициентов каждого искомого неизвестного. В качестве величин нулевого приближения выбираются функции поперечного перемещения w_0 и напряжение сдвига τ_0 . Полагая эти величины основными, определяем через них последовательно остальные неизвестные в нулевом приближении и w_1 и τ_1 как величины первого приближения. Если функции нулевого приближения выбраны зависящими только от поперечной координаты, решение записывается в квадратурах по поперечной координате. При этом появляются, как произволы интегрирования, функции продольного перемещения u_0 и σ_0 . Для определения новых четырех неизвестных w_0 , τ_0 , u_0 и σ_0 записываются четыре граничных условия на продольных сторонах полосы. Из этих условий получается четыре дифференциальных уравнения в полных производных относительно неизвестных w_0 , τ_0 , u_0 и σ_0 .

Ключевые слова: принцип сжатых отображений; композиционный материал; асимптотическое разложение; весовые коэффициенты

Существующие методы получения эффективных характеристик основных элементов конструкций основаны на осреднении материалов с периодическими свойствами [1,2]. При этом рассматриваются одномерные задачи. В случае двумерных или трехмерных задач стандартные методы асимптотического интегрирования не работают, т.к. каждое искомое неизвестное имеет свой весовой множитель и свою изменяемость, определяющие его вклад в каждое отдельно взятое уравнение. Определение весовых коэффициентов с помощью метода простых итераций дано в работе [3] для задач теории оболочек и в [4,5] на примере длинной упругой полосы. В книге [6] автор близко подходит к идее осреднения, опираясь на полуобратный метод Сен-Венана, являющийся, по своей сути, как это показано в [4,5] первой итерацией метода простых итераций.

Ряд вопросов, связанных с существованием и единственностью решений уравнений того или иного типа можно сформулировать в виде вопроса о существовании и единственности неподвижной точки при некотором отображении соответствующего метрического пространства в себя. Среди различных критериев существования и единственности неподвижной точки при такого рода отображениях

простейшим и в то же время наиболее важным является, так называемый, принцип сжатых отображений.

Отображение $x = Ax$ метрического пространства M в себя называется сжимающим отображением (сжатием), если существует такое число $\alpha < 1$, что для любых двух точек $x, y \in M$ выполняется неравенство $\rho(Ax, Ay) \leq \alpha \rho(x, y)$. Точка x называется неподвижной точкой отображения, если $x = Ax$. Иначе говоря, неподвижные точки – это решения уравнения $x = Ax$. Итерационный процесс начинается, исходя из некоторого начального приближения x_0 . Если оператор A является сжимающим, процедура сходится к некоторому решению x независимо от выбора величины начального приближения. Последовательные приближения $x_1, x_2, x_3, \dots$ находятся с помощью формулы

$$x_{n+1} = Ax_n$$

Рассмотрим задачу определения НДС длинной упругой полосы, модуль упругости и коэффициент Пуассона которой меняются по высоте по произвольному закону (рис.1).

При E и ν постоянных эта задача решена в [1,2].

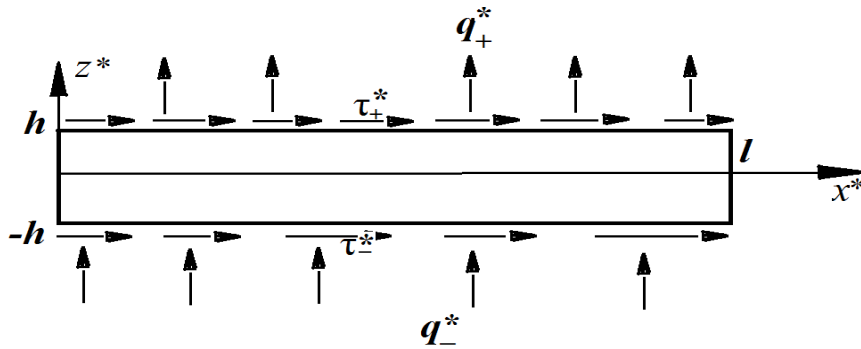


Рис.1.

Будем исходить из уравнений плоской задачи теории упругости

$$\frac{\partial \sigma_x^*}{\partial x^*} + \frac{\partial \tau^*}{\partial z^*} = 0, \quad \frac{\partial \sigma_z^*}{\partial z^*} + \frac{\partial \tau^*}{\partial x^*} = 0$$

$$\varepsilon_x = \frac{E^*}{1-\nu^{*2}}(\sigma_x - \nu\sigma_z), \quad \varepsilon_z = \frac{E^*}{1-\nu^{*2}}(\sigma_z - \nu\sigma_x), \quad \gamma = \frac{E^*}{2(1+\nu^*)}\tau$$

$$\varepsilon_x = \frac{\partial u^*}{\partial x^*}, \quad \varepsilon_z = \frac{\partial w^*}{\partial z^*}, \quad \gamma = \frac{\partial u^*}{\partial z^*} + \frac{\partial w^*}{\partial x^*}$$

Отмеченные звездочкой величины являются размерными. Полосу, длиной l и толщиной $2h$, отнесем к системе прямоугольных координат, считая, что $0 \leq x \leq l$ и $-1 \leq z \leq 1$. Введем безразмерные координаты $x = x^*/l$, $z = z^*/h$, безразмерные перемещения $u = u^*/h$, $w = w^*/h$, безразмерные напряжения $\sigma_x = \sigma_x^*/E_h^*$, $\sigma_z = \sigma_z^*/E_h^*$, $\tau = \tau^*/E_h^*$, некоторую величину E_h^* , представляющую собой, например, среднее значение модуля упругости, и безразмерный модуль упругости $E = E^*/E_h^*$. Будем считать, что $E = E(z)$.

Уравнения представим в виде, подходящем для решения методом простых итераций

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial z} &= -\varepsilon \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{2(1+\nu)}{E} \tau, \quad \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} = -\varepsilon \frac{\partial \tau}{\partial x}, \quad \varepsilon_x = \varepsilon \frac{\partial u}{\partial x} \\ \sigma_x &= E\varepsilon_x + \nu\sigma_z, \quad \varepsilon_z = \frac{1-\nu^2}{E} \sigma_z - \nu\varepsilon_x, \quad \frac{\partial w}{\partial z} = \varepsilon_z, \quad \frac{\partial \tau}{\partial z} = -\varepsilon \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} \end{aligned} \quad (1)$$

Действительно, если в двух первых уравнениях выбрать в качестве начального приближения величины $w = w_0$, $\tau = \tau_0$ в качестве известных, остальные неизвестные могут быть вычислены последовательно. Сначала вычисляются u_0 и σ_{z0} , затем через них — ε_{x0} , σ_{x0} , ε_{z0} . Потом по известным σ_{x0} , ε_{z0} вычисляются w_1 и τ_1 в первом приближении и т.д.

Величины начального приближения выберем такими

$$w = w_0(x), \quad \tau = \tau_0(x)$$

считая поперечное перемещение и касательное напряжение в нулевом приближении не зависящими от поперечной координаты. Для удобства процедуру вычислений разделим в силу линейности задачи на три элементарных: w , τ и 0 — процессы, считая, что в w -процессе задается величина начального приближения $w_0 \neq 0$, а $\tau_0 = 0$. В τ -процессе наоборот, $w_0 = 0$, а $\tau_0 \neq 0$. 0 -процесс выделен для того, чтобы учесть появляющиеся в процессе вычисления произволы интегрирования, не учитываемые в w и τ - процессах.

Проводя теперь вычисления по описанной схеме, получаем следующие выражения для искомых неизвестных:

в w -процессе

$$w_0 = w_0(x), \quad \tau_0 = 0, \quad u_0 = -\varepsilon w_0' z, \quad \sigma_{z0} = 0, \quad \varepsilon_{x0} = -\varepsilon^2 w_0'' z, \quad \sigma_{x0} = -E\varepsilon^2 w_0'' z$$

$$\varepsilon_{z0} = \nu\varepsilon^2 w_0'' z, \quad w_1 = \varepsilon^2 w_0'' \int_0^z \nu z dz, \quad \tau_1 = \varepsilon^3 w_0''' \int_0^z E z dz, \quad \sigma_{z1} = -\varepsilon^4 w_0^{IV} \int_0^z \int_0^z E z dz dz$$

в τ -процессе

$$w_0 = 0, \quad \tau_0 = \tau_0(x), \quad u_0 = \tau_0 \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz, \quad \sigma_{z0} = -\varepsilon \tau_0' z, \quad \varepsilon_{x0} = \varepsilon \tau_0' \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz,$$

$$\sigma_{x0} = \varepsilon \tau_0' \left[E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz - \nu z \right], \quad \varepsilon_{z0} = \varepsilon \tau_0' \left[\nu \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz - \frac{1-\nu^2}{E} z \right]$$

$$w_0 = \varepsilon \tau_0' \left[\int_0^z \nu \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz dz - \int_0^z \frac{1-\nu^2}{E} z dz \right], \quad \tau_1 = \varepsilon^2 \tau_0'' \left[-\int_0^z E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz dz + \int_0^z \nu z dz \right]$$

$$\sigma_{z1} = -\varepsilon^3 \tau_0''' \left[-\int_0^z E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz dz + \int_0^z \nu z dz \right] dz$$

в 0 -процессе

$$w_0 = 0, \quad \tau_0 = 0, \quad u_0 = u_0(x), \quad \sigma_{z0} = \sigma_{z0}(x), \quad \varepsilon_{x0} = \varepsilon u_0', \quad \sigma_{x0} = E\varepsilon u_0' + \nu\sigma_{z0},$$

$$\varepsilon_{z0} = -\nu\varepsilon u_0' + \frac{1-\nu^2}{E} \sigma_{z0}, \quad w_0 = -\varepsilon u_0' \int_0^z \nu dz + \sigma_{z0} \int_0^z \frac{1-\nu^2}{E} dz, \quad \tau_0 = -\varepsilon^2 u_0'' \int_0^z E dz - \varepsilon \sigma_{z0}' \int_0^z \nu dz$$

$$u_1 = \varepsilon^2 u_0'' \left[-\int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} \int_0^z E dz dz + \int_0^z \int_0^z \nu z dz dz \right] - \varepsilon \sigma_{z0}' \left[\int_0^z \int_0^z \frac{1-\nu^2}{E} z dz dz + \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} \int_0^z \nu z dz dz \right]$$

$$\sigma_{z1} = \varepsilon^3 u_0''' \int_0^z \int_0^z E dz dz + \varepsilon^2 \sigma_{z0}'' \int_0^z \int_0^z \nu dz dz$$

В итоге получим следующую запись искомых неизвестных в первом приближении

$$\begin{aligned} w &= w_0 + \varepsilon^2 w_0'' \int_0^z \nu dz + \varepsilon \tau_0' \left[\int_0^z \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz dz - \int_0^z \frac{1-\nu^2}{E} dz \right] - \varepsilon u_0' \int_0^z \nu dz + \sigma_{z0} \int_0^z \frac{1-\nu^2}{E} dz \\ u &= -\varepsilon w_0' z + \tau_0 \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz + u_0 + \varepsilon^2 u_0'' \left[-\int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} \int_0^z E dz dz + \int_0^z \int_0^z \nu dz dz \right] + \\ &\quad + \varepsilon \sigma_{z0}' \left[-\int_0^z \int_0^z \frac{1-\nu^2}{E} dz dz - \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} \int_0^z \nu dz dz \right] \\ \tau &= \varepsilon^3 w_0''' \int_0^z E dz + \tau_0 + \varepsilon^2 \tau_0'' \left[-\int_0^z E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz dz + \int_0^z \nu dz \right] - \varepsilon^2 u_0'' \int_0^z E dz - \varepsilon \sigma_{z0}' \int_0^z \nu dz \\ \sigma_z &= -\varepsilon^4 w_0^{IV} \int_0^z \int_0^z E dz dz - \varepsilon \tau_0' z - \varepsilon^3 \tau_0''' \int_0^z \left[-\int_0^z E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz dz + \int_0^z \nu dz \right] dz + \\ &\quad + \sigma_{z0} + \varepsilon^3 u_0''' \int_0^z \int_0^z E dz dz + \varepsilon^2 \sigma_{z0}'' \int_0^z \int_0^z \nu dz dz \\ \sigma_x &= -E \varepsilon^2 w_0'' z + \varepsilon \tau_0' \left[E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz - \nu z \right] + E \varepsilon u_0' + \\ &\quad + \varepsilon^3 u_0''' \int_0^z E dz + \nu \sigma_{z0} + \varepsilon^2 \sigma_{z0}'' \int_0^z \int_0^z \nu dz dz \\ \varepsilon_{x0} &= -\varepsilon^2 w_0'' z + \varepsilon \tau_0' \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz + \varepsilon u_0' \\ \varepsilon_{z0} &= \nu \varepsilon^2 w_0'' z + \varepsilon \tau_0' \left[\nu \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz - \frac{1-\nu^2}{E} z \right] - \nu \varepsilon u_0' + \frac{1-\nu^2}{E} \sigma_{z0} \end{aligned} \quad (2)$$

Неизвестные выражены через четыре новые величины $w_0, \tau_0, \sigma_{z0}, u_0$. Две последние являются произволами интегрирования системы (1), при $w = \tau = 0$ и являются функциями только координаты x .

Теперь надо выполнить граничные условия на длинных краях полосы. Примем их такими

$$\begin{aligned} \tau &= \tau_+ \text{ при } z=1, \tau = \tau_- \text{ при } z=-1 \\ \sigma_z &= q_+ \text{ при } z=1, \sigma_z = q_- \text{ при } z=-1 \end{aligned} \quad (3)$$

Подставив выражения τ и σ_z из (2) в эти условия, получим четыре уравнения для определения $w_0, \tau_0, \sigma_{z0}, u_0$.

Первые два условия с помощью выражения для τ из (2) принимают форму с определенными интегралами от жесткостных характеристик материала

$$\varepsilon^3 w_0''' \int_0^1 E dz + \tau_0 + \varepsilon^2 \tau_0'' \left[-\int_0^1 E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz dz + \int_0^1 \nu dz \right] - \varepsilon^2 u_0'' \int_0^1 E dz - \varepsilon \sigma_{z0}' \int_0^1 \nu dz = \tau_+$$

$$\varepsilon^3 w_0''' \int_0^{-1} E z dz + \tau_0 + \varepsilon^2 \tau_0'' \left[- \int_0^{-1} E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz dz + \int_0^{-1} \nu z dz \right] - \varepsilon^2 u_0'' \int_0^{-1} E dz - \varepsilon \sigma'_{z0} \int_0^{-1} \nu dz = \tau_-$$

Преобразуем эти два уравнения, складывая и вычитая их попарно

$$\begin{aligned} & \varepsilon^3 w_0''' \left(\int_0^1 E z dz + \int_0^{-1} E z dz \right) + 2\tau_0 + \\ & + \varepsilon^2 \tau_0'' \left[- \int_0^1 E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz dz + \int_0^1 \nu z dz - \int_0^{-1} E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz dz + \int_0^{-1} \nu z dz \right] - \\ & - \varepsilon^2 u_0'' \left(\int_0^1 E dz + \int_0^{-1} E dz \right) - \varepsilon \sigma'_{z0} \left(\int_0^1 \nu dz + \int_0^{-1} \nu dz \right) = \tau_+ + \tau_- \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & \varepsilon^3 w_0''' \left(\int_0^1 E z dz - \int_0^{-1} E z dz \right) + \\ & + \varepsilon^2 \tau_0'' \left[- \int_0^1 E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz dz + \int_0^1 \nu z dz + \int_0^{-1} E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz dz - \int_0^{-1} \nu z dz \right] - \\ & - \varepsilon^2 u_0'' \left(\int_0^1 E dz - \int_0^{-1} E dz \right) - \varepsilon \sigma'_{z0} \left(\int_0^1 \nu dz - \int_0^{-1} \nu dz \right) = \tau_+ - \tau_- \end{aligned}$$

Последнее уравнение преобразуем к более компактному виду с интегралами, вычисленными по всей высоте полосы

$$\begin{aligned} & \varepsilon^3 w_0''' \int_{-1}^{+1} E z dz + \varepsilon^2 \tau_0'' \left[- \int_{-1}^1 E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz dz + \int_{-1}^1 \nu z dz \right] - \\ & - \varepsilon^2 u_0'' \int_{-1}^1 E dz - \varepsilon \sigma'_{z0} \int_{-1}^1 \nu dz = \tau_+ - \tau_- \end{aligned} \quad (5)$$

тогда как первое оставим без изменения.

Теперь запишем уравнения, соответствующие граничным условиям (3)

$$\begin{aligned} & -\varepsilon^4 w_0^{IV} \int_0^1 \int_0^z E z dz dz - \varepsilon \tau_0' - \varepsilon^3 \tau_0''' \left[- \int_0^z E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz dz + \int_0^z \nu z dz \right] dz + \\ & + \varepsilon^3 u_0''' \int_0^1 \int_0^z E dz dz + \sigma_{z0} + \varepsilon^2 \sigma_{z0}'' \int_0^1 \int_0^z \nu dz dz = q_+ \\ & -\varepsilon^4 w_0^{IV} \int_0^{-1} \int_0^z E z dz dz + \varepsilon \tau_0' - \varepsilon^3 \tau_0''' \left[- \int_0^z E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz dz + \int_0^z \nu z dz \right] dz + \\ & + \varepsilon^3 u_0''' \int_0^{-1} \int_0^z E dz dz + \sigma_{z0} + \varepsilon^2 \sigma_{z0}'' \int_0^{-1} \int_0^z \nu dz dz = q_- \end{aligned}$$

Преобразуем эти два уравнения, складывая и вычитая их попарно

$$\begin{aligned} & -\varepsilon^4 w_0^{IV} \left(\int_0^1 \int_0^z E z dz dz + \int_0^{-1} \int_0^z E z dz dz \right) - \\ & - \varepsilon^3 \tau_0''' \left\{ \int_0^1 \left[- \int_0^z E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz dz + \int_0^z \nu z dz \right] + \int_0^{-1} \left[- \int_0^z E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dz dz + \int_0^z \nu z dz \right] \right\} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & +\varepsilon^3 u_0''' \left(\int_0^1 \int_0^z Edzdz + \int_0^{-1} \int_0^z Edzdz \right) + 2\sigma_{z_0} + \varepsilon^2 \sigma_{z_0}'' \left(\int_0^1 \int_0^z \nu dzdz + \int_0^{-1} \int_0^z \nu dzdz \right) = q_+ + q_- \\
 & -\varepsilon^4 w_0^{IV} \left(\int_0^1 \int_0^z Ezdzdz - \int_0^{-1} \int_0^z Ezdzdz \right) - 2\varepsilon \tau_0' \quad (6) \\
 & -\varepsilon^3 \tau_0' \left\{ \int_0^1 \left[-\int_0^z E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dzdz + \int_0^z \nu dzdz \right] dz - \int_0^{-1} \left[-\int_0^z E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dzdz + \int_0^z \nu dzdz \right] dz \right\} + \\
 & +\varepsilon^3 u_0''' \left(\int_0^1 \int_0^z Edzdz - \int_0^{-1} \int_0^z Edzdz \right) + \varepsilon^2 \sigma_{z_0}'' \left(\int_0^1 \int_0^z \nu dzdz - \int_0^{-1} \int_0^z \nu dzdz \right) = q_+ - q_-
 \end{aligned}$$

Последнее уравнение преобразуем к более компактному виду с интегралами, вычисленными по всей высоте полосы

$$\begin{aligned}
 & -\varepsilon^4 w_0^{IV} \int_{-1}^1 \int_0^z Ezdzdz - 2\varepsilon \tau_0' + \varepsilon^3 \tau_0' \int_{-1}^1 \left[\int_0^z E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dzdz - \int_0^z \nu dzdz \right] dz + \\
 & +\varepsilon^3 u_0''' \int_{-1}^1 \int_0^z Edzdz + \varepsilon^2 \sigma_{z_0}'' \int_{-1}^1 \int_0^z \nu dzdz = q_+ - q_- \quad (7)
 \end{aligned}$$

Таким образом, описание исходной задачи сводится к четырем уравнениям (4)-(7) с четырьмя неизвестными $w_0, \tau_0, \sigma_{z_0}, u_0$

$$\begin{aligned}
 & \varepsilon^3 w_0''' e_{11} + 2\tau_0 - \varepsilon^2 \tau_0'' e_{12} - \varepsilon^2 u_0'' e_{13} - \varepsilon \sigma_{z_0}' e_{14} = \tau_+ + \tau_- \\
 & -\varepsilon^4 w_0^{IV} e_{21} - 2\varepsilon \tau_0' + \varepsilon^3 \tau_0''' e_{22} + \varepsilon^3 u_0''' e_{23} + \varepsilon^2 \sigma_{z_0}'' e_{24} = q_+ - q_- \\
 & \varepsilon^3 w_0''' e_{31} + \varepsilon^2 \tau_0'' e_{32} - \varepsilon^2 u_0'' e_{33} - \varepsilon \sigma_{z_0}' e_{34} = \tau_+ - \tau_- \\
 & -\varepsilon^4 w_0^{IV} e_{41} - \varepsilon^3 \tau_0''' e_{42} + \varepsilon^3 u_0''' e_{43} + 2\sigma_{z_0} + \varepsilon^2 \sigma_{z_0}'' e_{44} = q_+ + q_- \quad (8)
 \end{aligned}$$

в которых осредненные коэффициенты определяются следующими выражениями

$$\begin{aligned}
 e_{11} &= \int_0^1 Ezdz + \int_0^{-1} Ezdz, \quad e_{12} = \int_0^1 E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dzdz - \int_0^1 \nu dzdz + \int_0^{-1} E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dzdz - \int_0^{-1} \nu dzdz \\
 e_{13} &= \int_0^1 Edz + \int_0^{-1} Edz, \quad e_{14} = \int_0^1 \nu dz + \int_0^{-1} \nu dz \\
 e_{21} &= \int_{-1}^1 \int_0^z Ezdzdz, \quad e_{22} = \int_{-1}^1 \left[\int_0^z E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dzdz - \int_0^z \nu dzdz \right] dz \\
 e_{23} &= \int_{-1}^1 \int_0^z Edzdz, \quad e_{24} = \int_{-1}^1 \int_0^z \nu dzdz \\
 e_{31} &= \int_{-1}^1 Ezdz, \quad e_{32} = \left[-\int_{-1}^1 E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dzdz + \int_{-1}^1 \nu dzdz \right], \quad e_{33} = \int_{-1}^1 Edz, \quad e_{34} = \int_{-1}^1 \nu dz \\
 e_{41} &= \int_0^1 \int_0^z Ezdzdz + \int_0^{-1} \int_0^z Ezdzdz \\
 e_{42} &= \int_0^1 \left[-\int_0^z E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dzdz + \int_0^z \nu dzdz \right] dz + \int_0^{-1} \left[-\int_0^z E \int_0^z \frac{2(1+\nu)}{E} dzdz + \int_0^z \nu dzdz \right] dz
 \end{aligned}$$

$$e_{43} = \int_0^1 \int_0^z E dz dz + \int_0^{-1} \int_0^z E dz dz, \quad e_{44} = \int_0^1 \int_0^z \nu dz dz + \int_0^{-1} \int_0^z \nu dz dz$$

В частности, для прикладных задач, ограничивающихся моделями аналогичными классической теории балок и имеющих дело с медленно меняющимися по длине нагрузками, систему (8) можно упростить, воспользовавшись свойством малой изменяемости, отбросив производные с малыми множителями по сравнению с самой функцией. Вместо системы (8) будем иметь такую систему

$$\begin{aligned} \varepsilon^3 w_0''' e_{11} + 2\tau_0 - \varepsilon^2 u_0'' e_{13} - \varepsilon \sigma_{z0}' e_{14} &= \tau_+ + \tau_- \\ -\varepsilon^4 w_0^{IV} e_{21} - 2\varepsilon \tau_0' + \varepsilon^3 u_0''' e_{23} + \varepsilon^2 \sigma_{z0}'' e_{24} &= q_+ - q_- \\ \varepsilon^3 w_0''' e_{31} + \varepsilon^2 \tau_0'' e_{32} - \varepsilon^2 u_0'' e_{33} - \varepsilon \sigma_{z0}' e_{34} &= \tau_+ - \tau_- \\ -\varepsilon^4 w_0^{IV} e_{41} - \varepsilon^3 \tau_0''' e_{42} + \varepsilon^3 u_0''' e_{43} + 2\sigma_{z0} &= q_+ + q_- \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь относительный вклад каждого слагаемого в каждое уравнение зависит от его весового множителя. Будем разыскивать решение системы в виде разложения каждого искомого неизвестного в асимптотический ряд по малому параметру ε

$$\begin{aligned} w_0 &= \varepsilon^{-a} (w_{00} + \varepsilon^2 w_{01} + \dots), \quad \tau_0 = \varepsilon^{-b} (\tau_{00} + \varepsilon^2 \tau_{01} + \dots) \\ u_0 &= \varepsilon^{-c} (u_{00} + \varepsilon^2 u_{01} + \dots), \quad \sigma_{z0} = \varepsilon^{-d} (\sigma_{z00} + \varepsilon^2 \sigma_{z01} + \dots) \end{aligned}$$

Множители перед скобками разложений являются весовыми коэффициентами каждой из искоемых величин. Показатели a, b, c, d должны быть непротиворечивыми, допуская определение всех искоемых неизвестных рассматриваемой системы рекуррентным образом в порядке возрастания номера приближения [7]. Этому условию удовлетворяют такие значения показателей

$$a = 4, \quad b = 1, \quad c = 3, \quad d = 0 \quad (10)$$

Для других значений показателей система (9), в которой оставлены только главные члены, будет противоречивой, т.е. она будет распадаться на подсистемы с числом неизвестных не совпадающим с их порядком.

В случае значений показателей (10) асимптотические ряды для неизвестных имеют вид

$$\begin{aligned} w_0 &= \varepsilon^{-4} (w_{00} + \varepsilon^2 w_{01} + \dots), \quad \tau_0 = \varepsilon^{-1} (\tau_{00} + \varepsilon^2 \tau_{01} + \dots) \\ u_0 &= \varepsilon^{-3} (u_{00} + \varepsilon^2 u_{01} + \dots), \quad \sigma_{z0} = \sigma_{z00} + \varepsilon^2 \sigma_{z01} + \dots \end{aligned}$$

Подставим разложения в уравнения (9), в которых для простоты примем

$$\tau_+ = \tau_- = q_- = 0$$

оставив загруженным только верхний край полосы.

Для главных членов разложения получим систему уравнений

$$\begin{aligned} w_{00}''' e_{11} + 2\tau_{00} - u_{00}'' e_{13} &= 0 \\ -w_{00}^{IV} e_{21} - 2\tau_{00}' + u_{00}''' e_{23} &= q_+ \\ w_{00}''' e_{31} - u_{00}'' e_{33} &= 0 \\ -w_{00}^{IV} e_{41} + u_{00}''' e_{43} + 2\sigma_{z00} &= 0 \end{aligned}$$

Из первых трех уравнений можно получить одно уравнение для w_{00}

$$C w_{00}^{IV} = q \quad (11)$$

в котором

$$C = e_{11} - e_{21} - \frac{e_{31}}{e_{33}}(e_{13} + e_{23}) =$$

$$= \int_0^1 E z dz + \int_0^{-1} E z dz - \int_{-1}^1 \int_0^z E z dz dz - \frac{\int_{-1}^1 E z dz}{\int_{-1}^1 E dz} \left(\int_0^1 E dz + \int_0^{-1} E dz + \int_{-1}^1 \int_0^z E z dz dz \right)$$

и через известную теперь величину w_{00} выражения для остальных неизвестных

$$u_{00}'' = \frac{e_{31}}{e_{33}} w_{00}''', \quad \sigma_{z00} = \frac{1}{2} (w_{00}^{IV} e_{41} - u_{00}''' e_{43}), \quad \tau_{00} = \frac{1}{2} (u_{00}'' e_{13} - w_{00}''' e_{11}) \quad (12)$$

При $E = E_c = \text{const}$ имеем

$$e_{13} = e_{23} = 0, \quad e_{11} = E_c, \quad e_{21} = \frac{1}{3} E_c$$

и это дает классическое уравнение изгиба балки (в безразмерном виде)

$$E_c \varepsilon^4 w_0^{IV} = q$$

Коэффициент жесткости (11) может быть легко вычислен для любого закона распределения модуля упругости. В случае медленно меняющегося НДС, входящие в выражения (11), (12) интегралы не зависят от коэффициента Пуассона. После определения неизвестных $w_{00}, \tau_{00}, \sigma_{z00}, u_{00}$ с помощью уравнений (11), (12) их надо помножить на весовые коэффициенты и подставить в выражения, задающие закон распределения компонент напряженно-деформированного состояния (2) в каждой точке.

Если модуль E задан как кусочно-постоянная функция, это будет соответствовать случаю слоистой полосы. Перемещения w и u и напряжения σ_z и τ в выражениях (2) непрерывны, как для медленно меняющегося состояния, так и для быстро меняющегося. Напряжение σ_z и деформация ε_z могут иметь устранимые разрывы.

Если рассматривать быстроменяющиеся состояния, необходимо решать уравнения (9) без каких-либо отбрасываний производных. Они в случае статической задачи возникают в области приложения локальной нагрузки (сосредоточенной силы) и имеют характер пограничного слоя, убывающий по мере удаления от места приложения [4]. В динамическом случае удерживание производных дает возможность учесть волновые решения, подобно тому, как это сделано в [5]. Эти задачи требуют отдельного рассмотрения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П. Осреднение процессов в периодических средах. – М.: Наука, 1984. – 352 с.
2. Санчес-Паленсия Э. Неоднородные среды и теория колебаний. – М.: Мир, 1984. – 472 с.
3. Зверьев Е.М. Декомпозиционные свойства принципа сжатых отображений // Механика композиционных материалов и конструкций. – 1997. – Т.3. – №2. – С.3-19.
4. Зверьев Е.М. Анализ гипотез, используемых при построении теории балок и плит // ПММ. – 2003. – Т.67. – Вып.3. – С.472-481.

5. *Зверьяев Е.М., Макаров Г.И.* Общий метод построения теорий типа Тимошенко // ПММ. – 2008. – Т.72. – Вып.2. – С.308-321.
6. *Колчин Г.Б.* Расчет элементов упругих конструкций из неоднородных материалов. – Кишинев.: «Карта молдовенясеэ», 1971. – 172 с.
7. *Гольденвейзер А.Л.* Влияние условий закрепления краев тонкой упругой оболочки на ее напряженное состояние / Труды Министерства авиационной промышленности СССР. – 1948. – №669.

УДК 539.3

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НЕОДНОРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ И СТРУКТУР*

Лурье С.А., Полянский М.Н., Соляев Ю.О., Лыкосова Е.Д.

*ФГБУН Институт прикладной механики Российской академии наук, г. Москва,
Россия*

РЕЗЮМЕ

Предлагается модель градиентной теплопроводности, корректная математическая модель которой строится с помощью вариационного формализма. Модель учитывает известный эффект термосопротивления, проявляющийся в зонах контакта компонент многокомпонентной структуры металл-неметалл. При этом обеспечивается равномерное распределение температур на границе контакта. Представленная модель является альтернативой известных феноменологических моделей, основанных на введении скачка температур на границе контакта, либо на введении феноменологических моделей электронной и фононной теплопроводности.

Ключевые слова: теплопроводность; градиентная теплопроводность; неоднородные материалы; межфазный эффект термосопротивления

1. ВВЕДЕНИЕ

Эффект аномального термосопротивления внутренних границ составных многокомпонентных сред был впервые зафиксирован П.Л.Капицей в 1941 году. П.Л.Капица [1] предложил для количественной оценки термосопротивления использовать коэффициент пропорциональности между потоком тепла и скачком температуры при переходе через границу контакта различных материалов. Это фактически устанавливает справедливость некоторой формы закона Фурье для границ.

Для описания термобарьерных свойств микро/наноразмерных структур часто применяются методы атомистического моделирования [2,3]. Другие методы описания пограничного термосопротивления основаны на использовании феноменологических моделей электронной проводимости металлов и фононной проводимости в неметаллах. Такие подходы применяются для тонкослойных покрытий металл-полупроводник [4,5]. При этом, фактически, постулируется наличие двух типов температурных полей, для каждого из которых процесс теплопроводности определяется законом Фурье. Следовательно, закон Фурье расширяется на оба типа проводимости. Часто в прикладных задачах при описании эффектов термосопротивления границ в континуальных моделях на контакте сред задается скачок температуры [3,4], величина которого связана с коэффициентом термосопротивления границы, который, в свою очередь, является физической характеристикой границы исследуемых контактирующих материалов. Известно достаточно большое количество работ, в которых были установлены значения

* Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 12-01-00273-а, 11-01-12081 офи-м) и ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 г.» ГК 02.740.11.0790, соглашение №8221.

термосопротивления границ для различных типов контактирующих материалов. Например, в недавней работе [6] приведены результаты исследования термосопротивления границ раздела в структурах кремний-алмаз, которые применяются в микроэлектронных устройствах (в частности, в интегральных схемах). Экспериментальным и теоретическим исследованиям по оценке коэффициентов термосопротивления границ в различных структурах посвящено большое количество научных работ (см. например, работы [7-12]). В целом, как показано в работе [13], для большого числа границ твердых тел температурное сопротивление лежит в пределах $5 \cdot 10^{-9} - 5 \cdot 10^{-8} \text{ м}^2 \text{ К/Вт}$.

2. ВАРИАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

В работах [14-16] вариационная формулировка для расширенной термодинамики была представлена как корректная вариационная пространственно-временная модель обобщенной теории упругости для пространственно-временного континуума в четырехмерном пространстве (4D), где в качестве четвертой координаты выступает нормированное время. Показано при этом, что для такой модели энтропия может играть роль обобщенной переменной, а температура соответствующей компонентой четырехмерного тензора обобщенных напряжений. Такая постановка задачи в перемещениях предполагает, что в 4D определена плотность внутренней энергии. Очевидно, что полученная вариационная постановка может быть переписана путем перехода к потенциалу Гиббса с использованием преобразования Лежандра. Тогда независимыми параметрами системы будет не тензор обобщенной деформации, куда в качестве компоненты входит плотность энтропии, а тензор обобщенных напряжений, где в качестве одной из компонент является приращение температуры. При формулировке вариационной задачи можно использовать и потенциал свободной энергии. Тогда также приращение температуры является обобщенным параметром функционала при вариационном описании среды.

Рассмотрим случай классической статической теплопроводности, и построим соответствующую вариационную модель. Полагаем для простоты, что при общей постановке с использованием, например, потенциала свободной энергии Гельмгольца поля перемещений равны нулю (связные термомеханические эффекты отсутствуют), а приращение температуры не зависит от временной координаты. Тогда для проблемы линейной теплопроводности свободная энергия $E(T)$ может быть записана в виде

$$E(T) = \frac{1}{2} \int_G k(|\nabla T|^2) dV, \quad (1)$$

где интегрирование проводится по объему G , занимаемому исследуемым телом, $k(x)$ – коэффициент теплопроводности, который может быть и переменным по координатам $x: (x_i, i=1, 2, 3)$.

Вариационное уравнение для рассматриваемого случая записывается следующим образом

$$\delta L = \delta(W - E) = 0, \quad W \equiv \int_G f^G T dV + \int_{\partial G} f^{\partial G} T dV', \quad (2)$$

Здесь $(f^G, f^{\partial G})$ – заданные в объеме G и на поверхности ∂G скалярные поля, определяющие плотности тепловых источников.

Учитывая выражение (1) и используя процедуру интегрирования по частям, получим из условия стационарности (2) следующее вариационное уравнение, определяющее математическую постановку линейной задачи теплопроводности ($k = \text{const}$)

$$\delta L = \int_G (k \nabla^2 T + f^G) \delta T dV + \int_{\partial G} \left((k \partial(T) / \partial n + f^{\partial G}) \delta T \right) dV' = 0 \quad (3)$$

Уравнение (3) дает полную формулировку классической задачи стационарной теплопроводности. Действительно, уравнение

$$k \nabla^2 T + f^G = 0$$

является уравнением стационарной теплопроводности. Оно может быть переписано в следующем виде

$$\partial q_i / \partial x_i - f^G = 0, \quad q_i = -k(\partial T / \partial x_i) \quad (4)$$

где q_i – вектор теплового потока ($\mathbf{q} = -k \nabla(T)$, $\nabla(T) = \text{grad}(T)$)

Второе слагаемое в (3) определяет спектр возможных граничных условий:

$$T = T_0(x_i \eta_{ij}), \quad (\eta_{ij} = \delta_{ij} - n_i n_j) \quad (5)$$

$$k(\partial T / \partial n) + f^{\partial G}(x_i \eta_{ij}) = 0 \quad (6)$$

Первое из записанных краевых условий (5) соответствует заданию температуры на поверхности тела, второе (6) – заданию теплового потока, т.к. $T_0(x)$ – температура, заданная на поверхности тела, $\partial T / \partial n = (\partial T / \partial x_i) n_i$, $\mathbf{n} = \{n_i\}$ – вектор нормали на границе тела, $s_j = x_i \eta_{ij}$ – координаты определенные на поверхности с нормалью $\mathbf{n}$.

3. МОДЕЛЬ ГРАДИЕНТНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Построим вариант градиентной двухпараметрической модели теплопроводности, в которой один параметр – C отвечает за масштабные эффекты в объеме тела, а второй – R_s определяет свойства термосопротивления границы тела. В данном случае вариационное уравнение запишем в виде

$$\delta L = - \int_G (k \nabla^2 (C^{-1} \nabla^2 T) - f^G) \delta T dV + \int_{\partial G} [k \partial (C^{-1} \nabla^2 T) / \partial n + f^{\partial G}] \delta T dV' - \int_{\partial G} [k [C^{-1} \nabla^2 T - R_s (\partial T / \partial n)] \delta (\partial T / \partial n)] dV' = 0, \quad (7)$$

где $\nabla_C^2 T = \nabla^2 T - C T$.

Для получения (7) было использовано следующее выражение для свободной энергии $E(T)$, являющееся естественным обобщением выражения (1)

$$E(T) = E_G(T) + E_{\partial G}(T) = \frac{1}{2} \int_G k \left(|\nabla T|^2 + C^{-1} |\nabla^2 T|^2 \right) dV + \frac{1}{2} \int_{\partial G} R_s \left(\frac{\partial T}{\partial n} \frac{\partial T}{\partial n} \right) dV'.$$

Вариационное уравнение (7) дает полную математическую постановку обобщенной градиентной теплопроводности (формулировку краевой задачи). Уравнение стационарной теплопроводности (уравнение Эйлера) имеет следующий вид

$$k\nabla^2(C^{-1}\nabla_c^2 T) - f^G = 0. \quad (8)$$

Уравнение (7) дает и весь спектр краевых условий на поверхности ∂G

$$\begin{aligned} T &= T_0(x_i \eta_{ij}), \quad \eta_{ij} = \delta_{ij} - n_i n_j, \\ k\partial(C^{-1}\nabla_c^2 T)/\partial n + f^{\partial G} &= 0, \\ \partial T/\partial n &= q^*(x_i \eta_{ij}), \quad \eta_{ij} = \delta_{ij} - n_i n_j \\ k[C^{-1}\nabla^2 T - R_s(\partial T/\partial n)] &= 0 \end{aligned} \quad (9)$$

Учитывая уравнение теплопроводности (7) легко ввести обобщенный закон теплопроводности, который можно считать обобщенным законом Фурье

$$\mathbf{q} = -k\nabla(T - C^{-1}\nabla(T)), \quad \nabla(T) = \text{grad}(T) \quad (10)$$

Уравнение градиентной теплопроводности имеет повышенный порядок. Соответственно, для градиентной теплопроводности, вариационное уравнение (7) дает более широкий список краевых условий. «Кинематическое» краевое условие для температур дается первым равенством в (9) и является классическим (сравни с (5)). Оно дополняется неклассическим «кинематическим» краевым условием на «полный» тепловой поток (третье условие в (9)). Естественное краевое условие («статическое» условие, второе в (9)) на поток, определенный формулой (10) соответствует классическому условию (6). Оно дополняется «статическим» неклассическим краевым условием на градиент «полного» теплового потока, записанного с учетом термосопротивления – $R_s(\partial T/\partial n)$. Это слагаемое в последнем краевом условии (9) связано с плотностью свободной энергии на поверхности тела $R_s((\partial T/\partial n)(\partial T/\partial n))$. Параметр R_s является, таким образом, характеристикой теплопроводности границы тела.

Вариационная постановка (7) позволяет сформулировать и краевые условия для контактной задачи теплопроводности, когда стационарная задача теплопроводности формулируется для неоднородных составных тел

$$[T] = [\partial T/\partial n] = [M(T)] = [Q(T)] = 0, \quad (11)$$

где $M(T) = kC^{-1}\nabla^2 T$, и $Q(T) = -kC[\partial(\nabla_c^2 T)/\partial n]$, $[f] = f_m - f_l$ – скачок значений функции на границе раздела фаз.

Модель градиентной теплопроводности (8)-(11) позволяет решать проблему оценки эффективных теплофизических свойств неоднородных многофазных материалов с микро- и наноструктурой. В случае идеальных тепловых контактов, когда преобладает электронный тип теплопроводности градиентная модель позволяет объяснять эффекты аномального увеличения эффективной теплопроводности, когда материнская фаза армирована малыми включениями с высокими теплопроводящими свойствами. Эти эффекты подобны эффектам усиления, наблюдающиеся при описании эффективных механических свойств нанокомпозитов.

С другой стороны, за счет возможности учета параметра, определяющего термосопротивление границ, градиентная модель теплопроводности позволяет моделировать и неклассические эффекты высоких градиентов температур на границах многофазных материалов, характерных для неоднородных структур металл-неметалл (эффект Капицы).

4. НЕКОТОРЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В работе [11] методом молекулярной динамики изучались межфазные эффекты в теплопроводности, связанные с граничным термосопротивлением. Для этого рассматривалась периодическая структура, на фрагментах малой длины которой задавались источники и стоки тепла (рис.1). По результатам прямого численного моделирования методом молекулярной динамики исследовались неклассические межфазные эффекты в окрестности границ контакта средней части материала представительного фрагмента с областью задания источников тепла. В качестве материала рассматривался Sillinger-Weber Кремний, в котором можно пренебречь движением электронов, и, следовательно, так называемой электронной теплопроводностью.

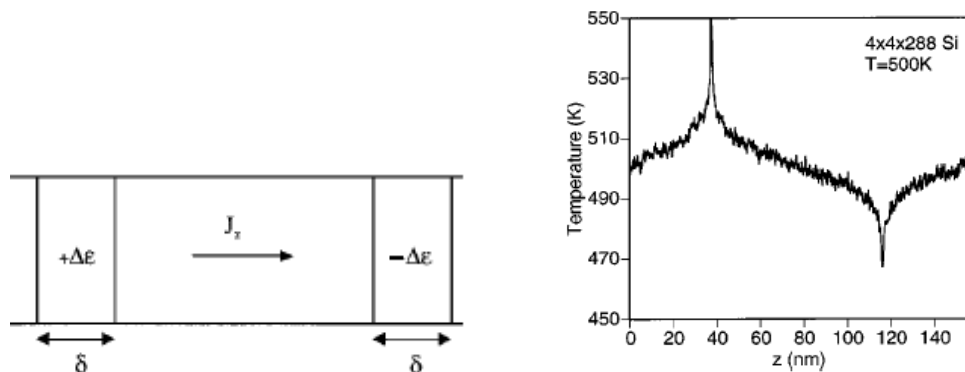


Рис.1. Схема периодической структуры для прямого численного моделирования и характерный профиль локализации распределения в температуры в окрестности межфазных границ, где заданы источник и сток тепла.

Размер областей источника и стока тепла выбирался намного меньше длины фрагмента 2. Характерное распределение тепла в кремнии представлено на рис.1 при средней температуре 500K. Источник локализован при $z = 39 \text{ nm}$, а сток при $z = 117 \text{ nm}$. Видно, что в середине фрагмента (рис.1) реализуется классический закон распространения тепла Фурье (на левой части рис.1 J_x -тепловой поток). Однако в окрестности межфазных границ (правая часть рис.1) имеет место резкое изменение температуры, характерный для межфазного эффекта термосопротивления.

Рассмотрим теперь градиентную модель теплопроводности (8)-(11) и получим решение задачу о распространении тепла в условно составной периодической структуре, аналогичной той, что была изучена в работе [11]. В составной среде выделим представительный фрагмент длиной $2l$ (рис.2).

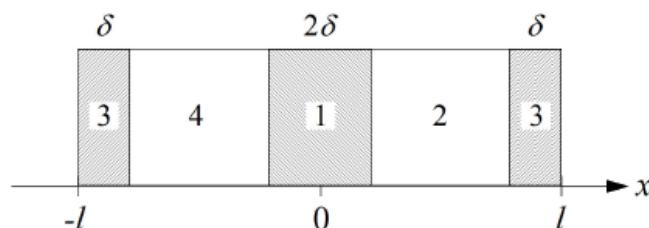


Рис.2. Представительный фрагмент периодической структуры.

Положим, что в части структуры 1 с длиной 2δ задан равномерно распределенный источник тепла с плотностью $f^G = q_0$. В части структуры 3 с той же самой длиной 2δ (имеют место периодические граничные условия) имеется равномерно распределенный сток тепла $f^G = -q_0$. Через фазу 2 тепло распространяется от части 1 к части 2 [11].

Результаты решения краевой задачи (8),(11) представлены на рис.3. При этом принималось что $Q = q_0/k$, k – коэффициент теплопроводности. $Q = 10$.

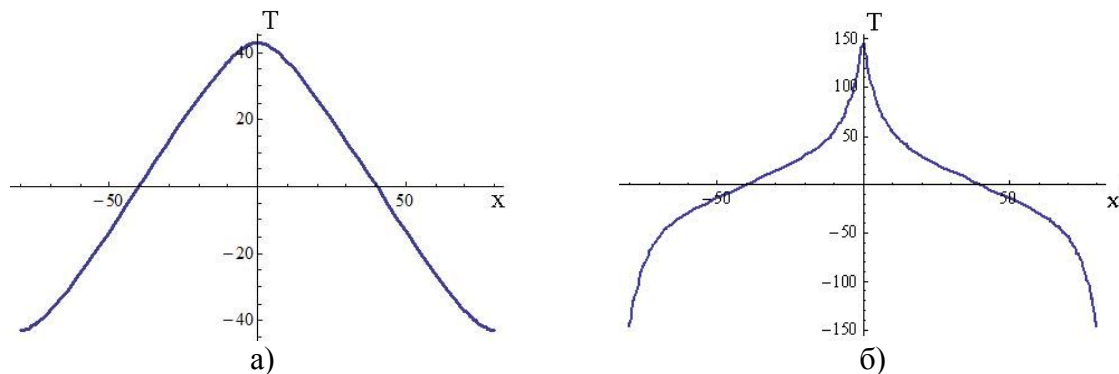


Рис.3. Профили распределения температур построенные для структуры, показанной на рис.2 на интервале $-l < x < l$. а) $R_s = 0$ – идеальный контакт без межфазного термосопротивления, б) $R_s = 7,24$ – контакт с межфазным термосопротивлением.

Для получения качественных результатов принимались следующие относительные параметры $Q = 10$, $\delta = 0.14$, $l = 80$, $C^{-1} = 5$. В случае идеального теплового контакта (рис.3а), полагалось $R_s = 0$. При моделировании межфазного термосопротивления принималось, что $R_s = 7,24$ (рис.3б). Здесь, как было определено ранее C^{-1} – масштабный параметр, R_s – параметр, характеризующий термосопротивление границы.

Сравнивая кривую, приведенную на правом рис.2, с кривой, представленной на рис.3б, мы видим, что предложенная градиентная модель, построенная с учетом возможного теплового сопротивления, позволяет качественно правильно описывать неклассические эффекты межфазного пограничного слоя в теплопроводности. Вдали от зон контакта решение в точности соответствует классическому закону Фурье, что следует и непосредственно из структуры решения градиентной теплопроводности. С другой стороны, кривая, представленная на рис.3а, дает гладкое распределение температур с гладким сопряжением по границам контакта. Такая ситуация, вероятно, имеет место в структурах металл-металл, когда процесс передачи тепла контролируется электронной теплопроводностью.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложен вариант градиентной теплопроводности, учитывающая масштабные эффекты в объеме и эффекты межфазного термосопротивления. Для стационарной проблемы распределения тепла сформулирована вариационная математическая модель, сводящаяся к краевой задаче с оператором четвертого

порядка. Показано, что предложенная градиентная модель теплопроводности позволяет качественно правильно учитывать неклассический эффект пограничного термосопротивления (эффект Капицы), который может определять эффективные свойства теплопроводности в структурированных средах.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Капица П.Л.* Исследование механизма теплопередачи в гелии II // ЖЭТФ. – 1941. – Т.2. – №1. – С.1-31.
2. *Gaughey A.J.H. MC, Kaviany M.* Phonon transport in molecular dynamics simulations: formulation and thermal conductivity prediction // *Advances in heat transfer*. – 2006. – Vol.39. – P.169-254.
3. *Zhou Ya, Anglin B., Strachan A.* Phonon thermal conductivity in nanolaminated composite metals via molecular dynamics // *J. of Chemical Physics*. – 2007. – Vol.127. – Iss.18. – 184702.
4. *Majumdar A., Reddy P.* Role of electron-phonon coupling in thermal conductance of metal-nonmetal interfaces // *Applied Physics Letters*. – 2004. – Vol.84. – Iss.23. – P.4768–4770.
5. *Ordóñez-Miranda J., Alvarado-Gil J.J., Yang R.* The effect of the electron-phonon coupling on the effective thermal conductivity of metal-nonmetal multilayers // *J. of Applied Physics*. – 2011. – Vol.109. – Iss.9. – P.10-14.
6. *Клоков А.Ю., Аминева Д.Ф., Шарков А.И., Ральченко В.Г., Галкина Т.И.* Тепловые параметры слоев и границ раздела в структурах кремний на алмазе // *Физика твердого тела*. – 2008. – Т.50. – №3. – С.2167-2173.
7. *Stoner R.J., Maris H.J.* Kapitza conductance and heat flow between solids at temperatures from 50 to 300K // *Phys. Rev. B*. – 1993. – Vol.48. – Iss.22. – 16373.
8. *Gundrum B.C., Cahill D.G., Averbach R.S.* Thermal conductance of metal-metal interfaces // *Phys. Rev. B*. – 2005. – Vol.72. – Iss.24.
9. *Swartz E.T., Pohl R.O.* Thermal resistance at interfaces // *Applied Physics Letters*. – 1987. – Vol.51. – Iss.26. – 2200.
10. *Costescu R.M., Wall M.A., Cahill D.G.* Thermal conductance of epitaxial interfaces // *Phys. Rev. B*. – 2003. – Vol.67. – Iss.5. – 054302.
11. *Schelling P.K., Phillpot S.R., Keblinski P.* Comparison of atomic-level simulation methods for computing thermal conductivity // *Physical Review B*. – 2002. – Vol.65. – Iss.14. – 144306.
12. *Физический энциклопедический словарь*. – М.: Советская энциклопедия, 1983.
13. *Cahill D.G., Goodson K., Majumdar A.* Thermometry and thermal transport in micro/nanoscale solid state devices and structures // *J. Heat Transfer*. – 2002. – Vol.124. – Iss.2. – P.223-241.
14. *Лурье С.А., Белов П.А., Яновский Ю.Г.* О моделировании теплопереноса в динамически деформируемых средах // *Механика композиционных материалов и конструкций*. – 2000. – Т.6. – №3. – С.436-444.
15. *Лурье С.А., Белов П.А.* Вариационная модель неголономных сред // *Механика композиционных материалов и конструкций*. – 2001. – Т.7. – №2. – С.266-276.
16. *Белов П.А., Горшков А.Г., Лурье С.А.* Вариационная модель неголономных 4D-сред // *МТТ*. – 2006. – №6. – С.29-46.

КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ АГЛОМЕРАЦИИ НАНОРАЗМЕРНЫХ ЧАСТИЦ ШУНГИТА В СПИРТАХ

Никитина Е.А., Яновский Ю.Г., Карнет Ю.Н.

*ФГБУН Институт прикладной механики Российской академии наук, г. Москва,
Россия*

РЕЗЮМЕ

В настоящей работе, с целью дальнейшего увеличения усиливающей способности шунгита в разнообразных композиционных материалах, были выполнены теоретические исследования процессов агломерации его наночастиц на стадии их приготовления, а именно, измельчения в растворителях.

При подборе возможных растворителей шунгита, в которых его размол и хранение дает наименьшие по размеру агрегаты, использовался метод компьютерного моделирования на основе прямых квантово механических расчетов. Такой подход позволил перебрать ряд возможных растворителей без проведения экспериментов и оценить адгезионные свойства агрегатов шунгита, исходя из микроскопического строения поверхности его силикатной и углеродной составляющих, и дать рекомендации к выбору наиболее оптимальных растворителей в экспериментах.

Ключевые слова: шунгит; эластомерные композиты; активные наполнители; коллоидное измельчение; адсорбция; квантово механическое моделирование; фрактальный анализ; размер и свойства поверхности агрегатов

1. ВВЕДЕНИЕ

Эластомерные композиты, к которым относятся и резины, представляют собой сложные многокомпонентные системы. В их состав помимо каучука и вулканизирующего вещества входят и другие компоненты (ингредиенты), придающие композитам определенные свойства, важные для их использования в производстве различных резинотехнических изделий, а также в автомобильной, нефтеперерабатывающей, легкой промышленности и в строительстве. Ингредиенты таких композитов находятся в разных состояниях, например, высокоэластическом (каучук), твердом (активный наполнитель), жидком (пластификатор) и имеют между собой химические и невалентные (межмолекулярные) связи. К таким компонентам относятся ускорители вулканизации в количестве 1-2% от веса каучука, которые сокращают время вулканизации и повышают качество резины, усилители (активные наполнители) в количестве до 50% от веса каучука, которые служат для улучшения механических свойств резины, неактивные наполнители в количестве 30-40% от веса каучука, которые вводятся для удешевления резины без заметного ухудшения ее свойств, противостарители в количестве 0.5-2.5% от веса каучука, которые вводятся для замедления старения резины под действием кислорода воздуха, солнечных лучей и других факторов, мягчители и пластификаторы в количестве от 3 до 20% от веса каучука, которые улучшают смешиваемость компонентов резиновой смеси и делают ее более пластичной и липкой, а также некоторые другие компоненты.

Целью настоящей работы являлось исследование нового кремний-углеродного наполнителя эластомерных композитов – шунгита [1] и методов обработки этого природного материала для получения порошка с частицами наноразмеров, который может быть использован, как активный наполнитель.

Шунгит - это докембрийская горная порода, минерал, который содержит очень большое количество элементов [2]. Он представляет собой композит, основой которого является аморфный углерод. В углеродной матрице равномерно распределены высокодисперсные частицы силикатов (35-50%). Кроме этого, в состав шунгита входят также TiO_2 (0.2%), Al_2O_3 (4.0%), FeO (2.5%), MgO (1.2%), H_2O (4.2%), K_2O (1.5%), S (1.2%).

Структура и состав шунгита дают материалам на его основе ряд необычных физико-химических и технологических свойств. В шунгите как наполнителе одновременно проявляют себя как углеродная, так и силикатная компоненты. Эти две основные составляющие шунгита – аморфный ультрадисперсный углерод и аморфный ультрадисперсный силикат представляют собой разные по полярности фазы. Углеродная составляющая является гидрофобной, ее нерегулярная $\text{C-sp}^2\text{-sp}^3$ поверхность покрыта водородом. Силикатная составляющая является гидрофильной, основной мотив ее каркаса Si-O-Si замыкается на поверхности гидроксилами. Благодаря биполярности порошки шунгита смешиваются со всеми известными веществами (водными растворителями, суспензиями, фторопластами, каучуками, смолами, цементами и др.), следствием чего является способность шунгита создавать высоконаполненные композиции.

К традиционным активным наполнителям эластомерных композитов в настоящее время относятся технический углерод (черная сажа) и силикаты (белая сажа).

Наполнитель называют активным, если его наличие в составе резины приводит к многократному повышению уровня эксплуатационных характеристик, а именно, износостойкости, усталостной выносливости, прочности. С точки зрения структуры эластомерного композита основным является то, что частицы активного наполнителя имеют наноразмеры. Чем меньше размеры частиц, тем больше их удельная поверхность, с которой взаимодействуют макромолекулы каучуковой матрицы. Это взаимодействие может быть химическим и физическим. Известно, что активность наполнителя растет с увеличением его удельной поверхности. У наноразмерных частиц наполнителя увеличиваются не только площадь контакта с полимерной матрицей, но и кривизна и дефектность структуры поверхности, что приводит к большой величине поверхностного потенциала.

Шунгит применяется в рецептуре не более 10% шинных резин в качестве добавки. Особенности его структуры до настоящего времени не позволяли рассматривать его в качестве усиливающего наполнителя, так как размеры частиц шунгитов как Зажогинского месторождения (новокарбон), так и казахстанского (таурит) слишком велики – в среднем 5–100 мкм.

Однако известно, что введение шунгита в состав наполненных техническим углеродом резин в отсутствие традиционно применяемых пластифицирующих добавок облегчает переработку резиновых смесей, повышает их упруго-деформационные и конфекционные (повышение клейкости) свойства [3]. Резиновые смеси, наполненные шунгитом, характеризуются повышенной скоростью структурирования, что вызывает необходимость корректировки вулканизирующей системы в сторону снижения содержания ускорителя вулканизации. Применение этого нового наполнителя позволяет снизить каучукосодержание резин при

сохранении их качества, что является актуальным в условиях непрерывного роста стоимости полимеров.

Поскольку шунгит – относительно дешевый минерал, создание на его основе нового активного наполнителя с наноразмерными частицами, помимо улучшения свойств резин, может принести ощутимый экономический эффект [4].

Для измельчения частиц шунгита может применяться неколлоидный помол, который осуществляется сухим способом, что способствует относительно быстрому дроблению. Однако в этом случае не удастся добиться требуемых размеров частиц, которые остаются в виде агломератов микронных размеров. Чтобы добиться получения наноразмерных частиц, перемол должен проводиться в жидком состоянии (коллоидное измельчение). В таких случаях обычно используют различные растворители, в том числе и воду. Наличие жидкости приводит к лучшей дисперсии и увеличивает количество наноразмерных агрегатов частиц.

Известен способ измельчения частиц материала в воде [5] принудительным полиградиентным перемещением концентрических слоев материала при одновременном разрушении высокотемпературным потоком перегретого пара.

С тем, чтобы уменьшить агломерирование наночастиц шунгита, а также повысить их взаимодействие с каучуком, было предложено [6] осуществлять модификацию поверхности частиц.

Была предложена физическая модификация частиц шунгита, которая проводилась при его помоле в растворе изопропилового спирта. При этом применялась планетарная шаровая мельница Retsch, которая используется везде, где необходима высокая конечная тонкость измельчения. В отличие от классического перемешивания и уменьшения размера, планетарные шаровые мельницы удовлетворяют всем техническим требованиям для коллоидного измельчения, также обладают достаточной энергией для механического легирования. Оказалось, что добавление изопропилового спирта позволяет улучшить процесс измельчения шунгита за счет его лучшей диспергации, исключает образование крупных агломератов, снижает тепловыделение при помоле, а также уменьшает нагрев размольного стакана [7]. Предполагалось, что в изопропиловом спирте молекулы растворителя мономолекулярным слоем оседают на поверхность наночастиц шунгита и переходят в псевдостеклообразное (менее подвижное) состояние. Слой молекул растворителя, адсорбированный на поверхности частиц шунгита, в качестве экрана уменьшает межмолекулярное взаимодействие и, как следствие, агломерирование наночастиц шунгита. Но этот слой не должен снижать взаимодействие между наполнителем и макромолекулами каучука

В настоящей работе, с целью дальнейшего увеличения усиливающей способности шунгита в разнообразных композиционных материалах, были выполнены теоретические исследования процессов агломерации его наночастиц на стадии их приготовления.

Новые композиционные материалы и новые активные наполнители можно создавать двумя принципиально разными способами. Первый основан на большом эмпирическом опыте использования различных материалов и методов измельчения частиц наполнителя до наноразмеров. Второй способ предполагает глубокое изучение природы взаимодействий в сложной многокомпонентной системе в рамках компьютерного моделирования. Такой способ был осуществлен в настоящей работе.

При подборе возможных растворителей шунгита, в которых его размол и хранение дает наименьшие по размеру агрегаты, использовался метод компьютерного моделирования на основе прямых квантово механических расчетов.

При этом были выполнены расчеты взаимодействия частиц шунгита с молекулами растворителя. Такой подход позволил перебрать ряд возможных растворителей без проведения экспериментов и оценить адгезионные свойства агрегатов шунгита, исходя из микроскопического строения поверхности его основных компонентов – силикатной и углеродной составляющих. Предварительное компьютерное моделирование дало рекомендации к выбору наиболее оптимальных растворителей в экспериментах.

2. МЕТОДЫ И ПОДХОДЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В рамках квантово механического подхода исследовались структурные и энергетические особенности взаимодействия молекул ряда растворителей с поверхностью силикатной и углеводородной компонент шунгита. Расчеты проводились в рамках полуэмпирического метода NDDO (Neglect of Diatomic Differential Overlap, пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрыванием) [8] с параметризацией PM3 [9,10]. Используемый полуэмпирический метод наиболее близок концептуально к методам *ab initio* и немногим уступает им в точности расчетов (геометрические и энергетические характеристики молекулярных систем), будучи параметризованным по большому количеству экспериментальных данных. Для этого метода были получены средние отклонения расчетных и экспериментальных значений теплот образования 14 кДж/моль, межъядерных расстояний 0.0012 нм и валентных углов 2.1 град. Этот метод также не уступает неэмпирическим расчетам по точности при рассмотрении межмолекулярных взаимодействий, однако значительно выигрывает в скорости счета.

Применение полуэмпирических методов позволяет рассчитывать на хорошую точность воспроизведения основных структурных и энергетических характеристик многоатомных систем. В методах NDDO условие пренебрежения двухатомным дифференциальным перекрыванием распространяется только на пары орбиталей, локализованные на различных центрах. В результате приближение NDDO сохраняет не только одноцентровые, но и двухцентровые обменные интегралы. По нашему мнению, методы NDDO, хотя и являются наиболее трудоемкими в своем классе, выигрывают по временам счета, возможным размерам рассматриваемых молекулярных систем и наилучшим образом подходят для использования в представленном в настоящей работе компьютерном вычислительном эксперименте.

Расчеты в работе проводились в рамках оригинального пакета NDDO/sp-spd [11].

Вычислительный эксперимент был реализован в кластерном приближении, в котором границы раздела фаз моделировались кластерами достаточно большой величины (до нескольких десятков нм и до нескольких сотен атомов). Кластерные методы очень близки к методам, применяемым в квантовой химии молекулярных систем. Важное отличие обусловлено тем, что при кластерном моделировании объемного твердого тела необходимо, вообще говоря, учитывать свойства поверхности кластера и влияние окружения кластера на его состояние. На практике это осуществляется, например, при помощи специально подобранных внешних потенциалов или граничных условий, накладываемых на решение уравнения Шредингера. Кластерные методы оказываются весьма эффективным средством моделирования локализованных объектов, таких как места адсорбционных

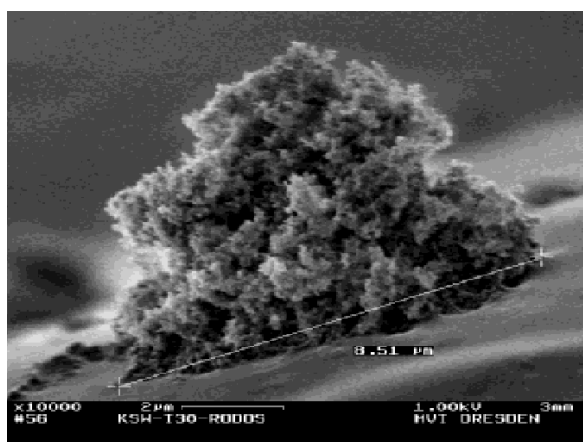
контактов молекул растворителя на поверхности частиц, физические размеры которых меньше, чем размеры доступных с вычислительной точки зрения кластеров.

3. МОДЕЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ

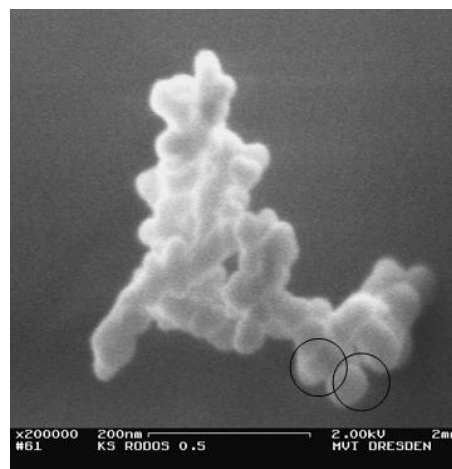
В ходе компьютерного моделирования вначале строятся молекулярные модели отдельных компонентов адсорбционного комплекса и оптимизируются в квантово механическом расчете. Затем на основе полученных моделей компонентов строится сложносоставной кластер, моделирующий адсорбционный комплекс и также рассчитывается в квантово механическом приближении.

Рассчитанная энтальпия связывания как разность теплот образования комплекса и отдельных компонент характеризует на микроскопическом уровне прочность связей на поверхности наночастицы. Ранее было показано [12], что такой подход дает надежные результаты при определении атомной структуры и энергетических характеристик межфазных и адсорбционных слоев в композитах, в которых основную роль играют локальные химические взаимодействия.

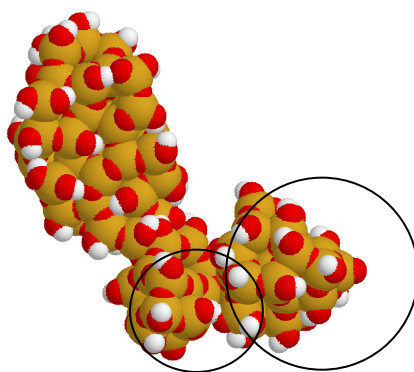
Малые нанометровые первичные сферические частицы шунгита (как силикатные, так и углеродные компоненты) агрегируются посредством межмолекулярных взаимодействий, как гидрофильного, так и гидрофобного характера. Так на рис.1 показаны изображения агломерата и агрегата силикатных частиц, полученные с помощью сканирующего туннельного микроскопа (СТМ), на этом же рисунке представлена квантово механическая модель силикатного агрегата.



а)



б)



в)

Рис.1. СТМ изображения агломерата (а) и агрегата (б) силикатных частиц, и квантово механическая модель силикатного агрегата (в).

4. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОБСУЖДЕНИЕ

Строение и свойства ядра и поверхности базовых кластерных моделей, которые правильно передают химическую природу исследуемых частиц, является очень важным условием при моделировании. На рис.2 представлены кластерные модели частиц силикатной и углеродной составляющих шунгита, использованные в настоящем исследовании. Пространственные структуры этих частиц полностью оптимизированы.

Силикатная гидрофильная частица имеет основной мотив ядра - шестичленные циклы из кремний-кислородных тетраэдров и замыкается на поверхности гидроксилами. Она состоит из 110 атомов и имеет наибольший линейный размер ~14Å. Углеродная гидрофобная частица имеет основной мотив ядра – различные циклы из углерода в sp^2 - sp^3 гибридизациях и замыкается на поверхности водородами. Она состоит из 140 атомов и также имеет наибольший линейный размер ~14Å.

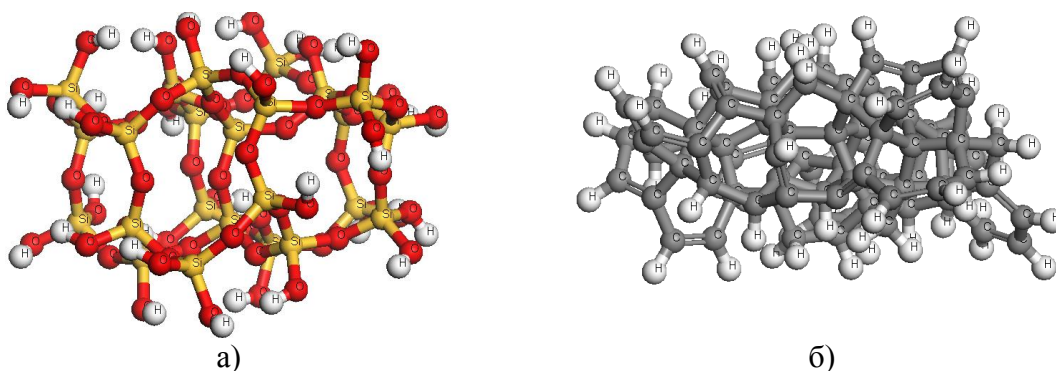


Рис.2. Оптимизированные кластерные модели частиц силикатной (а) и углеродной (б) составляющих шунгита.

В качестве растворителей, которые могут быть использованы при коллоидном помоле шунгита, были выбраны изобутанол, изопропанол, ацетон, этанол, метанол, и вода. Оптимизированные структуры молекул этих растворителей представлены на рис.3.

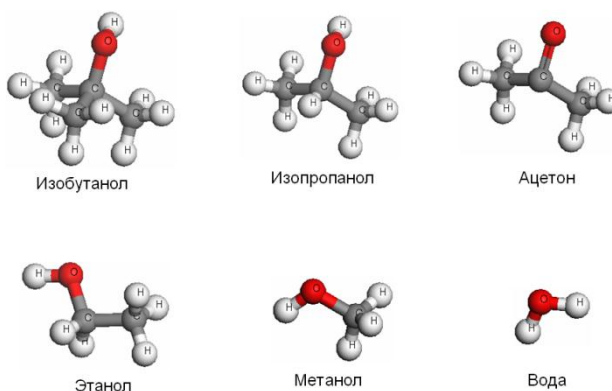


Рис.3. Оптимизированные структуры молекул спиртов.

Далее были построены адсорбционные комплексы двух частиц наполнителя (силикатных и углеродных), проведена полная оптимизация пространственного строения этих адсорбционных комплексов (рис.4) и выполнен расчет энергии взаимодействия частиц.

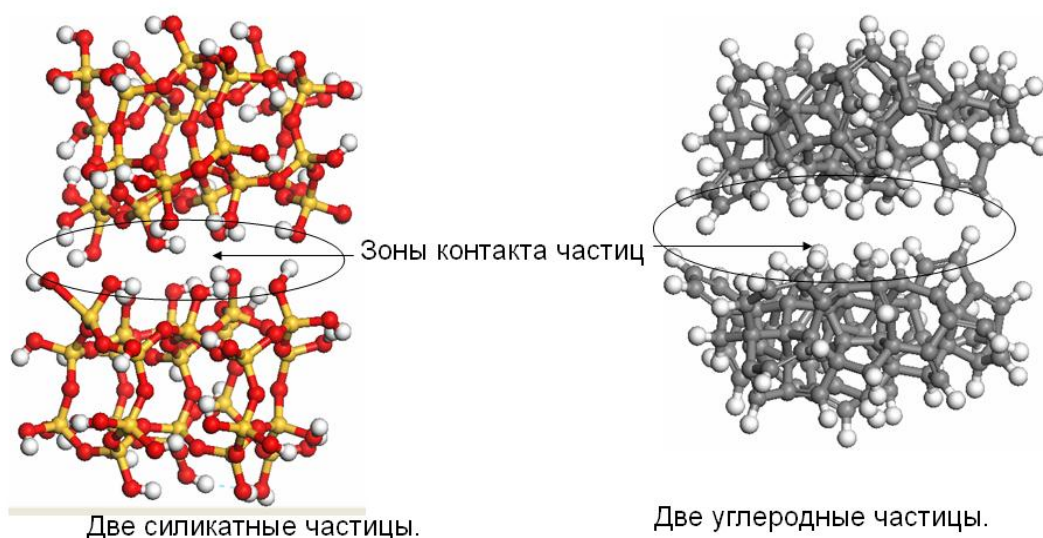


Рис.4. Оптимизированные структуры адсорбционных комплексов двух силикатных и двух углеродных частиц.

Характер связывания двух силикатных частиц - гидрофильный (водородные связи). Рассчитанная энергия взаимодействия на один контакт $\text{SiOH}\dots\text{HOSi}$ составила $\Delta H=54.34$ кДж/моль. Характер связывания двух углеродных частиц - гидрофобный. Рассчитанная энергия взаимодействия на один контакт $\text{CH}\dots\text{HC}$ составила $\Delta H=25.08$ кДж/моль.

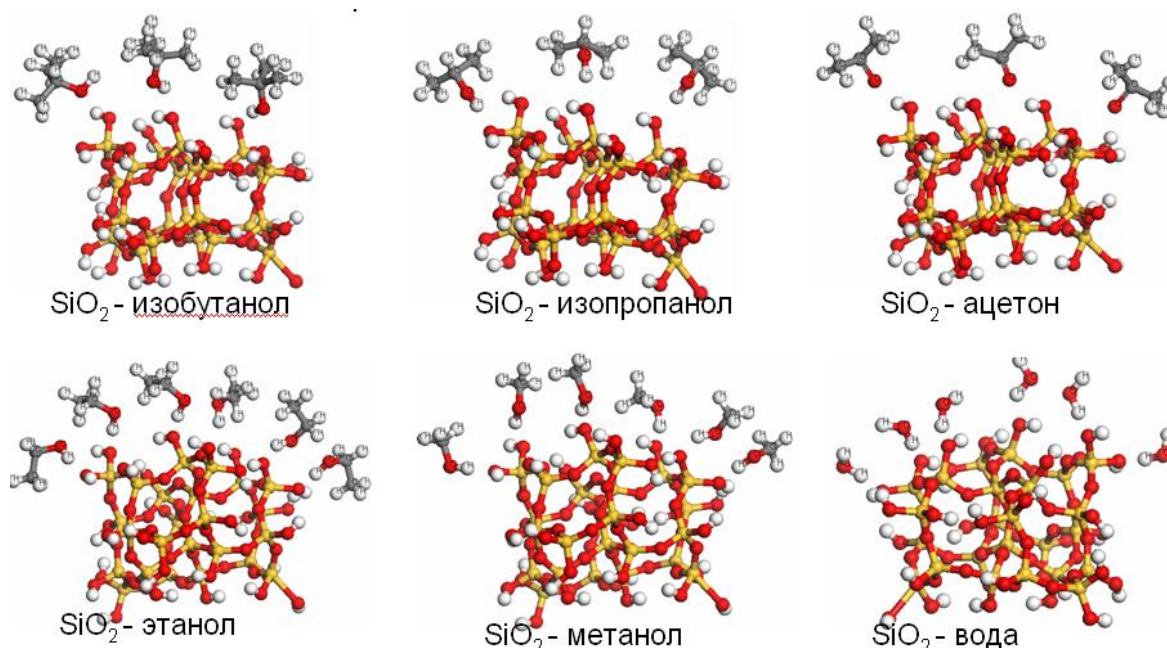


Рис.5. Оптимизированные структуры адсорбционных комплексов силикатной частицы с молекулами спиртов.

Далее было исследовано взаимодействие частиц наполнителя с несколькими молекулами растворителя (для каждого из рассмотренных растворителей). Полностью оптимизированные структуры соответствующих адсорбционных комплексов силикатной и углеродной частиц с молекулами спиртов представлены на рис.5 и 6, соответственно. Видно, что молекулы спиртов, имеющие как гидрофобную

(алифатическую), так и гидрофильную (гидроксилы и карбоксил) части, связываются с поверхностью гидрофобной частицы (углеродной) своей гидрофобной частью, и гидрофильной частицы (силикатной) - своей гидрофильной частью.

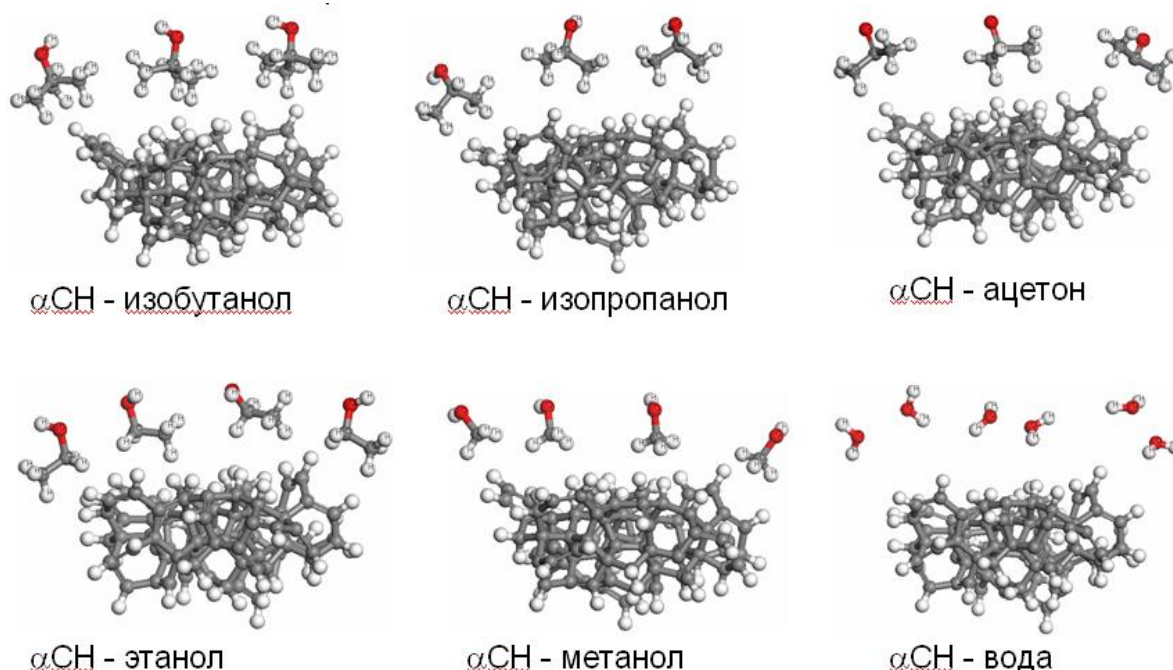


Рис.6. Оптимизированные структуры адсорбционных комплексов углеродной частицы с молекулами спиртов.

В Таблице 1 приведены рассчитанные энергии взаимодействия силикатной частицы с молекулами спиртов на один контакт SiOH...HOR (характер связывания гидрофильный - водородные связи) и энергии взаимодействия углеродной частицы с молекулами спиртов на один контакт CH...HC (характер связывания гидрофобный).

Таблица 1.

Рассчитанные энергии взаимодействия силикатной и углеродной компонент шунгита (кДж/моль) с молекулами спиртов на один межмолекулярный контакт.

	Изобутанол	Изопропанол	Ацетон	Этанол	Метанол	Вода
SiO ₂	33.44	33.44	37.62	50.16	58.52	66.88
αCH	20.90	16.72	16.72	33.44	25.08	8.36

При сравнении рассчитанных энергий взаимодействия частиц на один межатомный контакт можно сделать вывод, частицы каких растворителей лучше предохраняют частицы наполнителя от агрегирования.

5. ВЫВОДЫ

Методами квантовой механики (NDDO, AM1) исследовалось влияние на агломеризацию и, в конечном счете, на размер полученных при размоле частиц шунгита различных растворителей. При этом рассматривались агломеризация как силикатной, так и углеродной компонент шунгита.

Малые сферические частицы шунгита (как силикатные, так и углеродные) агрегируются, удерживаясь рядом посредством межмолекулярных взаимодействий,

как гидрофильного, так и гидрофобного характера. Взаимодействие поверхностных активных групп частиц шунгита с молекулами растворителя может предотвратить частицы от слипания.

В ходе расчетов были рассчитаны энтальпии связывания силикатных и углеродных частиц друг с другом и с частицами растворителей. Рассматривался как энергетический, так и геометрический аспекты, влияющие на агломеризацию частиц шунгита при размоле в растворителях.

В ходе моделирования было показано, что в случае растворителей, имеющих достаточно крупную молекулу, а именно, в случае изобутанола, изопропанола и ацетона из-за объема адсорбированных частиц только часть поверхностных активных групп частиц шунгита “прикрыта” молекулами растворителей и не образует с молекулами спирта водородных связей. Эта часть поверхностных гидроксильных групп открыта для энергетически более выгодного взаимодействия с другими частицами шунгита.

Из-за малого размера частиц этанола и метанола практически все поверхностные активные группы частиц силиката и аморфного углерода образуют с молекулами спирта связи гидрофобного или гидрофильного характера. Контакты с молекулами растворителей в этом случае энергетически равноценны или превосходят энергии связей между частицами шунгита. Это препятствует образованию связей между частицами шунгита и их агломеризации.

Вода является плохим растворителем для коллоидного измельчения шунгита. В случае адсорбции на силикатных частицах не имеющие алифатической части молекулы воды могут образовывать гидрофильные контакты с двумя контактирующими частицами по силе связывания достаточно близкие к прямым контактам двух силикатных частиц. Таким образом, в этом случае происходит агрегирование силикатных частиц опосредованное прослойкой воды, и размер агрегатов может слабо уменьшаться при помоле. Гидрофобная частица углерода и гидрофильная молекулы воды имеют очень слабые взаимодействия, и вода в этом случае не влияет на их контакты.

Таким образом, было показано, что меньшие по размеру частицы агломератов шунгита могут быть получены при помоле его в этаноле, а также в метаноле. Использование всех остальных рассмотренных растворителей дает худший результат.

ЛИТЕРАТУРА

1. Горная энциклопедия. / Под редакцией Е.А.Козловского. – М.: Советская энциклопедия, 1984-1991.
2. Борисов П.А. Карельские шунгиты. – Петрозаводск, 1956; Сидоренко С.А., Сидоренко А.В. Органическое вещество в осадочно-метаморфических породах докембрия. – М., 1975.
3. Харламов В.М., Писаренко Т.И., Печникова И.Г. Новый углеродный наполнитель для технических резин, Каучук и резина, 1996, №2, С. 19-24.
4. Yanovsky Yu.G., Valiev H.H., Kornev Yu.V., Karnet Yu.N., Boiko O.V., Kosichkina K.P., Yumashev O.B. The role of the scale factor in estimation of the mechanical properties of composite materials with nanofillers // Int. J. Nanomechanics, Sciences and Technologies. – 2010. – Vol.3. – Iss.1. – P.187-210.
5. Описание изобретения к патенту Российской Федерации № 2104787 «Способ переработки материалов».

6. Яновский Ю.Г., Никитина Е.А., Никитин С.М., Карнет Ю.Н. Нанокompозиты на основе полимерных матриц и минерала шунгита. Квантово-механическое исследование механических свойств, прогнозирование эффекта усиления // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2009. – Т.15. – №4. – С.145-169.
7. Описание изобретения к патенту Российской Федерации № 2442657 «Способ получения частиц наноразмеров из минерала шунгит».
8. Dewar M.J.S., Thiel W.J. Ground states of molecules. The AM1 method. Approximations and parameters // Am. Chem. Soc. – 1977. – Vol.99. – P.4899-4907.
9. Stewart J.J.P. Optimisation of parameters for semiempirical methods. I. Method // J. Comput. Chem. – 1989. – Vol.10. – N2. – P.209-220.
10. Stewart J.J.P. Optimisation of parameters for semiempirical methods. II. Applications // J. Comput. Chem. – 1989. – Vol.10. – N2. – P.221-264.
11. Оригинальный пакет квантово-механических программ NDDO/sp-spd, реализованный в параллельном режиме расчета (ИПРИМ РАН, Свидетельство о государственной регистрации №2009614949 от 10.09.2009).
12. Яновский Ю.Г., Власов А.Н., Никитина Е.А., Карнет Ю.Н. Анализ теоретической прочности межфазных слоев адсорбционных комплексов полимерных композитных сред // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2007. – Т.13. – №1. – С.33-41.

НОВЫЕ ГИПЕРБОЛИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕД

Суров В.С., Березанский И.В.

*Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана,
г. Москва, Россия*

РЕЗЮМЕ

В рамках одно- и многоскоростной моделей многокомпонентной среды, в которых учтены вязкие и теплопроводящие свойства смеси, анализируются автомодельные решения типа бегущих волн.

Ключевые слова: многокомпонентные вязкие теплопроводные смеси; одно- и многоскоростные среды; гиперболические системы уравнений в частных производных; автомодельные решения

1. ВВЕДЕНИЕ

Односкоростные модели многокомпонентной среды используются при моделировании волновых процессов во вспененных жидкостях и полимерах [1], в пузырьковых жидкостях [2], для локализации контактных поверхностей в многожидкостной гидродинамике [3]. Включение в уравнения смеси сил вязкого трения и теплопроводности расширяет сферу приложения модели и дает возможность проводить расчеты течений, например, углеводородных смесей, биологических жидкостей и т.д. В литературе, помимо использованной в настоящей работе модели односкоростной смеси из [4], имеются и другие гиперболические модели, описывающие течения бинарных смесей (см. [5-7]), которые, в отличие от [4], не распространяются на случай с произвольным числом фракций в смеси.

Разработка математически корректных и физически непротиворечивых моделей многофазных сред является актуальной задачей, поскольку не все существующие к настоящему времени общие модели гетерогенных сред являются таковыми. В частности, если при рассмотрении явления распространения тепла в односкоростных гетерогенных средах воспользоваться законом Фурье, то тепловые волны будут перемещаться с бесконечными скоростями. Если же вместо закона Фурье применить закон Максвелла-Каттанео [8,9], учитывающий релаксацию теплового потока, то движение волн происходит с конечными скоростями, что в свою очередь связано с принадлежностью системы уравнений к гиперболическому типу [10].

Включение сил вязкого трения в уравнения модели односкоростной многокомпонентной среды из [4] также приводит к появлению волн с бесконечно большими скоростями распространения. В настоящей работе представлена модель среды, свободная от этого парадокса, в которой по аналогии с подходом Максвелла-Каттанео в теплопередаче также учтена релаксация вязких напряжений.

Вязкие напряжения вводятся в уравнения модели односкоростной многокомпонентной среды из [4] на уровне смеси в целом, которые по виду совпадают с газодинамическими. В газовой динамике широко используется

упрощенная формула для расчета вязких напряжений [11], которая для одномерных течений имеет вид

$$\sigma = \mu \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (1)$$

где μ – коэффициент вязкости. Но применение этого соотношения приводит к потере гиперболичности исходной системы уравнений. Чтобы остаться в рамках гиперболической системы, вместо выражения (1) предлагается использовать соотношение

$$\tau_{\sigma} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial t} + u \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) + \sigma = \mu \frac{\partial u}{\partial x}. \quad (2)$$

Подобный прием впервые использовался в теплопередаче для исключения парадокса, связанного с бесконечной скоростью распространения тепловых волн. С точки зрения физики это означает, что силы вязкости начинают действовать не мгновенно, а в прошествии времени релаксации τ_{σ} .

Отметим также, что уравнение (2) есть упрощенный вариант реологического выражения для жидкости Максвелла [12]. С этой точки зрения смесь в целом может рассматриваться как вязкоупругая среда. Для вязкоупругих жидкостей время релаксации может быть найдено из соотношения

$$\tau_{\sigma} = \mu / G,$$

где G – модуль упругости смеси.

При рассмотрении многоскоростных сред в работе использовалась модель гетерогенной среды из [13], основанная на законах сохранения. Особенность этой модели состоит в том, что в ней вводится такое состояние среды как смесь в целом, характеризующая осредненными значениями скорости, плотности и т.д., уравнения для которых по виду совпадают с газодинамическими. К этим уравнениям добавляются соотношения, выражающие законы сохранения для отдельных компонентов смеси. Давление полагалось общим для всех фракций смеси.

В настоящей работе представлена модификация модели из [13], учитывающая вязкие и теплопроводящие свойства смеси.

2. ГИПЕРБОЛИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОДНОСКОРОСТНОЙ ВЯЗКОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОЙ СРЕДЫ

Рассмотрим n -компонентную смесь с первыми m сжимаемыми фракциями [4], в уравнения которой включены эффекты вязкости и теплопроводности

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) &= 0, \quad \rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right] + \nabla(p - \sigma) = \mathbf{F}, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\varepsilon + \frac{1}{2} |\mathbf{u}|^2 \right) \right] + \operatorname{div} \left[\rho \left(\varepsilon + \frac{1}{2} |\mathbf{u}|^2 + \frac{p - \sigma}{\rho} \right) \mathbf{u} + \mathbf{W} \right] &= \mathbf{F} \cdot \mathbf{u}, \\ \tau_w \left(\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{W} \right) + \chi \nabla T + \mathbf{W} &= 0, \quad \tau_{\sigma} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \sigma \right) - \mu \operatorname{div}(\mathbf{u}) + \sigma = 0; \\ \frac{\partial \alpha_i \rho_i^0}{\partial t} + \operatorname{div}(\alpha_i \rho_i^0 \mathbf{u}) &= \sum_{k=1}^n \delta_{ik} J_{ik}, \\ \rho_i \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \varepsilon_i \right) + \frac{\alpha_i p}{\rho_i} \left[\sum_{k=1}^n \delta_{ik} J_{ik} - \left(\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \rho_i \right) \right] &= \end{aligned} \quad (3)$$

$$= \sum_{k=1}^n \delta_{ik} Q_{ik} - \left(\varepsilon_i - \frac{1}{2} |\mathbf{u}|^2 \right) \sum_{k=1}^n \delta_{ik} J_{ik}, \quad i=1, \dots, m-1;$$

$$\frac{\partial \alpha_j}{\partial t} + \operatorname{div}(\alpha_j \mathbf{u}) = \frac{1}{\rho_j^0} \sum_{k=1}^n \delta_{ik} J_{jk}, \quad j=m+1, \dots, n.$$

Поведение сжимаемых фракций описывается калорическими уравнениями состояния $\varepsilon_i = \varepsilon_i(p, \rho_i^0)$, поэтому выражение для удельной внутренней энергии смеси, учитывая равенства $\sum_{i=1}^n \alpha_i = 1$, $\rho = \sum_{i=1}^n \rho_i$, может быть записано как

$$\varepsilon = \varepsilon(\rho, p, \alpha_1, \rho_1^0, \dots, \alpha_{m-1}, \rho_{m-1}^0, \alpha_{m+1}, \dots, \alpha_n). \quad (4)$$

Среднюю температуру определим в соответствии с формулой

$$T = \sum_{i=1}^n \alpha_i T_i, \quad (5)$$

где T_i – локальная температура i -й фракции, которая находится из термического уравнения состояния $T_i = T_i(p, \rho_i^0)$. Формулу (5) перепишем так

$$T = T(\rho, p, \alpha_1, \rho_1^0, \dots, \alpha_{m-1}, \rho_{m-1}^0, \alpha_{m+1}, \dots, \alpha_n). \quad (6)$$

Можно показать, что система уравнений (3) при отсутствии массовых сил, фазовых и химических превращений для одномерных плоских течений приводится к виду

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} &= 0, \quad \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial p}{\partial t} + u \frac{\partial p}{\partial x} + \rho c^2 \frac{\partial u}{\partial x} + H \frac{\partial W}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial W}{\partial t} + u \frac{\partial W}{\partial x} + k_p \frac{\partial \rho}{\partial x} + k_p \frac{\partial p}{\partial x} + \sum_{i=1}^{m-1} \left(k_{\alpha_i} \frac{\partial \alpha_i}{\partial x} + k_{\rho_i^0} \frac{\partial \rho_i^0}{\partial x} \right) + \sum_{j=m+1}^n k_{\alpha_j} \frac{\partial \alpha_j}{\partial x} + \frac{W}{\tau_w} &= 0, \\ \frac{\partial \sigma}{\partial t} + u \frac{\partial \sigma}{\partial x} - \frac{\mu}{\tau_\sigma} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\sigma}{\tau_\sigma} &= 0; \\ \frac{\partial \rho_i^0}{\partial t} + u \frac{\partial \rho_i^0}{\partial x} + \rho_i^0 G_i \frac{\partial u}{\partial x} &= 0, \quad \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_i}{\partial x} + \alpha_i (1 - G_i) \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad i=1, \dots, m-1; \\ \frac{\partial \alpha_j}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_j}{\partial x} + \alpha_j \frac{\partial u}{\partial x} &= 0, \quad j=m+1, \dots, n, \end{aligned} \quad (7)$$

где

$$k_p = \frac{\chi}{\tau_w} \frac{\partial T}{\partial \rho}, \quad k_p = \frac{\chi}{\tau_w} \frac{\partial T}{\partial p}, \quad k_{\alpha_1} = \frac{\chi}{\tau_w} \frac{\partial T}{\partial \alpha_1}, \quad k_{\rho_1^0} = \frac{\chi}{\tau_w} \frac{\partial T}{\partial \rho_1^0}, \dots, \quad k_{\alpha_n} = \frac{\chi}{\tau_w} \frac{\partial T}{\partial \alpha_n}.$$

Соответствующие выражения для H , G_i и адиабатической скорости звука c имеют вид

$$H = \frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial p} + \sum_{i=1}^{m-1} \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial p} \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \rho_i^0} \right)^{-1} \left(\frac{\alpha_i}{\rho_i^0} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \alpha_i} - \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho_i^0} \right) \right]^{-1}, \quad G_i = \frac{1}{\rho_i^0} \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \rho_i^0} \right)^{-1} \left(\frac{p}{\rho_i^0} - \rho c^2 \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial p} \right),$$

$$c = \sqrt{\frac{\frac{p-\sigma}{\rho} - \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial p} - \sum_{i=1}^{m-1} \left[\frac{p}{\rho_i^0} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho_i^0} \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \rho_i^0} \right)^{-1} + \alpha_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial \alpha_i} \left(1 - p \left(\rho_i^0 \right)^2 \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \rho_i^0} \right)^{-1} \right]}{\rho \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial p} + \sum_{i=1}^{m-1} \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial p} \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \rho_i^0} \right)^{-1} \left(\frac{\alpha_i}{\rho_i^0} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \alpha_i} - \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho_i^0} \right) \right]} - \sum_{j=m+1}^n \alpha_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial \alpha_j}}.$$

Систему уравнений (7) перепишем в векторной форме

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = \mathbf{S} \quad (8)$$

где

$$\mathbf{U} = (\rho, u, p, \sigma, \rho_1^0, \alpha_1, \dots, \rho_{m-1}^0, \alpha_{m-1}, \alpha_{m+1}, \dots, \alpha_n, W)^T,$$

$$\mathbf{S} = (0, 0, 0, -\sigma/\tau_\sigma, \dots, 0, -W/\tau_w)^T,$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} u & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & u & 1/\rho & -1/\rho & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \rho c^2 & u & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & H \\ 0 & -\mu/\tau_\sigma & 0 & u & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \rho_1^0 G_1 & 0 & 0 & u & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_1(1-G_1) & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \rho_{m-1}^0 G_{m-1} & 0 & 0 & 0 & u & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{m-1}(1-G_{m-1}) & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & u & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{m+1} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & u & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \alpha_n & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & u & 0 \\ k_p & 0 & k_p & 0 & k_{\rho_1^0} & k_{\alpha_1} & \dots & k_{\rho_{m-1}^0} & k_{\alpha_{m-1}} & k_{\alpha_{m+1}} & \dots & k_{\alpha_n} & u \end{pmatrix}.$$

Здесь Т – оператор транспонирования. Характеристическое уравнение системы (7) имеет вид

$$[\xi - (u - c_1)][\xi - (u - c_2)](\xi - u)^{n+m-2}[\xi - (u + c_2)][\xi - (u + c_1)] = 0, \quad (9)$$

где $\xi = dx/dt$. Значения скоростей c_1 и c_2 рассчитываются по формулам

$$c_1 = \sqrt{\frac{1}{2} \left\{ c^2 + \omega^2 + k_p H + \sqrt{c^4 + H \left[k_p (2c^2 + 2\omega^2 + k_p H) + 4 \left(k_p + \frac{1}{\rho} \left(\sum_{i=1}^{m-1} (k_{\rho_i^0} \rho_i^0 G_i + k_{\alpha_i} \alpha_i (1 - G_i)) + \sum_{j=m+1}^n k_{\alpha_j} \alpha_j \right) \right] \right]} \right\}}$$

$$c_2 = \sqrt{\frac{1}{2} \left\{ c^2 + \omega^2 + k_p H - \sqrt{c^4 + H \left[k_p (2c^2 + 2\omega^2 + k_p H) + 4 \left(k_p + \frac{1}{\rho} \left(\sum_{i=1}^{m-1} (k_{\rho_i^0} \rho_i^0 G_i + k_{\alpha_i} \alpha_i (1 - G_i)) + \sum_{j=m+1}^n k_{\alpha_j} \alpha_j \right) \right] \right]} \right\}}$$

$$\text{где } \omega^2 = \frac{\mu}{\rho \tau_\sigma}.$$

Корни характеристического уравнения (9) – действительные числа. Кроме того, матрицу $\mathbf{A}$ можно представить в виде

$$\mathbf{A} = \mathbf{\Omega}^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Omega}, \quad (10)$$

поэтому система (7) гиперболическая. Отметим, что система (7), так же как и уравнения для теплопроводного вязкого газа, к дивергентному виду не приводится.

Для бинарной смеси идеального газа с несжимаемой второй составляющей газодинамическая часть системы уравнений (7) имеет вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} &= 0, \quad \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial (p - \sigma)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial p}{\partial t} + u \frac{\partial p}{\partial x} + \rho c^2 \frac{\partial u}{\partial x} + H \frac{\partial W}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \alpha}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha}{\partial x} - (1 - \alpha) \frac{\partial u}{\partial x} &= 0,\end{aligned}\tag{11}$$

где $c = \sqrt{\frac{\gamma(p - \sigma)}{\alpha \rho}}$, $H = \frac{\gamma - 1}{\alpha}$, α – объемная доля газа в смеси. Выражение для закона Фурье с тепловой релаксацией, учитывая соотношение $T = T(p, \rho, \alpha)$, перепишем как

$$\frac{\partial W}{\partial t} + u \frac{\partial W}{\partial x} + k_p \frac{\partial p}{\partial x} + k_\rho \frac{\partial \rho}{\partial x} + k_\alpha \frac{\partial \alpha}{\partial x} + \frac{W}{\tau_w} = 0,\tag{12}$$

где

$$k_p = \frac{\chi}{\tau_w} \frac{\partial T}{\partial p}, \quad k_\rho = \frac{\chi}{\tau_w} \frac{\partial T}{\partial \rho}, \quad k_\alpha = \frac{\chi}{\tau_w} \frac{\partial T}{\partial \alpha}.$$

Систему (2), (11) и (12) представим в векторной форме (8), в которой

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ p \\ \sigma \\ \alpha \\ W \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} u & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u & 1/\rho & -1/\rho & 0 & 0 \\ 0 & \rho c^2 & u & 0 & 0 & H \\ 0 & -\rho \omega^2 & 0 & u & 0 & 0 \\ 0 & \alpha - 1 & 0 & 0 & u & 0 \\ k_p & 0 & k_\rho & 0 & k_\alpha & u \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\sigma/\tau_\sigma \\ 0 \\ -W/\tau_w \end{pmatrix}.\tag{13}$$

Матрица $\mathbf{A}$ имеет шесть действительных собственных значений: $u \pm c_1$, u , u , $u \pm c_2$, где

$$\begin{aligned}c_1 &= \sqrt{\frac{1}{2} \left\{ c^2 + \omega^2 + k_p H + \sqrt{c^4 + H \left[k_p \left[2(c^2 + \omega^2) + k_p H \right] + 4 \left(k_p - \frac{k_\alpha}{\rho} (1 - \alpha) \right) \right]} \right\}}, \\ c_2 &= \sqrt{\frac{1}{2} \left\{ c^2 + \omega^2 + k_p H - \sqrt{c^4 + H \left[k_p \left[2(c^2 + \omega^2) + k_p H \right] + 4 \left(k_p - \frac{k_\alpha}{\rho} (1 - \alpha) \right) \right]} \right\}}.\end{aligned}\tag{14}$$

Отметим, что c_1 определяет скорость распространения газодинамических возмущений, а c_2 – тепловых. Соответствующие матрицы $\mathbf{\Omega}$ и $\mathbf{\Lambda}$ в представлении (10) имеют вид

$$\Omega = \begin{pmatrix} -\frac{k_p}{c_1} & \rho \left(\frac{c_1^2}{H} - k_p \right) & -\frac{c_1}{H} & \frac{1}{c_1} \left(\frac{c_1^2}{H} - k_p \right) & -\frac{k_\alpha}{c_1} & 1 \\ \frac{k_p}{c_1} & \rho \left(\frac{c_1^2}{H} - k_p \right) & \frac{c_1}{H} & -\frac{1}{c_1} \left(\frac{c_1^2}{H} - k_p \right) & \frac{k_\alpha}{c_1} & 1 \\ -\frac{k_p}{c_2} & \rho \left(\frac{c_2^2}{H} - k_p \right) & -\frac{c_2}{H} & \frac{1}{c_2} \left(\frac{c_2^2}{H} - k_p \right) & -\frac{k_\alpha}{c_2} & 1 \\ \frac{k_p}{c_2} & \rho \left(\frac{c_2^2}{H} - k_p \right) & \frac{c_2}{H} & -\frac{1}{c_2} \left(\frac{c_2^2}{H} - k_p \right) & \frac{k_\alpha}{c_2} & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\rho}{\alpha - 1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \frac{\rho \omega^2}{\alpha - 1} & 0 \end{pmatrix},$$

$$\Lambda = \begin{pmatrix} u - c_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u + c_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u - c_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u + c_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Подробнее рассмотрим пузырьковую жидкость. Без потери точности можно считать, что температура несжимаемой фракции постоянна, т.е. $T_2 = const$, поскольку ее доля в смеси значительна. Это предположение снимается при учете сжимаемости жидкости. Выражение для средней температуры (5) дает

$$T = \frac{\alpha^2 p}{[\rho - \rho_2^0(1 - \alpha)]R} + (1 - \alpha)T_0, \quad (16)$$

где T_0 – начальная температура среды, R – газовая постоянная. С использованием (16) коэффициенты k_p , k_p и k_α , которые входят в соотношения (14), принимают вид

$$k_p = -\frac{\alpha^2 \chi p}{\tau_w [\rho - \rho_2^0(1 - \alpha)]^2 R},$$

$$k_p = \frac{\alpha^2 \chi}{\tau_w [\rho - \rho_2^0(1 - \alpha)] R},$$

$$k_\alpha = \frac{\chi}{\tau_w} \left(\frac{\alpha p (2\rho + \alpha \rho_2^0)}{[\rho - \rho_2^0(1 - \alpha)]^2 R} - T_0 \right).$$

В частности, для водно-воздушной смеси при нормальных условиях и объемной доле газовой составляющей $\alpha = 0.1$ ($\rho_2^0 = 1000$ кг/м³), значения скоростей c_1 , c_2 и c равны 39.38, 2.06 и 39.44 м/с соответственно. В расчетах коэффициент теплопроводности смеси определялся из выражения

$$\chi = \frac{1}{\rho} (\rho_1 \chi_1 + \rho_2 \chi_2),$$

где $\chi_1 = 2.58 \cdot 10^{-2}$ кг м/(с³ К) – для воздуха, $\chi_2 = 60.2 \cdot 10^{-2}$ кг м/(с³ К) – для воды, а коэффициент $\tau_w = 10$ с [14]. Вязкость смеси полагалась равной вязкости жидкости

$\mu=10^{-3}$ кг/(м с), $\tau_\sigma=0.1$ с. Значения определяющих параметров гетерогенной смеси, в отличие от «чистых» газов, существенно зависят от коэффициента тепловой релаксации τ_w и в меньшей степени от μ и τ_σ .

3. МОДЕЛЬ МНОГОСКОРОСТНОЙ ВЯЗКОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОЙ СРЕДЫ

Для бинарной смеси с объемной долей идеального газа α и несжимаемой второй составляющей уравнения многоскоростной модели из [13], в которой дополнительно учтены вязкостные и теплопроводящие свойства смеси, принимают вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} &= 0, \quad \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial (p - \sigma)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial p}{\partial t} + u \frac{\partial p}{\partial x} + \rho c^2 \frac{\partial u}{\partial x} + H \frac{\partial W}{\partial x} &= 0, \quad \tau_\sigma \left(\frac{\partial \sigma}{\partial t} + u \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) + \sigma = \mu \frac{\partial u}{\partial x}, \\ \frac{\partial W}{\partial t} + u \frac{\partial W}{\partial x} + k_p \frac{\partial p}{\partial x} + k_p \frac{\partial \rho}{\partial x} + k_\alpha \frac{\partial \alpha}{\partial x} + \frac{W}{\tau_w} &= 0, \\ \frac{\partial \alpha}{\partial t} + u_s \frac{\partial \alpha}{\partial x} - (1 - \alpha) \frac{\partial u_s}{\partial x} &= 0, \quad \frac{\partial u_s}{\partial t} + u_s \frac{\partial u_s}{\partial x} + \frac{1}{\rho_s} \frac{\partial p}{\partial x} - G \frac{\partial \alpha}{\partial x} = S, \end{aligned} \quad (17)$$

где

$$c = \sqrt{\frac{\gamma(p - \sigma)}{\alpha \rho}}, \quad H = \frac{\gamma - 1}{\alpha}, \quad k_p = \frac{\chi}{\tau_w} \frac{\partial T}{\partial \rho}, \quad k_p = \frac{\chi}{\tau_w} \frac{\partial T}{\partial p}, \quad k_\alpha = \frac{\chi}{\tau_w} \frac{\partial T}{\partial \alpha}, \quad G = \frac{p}{(1 - \alpha) \rho_s}.$$

Характеристическое уравнение системы (17) определяется из соотношения

$$\begin{vmatrix} \xi - u & -\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \xi - u & -1/\rho & 1/\rho & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\rho c^2 & \xi - u & 0 & -H & 0 & 0 \\ 0 & \mu/\tau_\sigma & 0 & \xi - u & 0 & 0 & 0 \\ -k_p & 0 & -k_p & 0 & \xi - u & -k_\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \xi - u_s & 1 - \alpha \\ 0 & 0 & -1/\rho_s & 0 & 0 & G & \xi - u_s \end{vmatrix} = 0,$$

или, раскрывая определитель, получим

$$\begin{aligned} \lambda(\xi) &= [(\xi - u_s)^2 - (1 - \alpha)G](\xi - u)^5 + \\ &+ \left\{ \frac{(1 - \alpha)k_\alpha H}{\rho_s} - [(\xi - u_s)^2 - (1 - \alpha)G] \left(c^2 + k_p H + \frac{\mu}{\rho \tau_\sigma} \right) \right\} (\xi - u)^3 + \\ &+ \left\{ H [(\xi - u_s)^2 - (1 - \alpha)G] \left(\frac{\mu k_p}{\rho \tau_\sigma} - k_p \right) - \frac{\mu(1 - \alpha)k_\alpha H}{\rho_s \rho} \right\} (\xi - u) = 0 \end{aligned} \quad (18)$$

Выписать аналитические выражения для всех корней уравнения (18) не удастся. Однако, если в (18) положить $k_\alpha = 0$, то оно преобразуется к виду

$$\lambda_1(\xi) = (\xi - u) [(\xi - u_s)^2 - (1 - \alpha)G] \left[(\xi - u)^4 - \left(c^2 + k_p H + \frac{\mu}{\rho \tau_\sigma} \right) (\xi - u)^2 - \left(k_p - \frac{\mu k_p}{\rho \tau_\sigma} \right) H \right] = 0 \quad (19)$$

корни которого

$$u, u \pm c_1, u \pm c_2, u_s \pm c_3,$$

где

$$c_1 = \sqrt{\frac{1}{2} \left\{ c^2 + \omega^2 + k_p H + \sqrt{c^4 + H \left(k_p \left[2(c^2 + \omega^2) + k_p H \right] + 4k_p} \right)} \right\}},$$

$$c_2 = \sqrt{\frac{1}{2} \left\{ c^2 + \omega^2 + k_p H - \sqrt{c^4 + H \left(k_p \left[2(c^2 + \omega^2) + k_p H \right] + 4k_p} \right)} \right\}}, \quad c_3 = \sqrt{\frac{p}{\rho_s}}.$$

Отметим, что для газожидкостных систем условие $k_\alpha = 0$ практически не меняет вид характеристического полинома, что видно из рис.1, где приведены зависимости $\lambda(\xi)$ и $\lambda_1(\xi)$. С точностью до графического представления полиномы (18) и (19) совпадают. Для других многокомпонентных систем условие $k_\alpha = 0$ может оказаться неприемлемым, в этом случае корни характеристического уравнения необходимо определять численно.

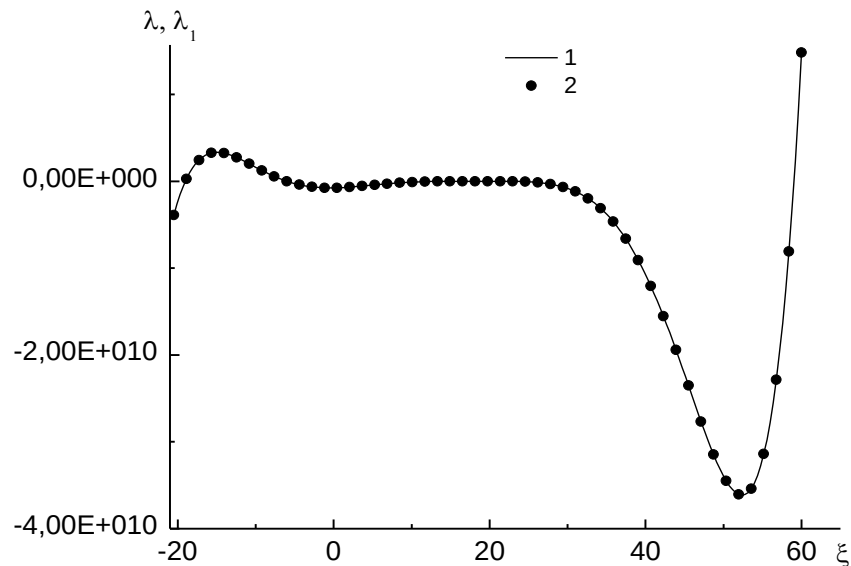


Рис.1. Зависимости $\lambda(\xi)$ и $\lambda_1(\xi)$ (кривые 1 и 2) в водно-воздушной смеси.

4. АВТОМОДЕЛЬНЫЕ РЕШЕНИЯ

Решение системы (2), (11)-(12) будем искать в виде $\rho = \rho(\xi)$, $u = u(\xi)$, $p = p(\xi)$, $\sigma = \sigma(\xi)$, $W = W(\xi)$, $\rho_i^0 = \rho_i^0(\xi)$, $\alpha_i = \alpha_i(\xi)$, $\alpha_j = \alpha_j(\xi)$, где $\xi = x - Dt$. При учете соотношений

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{d}{d\xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} = -D \frac{d}{d\xi}, \quad \frac{\partial}{\partial x} = \frac{d}{d\xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{d}{d\xi}, \quad (21)$$

система (7) приводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений

$$(u - D) \frac{d\rho}{d\xi} + \rho \frac{du}{d\xi} = 0,$$

$$(u - D) \frac{du}{d\xi} + \frac{1}{\rho} \frac{dp}{d\xi} - \frac{1}{\rho} \frac{d\sigma}{d\xi} = 0,$$

$$\begin{aligned}
(u-D) \frac{dp}{d\xi} + \rho c^2 \frac{du}{d\xi} + H \frac{dW}{d\xi} &= 0, \\
(u-D) \frac{dW}{d\xi} + k_p \frac{d\rho}{d\xi} + k_p \frac{dp}{d\xi} + \sum_{i=1}^{m-1} \left(k_{\alpha_i} \frac{d\alpha_i}{d\xi} + k_{\rho_i^0} \frac{d\rho_i^0}{d\xi} \right) + \sum_{j=m+1}^n k_{\alpha_j} \frac{d\alpha_j}{d\xi} + \frac{W}{\tau_w} &= 0, \\
(u-D) \frac{d\sigma}{d\xi} - \frac{\mu}{\tau_\sigma} \frac{du}{d\xi} + \frac{\sigma}{\tau_\sigma} &= 0, \quad (u-D) \frac{d\rho_i^0}{d\xi} + \rho_i^0 G_i \frac{du}{d\xi} = 0, \\
(u-D) \frac{d\alpha_i}{d\xi} + \alpha_i (1-G_i) \frac{du}{d\xi} &= 0, \quad i=1, \dots, m-1; \\
(u-D) \frac{d\alpha_j}{d\xi} + \alpha_j \frac{du}{d\xi} &= 0, \quad j=m+1, \dots, n.
\end{aligned} \tag{22}$$

В частности, для бинарной смеси идеального газа с несжимаемой второй составляющей соответствующая система уравнений запишется как

$$\begin{aligned}
(u-D) \frac{d\rho}{d\xi} + \rho \frac{du}{d\xi} &= 0, \\
(u-D) \frac{du}{d\xi} + \frac{1}{\rho} \frac{dp}{d\xi} - \frac{1}{\rho} \frac{d\sigma}{d\xi} &= 0, \\
(u-D) \frac{dp}{d\xi} + \rho c^2 \frac{du}{d\xi} + H \frac{dW}{d\xi} &= 0, \\
(u-D) \frac{dW}{d\xi} + k_p \frac{d\rho}{d\xi} + k_p \frac{dp}{d\xi} + k_\alpha \frac{d\alpha}{d\xi} + \frac{W}{\tau_w} &= 0, \\
(u-D) \frac{d\sigma}{d\xi} - \frac{\mu}{\tau_\sigma} \frac{du}{d\xi} + \frac{\sigma}{\tau_\sigma} &= 0, \quad (u-D) \frac{d\alpha}{d\xi} - (1-\alpha) \frac{du}{d\xi} = 0.
\end{aligned} \tag{23}$$

Систему (23) перепишем в удобном для интегрирования виде

$$\begin{aligned}
\frac{du}{d\xi} &= \Psi, \quad \frac{d\rho}{d\xi} = A\Psi, \quad \frac{d\sigma}{d\xi} = E\Psi + F, \quad \frac{d\alpha}{d\xi} = B\Psi, \\
\frac{dp}{d\xi} &= \frac{F}{\Phi} \left[H \left(k_p A + k_\alpha B - \frac{EW}{\tau_w F} \right) - \rho(u-D) \left(c^2 - \frac{HW}{\tau_w F} \right) \right], \\
\frac{dW}{d\xi} &= \frac{1}{\Phi} \left[\rho c^2 \left(\frac{W}{\tau_w} + k_p F \right) - (u-D) \left\{ \frac{W}{\tau_w} [\rho(u-D) - E] + F(k_p A + k_\alpha B) \right\} \right],
\end{aligned} \tag{24}$$

где

$$\begin{aligned}
A &= -\frac{\rho}{u-D}, \quad B = \frac{1-\alpha}{u-D}, \quad E = \frac{\mu}{\tau_\sigma(u-D)}, \quad F = -\frac{\sigma}{\tau_\sigma(u-D)}, \\
\Phi &= (u-D) \left\{ \rho[(u-D)^2 - c^2] - \rho k_p H - uE \right\} + H(k_p A + k_\alpha B), \\
\Psi &= \frac{F}{\Phi} \left[(u-D)^2 - H \left(k_p + \frac{W}{\tau_w F} \right) \right].
\end{aligned}$$

В качестве примера рассмотрена задача о движении волны по неподвижной однородной газожидкостной смеси с параметрами: $\alpha_0 = 0.9$, $T_0 = 298\text{K}$, $\rho_{10}^0 = 1.19 \text{ кг/м}^3$, $\gamma = 1.4$, $\rho_s^0 = 1000 \text{ кг/м}^3$, $\chi = 2.58 \cdot 10^{-2} \text{ кг} \cdot \text{м} / (\text{с}^3 \cdot \text{K})$, $\chi_s = 60.2 \cdot 10^{-2} \text{ кг} \cdot \text{м} / (\text{с}^3 \cdot \text{K})$, $\tau_w = 10^{-2} \text{ с}$, $\mu = 0.01 \text{ кг} / (\text{м} \cdot \text{с})$, $\tau_{\sigma(1)} = 0.1 \text{ с}$. Скорость

перемещения волны равна $D = -39.112$ м/с. Решалась задача Коши на отрезке от $\xi_- = -0.005$ до некоторого значения ξ_+ , где решение остается непрерывным. Отметим, что ввиду наличия особенностей в системе (24) найти полное распределение параметров во фронте волны не удастся. На рис.2 приведены результаты вычислений для варианта: $p(\xi_-) = 0.1$ МПа, $u(\xi_-) = 0$, $W(\xi_-) = -10^3$, $\sigma(\xi_-) = 10^4$.

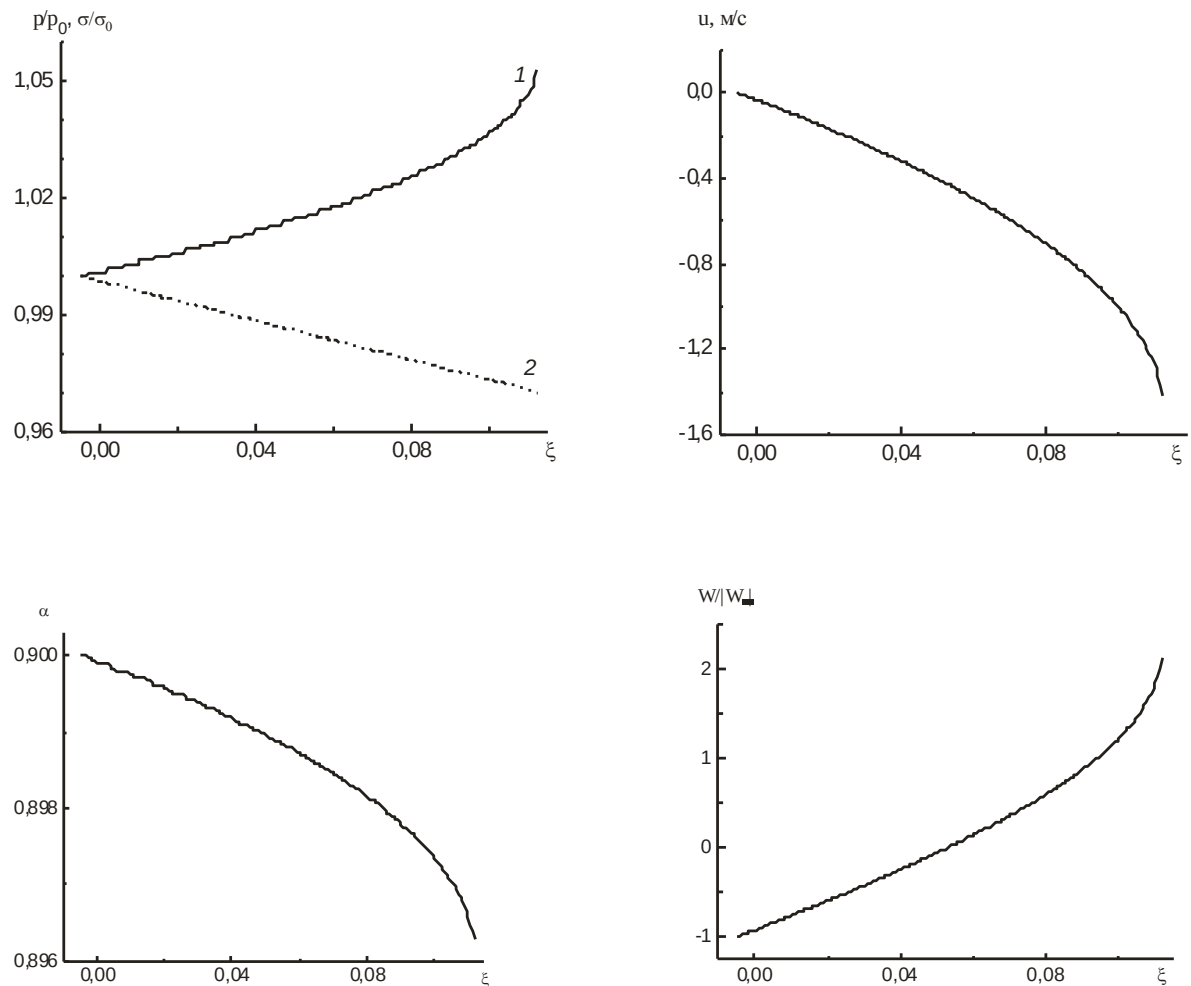


Рис.2. Зависимости $p/p_0(\xi)$, $\sigma/\sigma_0(\xi)$, $u(\xi)$, $\alpha(\xi)$, $W/W_0(\xi)$ в водно-воздушной смеси для односкоростного приближения.

В качестве второго примера рассмотрена задача о движении волны по неподвижной однородной смеси углекислого газа и азота. Оба газа полагались сжимаемыми. Параметры первого: $\alpha = 0.2$, $\rho^0 = 1.9769$ кг/м³, $\gamma = 1.31$, $\chi = 0.0137$ кг·м/(с³·К), $R = 188,96$ Дж/(К·кг). Параметры второго: $\alpha = 0.8$, $\rho^0 = 1.149$ кг/м³, $\gamma = 1.4$, $\chi = 0.0243$ кг·м/(с³·К), $R = 296,94$ Дж/(К·кг). Параметры смеси $\tau_w = 10^{-2}$ с, $\mu = 0.18$ кг/(м·с), $\tau_{\sigma(1)} = 0.1$ с. Скорость перемещения волны равна $D = 173.8783$ м/с. Решалась задача Коши на отрезке от $\xi_- = -0.005$ до $\xi_+ = +0.005$. На рис.3 приведены результаты вычислений для варианта: $p(\xi_-) = 0.1$ МПа, $u(\xi_-) = 0$, $W(\xi_-) = -10^3$, $\sigma(\xi_-) = 10^4$.

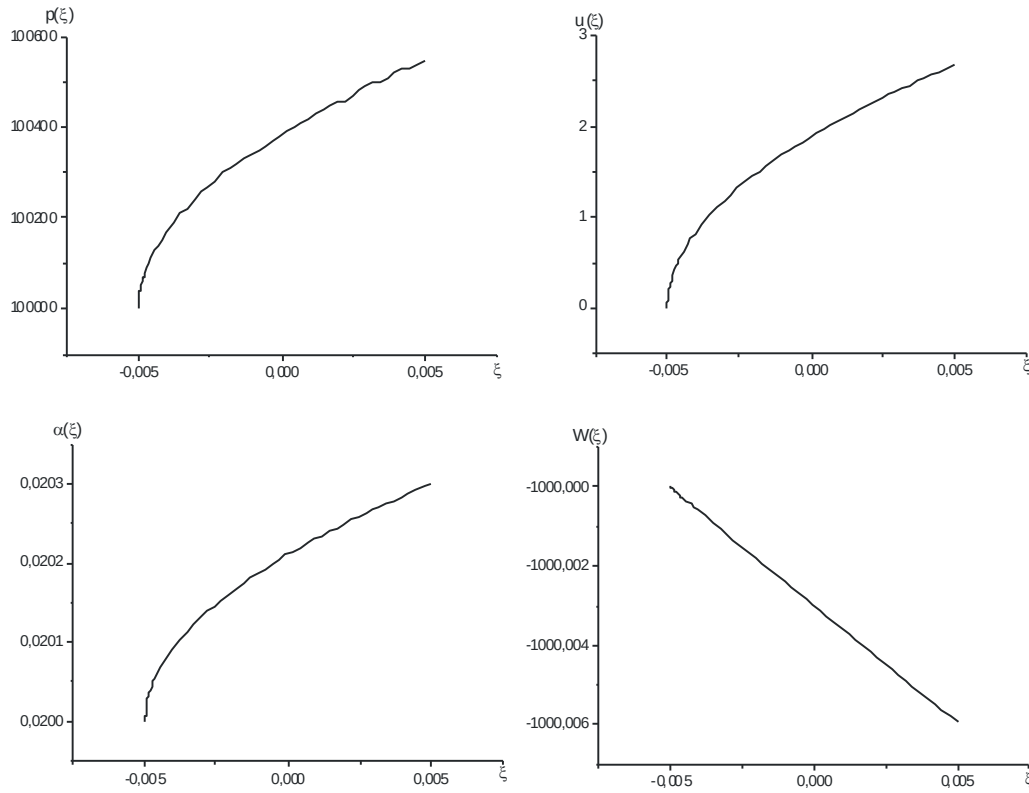


Рис.3. Зависимости $p(\xi)$, $u(\xi)$, $\alpha(\xi)$, $W(\xi)$ в смеси двух газов для односкоростного приближения.

При рассмотрении многоскоростной модели, учитывая соотношения (18), система (17) приводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned}
 (u - D) \frac{d\rho}{d\xi} + \rho \frac{du}{d\xi} &= 0, \\
 (u - D) \frac{du}{d\xi} + \frac{1}{\rho} \frac{dp}{d\xi} &= 0, \\
 (u - D) \frac{dp}{d\xi} + \rho c^2 \frac{du}{d\xi} + H \frac{dW}{d\xi} &= 0, \\
 (u - D) \frac{dW}{d\xi} + k_p \frac{d\rho}{d\xi} + k_p \frac{dp}{d\xi} + k_\alpha \frac{d\alpha}{d\xi} + \frac{W}{\tau_w} &= 0, \\
 (u_s - D) \frac{d\alpha}{d\xi} - (1 - \alpha) \frac{du_s}{d\xi} &= 0, \\
 (u_s - D) \frac{du_s}{d\xi} + \frac{1}{\rho_s} \frac{dp}{d\xi} - G \frac{d\alpha}{d\xi} &= S.
 \end{aligned} \tag{25}$$

Перепишем (25) в удобном для интегрирования виде

$$\begin{aligned}
 \frac{du}{d\xi} &= \Phi, \quad \frac{d\rho}{d\xi} = A\Phi, \quad \frac{d\alpha}{d\xi} = B\Psi, \quad \frac{dp}{d\xi} = M\Phi + L, \\
 \frac{d\sigma}{d\xi} &= K\Phi + L, \quad \frac{dW}{d\xi} = P\Phi + R, \quad \frac{du_s}{d\xi} = \Psi,
 \end{aligned} \tag{26}$$

где

$$A = -\frac{\rho}{u-D}, \quad B = \frac{1-\alpha}{u_s-D}, \quad K = \frac{\mu}{\tau_\sigma(u-D)}, \quad L = -\frac{\sigma}{\tau_\sigma(u-D)},$$

$$M = K - \rho(u-D), \quad P = -\frac{M(u-D) + \rho c^2}{H}, \quad R = -\frac{L(u-D)}{H},$$

$$X = (u-D)P + k_\alpha A + k_p M, \quad Y = -k_p L - (u-D)R - W/\tau_w.$$

$$\Phi = \frac{\rho_s Y(u_s - D - BG) + k_\alpha B(L - \rho_s S)}{\rho_s X(u_s - D - BG) - k_\alpha BM}, \quad \Psi = -\frac{MY + X(L - \rho_s S)}{\rho_s X(u_s - D - BG) - k_\alpha BM}.$$

На рис.4 представлены результаты интегрирования системы (26) для варианта: $D = -39.178$ м/с, $p(\xi_-) = 0.1$ МПа, $u(\xi_-) = 0$, $u_s(\xi_-) = 0$, $W(\xi_-) = -10^3$, $\sigma(\xi_-) = 10^4$. Параметры водно-воздушной смеси те же, что и в первом примере.

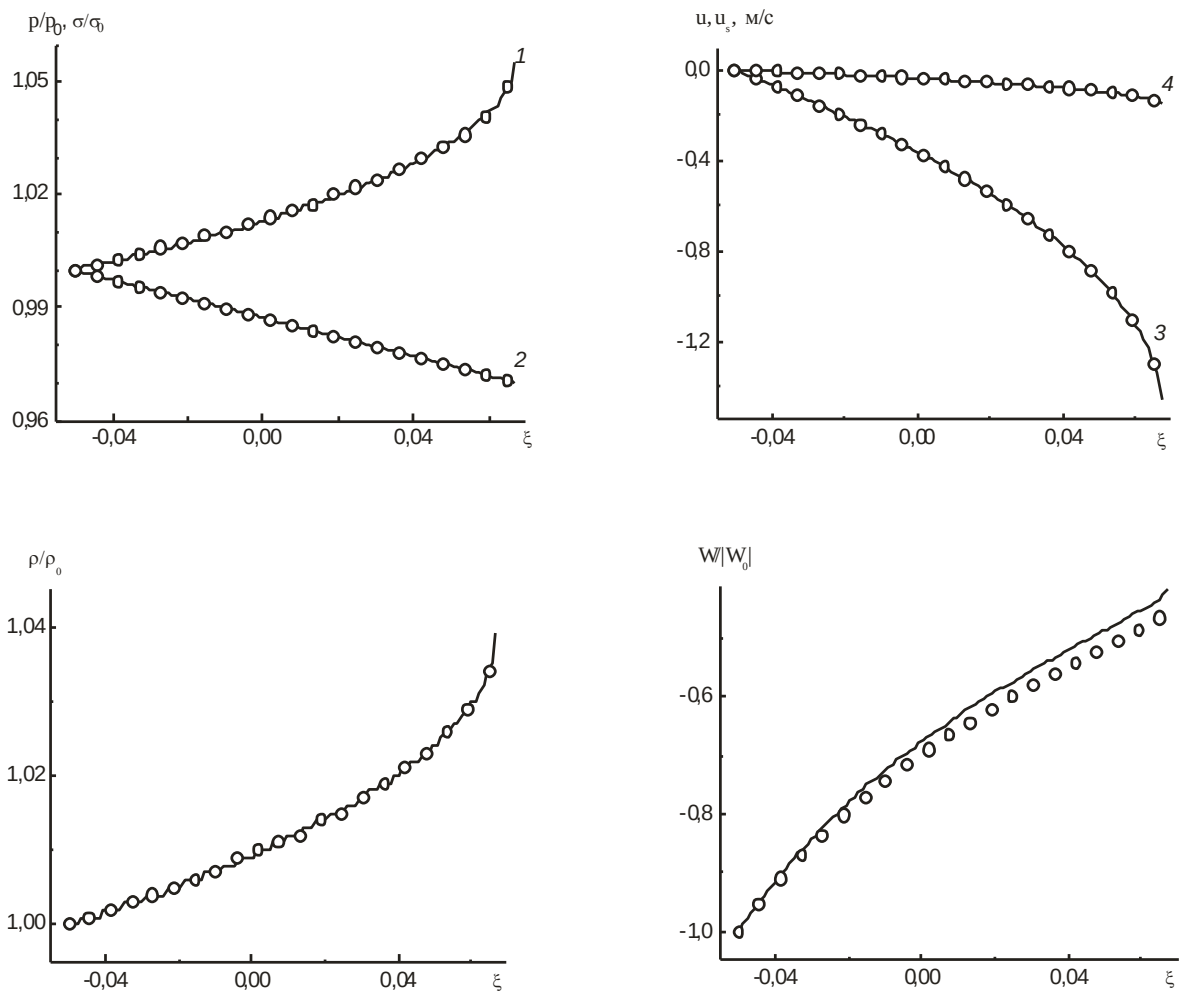


Рис.4. Зависимости $p/p_0(\xi)$, $\sigma/\sigma_0(\xi)$, $u(\xi)$, $u_s(\xi)$, $\rho/\rho_0(\xi)$, $W/|W_0|(\xi)$ в водно-воздушной смеси для многоскоростного приближения.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлены модифицированные модели одно- и многоскоростной многокомпонентной среды, учитывающие вязкостные и теплопроводящие свойства смеси. Показано, что при использовании релаксационных законов для диссипативных процессов системы уравнений относятся к гиперболическому типу.

Для рассматриваемых моделей среды исследованы автомодельные решения типа бегущих волн, которые в дальнейшем могут быть использованы при конструировании решателей задачи Римана, используемых в численных схемах Годуновского типа.

Обозначения:

c – скорость звука в смеси; c_{*i} , γ_i , ρ_{*i} – константы уравнения состояния; D – скорость перемещения волны; m – число сжимаемых фракций в смеси; n – общее количество фракций; p – давление; $\mathbf{u}$ – вектор скорости; $\mathbf{F}$ – плотность массовой силы; J_{ij} – интенсивность превращения массы из i -й фракции в j -ю на единицу объема смеси; Q_{ij} – тепловыделение в единицу времени на единицу объема смеси вследствие превращения i -й фракции в j -ю; T и $\mathbf{W}$ – осредненные температура и вектор плотности теплового потока; α_i – объемная доля i -й фракции в смеси; ξ – автомодельная переменная; ρ – плотность смеси; ρ_i^0 – истинная плотность i -й фракции; ε_i – удельная внутренняя энергия i -го компонента; σ – вязкое напряжение; μ – коэффициент вязкости; χ – коэффициент теплопроводности смеси; τ_w и τ_σ – времена тепловой релаксации смеси и релаксации вязких напряжений. Индексы: 0 – в невозмущенной среде; i – для сжимаемых фракций; j – для несжимаемых.

ЛИТЕРАТУРА

1. Суров В.С. Об отражении воздушной ударной волны от слоя пены // ТВТ. – 2000. – Т.38. – №1. – С.101-110.
2. Суров В.С. К расчету ударно-волновых процессов в пузырьковых жидкостях // ЖТФ. – 1998. – Т.68. – №11. – С.12-19.
3. Суров В.С. О локализации контактных поверхностей в многожидкостной гидродинамике // ИФЖ. – 2010. – Т.83. – №3. – С.518-527.
4. Суров В.С. Односкоростная модель гетерогенной среды с гиперболическим адиабатическим ядром // ЖВМ и МФ. – 2008. – Т.48. – №6. – С.1111-1125.
5. Wackers J., Koren B. A fully conservative model for compressible two-fluid flow // J. Numer. Meth. Fluids. – 2005. – Vol.47. – P.1337-1343.
6. Murrone A., Guillard H. A five equation reduced model for compressible two phase flow problems // J. Comput. Phys. – 2005. – Vol.202. – P.664-698.
7. Kreeft J.J., Koren B. A new formulation of Kapila's five-equation model for compressible two-fluid flow, and its numerical treatment // J. Comput. Phys. – 2010. – Vol.229. – P.6220-6242.
8. Cattaneo C. Sur une forme de l'equation de la chaleur elinant le paradoxe d'une propagation instantanee // CR. Acad. Sci. – 1958. – Vol.247. – P.431-432.
9. Dai W., Wang H., Jordan P.M. A mathematical model for skin burn injury induced by radiation heating // Int. J. Heat and Mass Transfer. – 2008. – Vol.51. – P.5497-5510.
10. Суров В.С. Гиперболическая модель односкоростной многокомпонентной теплопроводной среды // ТВТ. – 2009. – Т.47. – №6. – С.905-913.
11. Самарский А.А., Попов Ю.П. Разностные методы решения задач газовой динамики. – М.: Наука, 1992. – 424 с.
12. Лодж А.С. Эластичные жидкости. – М.: Наука, 1969. – 464 с.
13. Суров В.С. Гиперболическая модель многоскоростной гетерогенной среды // ИФЖ. – 2012. – Т.85. – №3. – С. 495-502.

14. Kaminski W. Hyperbolic heat conduction equation for materials with a non-homogeneous inner structure // Trans. of the ASME. J. of Heat Transfer. – 1990. – Vol.112. – P.555.

Том 2

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Горение и детонация сложных сред</i>	3
Математическое моделирование фингер-эффекта при фильтрационном горении	
Алдушин А.П., Ивлева Т.П.....	4
Разработка модуля расчета плоских детонационных течений в системе Ansys Fluent	
Бедарев И.А., Федоров А.В., Ульзутуева К.В.....	14
Бифуркация газовых струй при акустическом воздействии	
Голуб В.В., Кривокорытов М.С.....	26
Исследование процессов смешения пространственных воздушных потоков со струями, имитирующими генераторные газы в камере дожигания РПД	
Захаров Н.Н., Кутузова А.Н., Шаров М.С.....	31
Численное моделирование на основе уравнений Навье-Стокса распространения волн горения в шаровом реакторе и продувок модели тягового устройства с кольцевым соплом	
Левин В.А., Громов В.Г., Афонина Н.Е., Марков В.В., Хмелевский А.Н.....	47
Стабилизация детонации в сверхзвуковом потоке водородно-воздушной смеси в плоских каналах	
Левин В.А., Журавская Т.А.....	57
Ячеистая детонация в трехмерных каналах и открытом пространстве	
Левин В.А., Мануйлович И.С., Марков В.В.....	66
Детонация в квадратной камере с подвижными стенками и трехмерных каналах квадратного сечения	
Левин В.А., Мануйлович И.С., Марков В.В.....	75
Численное моделирование течений в импульсной гиперзвуковой аэродинамической трубе	
Левин В.А., Мануйлович И.С., Марков В.В., Захаров Н.Н., Яновский Ю.Г., Левин Ю.К.....	88
Расчет подавления газовой детонации инертными частицами в двухскоростном двухтемпературном приближении	
Тропин Д.А., Федоров А.В.....	104
Моделирование ударно-волновых и детонационных процессов в столкновительных газовзвесах	
Хмель Т.А., Федоров А.В.....	116

Вычислительные методы механики гетерогенных сред	125
Численный анализ предельной деформируемости композитных оболочек вращения при импульсном нагружении	
Абросимов Н.А., Елесин А.В.	126
Идентификация нейронной сети Елмана напряжённо-деформационному состоянию вязкоупругой среды	
Басистов Ю.А., Яновский Ю.Г.	136
Метод симметрических многочленов в расчётах характеристической матрицы многослойной среды	
Беляев Ю.Н.	147
Экструзия композитного материала в условиях волнового воздействия	
Беляева Н.А., Прянишникова Е.А., Столин А.М., Кобзев Д.Е.	160
О моделировании контактного взаимодействия упругих тел с тонкими покрытиями Винклеровского типа	
Бобылёв А.А., Белашова И.С.	169
Математическое и экспериментальное моделирование уединенных волн в тонком слое среды	
Бошенятов Б.В., Левин Ю.К., Лисин Д.Г., Попов В.В., Семянистый А.В., Яновский Ю.Г.	178
Моделирование уравнений конвективного переноса тепла в структурно-неоднородных средах методом двухмасштабного усреднения	
Волков-Богородский Д.Б., Власов А.Н.	186
Интерьерные границы композитов: полимасштабность структуры и свойства силовых полей	
Гергега А.Н., Выровой В.Н.	204
Применение математических методов, основанных на теории многозначных отображений для исследования предельных возможностей композиционных структур при волновых воздействиях различной физической природы	
Гусев Е.Л.	210
Применение методов математического и компьютерного моделирования для исследования систем трубопроводного транспорта в экстремальных геолого-климатических условиях	
Гусев Е.Л.	216
Методы решения задач численного анализа и оптимального проектирования неоднородных композиционных оболочек и пластин с требуемым и регулируемым комплексом свойств	
Гусев Е.Л., Бакулин В.Н.	221
Построение математической модели полосы и балки из композиционного материала на основе принципа сжатых отображений	
Зверяев Е.М.	226

**Моделирование теплопроводности неоднородных материалов
и структур**

Лурье С.А., Полянский М.Н., Соляев Ю.О., Лыкосова Е.Д..... 235

**Квантово-механическое моделирование процессов агломерации
наноразмерных частиц шунгита в спиртах**

Никитина Е.А., Яновский Ю.Г., Карнет Ю.Н..... 242

**Новые гиперболические модели многокомпонентных гетерогенных
сред**

Суров В.С., Березанский И.В..... 252