



ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР

нашему журналу 60 лет

www.sciencejournals.ru

Журнал публикует оригинальные статьи и обзоры по всем вопросам теплофизических свойств веществ и теплообмена, низкотемпературной плазмы и плазменных технологий, физической газодинамики, по методам экспериментальных исследований и измерений в теплофизике, высокотемпературным аппаратам и конструкциям



СОДЕРЖАНИЕ

Том 61, номер 3, 2023

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛАЗМЫ

Физико-химические характеристики плазменного потока, окружающего возвращаемые космические аппараты при входе в атмосферу Земли с орбитальной скоростью

В. Ю. Тугаенко, А. С. Грибков, С. Т. Суржиков 323

Исследование поверхностной структуры электродов при разряде в электролите в магнитном поле

Д. Л. Кирко 333

Влияние момента инициации высокочастотного коронного разряда на развитие горения в гибридном компрессионном двигателе

Е. А. Филимонова, А. С. Добровольская 340

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ

О замкнутом интерполяционном уравнении состояния для простой жидкости

В. Б. Бобров 349

Расчет термодинамических свойств метана до 30 МПа по новому малокоэффициентному уравнению состояния с регулярной и масштабной частями

П. П. Безверхий, О. С. Дутова 358

Плотность и молярный объем жидких амальгам таллия, свинца и висмута

В. С. Саввин 370

Температурные зависимости теплоемкости и термодинамических функций алюминиевого проводникового сплава AlTi0.1 со стронцием

И. Н. Ганиев, Р. Дж. Файзуллоев, Ф. Ш. Зокиров, Н. И. Ганиева 376

Первопринципное изучение переноса протона в металл-оксидном перовските

А. Е. Галашев 382

ТЕПЛОМАССООБМЕН И ФИЗИЧЕСКАЯ ГАЗОДИНАМИКА

Процесс переноса тепла в угольном пласте с изменяющимися теплофизическими свойствами

И. М. Абдулагатов, А. Э. Рамазанова 391

Моделирование тепломассопереноса на затупленных телах в условиях аэродинамического нагрева высокоскоростных летательных аппаратов

В. Ф. Формалев, Б. А. Гарибян, С. А. Колесник 398

Инверсия кривой кипения на микроструктурированных пористых покрытиях

Д. А. Швецов, А. Н. Павленко, А. Е. Брестер, В. И. Жуков 405

Процессы в факеле распыла теплоносителя

А. Т. Комов, А. В. Захаренков, В. В. Толмачев, В. С. Штелинг 410

Импульсное воздействие на коллапс кавитационного пузырька

А. А. Аганин, Н. А. Хисматуллина, Р. И. Нигматулин 419

Трехмерные вихревые течения в замкнутом объеме и некоторые “аномальные” явления в атмосфере Земли

О. А. Синкевич, Г. О. Зинченко 426

Волновая динамика капель перфторуглерода в вязкоупругой жидкости

Д. А. Губайдуллин, Ю. В. Федоров 436

Численное моделирование взаимодействия ударной волны со слоем пены с использованием двухжидкостного подхода	443
<i>П. А. Чупров, П. С. Уткин, С. В. Фортובה, А. Д. Киверин</i>	
Формирование входного профиля течения для пассивного управления магнитогидродинамическим потоком жидкого металла в канале	452
<i>И. А. Беляев, Д. Ю. Черныш, Н. А. Лучинкин, Д. С. Краснов, Ю. Б. Колесников, Я. И. Листратов</i>	
Изготовление и исследование характеристик новой конструкции пассивного солнечного водонагревателя термосифонного типа	465
<i>M. U. Farooq, M. I. Hussain, M. Y. Naz, M. M. Makhoulouf, S. Shukrullah, A. Ghaffar, K. Ibrahim, N. M. AbdEl-Salam</i>	

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Уравнения состояния сапфира, кремнезема, периклаза и рутила	473
<i>И. В. Ломоносов</i>	
Уравнение состояния алюминия при высоких давлениях	477
<i>К. В. Хищенко</i>	

УДК 533.92:533.6.01

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЛАЗМЕННОГО ПОТОКА, ОКРУЖАЮЩЕГО ВОЗВРАЩАЕМЫЕ КОСМИЧЕСКИЕ АППАРАТЫ ПРИ ВХОДЕ В АТМОСФЕРУ ЗЕМЛИ С ОРБИТАЛЬНОЙ СКОРОСТЬЮ

© 2023 г. В. Ю. Тугаенко^{1, *}, А. С. Грибков¹, С. Т. Суржииков²¹Ракетно-космическая корпорация “Энергия” им. С.П. Королёва, г. Королев, Россия²Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, Россия

*E-mail: vjatcheslav.tugaenko@rsce.ru

Поступила в редакцию 27.12.2022 г.

После доработки 03.03.2023 г.

Принята к публикации 11.05.2023 г.

Исследованы характеристики плазменного потока, окружающего спускаемый аппарат пилотируемого транспортного корабля “Союз” во время прохождения атмосферы Земли. Впервые сделаны оценки химического состава сжатого слоя и плазменного потока в подветренной области, доступной для инструментальных исследований через иллюминатор спускаемого аппарата. Описаны характеристики аппаратуры, разработанной для проведения космического эксперимента по исследованию спектра излучения плазменного слоя вокруг спускаемого аппарата.

DOI: 10.31857/S0040364423030225

ВВЕДЕНИЕ

Спускаемые аппараты (СА) космических кораблей, возвращающие космонавтов или научное оборудование с низкой околоземной орбиты, входят в атмосферу Земли со скоростью примерно 7.8 км/с. Посадку совершают с применением парашютной системы [1]. Для защиты конструкции аппарата от аэродинамического нагрева применяется тепловая защита на основе абляционных материалов. Характерной особенностью аэрофизики входа СА в плотные слои атмосферы с орбитальной скоростью является то, что в сжатом слое, образующемся у поверхности СА, превалируют процессы диссоциации молекулярных компонентов набегающего воздуха, а характерная температура в сжатом слое у лобовой поверхности достигает 6000 К [2].

По современным представлениям [3] среди процессов физической и химической кинетики в высокотемпературном слое у лобовой поверхности СА и в отрывном течении за кромкой лобового экрана начинают преобладать процессы с участием электронно-возбужденных состояний атомов и молекул, несмотря на то что уровень ионизации газа достаточно низкий (степень ионизации — десятки доли процента) и, по-видимому, определяется процессом ассоциативной ионизации, протекающей через образование электронно-возбужденных молекул NO*:



где атомарные компоненты образуются при ударной диссоциации молекулярных компонентов воздуха.

В статье описываются физико-химические характеристики плазменного потока, окружающего СА при движении в атмосфере со скоростями, соответствующими числам Маха от 27 до 14. Основное внимание уделяется подветренной области, где в зоне отрыва формируются возвратные течения с интенсивным подмешиванием продуктов термохимического разрушения теплозащитных материалов лобового теплозащитного экрана и боковой поверхности. В случае СА корабля “Союз” можно проводить инструментальные исследования спектра излучения плазменного слоя и его химического состава, используя иллюминатор, расположенный на боковой поверхности СА.

БАЛЛИСТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СПУСКА И ГЕОМЕТРИЯ СА ТРАНСПОРТНОГО ПИЛОТИРУЕМОГО КОРАБЛЯ “СОЮЗ”

Спускаемый аппарат транспортного пилотируемого корабля “Союз” находится в его средней части и имеет массу 2.8 т, длину 2.16 м, диаметр 2.2 м. СА входит в плотные слои атмосферы со скоростью примерно 7.8 км/с, имея балансировочный угол атаки в диапазоне 20°–30° на участке аэродинамического нагрева. Продольная дальность движения в атмосфере составляет примерно 2500 км. Форма СА осесимметричная, сегментально-коническая и состоит из двух сферических участков и одного участка конической формы. Конус имеет угол полураствора 7°. Геометрия СА представлена на рис. 1.

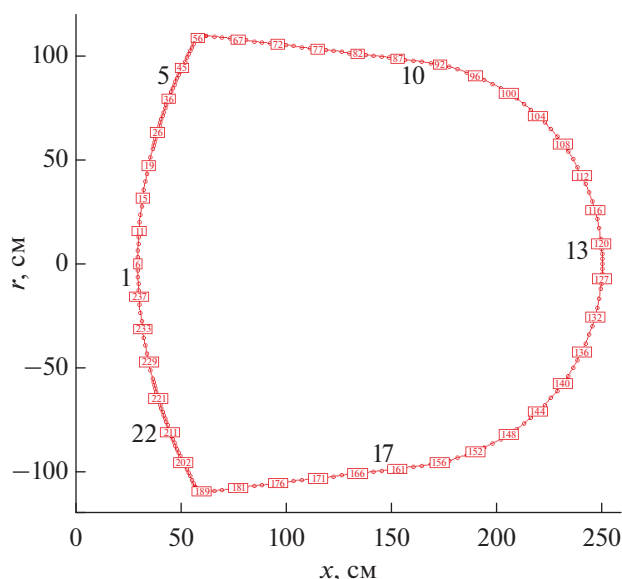


Рис. 1. Форма СА и местоположение расчетных контрольных точек на его поверхности.

На внешней поверхности расположены двигатели управления спуском, определяющие ориентацию СА во время полета в атмосфере, что позволяет использовать аэродинамическое качество СА и снизить перегрузки.

Тепловая защита СА [4] состоит из двух частей: лобового теплозащитного экрана (ЛТЭ) и сфероконического участка. ЛТЭ имеет форму сферического сегмента и расположен в передней относительно набегающего потока части СА (на рис. 1 левый сегмент окружности). В конструкции периферийной части ЛТЭ имеются титановые цилиндры, которые на участке аэродинамического нагрева разрушаются. Материалы и конструкция тепловой защиты были разработаны более 50 лет назад и обеспечили безопасный спуск СА в атмосфере для более чем 190 аппаратов.

ЛТЭ выполнен из слоистого пластика ПКТ-11-К-ФЛ, изготовленного из вязально-прошивного полотна на основе кремнеземно-капроновой ткани, пропитанной фенольно-формальдегидными смолами. При нагреве выше 300°C начинается разложение капрона ткани и фенольно-формальдегидной смолы с образованием разнообразных продуктов деструкции. Состав получающейся смеси зависит от многих факторов (температуры, давления, темпа нагрева и т.п.). Основными компонентами являются C , H , O , N , CH , CH_4 , CO , CO_2 , CN , C_2 , C_2H , C_2H_2 , C_3 , C_4 , C_5 , HCN , H_2 , H_2O , N_2 [5]. Исследования пиролиза фенольной смолы при температуре 1200°C показывают, что среди продуктов абляции должны присутствовать компоненты, образованные при деструкции фенольных смол, такие как C_2H_4 , C_3H_6 , C_5H_6 , C_6H_6 [6].

Прямыми измерениями оценено, что потеря массы лобового щита в результате абляции составляет 40–60 кг.

Тепловая защита коническо-сферической поверхности состоит из наружного защитного и внутреннего изоляционного слоев. Защитный слой выполнен в виде оболочки из стеклопластика ТСП-ФН (прошивной материал на основе кремнеземной ткани и фенольно-формальдегидной смолы).

На наветренную сторону оболочки дополнительно приклеивается теплозащитный материал фторлон (сополимер политетрафторэтилена с поливинилиденфторидом). При нагреве фторлон плавится и сублимируется. Коэффициент газификации зависит от температуры и для условий спуска с околоземной орбиты находится в диапазоне 0.75–1.0. Продукты сублимации имеют в своем составе C_2F_4 , CF_4 , COF_2 , CO_2 и др.

При разрушении титановых цилиндров, входящих в конструкцию ЛТЭ, за счет химического взаимодействия с набегающим высокотемпературным газом, оплавления и уноса образуются окислы титана TiO_2 , Ti_2O_3 и, возможно, некоторое количество карбида титана TiC и нитрида титана TiN .

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ТЕРМОГАЗОДИНАМИКИ ПРОСТРАНСТВЕННОГО ОБТЕКАНИЯ СА “СОЮЗ”

Сложность решения задачи радиационной газовой динамики об орбитальном входе СА состоит в том, что на начальном участке траектории в сжатом слое формируются сильно неравновесные условия с пространственным характером течения излучающего и поглощающего газа, когда зона релаксации за фронтом ударной волны может быть соизмерима с величиной отхода фронта ударной волны от поверхности. По мере спуска у поверхности формируются условия, близкие к равновесным, но при весьма высокой температуре непосредственно у поверхности. Для трехмерного моделирования обтекания СА “Союз” в отдельных точках траектории орбитального входа в атмосферу используется авторский компьютерный код NERAT-3D [7], в котором реализована расчетно-теоретическая модель, основанная на системе самосогласованных уравнений неравновесной физической и химической механики частично ионизованного многокомпонентного вязкого, теплопроводного, селективно излучающего и поглощающего газа. В указанную систему входят уравнения Навье–Стокса и неразрывности смеси газов (вектор-функция U_g), уравнения сохранения энергии поступательного движения частиц и сохранения энергии, накапливаемой в колебаниях молекул N_2 , O_2 и NO , уравнения неразрывности отдельных химических компонентов (вектор-

функция U_c) совместно с системой уравнений химической кинетики, а также уравнение переноса селективного теплового излучения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial uU}{\partial x} + \frac{\partial vU}{\partial y} + \frac{\partial wU}{\partial z} &= R, \\ U &= (U_g, U_c), \quad R = (R_g, R_c); \\ U_g &= (\rho, \rho u, \rho v, \rho w)^T, \quad U_c = (T, \rho_i, E_{V,m})^T, \\ i &= 1, 2, \dots, N_s, \quad m = 1, 2, N_V = 3; \\ \left(\frac{dX_i}{dt}\right)_n &= (b_{i,n} - a_{i,n}) \left(k_{f,n} \prod_j X_j^{a_{j,n}} - k_{r,n} \prod_j X_j^{b_{j,n}} \right), \\ n &= 1, \dots, N_r; \\ \Omega \frac{\partial J_\omega(\mathbf{r}, \Omega)}{\partial \mathbf{r}} + \kappa_\omega(\mathbf{r}) J_\omega(\mathbf{r}, \Omega) &= j_\omega(\mathbf{r}); \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} R_g &= \left(0, -\frac{\partial p}{\partial x} + S_{\mu,x}, -\frac{\partial p}{\partial y} + S_{\mu,y}, -\frac{\partial p}{\partial z} + S_{\mu,z} \right)^T, \\ R_c &= \begin{bmatrix} R_T / \rho c_p \\ -\nabla \rho \mathbf{J}_i - \rho \nabla \mathbf{V} + \dot{\omega}_i \\ e_{V,m} - E_{V,m} \nabla \mathbf{V} - \nabla E_{V,m} \mathbf{J}_{i(m)} \end{bmatrix}, \\ S_{\mu,\alpha} &= -\frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\mu \nabla \mathbf{V}) + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[\mu \left(\frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) \right] + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \left[\mu \left(\frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\gamma} \right) \right] + 2 \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\mu \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha} \right), \\ R_T &= \nabla (\lambda \nabla T) + \nabla \mathbf{q}_R + \frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla p + \Phi_\mu + \\ &+ Q_V - \sum_{i=1}^{N_s} h_i \dot{\omega}_i + \sum_{i=1}^{N_s} \rho c_{p,i} D_i (\nabla Y_i \cdot \nabla T), \\ \Phi_\mu &= \mu \left[2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \right. \\ &\left. + \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right], \end{aligned}$$

t — время; $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$ — ортогональные декартовы координаты; $u_1 = u$, $u_2 = v$, $u_3 = w$ — проекции вектора скорости $\mathbf{V}$ на оси координат; α, β, γ — индексы координатных осей, подставляемые в круговом порядке (1, 2, 3; 2, 3, 1; 3, 1, 2); p , ρ , T — давление, плотность и температура поступательного движения частиц; μ , λ , c_p — динамический коэффициент вязкости, коэффициент теплопроводности и удельная теплоемкость смеси при постоянном давлении; N_s , N_r , N_V — число химических компонентов смеси газов, химических реакций и учитываемых колебательных мод ($m = 1$ для колебательной энергии N_2 , $m = 2$ для O_2 , $m = 3$ для NO); $a_{i,n}$, $b_{i,n}$, $k_{f,n}$, $k_{r,n}$ — стехиометриче-

ские коэффициенты и константы скорости прямой и обратной n -й химической реакции; X_i , Y_i — объемно-молярная и относительная массовая концентрация i -го компонента; $c_p = \sum_i^{N_s} Y_i c_{p,i}$, $c_{p,i}$, h_i — удельная теплоемкость при постоянном давлении, связанная с поступательными и вращательными степенями свободы и энтальпия i -го компонента смеси; $\dot{\omega}_i = M_i \sum_{n=1}^{N_r} \left(\frac{dX_i}{dt} \right)_n$, $\mathbf{J}_i = -D_i \nabla Y_i$, D_i — массовая скорость химических превращений, вектор плотности диффузионного переноса, эффективный коэффициент диффузии i -го компонента смеси; $Q_V = -\sum_{m=1}^{N_V} e_{V,m}$ — объемная мощность теплового выделения, обусловленная процессами колебательной релаксации в газовой смеси; $e_{V,m}$, $\dot{e}_{V,m}$ — удельная энергия колебательного движения в m -й колебательной моде i -го компонента газовой смеси $e_{V,m} = R_{i(m)} \theta_m / [\exp(\theta_m / T_{V,m}) - 1]$ и источник колебательной энергии в m -й моде; $R_{i(m)} = R_0 / M_{i(m)}$, R_0 — газовая и универсальная газовая постоянные; $T_{V,m}$, $\rho_{i(m)}$, $D_{i(m)}$, $\mathbf{J}_{i(m)}$, $M_{i(m)}$ — колебательная температура m -й колебательной моды, плотность, эффективный коэффициент диффузии, вектор плотности диффузионного переноса и молекулярный вес i -го компонента газовой смеси, обладающего m -й модой колебательного движения; θ_m — характеристическая колебательная температура; $J_\omega(r, \Omega)$, $\kappa_\omega(r)$, $j_\omega(r)$ — спектральная интенсивность излучения, объемные спектральные коэффициенты поглощения и излучения; $\mathbf{r}$, Ω — радиус-вектор точки расчетной области, в которой ищется решение уравнения переноса излучения, и единичный вектор распространения излучения; ω — волновое число теплового излучения; λ — длина волны в мкм рассчитывается по формуле $\lambda = 10^4 / \omega$, где ω измеряется в см^{-1} ; $\mathbf{q}_r = \int_{\Delta\omega_{\text{tot}}} \mathbf{q}_{r,\omega} d\omega = \int_{\Delta\omega_{\text{tot}}} d\omega \int_{4\pi} J_\omega(r, \Omega) \Omega d\Omega$ — вектор плотности интегрального по спектру излучения, $\Delta\omega_{\text{tot}} = \omega_{\text{max}} - \omega_{\text{min}}$.

Замыкающие соотношения для решаемой системы уравнений включают в себя термическое и калорическое уравнения состояния идеального газа:

$$p = \rho R_0 T / M_\Sigma, \quad e_i = \int_{T_0}^T c_{V,i} dT + e_{i,0},$$

где $M_\Sigma^{-1} = \sum_i^{N_s} Y_i / M_i$, $e = \sum_i^{N_s} Y_i e_i$, $e_{i,0}$ — внутренняя энергия при T_0 , $c_{V,i}$ — удельная теплоемкость при постоянном объеме i -го компонента, M_Σ — суммарный молекулярный вес газа.

На поверхности СА задавались условия прилипания, абсолютной каталитичности и рекомбинации для заряженных частиц, а также температура поверхности T_w , определяемая по модели равновесно излучающей поверхности со степенью черноты $\varepsilon = 0.8$. На обтекаемой поверхности $T_{V,m} = T_w$. В выходном сечении задавались так называемые “мягкие” граничные условия (равенство нулю производных искоемых функций вдоль линий тока).

Кинетическая модель газофазных процессов включала 87 химических реакций для 21 химического компонента (H, C, N, O, e, N₂, O₂, NO, H₂, C₂, CN, CO, CO₂, C₃, HCN, C⁺, N⁺, O⁺, N₂⁺, O₂⁺, NO⁺). Константы скоростей химических реакций приведены в работе [8].

Плотности конвективного и интегрального радиационного теплового потока на участке поверхности с координатой $\mathbf{r}_n$ и локальной нормалью $\mathbf{n}$ определялись по формулам

$$q_c = q_t + q_d = -\lambda_w (\mathbf{n} \cdot \nabla T)_w - \sum_i^{N_s} \rho_i h_i (\mathbf{n} \cdot \mathbf{J}_i)_w,$$

$$q_r = - \int_{4\pi} d\Omega \int_{\Delta\omega_{\text{tot}}} J_\omega(\mathbf{r}_w, \Omega) (\mathbf{n} \cdot \Omega)_w d\omega =$$

$$= - \sum_{i=1}^{N_{\Delta\Omega}} \Delta\Omega_i \sum_{k=1}^{N_{\Delta\omega}} J_k(\mathbf{r}_w, \Omega_i) (\mathbf{n} \cdot \Omega_i)_w \Delta\omega_k,$$

где $N_{\Delta\Omega}$, $N_{\Delta\omega}$ — число элементарных телесных углов, на которые разбито пространство угловых направлений над элементарной площадкой с нормалью $\mathbf{n}$, и число спектральных групп; $J_k(\mathbf{r}_w, \Omega_i)$ — интенсивность излучения, осредненная по направлениям в пределах элементарного телесного угла и спектральной группы.

Описание используемых моделей химической кинетики, колебательной релаксации, неравновесной диссоциации, переносных свойств многокомпонентного частично ионизованного газа с учетом ограничения потенциалов взаимодействия заряженных частиц, приводящего к амбиполярной диффузии, а также численный метод интегрирования системы уравнений, включая подробности интегрирования уравнения переноса селективного теплового излучения, приведены в [7, 9]. Расчеты выполнены на многоблочных конечно-раз-

ностных сетках, для построения которых использован метод аналитических функций [10]. Три блока расчетной сетки расположены у лобовой поверхности, один блок вблизи кромки аэродинамического щита и два блока у боковой поверхности и в следе. Многоблочный алгоритм использовался для удобства проведения расчетов с использованием процедуры MPI-распараллеливания (MPI — message passing interface (взаимодействие через передачу сообщений) — программный инструментарий для обеспечения связи между ветвями параллельных вычислений). В пределах каждого блока использовалась многосеточная технология, когда после достижения сходимости проводилось двукратное измельчение конечно-разностной сетки. Характерный размер наиболее грубой сетки: 41 узел по нормали к поверхности, 31 узел вдоль каждого блока у лобовой поверхности и 101 узел вдоль боковой поверхности. Процедура удвоения сетки проводилась три раза. Заметим, что использованный алгоритм численного моделирования позволял проводить высокоэкономичные расчеты при одновременном контроле качества сеточной сходимости.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ АЭРОФИЗИКИ СА “СОЮЗ”

Используемые в расчетах характеристики атмосферы в расчетных точках траектории СА приведены в таблице.

На рис. 2а показано распределение температуры газа при поступательных степенях свободы (далее — поступательной температуры) в окрестности СА на высоте 60.7 км, где хорошо видна общая конфигурация возмущенного поля течения в окрестности СА. У лобовой поверхности формируется высокотемпературный сжатый слой, температура в котором падает от окрестности критической линии тока к периферии лобового щита.

Линии тока показаны на рис. 2б. Асимметрия поля течения в окрестности СА, входящего в плотные слои атмосферы под углом атаки 25°, хорошо видна на рис. 2б, показывающем распределение продольной проекции скорости потока в плоскости симметрии. Критическая линия тока расположена вблизи верхней кромки аэродинамического щита.

Параметры атмосферы в расчетных точках траектории

Точка траектории	1	2	3	4
$H_{\text{СА}}$, км	80	70	60.7	45.6
p_∞ , эрг/см ³	10	52.2	200	1380
ρ_∞ , г/см ³	0.19×10^{-7}	0.83×10^{-7}	0.28×10^{-6}	0.18×10^{-5}
T_∞ , К	185	219	251	273
V_∞ , км/с	7.55	7.55	7.11	4.54

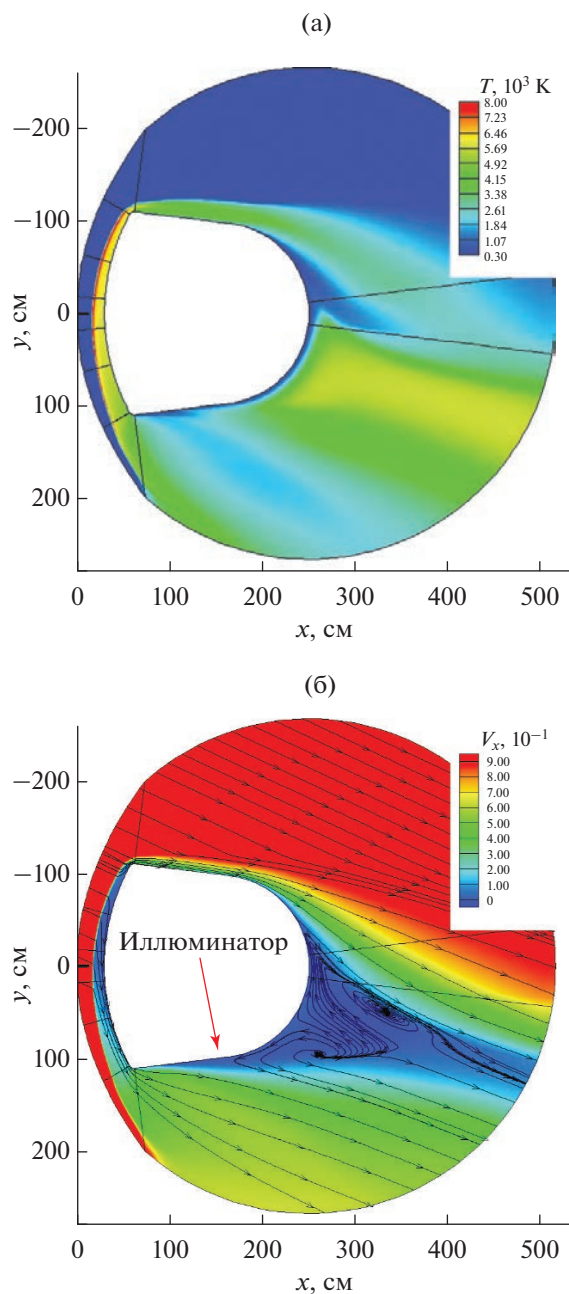


Рис. 2. Поля температуры газа при поступательных степенях свободы (а) и продольной компоненты скорости потока $V_x = u/V_\infty$ (б) в плоскости симметрии для точки траектории на высоте 60.7 км.

Отметим сложный характер течения вблизи задней поверхности СА, где наблюдается интенсивное возвратно-вихревое течение. Из рис. 2 видно, что в этой области происходит локальное увеличение температуры газа, втекающего в ближний след, а также вихревое движение у поверхности.

На рис. 3 приведен результат моделирования равновесных значений массовых долей продук-

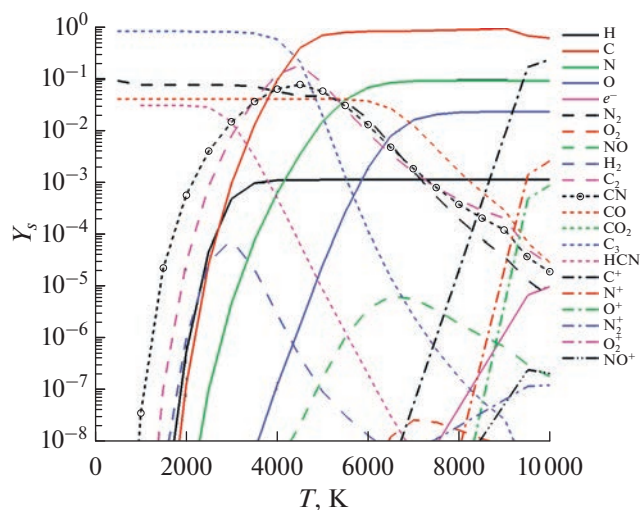


Рис. 3. Массовые доли Y_s продуктов термодеструкции теплозащитного материала у поверхности при $p = 0.1$ атм.

тов термохимического разрушения у поверхности лобового щита при заданных температуре и давлении, значения которых определялись из решения задачи о химически и физически неравновесном обтекании разрушающегося теплозащитного покрытия высокотемпературным воздухом, как это описано в предыдущем разделе. Элементный состав теплозащитного материала лобового щита был определен методом рентгеновского спектрального микроанализа. По результатам расчетов на поверхности теплозащитного материала задавались концентрации компонентов в ударном слое. Именно эти концентрации использовались в качестве граничных условий на поверхности спускаемого аппарата. Помимо концентраций компонентов рассчитывалась скорость вдува указанных компонентов с поверхности в сжатый слой. Поэтому количество продуктов разрушения тепловой защиты в сжатом слое определялось на основе уравнений многокомпонентной диффузии.

Для определения теплового баланса на поверхности материала (в конечном счете: температуры поверхности T_w и скорости вдува V_w газовых компонентов в сжатый слой) использовалось следующее условие энергетического баланса:

$$q_c + q_R = \varepsilon \sigma T_w^4 + m_w \Delta Q_{ch},$$

где q_c , q_R — плотности конвективного и интегрального радиационного тепловых потоков; ε — степень черноты поверхности (полагалась равной 0.8); σ — постоянная Стефана–Больцмана; m_w — массовая скорость линейного уноса материала тепловой защиты; ΔQ_{ch} — тепловая энергия, затрачиваемая на термическое разрушение единицы массы (полагалась равной 15 МДж/кг). Ли-

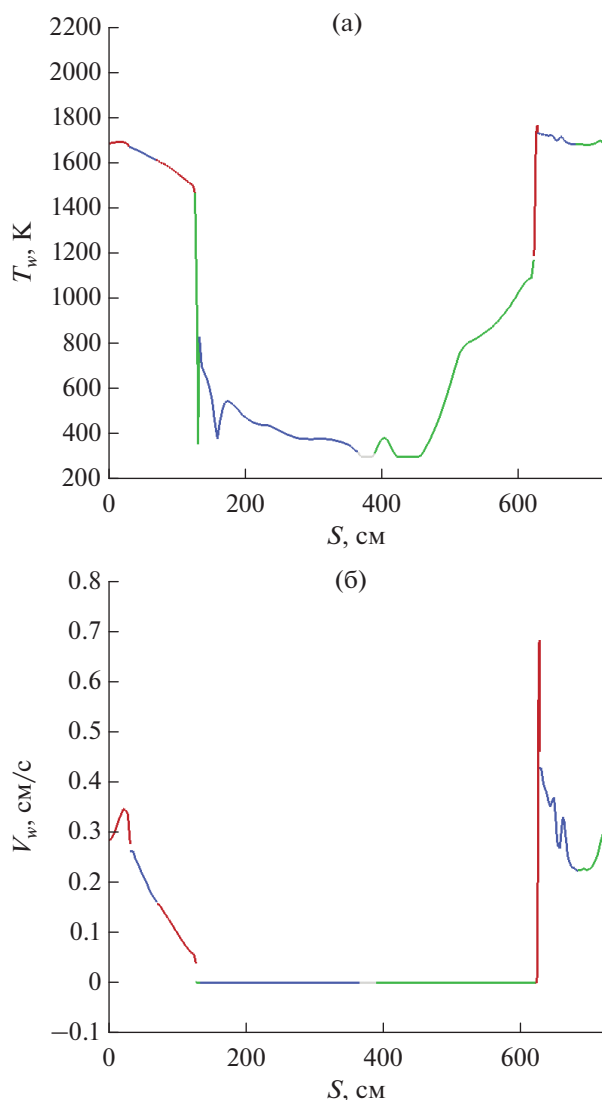


Рис. 4. Распределения температуры разрушающегося материала (а) и скорости вдува продуктов термохимического разрушения (б) в сжатый слой вдоль поверхности спускаемого аппарата для условий полета на высоте $H = 60.7$ км.

нейная скорость вдува продуктов разрушения с поверхности рассчитывалась по соотношению $V_w = m_w / \rho_w$, где плотность газовой смеси у поверхности определялась в результате решения задачи о сжатом слое. Массовый унос с поверхности теплозащитного материала (размерность — $\text{г}/(\text{см}^2 \text{с})$) оценивался по формуле $m_w = 15T_w \exp(-35000/T_w)$ [11].

Распределения вдоль поверхности спускаемого аппарата “Союз” температуры и массовой скорости вдува продуктов разрушения в траекторной точке 3 на высоте 60.7 км показаны на рис. 4. Горизонтальная координата S на графиках рисунка соответствует длине вдоль образующей контура СА “Союз”. Отсчет координаты S начинается в

центре лобового щита. Расположение расчетной системы координат показано на рис. 1.

Заметим, что скорость уноса массы теплозащитного материала на задней поверхности спускаемого аппарата (координаты S в диапазоне примерно 150–600 см) является весьма низкой и, как следствие, основная доля продуктов термохимического разрушения здесь обусловлена уносом с лобовой поверхности. Хотя нельзя исключить, что малая доля уносимого с задней поверхности материала также может сыграть значительную роль в загрязнении иллюминатора.

Как уже отмечалось, задача аэрофизики обтекания спускаемого аппарата с учетом разрушающейся тепловой защиты решалась при течении химически и физически неравновесного теплопроводного и вязкого селективно излучающего газа на основе полной системы уравнений Навье—Стокса.

На рис. 5 показаны распределения объемных долей компонентов набегающего воздуха и продуктов термодеструкции теплозащитного материала по толщине сжатого слоя для условий полета на высоте 60.7 км. Начало отсчета координат — по толщине на поверхности СА. В полученных расчетных данных отметим наибольшие концентрации. Это атомы N и O и молекулы N_2 , NO в центральной области сжатого слоя и C_3 , CO, HCN вблизи поверхности.

По мере входа в плотные слои атмосферы температура в сжатом слое снижается с ~ 10000 К на высоте 80 км до 4500 К на высоте 45 км. Высокая температура в сжатом слое приводит к протеканию большого числа химических процессов. На рис. 6 приведено осевое распределение плотно-

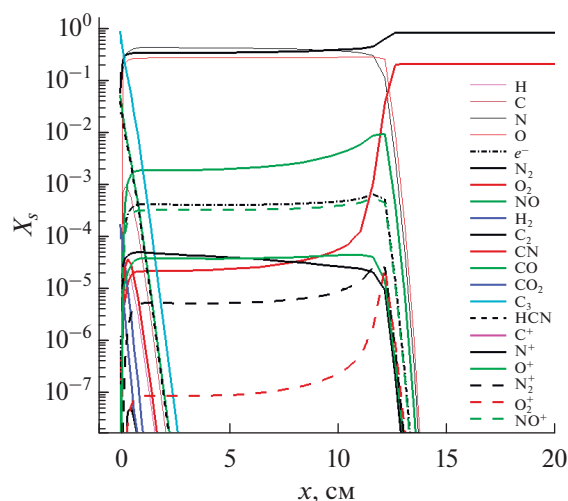


Рис. 5. Распределения объемных долей X_s компонентов набегающего воздуха и продуктов термодеструкции теплозащитного материала по толщине сжатого слоя для условий полета на высоте 60.7 км.

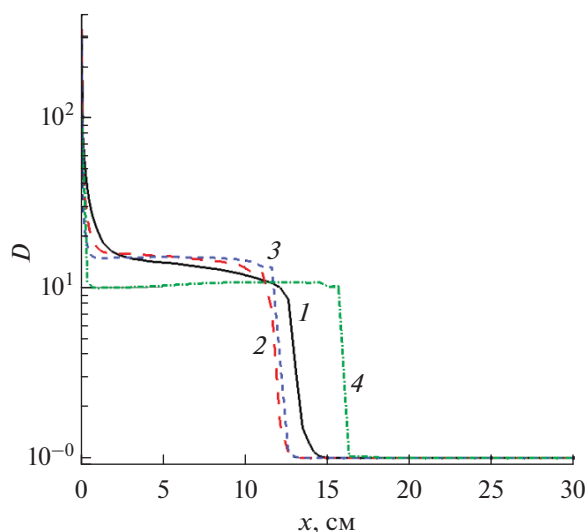


Рис. 6. Осевое распределение плотности сжатого слоя для условий полета на высотах $H = 80$ (1), 71 (2), 60 (3) и 45 км (4), где $D = \rho/\rho_\infty$.

сти сжатого слоя на различных высотах. Несмотря на значительные изменения температуры, плотность в сжатом слое меняется не столь сильно вследствие закономерного изменения скоростного напора.

На рис. 7 показано поле массовых долей одного из продуктов термохимической деструкции (молекул C_3) теплозащитного материала в плоскости симметрии $z = 0$ для условий полета на высоте 60.7 км. Расчетные оценки уноса вещества с лобового щита во время прохождения атмосферы показывают, что в плазменный слой вокруг СА может поступить 40–60 кг вещества, соотношение атомно-молекулярного компонента и «пыли» в котором неизвестно. Отметим единую закономерность — продукты термодеструкции сносятся вниз по потоку, поэтому их концентрация у наветренной стороны СА значительно меньше, чем у подветренной.

Важной особенностью аэрофизики орбитального входа СА является заметная ионизация газа в сжатом слое у лобовой поверхности, где концентрация электронов n_e в соответствии с результатами расчетов в исследуемых точках траектории составляет величину не менее $2 \times 10^{12} \text{ см}^{-3}$. Весьма высокая ионизация газа наблюдается также в следе за СА, где концентрация электронов в рассматриваемых условиях превосходит 10^{11} см^{-3} . Этого вполне достаточно для блокировки радиосигнала, что регулярно подтверждается летными данными.

Значительный интерес представляет изучение спектрального состава радиационных тепловых потоков, достигающих поверхности СА, что, с од-

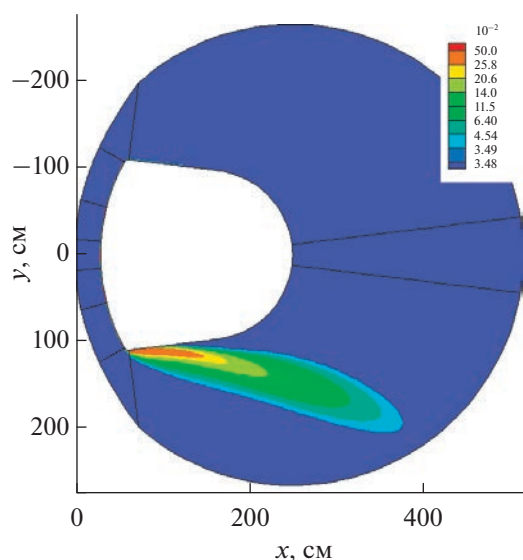


Рис. 7. Поле массовой доли молекул C_3 (продукта термохимической деструкции теплозащитного материала) в плоскости симметрии $z = 0$ для условий полета на высоте 60.7 км.

ной стороны, позволяет планировать эксперименты по изучению термохимического состояния сжатого слоя, а с другой стороны, выявить главные механизмы испускания излучения, ответственные за радиационный нагрев поверхности.

На рис. 8 приведены плотности спектральных радиационных тепловых потоков в шести точках на поверхности СА, имеющих номера 1, 5, 10, 13, 17, 22. Положение пронумерованных точек на поверхности СА показано на рис. 1. Точки 1, 5 и 10 соответствуют наветренной части поверхности СА, точки 13, 17 и 22 — подветренной стороне поверхности. Точка 17 находится вблизи иллюминатора СА.

В распределениях плотностей спектральных радиационных тепловых потоков хорошо идентифицируются электронно-колебательные и колебательные полосы двухатомных молекул в инфракрасной, видимой и ультрафиолетовой (УФ) областях спектра:

$$\begin{aligned} &N_2^+(B^2\Sigma_u^+-X^2\Sigma_g^+), \quad \Delta\omega = 7000-40\,000 \text{ см}^{-1}; \\ &O_2(B^3\Sigma_u^+-X^3\Sigma_g^-), \quad \Delta\omega = 22\,000-57\,000; \\ &N_2(C^3\Pi_u-B^3\Pi_g), \quad \Delta\omega = 10\,000-40\,000; \\ &NO(A^2\Sigma_u^+-X^2\Pi), \quad \Delta\omega = 16\,000-62\,000; \\ &NO(B^2\Pi-X^2\Pi), \quad \Delta\omega = 16\,000-60\,000; \\ &NO(C^2\Pi-X^2\Pi), \quad \Delta\omega = 20\,000-65\,000; \\ &CO(X^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+), \quad \Delta\omega = 100-8000. \end{aligned}$$

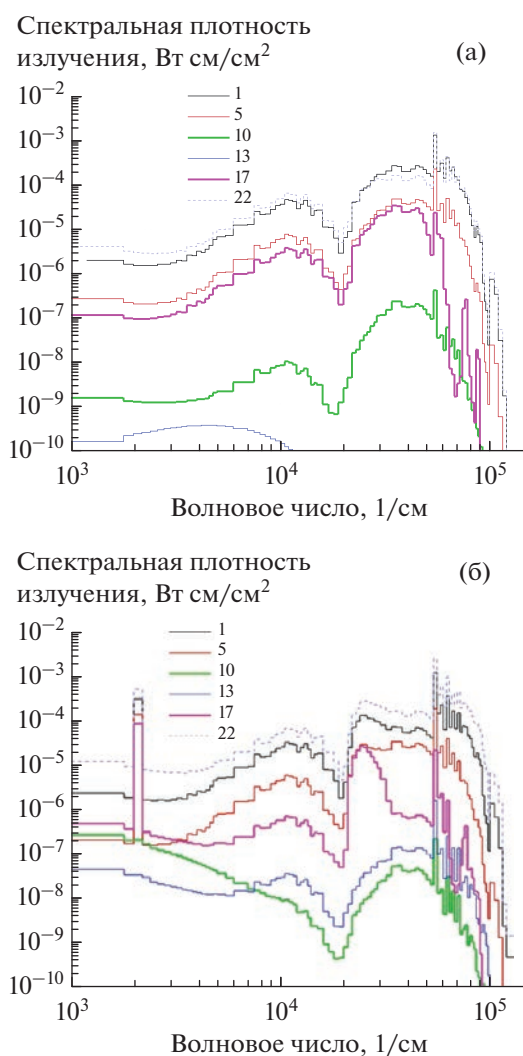


Рис. 8. Плотности спектральных радиационных потоков в шести точках на поверхности СА “Союз” в плоскости симметрии при высоте 60.7 км без учета (а) и с учетом (б) термохимического разрушения поверхности.

Спектральные характеристики представленных электронно-колебательных и колебательных полос детально исследованы в монографии [12]. Роль электронных полос в УФ-области спектра в рассматриваемых условиях высока, поскольку давление в сжатом слое весьма низкое и излучение указанных полос достигает поверхности СА, не поглощаясь сильно в низкотемпературном пограничном слое.

Сравнивая указанные распределения спектральных радиационных потоков к поверхности без учета и с учетом продуктов термохимического разрушения, отметим заметное возрастание плотностей этих потоков у контрольной точки № 17 на поверхности. Заметные изменения в картине спектральных радиационных потоков (особенно

в инфракрасной части спектра) связаны именно с наличием относительно больших концентраций молекул C_3 и CO , вклад которых хорошо виден при сравнении рис. 8а и 8б.

ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫЕ СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ ПЛАЗМЕННОГО ПОТОКА, ОКРУЖАЮЩЕГО СА

При прохождении атмосферы СА является достаточно ярким объектом, оставляющим светящийся след на высотах более 30–40 км. Когда его скорость снижается до значений менее 4 км/с, свечение заметно уменьшается и объект уже затруднительно наблюдать по его излучению. Схожие физико-химические процессы происходят и с ежегодно регистрируемыми десятками болидов, вызываемых падением достаточно крупных метеороидов и оставляющих в небе ярко светящиеся следы, возникающие в результате взаимодействия этих космических тел, двигающихся с гиперзвуковыми скоростями, с верхней атмосферой Земли [13, 14].

Электромагнитное излучение в УФ-диапазоне от возвращаемых космических аппаратов исследовалось экспериментально как с борта самого аппарата [15, 16], так и с МКС [17].

УФ-излучение ударного слоя с борта космического аппарата при скоростях входа в атмосферу Земли 3.5 и 5 км/с исследовалось в диапазоне 200–400 нм на высотах от 37 до 75 км при обтекании воздушным потоком полусферического купола радиусом 0.1 м с вмонтированными в него оптоволоконными фотометрами, быстродействующим спектрометром, а также ионизационной камерой и измерителем плотности электронов. Интенсивность излучения в измеряемом диапазоне длин волн увеличивалась примерно в 100000 раз с уменьшением высоты с 67 до 38 км. Теоретический анализ излучения для этих условий эксперимента был выполнен в работах [18–21].

Интенсивность УФ-излучения плазменного образования вблизи СА “Союз” была измерена с борта МКС радиометрической ультрафиолетовой камерой в области спектра 230–370 нм. Измерения проводились с расстояния примерно 400 км практически без поглощения атмосферы. Измеренная интегральная интенсивность УФ-излучения в указанном диапазоне длин волн составила 10^2 Вт/ср для высот движения СА в диапазоне от 100 до 30 км.

ИПМех и РКК “Энергия” предложен космический эксперимент “Плазма-СА” по исследованию излучения плазменного слоя, возникающего при прохождении атмосферы Земли СА “Союз”, через иллюминатор, находящийся в подветренной области. Иллюминатор предназначен для кон-

троля космонавтами ориентации корабля “Союз” с помощью оптической системы – визира. К моменту прохождения атмосферного участка траектории наружная часть оптического визира отстреливается и не препятствует измерению излучения плазменного слоя во время спуска.

Для регистрации излучения плазмы разработана аппаратура на основе спектрометра, регистрирующая электромагнитное излучение в диапазоне от 300 до 1060 нм с разрешением 0.7 нм. Для определения степени загрязнения иллюминатора во время спуска измеряется интенсивность излучения лазерного диода подсветки, отраженного от наружной поверхности иллюминатора. Научная аппаратура состоит из выносного блока, устанавливаемого непосредственно на визир иллюминатора (рис. 9), и основного блока, располагаемого в контейнере полезного груза в СА “Союз”.

Излучение плазмы, собранное с помощью концентратора, расположенного в выносном блоке, передается по оптическому кабелю в спектрометр, размещенный в основном блоке. Там же располагается электронная аппаратура, управляющая работой спектрометра, лазерного диода подсветки наружной поверхности иллюминатора и записью результатов измерения на носитель информации.

Для получения опосредованной информации о химическом составе плазмы, окружающей СА “Союз”, изучался состав налета, формирующегося на поверхности иллюминатора при прохождении атмосферы Земли [22]. Наблюдалось неравномерное распределение налета по поверхности, а его химический состав в основном (до 90% по массе) включал углерод, кислород и кремний. В составе исследуемых проб (12 проб с иллюминаторов четырех СА) азот и фтор присутствовали в разной степени, от малой доли до десяти массовых процентов.

Почти все исследуемые пробы содержали такие элементы, как железо и никель, в количестве не более нескольких массовых процентов. В качестве примесных элементов в образцах присутствовали натрий, магний, алюминий, хлор, калий, кальций, кобальт и другие, но в некоторых образцах содержание элементов из перечисленных доходило до 2–3 мас. %.

Особенно интересным и неожиданным представляется тот экспериментально обнаруженный факт, что в исследуемых образцах, являющихся конгломератами частиц с размерами от долей до десятков мкм, были обнаружены разнообразные по форме и размерам ограненные частицы. Рентгеноструктурный анализ выявил, что в составе исследуемых проб находятся минералы: криптогалит, нашатырь, муллит, андалузит и некоторые другие, по-видимому образовавшиеся из продуктов разрушения тепловой защиты во время прохождения атмосферы.

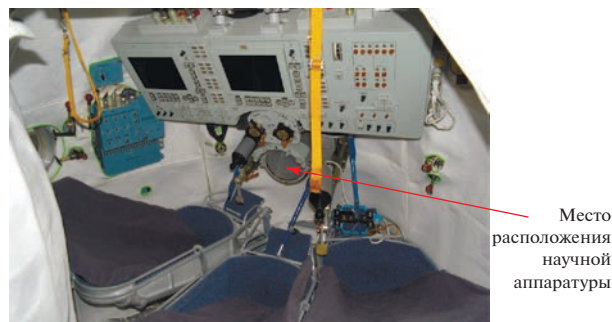


Рис. 9. Место размещения выносного блока научной аппаратуры, регистрирующей излучение плазмы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Вокруг возвращаемых космических аппаратов, равно как и крупных метеороидов, при прохождении атмосферы Земли с орбитальной или с более высокой скоростью образуется газо-плазменно-пылевой слой, химический состав которого определяется в основном продуктами термодеструкции лобовой части тела в результате взаимодействия с набегающим воздушным потоком. В спускаемом аппарате транспортного космического корабля “Союз”, возвращающего экипажи с Международной космической станции, температура на поверхности лобового щита теплозащитного покрытия аппарата достигает 2000 К, а температура в сжатом слое, по толщине составляющем 10–15 см, может достигать 8000–10000 К. В статье приведены результаты трехмерного моделирования обтекания СА “Союз” в отдельных точках траектории орбитального входа в атмосферу. Реализована расчетно-теоретическая модель, основанная на системе самосогласованных уравнений неравновесной физической и химической механики частично ионизованного многокомпонентного вязкого, теплопроводного, селективно излучающего и поглощающего газа. Кинетическая модель газофазных процессов включала 87 химических реакций для 21 химического компонента. Большинство физико-химических процессов происходит в высокотемпературном сжатом слое, участниками которых являются в первую очередь атомы и ионы азота и кислорода, возникающие при диссоциации молекул набегающего воздуха, а также продукты термохимической деструкции теплозащитного материала, в состав которого входят более десяти разнообразных химических элементов. Содержимое сжатого слоя в основном сносится вниз по потоку, что представляет особый интерес с точки зрения проведения инструментальных наблюдений за спектром излучения газо-плазменно-пылевого слоя в подветренной области СА через имеющийся в конструкции аппарата иллюминатор. Созданная для проведения такого космического эксперимента аппаратура должна позво-

лить измерять спектры излучения в диапазоне 300–1060 нм с разрешением 0.7 нм по трассе полета, параллельно исследуя динамику загрязнения иллюминатора. С целью получить опосредованную информацию о химическом составе плазмы, окружающей СА “Союз”, изучался состав налета, формирующегося на поверхности иллюминаторов вернувшихся на Землю СА.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Андреевский В.В. Динамика спуска космических аппаратов на Землю. М.: Машиностроение, 1970. 235 с.
2. Суржиков С.Т. Радиационная газовая динамика спускаемых космических аппаратов больших размеров // ТВТ. 2010. Т. 48. № 6. С. 956.
3. Суржиков С.Т. Пространственная задача аэрофизики сверхорбитального космического аппарата на больших высотах // Докл. РАН. 2018. Т. 482. № 3. С. 270.
4. Davis B.A. International Space Station Soyuz Vehicle Descent Module Evaluation of Thermal Protection System Penetration Characteristics // NASA Lyndon B. Johnson Space Center, JSC-66527. Houston, Texas, USA, 2013.
5. Muelenaere J., Lachaud J., Mansour N., Magin T. Stagnation Line Approximation for Ablation Thermochemistry // AIAA 2011-3616.
6. Madorsky S. Thermal Degradation of Organic Polymers. John Wiley & Sons, Inc. 1964.
7. Суржиков С.Т. Компьютерная аэрофизика спускаемых космических аппаратов. Двухмерные модели. М.: Физматлит, 2018. 543 с.
8. Park C., Howe J.T., Jaffe R.L., Candler G.V. Review of Chemical-kinetic Problems of Future NASA Missions. II. Mars Entries // J. Thermophys. Heat Transfer. 1994. V. 8. № 1. P. 9.
9. Овсянников В.М., Тирский Г.А. Разрушение осесимметричного тела вращения из материала сложного химического состава в потоке частично ионизованного воздуха // Изв. АН СССР. МЖГ. 1968. № 5. С. 100.
10. Суржиков С.Т. Аналитические методы построения конечно-разностных сеток для расчета аэротермодинамики спускаемых космических аппаратов // Вестн. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Машиностроение. 2004. № 2. С. 24.
11. Власов В.И., Залогин Г.Н., Ковалев Р.В., Чураков Д.А. Лучисто-конвективный теплообмен спускаемого аппарата с разрушаемой тепловой защитой // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2012. Т. 13. Вып. 2. <http://chemphys.edu.ru/issues/2012-13-2/articles/306/>
12. Суржиков С.Т. Оптические свойства газов и плазмы. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2004. 575 с.
13. Colonna G., Capitelli M., Laricchiuta A. Hypersonic Meteoroid Entry Physics // IOP Ser. Plasma Phys. Bristol, UK: IOP Publ., 2019.
14. Стулов В.П., Мирский В.Н., Вислый А.И. Аэродинамика болидов. М.: Наука; Физматлит, 1995. 240 с.
15. Erdman P.W., Zipf E.C., Espy P. et al. Measurements of Low-velocity Bow Shock Ultraviolet Radiation // J. Thermophys. Heat Transfer. 1993. V. 7. № 1. P. 37.
16. Erdman P.W., Zipf E.C., Espy P. et al. Measurements of Ultraviolet Radiation from a 5-km/s Bow Shock // J. Thermophys. Heat Transfer. 1994. V. 8. № 3. P. 441.
17. Пластинин Ю.А., Карабаджак Г.Ф., Власов В.И., Горшков А.Б., Залогин Г.Н. Измерение и анализ интенсивности УФ-излучения плазменного образования по траектории спуска с орбиты СА “Союз-ТМА” по данным наблюдений с борта МКС // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2006. Т. 4. С. 270.
18. Levin D.A., Candler G.V., Collins R.J. et al. Examination of Ultraviolet Radiation Theory for Bowshock Rocket Experiment // AIAA Paper 92-2871. 1992.
19. Gorelov V.A., Gladyshev M.K., Kireev A.Y., Yegorov I.V., Plastinin Yu.A., Karabadzha G.F. Experimental and Numerical Study of Nonequilibrium Ultraviolet NO and N₂⁺ Emission in Shock Layer // J. Thermophys. Heat Transfer. 1997. V. 12. № 1. P. 1.
20. Vlasov V.I., Gorshkov A.V., Kovalev R.V., Plastinin Yu.A. Theoretical Studies of Air Ionization and NO Vibrational Excitation in Low Density Hypersonic Flow Around Re-entry Bodies // AIAA Paper. 97-2582. 1997.
21. Plastinin Yu.A., Vlasov V.I., Gorshkov A.V., Kovalev R.V., Kuznetsova L.A. Analysis of Nonequilibrium Radiation for Low Density Hypersonic Flow at Low to Moderate Velocities // AIAA Paper. 98-2466. 1998.
22. Tugaenko V.Y., Ovchinnikov D.S., Isaenkova M.G. et al. The Chemical and Mineral Composition of Particles Precipitated from a Plasma–Dust Layer on the Port-hole of the Descend Space Vehicles During the Passage of the Earth’s Atmosphere // Geochem. Int. 2021. V. 59. № 1. P. 107.

УДК 537.525

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ СТРУКТУРЫ ЭЛЕКТРОДОВ ПРИ РАЗРЯДЕ В ЭЛЕКТРОЛИТЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

© 2023 г. Д. Л. Кирко*

Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

**E-mail: dmitri.kirko@gmail.com*

Поступила в редакцию 28.05.2022 г.

После доработки 01.07.2022 г.

Принята к публикации 13.10.2022 г.

Изучено возникновение микроструктур на поверхности вольфрамовых и титановых электродов при разряде в электролите в присутствии магнитного поля. Получены электротехнические характеристики разряда в различных режимах. Измерена температура плазмы в приэлектродной области с помощью спектральных методов. На вольфрамовых электродах происходит возникновение конических и острых образований с размерами до 10 мкм. На титановых электродах наблюдается появление микросфер и пористых поверхностей. Под воздействием магнитного поля происходят ускорение роста данных поверхностных структур и улучшение их характеристик. Обсуждается механизм роста наблюдаемых микроструктур.

DOI: 10.31857/S0040364423030146

ВВЕДЕНИЕ

При разрядах в электролитах происходит достаточно много явлений, связанных с плазмохимическими реакциями и электролизом в среде электролита, а также с процессами на поверхности электродов и материалов, погруженных в электролит. Разряд может формироваться между электродом над поверхностью электролита и электролитом, а также и между двумя электродами в среде электролита [1–5]. Токи слабых разрядов могут составлять миллиамперы, сильных разрядов — единицы ампер. При слабых токах разряд над поверхностью электролита напоминает тлеющий разряд и может иметь синий или фиолетовый цвет, для мощных разрядов цвет, как правило, зависит от свечения атомных линий элементов, входящих в состав электролита. Разряд над поверхностью электролита может иметь сложную многоканальную структуру, состоящую из токовых нитей толщиной менее десятой миллиметра [1]. Прохождение тока и электролиз раствора вызывают образование пузырьков газа на электродах, которые влияют на процессы пробоя и формирования разряда [2].

При разрядах в электролитах наблюдаются колебательные процессы в цепи разряда с частотами в широком диапазоне от 10 Гц до 100 МГц [1, 4, 6]. Для диапазона частот от 100 кГц до 100 МГц было предложено связать наблюдаемые частоты с возникновением плазменных электронно-циклотронных и ионно-циклотронных волн в среде разряда [6].

Практическое применение разрядов в электролитах связано со следующими направлениями. При использовании в качестве одного из электродов металлической детали со сложной поверхностью может наблюдаться эффект полировки поверхности материала детали при разряде в электролите с заданными параметрами [1]. Сильный ток в электролите вызывает быстрый нагрев жидкости и образование пара, что может быть использовано для формирования потока пароводяной плазмы [7]. Достаточно хорошо известны системы очистки воды, в которых используются барьерный разряд в электролите вблизи поверхности жидкости и методы с участием пузырьков [8]. В то же время разряды в электролитах могут применяться для проведения элементного анализа растворов [3], а также получения плазмохимических реакций [9]. Различные процессы между поверхностью электролита и электродом исследуются в работах [10–12]. Подробное описание вольт-амперных характеристик и процессов при разрядах в электролитах приводится в работах [4, 5, 9, 13].

При мощных разрядах с использованием инертных газов и водорода наблюдается образование нановеществ [14, 15]. Вместе с тем возникновение микроструктур на поверхности электродов регистрируется и при разрядах в электролитах [16–20]. Ввиду этого представляют интерес процессы на поверхности электродов при разряде в электролитах, приводящие к изменению свойств поверхности материала и формированию наноструктур.

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ

Для проведения экспериментов использовалась установка, изображенная на рис. 1. Электролит на основе карбоната Na_2CO_3 или гидрокарбоната натрия NaHCO_3 при концентрации $C = 0.2\text{--}0.5$ М (1 М соответствует молярному весу в граммах на 1 л воды) помещается в корпус из оргстекла объемом $150\text{--}400$ см³, применялась дистиллированная вода. Катод *1*, имеющий форму стержня с диаметром $1\text{--}3$ мм (материал: вольфрам, титан, молибден), размещался в среде электролита в керамической трубке. Рабочая часть катода составляет площадь около $0.5\text{--}1.0$ мм². Для экспериментов предпочтительным является вертикальное расположение электродов. На катоде происходит выделение молекулярного водорода, а на аноде — молекулярного кислорода. Для анода *5* применялись пластины из нержавеющей стали и молибдена, которые располагались около стенок корпуса. Для питания разряда использовался источник, работающий с частотой 50 и 100 Гц. Около боковой стенки камеры размещались сборки из постоянных магнитов *9*, которые создавали варьируемое магнитное поле в объеме электролита. Электротехнические измерения проводились с помощью шунтов, расположенных в цепи разряда. Вне камеры помещались магнитные зонды для исследования высокочастотных составляющих колебаний тока данного разряда.

Зависимости напряжения и тока разряда представляют собой последовательности импульсов с заданной частотой 100 Гц (рис. 2а). В начале каждого импульса тока наблюдаются высокочастотные колебания. Вблизи поверхности катода расположена прикатодная область *2* (рис. 1) толщиной $1\text{--}2$ мм, имеющая наибольшие излучательные характеристики [21]. Далее находится средняя плазменная область размером $1\text{--}2$ см, окруженная парогазовой оболочкой. Фотография разряда в электролите в режиме нормального горения представлена на рис. 3. Для фоторегистрации применялась камера Panasonic Lumix DMC-FZ45 (временное разрешение — 1 мс). При наличии турбулентных потоков происходит перемешивание областей, близлежащих к катоду, и форма области разряда имеет неправильную конфигурацию.

Вольт-амперная характеристика (ВАХ) разряда в электролите на основе карбоната натрия Na_2CO_3 при концентрации электролита 0.4 М для вольфрамовых электродов представлена на рис. 2б. Начальный участок характеристики описывает ток через электролит при отсутствии разряда и представляется линейной зависимостью. В верхней части данного участка на заостренной части катода наблюдается возникновение маленьких пузырьков водорода с размерами $0.1\text{--}0.5$ мм. Данные пузырьки окружают поверхность катода, по-

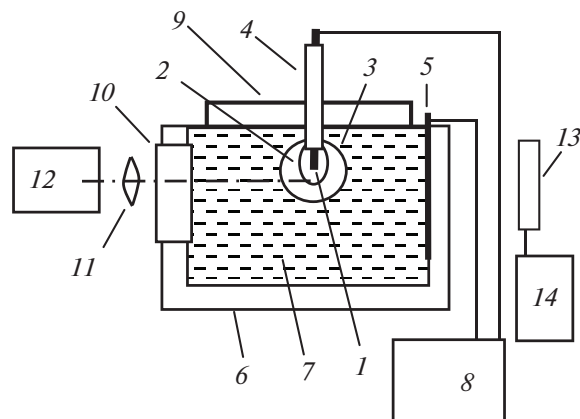


Рис. 1. Схема экспериментальной установки: *1* — катод, *2* — прикатодная область, *3* — граница разряда, *4* — керамическая трубка, *5* — анод, *6* — корпус, *7* — электролит, *8* — источник питания, *9* — постоянные магниты, *10* — окно, *11* — линза, *12* — спектрометр, *13* — магнитный зонд, *14* — анализатор спектра.

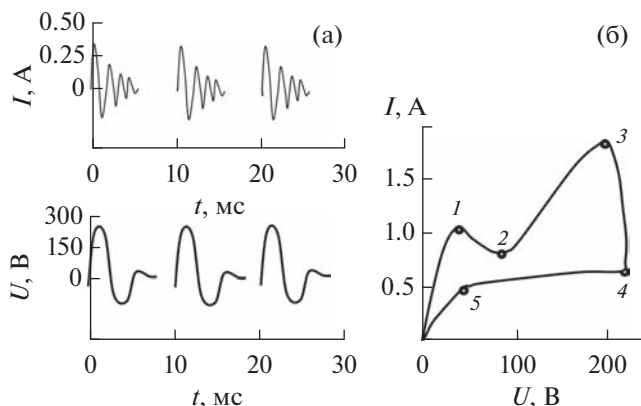


Рис. 2. Электротехнические характеристики разряда в электролите: (а) — осциллограммы тока и напряжения, (б) — вольт-амперная характеристика разряда при вольфрамовом катоде.

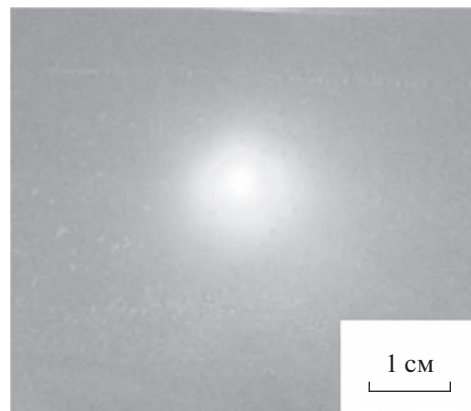


Рис. 3. Изображение разряда в электролите при нормальном горении (экспозиция 20 мс).

этому сопротивление электролита возрастает и зависимость немного искривляется. Вблизи точки 1 на заостренной части катода наблюдается искрение и в точке 1 происходит зажигание разряда при напряжении 38 ± 2 В. Наиболее вероятным представляется искровой характер пробоя разряда. С момента зажигания разряда и при дальнейшем его горении в цепи наблюдаются высокочастотные колебания [4, 6, 21]. На следующем участке характеристики ($I-2$) при увеличении напряжения происходит формирование парогазовой оболочки, окружающей катод и обладающей удельным сопротивлением, большим по сравнению с удельным сопротивлением электролита, из-за чего ток на данном участке уменьшается. При увеличении напряжения постепенно разгорается разряд и формируется его прикатодный слой [21]. На участке ($2-3$) зависимость приобретает вид, близкий к линейному. Наблюдается стабильное горение разряда. Данный участок является рабочим для проведения исследований разряда. При приближении к точке 3 увеличивается количество парогазовой смеси, окружающей катод и обладающей низкой проводимостью, поэтому работа разряда правее точки 3 становится прерывистой. При движении от точки 3 к точке 4 промежутки времени прерывания тока становятся более продолжительными, и сила тока уменьшается. В точке 4 происходит погасание разряда. Последующие участки характеристики связаны с прохождением тока через среду электролита. По мере движения тока температура электролита повышается, что приводит к изменению удельной проводимости электролита. Форма вольт-амперной характеристики напоминает петлю гистерезиса. При уменьшении концентрации вещества электролита график становится уже, площадь данной замкнутой зависимости (петли гистерезиса) уменьшается [6, 21].

С помощью электростатических зондов проводились измерения хода потенциала между катодом и анодом. Было установлено, что приблизительно около $2/3$ падения потенциала приходится на область разряда, остальная $1/3$ — на среду электролита между анодом и границей разряда. Согласно работам [6, 21, 22], наиболее вероятным представляется искровой механизм пробоя данного разряда в электролите на пузырьках водорода размерами 50–300 мкм, выделяющихся на катоде. Длительность пробоя, согласно оценкам, составляет $\Delta t = 10^{-7} - 10^{-6}$ с при характерной плотности тока в диапазоне $j = 10 - 50$ А/см².

Ранее были зарегистрированы электрические колебания в цепи разряда в широком диапазоне от 10 Гц до 100 МГц [1, 4, 6]. В области частот 150–300 кГц колебания представляют собой шумовой характер. Для возможного объяснения данных колебаний было предложено возникновение элек-

тронно-циклотронных и ионно-циклотронных волн [6, 21, 23].

Для измерений обзорного спектра в диапазоне 200–1100 нм были использованы спектрометр Ava Spec 2048 при спектральном разрешении 0.3 нм и монохроматор МУМ для временных измерений в области 200–800 нм при спектральном разрешении 0.2 нм. В качестве детектора излучения применялся ФЭУ-85 с временным разрешением 10 нс. Калибровка спектральной аппаратуры по абсолютным интенсивностям производилась с помощью лампы СИРШ8-200. Для учета коэффициента пропускания раствора электролита использовался спектрофотометр Спекорд-М40. В качестве электролита применялся карбонат натрия ($C = 0.4$). В экспериментах излучение регистрировалось из интенсивно излучающей области прикатодной плазмы вблизи острия катода приблизительно цилиндрической формы с размерами: длина — 1–1.5 мм, диаметр — 1–1.5 мм. Данная область окружена средней областью (размером 1–2 см), обладающей менее интенсивным излучением, которая являлась оптически тонкой для излучения прикатодной плазмы. Самопоглощение зарегистрированных спектральных линий отсутствовало.

Рассмотрим спектр разряда в электролите с вольфрамовым катодом для рабочего участка вольт-амперной характеристики разряда. Максимальная интенсивность наблюдается у линий атома натрия Na I 589 нм, 819 нм. В спектре также содержатся линии атомов: натрия Na I 519 нм, вольфрама W I 569 нм, кислорода O I 395.5 нм. Также регистрировались линии водорода серии Бальмера H_α 656 нм, H_β 486 нм, H_γ 434 нм, а линии данной серии, соответствующие высоковозбужденным уровням атома водорода, отсутствовали. Ранее проводилось изучение контуров данных линий, и по штарковскому уширению линий H_α и H_β определена концентрация плазмы, которая составила $n_e \sim 3 \times 10^{15}$ см⁻³ при токе разряда $I \sim 1.2$ А [21]. В экспериментах для катодов из тантала наблюдался непрерывный спектр в диапазоне 400–800 нм [20], для вольфрамовых и титановых катодов присутствие непрерывного спектра проявлялось более слабо в области 400–600 нм. Для прикатодной области реализуется высокая плотность тока, достигающая максимальных значений 100–150 А/см². Длительность импульсов тока ~ 1 мс значительно превышает время упругих столкновений электронов $\tau \sim 10^{-9}$ с. В литературе описывается реализация модели локального термодинамического равновесия для дугового разряда атмосферного давления на аргоне с добавками водорода при токе около 10 А и электронной концентрации порядка 10^{17} см⁻³ [24]. Было сделано предположение, что прикатодная область плазмы может локально термализоваться за время импульса тока. В этом случае для прикатодной обла-

сти плазмы может реализоваться модель локально-го термодинамического равновесия. Для расчета температуры методом относительных интенсивностей спектральных линий использовались три возможные отношения интенсивностей линий атома водорода H_α , H_β , H_γ . С учетом погрешностей получены близкие значения температуры. Среднее значение температуры составило $T = 2900 \pm 200$ К. Ввиду большей температуры плавления вольфрама ($T_{пл} = 3400^\circ\text{C}$) значения тока выбирались в верхней части рабочей части ВАХ вблизи величины 1.7 А.

Для разряда с титановым катодом наибольшая интенсивность присутствует у линий атома натрия Na I 589 нм, 424 нм. Менее интенсивны следующие линии: атома титана Ti I 337 нм, 323 нм, атома натрия Na I 515 нм, 819 нм, атома водорода H_α 656 нм, H_β 486 нм, H_γ 434 нм, атома кислорода O I 555 нм, 627 нм. Температура в данном случае рассчитывалась таким же методом, как и в случае вольфрамовых электродов по отношениям водородных линий H_α , H_β , H_γ . Среднее значение температуры было 2400 ± 200 К. Для титановых электродов (температура плавления $T_{пл} = 1670^\circ\text{C}$) значения тока находились в нижней части рабочей части ВАХ или около значения 1.2 А. Разряд в электролите с вольфрамовым катодом проходил при большей силе тока (превышение около 0.5 А), что, соответственно, обеспечивало больший энергетический вклад в плазму по сравнению с разрядом с титановым катодом. Поэтому для вольфрамового электрода была получена более высокая температура плазмы.

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ ЭЛЕКТРОДОВ

Ранее было обнаружено, что воздействие разряда в электролите приводит к образованию различных микроструктур на поверхности электродов [19, 20]. Было сделано предположение, что на приэлектродные процессы при разряде в электролите может влиять магнитное поле. Для проверки этого вблизи боковых стенок камеры располагались сборки из постоянных магнитов (рис. 1). Индукция магнитного поля могла варьироваться в диапазоне 100–800 Гс. Дискретность изменения магнитного поля составляла $\Delta B = 25$ Гс. Для приготовления электролитов использовалась дистиллированная вода. Влияние магнитного поля на потоки электролита изучалось в специальном сосуде из оргстекла объемом около 250 см³ в виде усеченного конуса, в который помещались электроды [21, 25]. Под сосудом располагались постоянные магниты. Проводилась регистрация с помощью кинокамеры. При разряде в объеме электролита и прохождении тока под действием магнитного поля жидкость приходила во вращательное движение против часовой стрелки со скоростью 3–6 см/с. Наблюдалось ламинарное движение потоков жид-

кости, турбулентные течения практически не возникали.

В экспериментах разряд включался в режиме нормального горения на участке 2–3 (рис. 26) в течение промежутка времени 5–20 мин. Поверхность вольфрамовых катодов исследовалась с помощью микроскопов Hitachi TM1000 и VEGA 3 SEM. Особенно тщательно изучалась область вблизи оконечности катода.

Рассмотрим взаимодействие разряда с поверхностью вольфрамового катода. После воздействия разряда поверхность содержала небольшие трещины шириной 20–30 мкм и длиной 40–50 мкм. Вблизи данных трещин располагались поверхности, содержащие “острийные” образования размером 1–10 мкм (рис. 4а). Формирование данных структур может происходить благодаря слоистому строению вольфрамовой проволоки. Также наблюдаются участки с более упорядоченными острийными структурами, похожими на тонкие нити. Элементный состав данных острийных структур показал преимущественное содержание вольфрама (до 96%) и небольшое количество натрия (до 4%), ввиду внедрения атомов натрия, содержащихся в электролите.

Также изучались выпуклые участки поверхности вольфрамовых катодов вблизи оконечности электродов. Были зарегистрированы поверхностные структуры, напоминающие “конусы” с размерами высотой 0.2–5 мкм и шириной 0.1–3 мкм (рис. 4б). Форма данных образований имеет преимущественно неправильную заостренную форму. Их расположение на поверхности хаотическое, нерегулярное. Элементный состав данных структур: вольфрам около 95% и натрия около 5%. В качестве характеристики содержания данных конусов на поверхности можно ввести величину среднего количества конусов на единице площади поверхности. В этом случае есть возможность проследить зависимость этой величины от магнитного поля.

Для титановых электродов характерно возникновение микропористых поверхностей. Наблю-

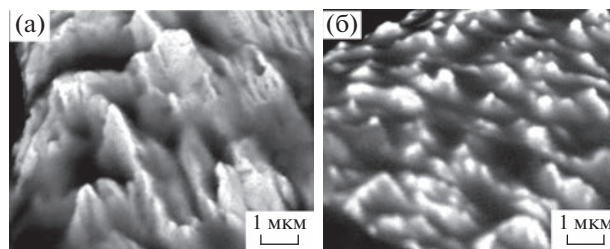


Рис. 4. Микроструктуры на поверхности катода: острийные (а) и конические (б) вольфрамовые образования.

дается хаотичное расположение пор с размерами в диапазоне 0.1–2 мкм.

В различных экспериментах с изучением электродов при разряде в электролите на поверхности вольфрамовых электродов появляются структуры, напоминающие “мох”, “лепестки”, а также поверхности сложной формы с микропорами. Рассмотрим образования, напоминающие небольшие “лепестки” длиной до 15–20 мкм и шириной 5–10 мкм. Толщина “лепестков” составляет 1–2 мкм, они достаточно плотно прилегают друг к другу. Элементный состав данных структур: вольфрам около 80%, натрий около 20%.

Другим видом структур на поверхности вольфрамовых электродов являются образования неправильной формы, содержащие маленькие поры размером 0.1–3 мкм. Элементный состав данных структур: вольфрам около 98%, натрий около 2%.

На поверхности титановых катодов наблюдается появление образований с формой, близкой к сферической, размером 0.2–60 мкм (рис. 5). В данных экспериментах вся область разряда и прилегающих слоев электролита была расположена в магнитном поле. При этом наблюдается ускорение роста сфер, первые сферы появляются в течение 5–7 мин. Возникновение данных микросфер происходит из небольших зародышей размером 0.1–0.2 мкм, расположенных на поверхности вблизи острия катода. Как правило, данные микросферы располагаются на пористой поверхности. Состав данных микросфер был определен ранее — это гидроксид титана(IV) $\text{TiO}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ [20].

У некоторых микросфер в центре может наблюдаться отверстие (рис. 5б). Данную форму можно объяснить захватом магнитного поля микросферой, в этом случае возникает торообразная поверхность, повторяющая торообразную конфигурацию магнитного поля. Это предположение может являться гипотезой для объяснения такой необычной формы.

Ввиду присутствия в прикатодной плазме электронов и протонов рассмотрим их ларморовские радиусы. Для используемого магнитного поля в диапазоне 800–100 Гс это следующие величины радиусов: для электронов 25–200 мкм, для протонов 1.1–8.6 мм. Размеры сфер на поверхности титановых катодов (рис. 5) достигают 30–40 мкм. Соответственно, ларморовские радиусы электронов при 25 мкм (магнитное поле около 800 Гс) близки к размерам данных сфер.

Представим зависимость количества конических микроструктур на поверхности вольфрама при помещении катода в магнитное поле (рис. 6). В отсутствие магнитного поля рост данных образований практически не наблюдался. С увеличением магнитного поля количество конусов на поверхности, взятой за единицу (20 мкм²), начинает расти. Дискретность значений поля $\Delta B = 25$ Гс

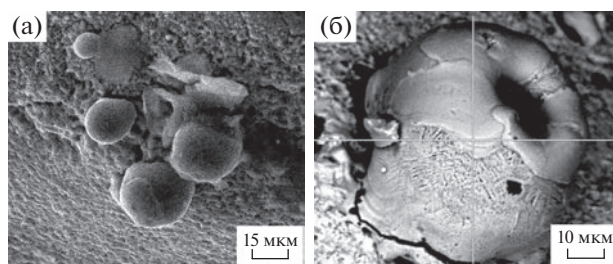


Рис. 5. Образования на поверхности титановых катодов: (а) — сферы, (б) — сфера с отверстием.

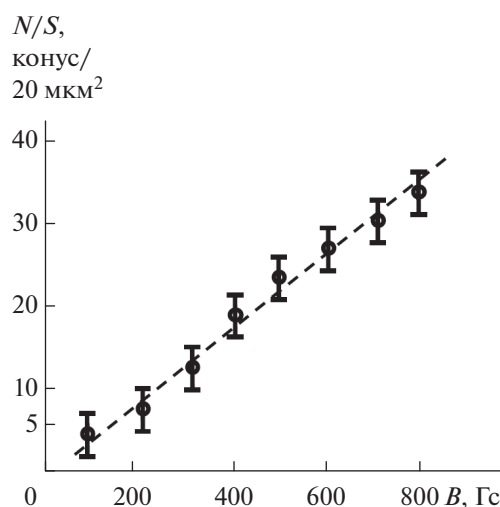


Рис. 6. Зависимость среднего количества конусов на поверхности вольфрамового катода от магнитного поля.

определяется использованием постоянных магнитов, из которых формировалась сборка, создающая поле в области разряда. Длительность горения разряда составляла около 15 мин. Осреднение проводилось по серии из 10 экспериментов. Полученная зависимость может быть аппроксимирована линейной.

В ходе экспериментов была также построена зависимость среднего количества сферических образований на поверхности титановых электродов в зависимости от магнитного поля. Время работы разряда составляло около 15 мин. Для осреднения была проведена серия из 10 экспериментов. Общей тенденцией является увеличение количества сферических образований с ростом магнитного поля.

Рассмотрим процесс возникновения на поверхности вольфрамового катода микроконусов (рис. 7) и приведем качественные оценки. Ранее было сделано предположение о возможности filamentации тока разряда вблизи поверхности катода [20]. Ввиду слоистой структуры используемого материала (вольфрамовой проволоки) поверхность катода содержит большое количество

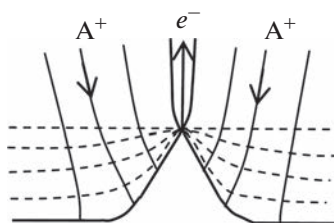


Рис. 7. Распыление поверхности вольфрама и формирование конусов.

неоднородностей. В результате ток начинает приобретать филаментную микроструктуру, состоящую из токовых нитей толщиной 0.2–1 мкм, при этом образуются микроуглубления. Можно предположить, что отдельные неоднородности поверхности становятся вершинами конусов из-за большей напряженности электрического поля. Через данные вершины будет наблюдаться эмиссионный ток электронов. Ввиду содержания натрия на поверхности электродов (до 5%) допустимо интенсивное воздействие ионов натрия на поверхность электрода вблизи данного конуса. Рассматривая данные предположения, можно также учитывать движение электронов и ионов у поверхности металла в магнитном поле по ларморовским радиусам. В магнитном поле токи могут приобретать спиральную конфигурацию. Можно предположить наличие механизма распыления поверхности по аналогии с распылением поверхностей металлов ионными пучками в вакууме [26]. В результате поверхность электрода между вершинами начинает распыляться, образуя микроконусы. В качестве величины, характеризующей распыление, приведем оценку средней скорости уменьшения вещества на единице поверхности вольфрамового электрода:

$$\frac{\Delta m}{\Delta t S} \approx 6.4 \times 10^{-5} \text{ г/см}^2\text{с}.$$

Присутствие магнитного поля, вероятно, начинает сжимать ток ионов вблизи отдельного растущего конуса и увеличивать плотность тока, следовательно, усиливать распыление вещества около конуса. Вместе с тем можно допустить влияние магнитного поля на процесс филаментации тока разряда, или явление образования токовых нитей. Если магнитное поле увеличивает среднее количество токовых нитей, то это также способствует ускорению роста микроконусов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе изучалось влияние постоянного магнитного поля на рост микроструктур на поверхности электродов при разряде в электролите. Величина магнитного поля составляла 100–800 Гс. С помощью спектральных методов определены

значения температуры плазмы вблизи поверхности исследуемых электродов. Для вольфрамовых электродов среднее значение температуры составило $2900 \pm 300 \text{ К}$, а в случае титановых электродов – $2400 \pm 300 \text{ К}$.

На поверхности вольфрамовых катодов было обнаружено возникновение конических и острых микроструктур размером до 10 мкм. Присутствие магнитного поля в проводимых экспериментах ускорило рост данных структур, увеличивало их среднее количество и повышало вероятность их образования. Полученные количественные зависимости показывают увеличение числа микроконусов и острых микроструктур при усилении магнитного поля.

Происходило стимулирование роста различных поверхностных структур, которых не было в отсутствие магнитного поля. Наблюдалось возникновение структур типа “моха” длиной до 20 мкм и образований неправильной формы с микропористой поверхностью на вольфрамовых катодах. При появлении микросфер на поверхности титановых катодов воздействие магнитного поля приводило к образованию торообразных форм. Наблюдаемый процесс образования микроконусов на поверхности вольфрама, по-видимому, связан с филаментацией тока разряда, которая проявляется в волокнистой структуре разряда, состоящей из микронных нитей. Образование данных поверхностных структур предполагает проведение дальнейших подробных исследований.

Автор выражает признательность коллективу кафедры Физика плазмы НИЯУ МИФИ за помощь в проведении экспериментов по тематике данной работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гайсин Ал.Ф., Насибуллин Р.Т. Об особенности электрического разряда между электролитическим катодом и металлическим анодом // Физика плазмы. 2011. Т. 37. № 10. С. 959.
2. Bruggeman P., Leys C. Non-thermal Plasmas in and in Contact with Liquids // J. Phys. D: Appl. Phys. 2009. V. 42. P. 053001.
3. Mezei P., Cserfalvi T. Electrolyte Cathode Atmospheric Glow Discharges for Direct Solution Analysis // Appl. Spectrosc. Rev. 2007. V. 42. P. 573.
4. Канарев Ф.М. Низкоамперный электролиз воды. Краснодар: Изд-во Краснодарск. ун-та, 2010. 81 с.
5. Гайсин Ф.М., Сон Э.Е. Возникновение и развитие объемного разряда между твердыми и жидкими электродами // Химия плазмы. 1990. Вып. 16. С. 120.
6. Кирко Д.Л., Савелов А.С., Визгалов И.В. Колебательные процессы в плазме разряда в электролите // Изв. вузов. Физика. 2012. Т. 55. № 11. С. 3.
7. Tazmeev G.Kh., Tazmeev Kh.K., Tazmeeva R.N., Talipova I.P., Tazmeev B.Kh. Gas Discharge with a Liquid Electrolyte Cathode in Creating a Flow of Stream Water Plasma // Int. Res. J. 2021. V. 1. P. 25.

8. Смирнов Б.М., Бабаева Н.Ю., Найдис Г.В., Панов В.А., Сон Э.Е., Терешонок Д.В. Пузырьковый метод очистки воды // ТВТ. 2019. Т. 57. № 2. С. 286.
9. Словецкий Д.И., Терентьев С.Д., Плеханов В.Г. Механизм плазменно-электролитного нагрева металлов // ТВТ. 1986. Т. 24. № 2. С. 353.
10. Pongrac B., Machala Z. Electrospraying of Water with Streamer Corona Discharge // IEEE Trans. Plasma Sci. 2011. V. 39. № 11. P. 2664.
11. Gaisin A.I., Son E.E., Kashapov N.F. Discharge between the Jet and Dropping Liquid Cathode and Metal Anode // J. Phys.: Conf. Ser. 2017. V. 927. P. 012018.
12. Гайсин Аз.Ф., Садриев Р.Ш., Багаутдинова Л.Н., Насыбуллин Р.Т., Гайсин Ф.М., Мастюков Ш.Ч. Электрические разряды малой мощности с металлическими, диэлектрическими и электролитическими электродами при низких частотах и атмосферном давлении // ТВТ. 2020. Т. 58. № 6. С. 860.
13. Лукомский Ю.Я., Гамбург Ю.Д. Физико-химические основы электрохимии. Долгопрудный.: Интеллект, 2013. 448 с.
14. Крауз В.И., Химченко Л.Н., Мялтон В.В., Виноградов В.П., Виноградова Ю.В., Гуреев В.М., Койдан В.С., Смирнов В.П., Фортков В.Е. Формирование наноструктур в разряде типа плазменный фокус // Физика плазмы. 2013. Т. 39. № 4. С. 326.
15. Сивков А.А., Герасимов Д.Ю., Никитин Д.С. Прямой динамический синтез нанодисперсных фаз оксидов титана при распылении электроразрядной плазмы титана в воздушную атмосферу // Письма в ЖТФ. 2016. Т. 42. Вып. 23. С. 21.
16. Nomine A.V., Gries Th., Noel C., Nomine A., Milichko V., Belmonte T. Synthesis of Nanomaterials by Electrode Erosion Using Discharges in Liquids // J. Appl. Phys. 2021. V. 120. P. 151101.
17. Glad X., Gorry J., Cha M.S., Hamdan A. Synthesis of Core-shell Copper-graphite Submicronic Particles and Carbon Nano-onions by Spark Discharges in Liquid Hydrocarbons // Sci. Rep. 2021. V. 11. Article number 7516. 11 p.
18. Kashapov R.N., Kashapov L.N., Kashapov N.F. Research of Plasma-electrolyte Discharge in the Processes of Obtaining Metallic Powders // J. Phys.: Conf. Ser. 2017. V. 927. P. 012086(6).
19. Kirko D.L., Sayjolv A.S. Investigation of Plasma Properties of Discharge in Electrolyte Surface Layer // J. Phys.: Conf. Ser. 2017. V. 941. P. 012018.
20. Кирко Д.Л. Исследование приэлектродной плазмы и поверхности электродов при разряде в электролите // Физика плазмы. 2020. Т. 46. № 6. С. 496.
21. Кирко Д.Л. Колебательные процессы в плазме разряда в электролите в магнитном поле // ЖТФ. 2015. Т. 85. Вып. 4. С. 28.
22. Коробейников С.М., Мелехов А.В., Бесов А.С. Зажигание разряда с помощью пузырьков // ТВТ. 2002. Т. 40. № 5. С. 706.
23. Кролл Н., Трайвелтис А. Основы физики плазмы. М.: Мир, 1975. 525 с.
24. Хаддлстоун Р., Леонард С. Диагностика плазмы. М.: Мир, 1967. 515 с.
25. Кирко Д.Л., Савелов А.С., Егоров И.Д. Свойства разряда в электролите во внешнем магнитном поле // Матер. XI Междун. науч. конф. "Волновая электрогидродинамика проводящей жидкости". Ярославль: ЯрГУ, 2015. С. 82.
26. Behrisch R., Eckstein W. Sputtering by Particle Bombardment. Experiments and Computer Calculations from Threshold to MeV Energies. Berlin, Heidelberg: Springer, 2007. 526 p.

УДК 544.452, 53.097

ВЛИЯНИЕ МОМЕНТА ИНИЦИАЦИИ ВЫСОКОЧАСТОТНОГО КОРОННОГО РАЗРЯДА НА РАЗВИТИЕ ГОРЕНИЯ В ГИБРИДНОМ КОМПРЕССИОННОМ ДВИГАТЕЛЕ

© 2023 г. Е. А. Филимонова*, А. С. Добровольская

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*E-mail: helpfil@mail.ru

Поступила в редакцию 23.05.2022 г.

После доработки 04.07.2022 г.

Принята к публикации 13.10.2022 г.

В работе приведены зависимости момента воспламенения активированной разрядом зоны и момента возникновения самовоспламенения топливной смеси в области перед фронтом волны горения от двух параметров: угла поворота коленвала, при котором инициировался разряд, и удельного энерговклада в стримерный канал. Показано, что для более точного определения оптимальных пределов воспламенения активированной зоны и возникновения самовоспламенения необходимо учитывать изменение давления в цилиндре за счет движения поршня. При моделировании принималось во внимание неоднородное образование химически активных частиц, связанное со стримерным, многоимпульсным характером разряда.

DOI: 10.31857/S0040364423030080

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время создаются гибридные двигатели внутреннего сгорания, в которых в стабильных условиях воспламенение наступает от сжатия, а в нестабильных условиях инициатором горения является не обычный искровой разряд малой мощности [1–3], а например, импульсный коронный разряд мегагерцовой частоты [4–8], создающий неравновесную плазму. Такие разряды обеспечивают стабильные условия для работы компрессионного двигателя, работающего на обедненных смесях или при низких температурах топливно-воздушной смеси во входном тракте. Также такого типа разряды рассматриваются как альтернатива свече зажигания в двигателе внутреннего сгорания (ДВС) с искровым зажиганием. Стабильные условия работы предполагают, что в каждом рабочем цикле будет происходить воспламенение, и происходит оно примерно при одних и тех же углах поворота коленвала за верхней мертвой точкой (ВМТ). Это важно с точки зрения вырабатываемой мощности. Обычная свеча зажигания неэффективна для воспламенения бедных смесей, так как рассчитана на поджиг стехиометрических смесей.

При использовании углеводородных топлив за такое явление, как стук в двигателе, ответственна низкотемпературная стадия горения (холодные и голубые пламена), так как локальное увеличение температуры за счет частичного выделения химической энтальпии (нагрев) в некоторой зоне может привести к неконтролируемому воспламенению не во всем объеме цилиндра, а лишь в его ча-

сти. Это вызовет скачки давления за счет прохождения волн сжатия и разряжения. Численное исследование механизма возникновения интенсивных волн давления при спонтанном самовоспламенении горячих точек перед фронтом пламени [9] или при сжатии фронтом пламени несгоревшего газа [10] представлено в этих работах в зависимости от свойства смеси проявлять в большей или меньшей степени при окислении отрицательный температурный коэффициент (ОТК) — немонотонное изменение скорости окисления с ростом температуры. Показано, что наличие ОТК влияет на время возникновения, место возникновения и амплитуду колебаний давления, которые могут перевести дефлаграционное горение в детонационное. Однако и в водородно-воздушных смесях возможны резкие скачки давления и возникновение волн самовоспламенения [11] в зависимости от температуры смеси перед фронтом. Другой механизм возникновения интенсивных процессов в камере сгорания ДВС с водородно-воздушной смесью, связанный с термоакустической неустойчивостью на фронте волны горения, предложен в [12].

Моделирование физико-химических процессов в камере сгорания гибридного двигателя представляет собой сложную задачу. Помимо обычных процессов горения необходимо моделировать воздействие разряда на топливно-воздушную смесь. В работе [13] была продемонстрирована возможность управления воспламенением с помощью импульсного коронного разряда мегагерцовой частоты.

ты путем воздействия на низкотемпературную стадию горения в компрессионном двигателе с гомогенной смесью. Численное моделирование в [13] было проведено в нульмерном приближении, где разряд являлся внешним источником дополнительного нагрева обработанной разрядом небольшой массы газа, в которой нарабатывались химически активные частицы. Эта масса газа инжектировалась в цилиндр двигателя через специальный порт в течение короткого времени при определенном угле поворота коленвала.

Для решения задачи о воспламенении и формировании волны горения в 1D- или 2D-приближении необходимо выработать подходы к созданию активированной разрядом области. Разряд имеет филаментированную структуру, т.е. только часть области заполняется каналами-филаментами. Эта область благодаря наличию в ней химически активных частиц, созданных в результате диссоциации молекул кислорода и топлива электронным ударом, и дополнительного нагрева этой области, инициирует горение в камере сгорания двигателя. Для определения нагрева и состава активированной разрядом области был предложен метод, который учитывает многоимпульсный и многоканальный режим работы разряда [14].

Совместное газодинамическое моделирование воздействия импульсного разряда и более медленного развития горения требует большого времени счета из-за разницы характерных времен. По этой причине авторами был разработан подход, позволяющий сначала найти состав и нагрев активированной области в результате действия высокочастотного коронного разряда для разных значений удельных энерговкладов в стример, и затем эти данные использовать в качестве начальных условий в газодинамическом расчете горения в компрессионном двигателе [14]. Роль волн давления в нагреве области перед фронтом в компрессионном двигателе с гомогенной смесью, с инициацией неравновесным разрядом, исследована в работе [15]. Эти волны дают незначительный вклад в нагрев газа перед фронтом волны горения.

В данной работе представлены результаты численного параметрического исследования развития горения в гибридном компрессионном двигателе с гомогенной смесью (или HCCI-двигатель — Homogenous Charge Compression Ignition Engine) после обработки части смеси разрядом. В качестве варьируемых параметров выбраны некоторые характеристики разряда.

Целью работы являются определение зависимости времени воспламенения активированной зоны и самовоспламенения смеси в области перед фронтом пламени от удельного энерговклада в стримерный канал для разных моментов инициации разряда, который определялся углом поворота коленвала, и нахождение оптимального диапазона управляющих параметров.

ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ

В данной работе приведены результаты моделирования распространения волны горения, которая формируется вследствие воздействия филаментированным импульсно-периодическим наносекундным разрядом на смесь, которая без разряда в результате сжатия в двигателе с гомогенной смесью не воспламеняется [14]. Разряд типа высокочастотной короны [4] в течение короткого времени активировал небольшую область смеси на оси цилиндра при определенном угле поворота коленвала на стадии сжатия. Моделирование проведено для бедной пропано-воздушной смеси $N_2 : O_2 : C_3H_8 = 0.7671 : 0.2043 : 0.0286$ (коэффициент избытка топлива $\phi = 0.7$). В качестве объекта исследования был выбран компрессионный двигатель объемом 2.37 л, скорость вращения коленвала — 1500 об/мин, степень сжатия — 15, другие параметры и режим работы указаны в [13]. Были выбраны четыре момента инициации разряда относительно ВМТ (360° поворота коленвала (ПК)), которые отмечены на рис. 1 и в таблице.

Основные положения и уравнения модели распространения волны горения даны в работах [14, 16]. Процесс горения (формирование и распространение волны горения с или без возникновения самовоспламенения в области перед фронтом волны горения) моделируется с помощью уравнений Навье—Стокса [17] в одномерной осесимметричной постановке. В эти уравнения введены специальные члены, которые имитировали сжатие вдоль оси цилиндра, что являлось особенностью данного моделирования. Обычно в одномерной постановке расчеты проводятся при постоянном объеме, поэтому изменение давления за счет сжатия не учитывается. Волна горения распространялась вдоль радиуса цилиндра $R = 5$ см. Система включала уравнения, отражающие законы сохранения массы, импульса и полной энергии для всей газовой смеси со специальными источниками

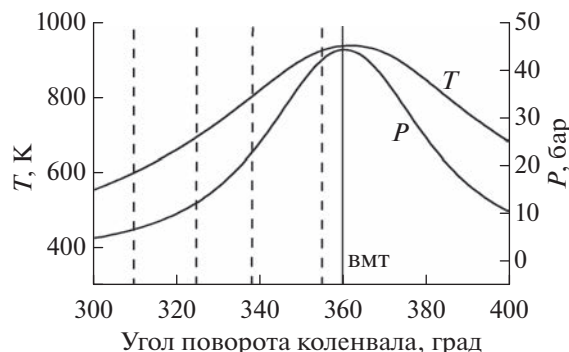


Рис. 1. Зависимости температуры и давления от угла поворота коленвала в случае отсутствия воспламенения смеси в результате сжатия без инициации разрядом; штриховыми линиями отмечены углы для четырех режимов, при которых инициировался разряд.

Условия инициации разряда

α_{dis} , град ПК	310	325	338	355
T_0 , К	600	700	801	925
P_0 , бар	6.8	12.4	22.6	42.2
T_{st} , К	769	867	959	1092
$[\text{O}]_{\text{st}}$	4.48×10^{-3}	4.38×10^{-3}	4.20×10^{-3}	4.54×10^{-3}
T_{aver} , К	658	760	869	972
$[\text{O}]_{\text{aver}}$	1.15×10^{-5}	3.05×10^{-7}	4.87×10^{-8}	1.2×10^{-7}
$[\text{C}_3\text{H}_7\text{OON}]_{\text{aver}}$	1.65×10^{-4}	2.07×10^{-4}	7.02×10^{-5}	1.03×10^{-7}
$[\text{H}_2\text{O}_2]_{\text{aver}}$	1.30×10^{-5}	1.91×10^{-5}	5.74×10^{-5}	5.08×10^{-4}
$[\text{CO}]_{\text{aver}}$	4.43×10^{-5}	6.48×10^{-5}	8.17×10^{-5}	1.38×10^{-4}
$[\text{CH}_2\text{O}]_{\text{aver}}$	8.89×10^{-5}	1.87×10^{-4}	3.42×10^{-4}	6.20×10^{-4}

Примечание. T_0 , P_0 – температура и давление для угла инициации разряда; температура T_{st} и мольная доля атомов О $[\text{O}]_{\text{st}}$ в стримере; осредненные по активированной разрядом зоне значения температуры T_{aver} и мольных долей компонентов; $Q_d = 0.047\text{--}0.051$ эВ/молекула, $\delta = 0.24$, $R_{\text{az}} = 0.75$ см.

ми в правой части уравнений, учитывающими изменение давления за счет сжатия. Давление в цилиндре являлось функцией объема $V(t)$. Точная функция $V(t)$ взята из расчетов рабочего цикла компрессионного двигателя [13]. Также учитывалось изменение массы каждого компонента за счет диффузии и химических превращений. Кинетическая схема для пропано-воздушной смеси опубликована в работе [18]. Она содержит 710 элементарных реакций между 103 компонентами и описывает окисление и горение для следующих видов топлива: CH_4 , C_2H_4 , C_2H_2 , C_2H_6 , C_3H_8 , CH_3CHO . Для этих углеводородов было проведено тестирование кинетической модели на соответствие экспериментальным результатам по времени задержки воспламенения, ламинарной скорости волны горения и концентрации некоторых конечных (например, NO) и промежуточных продуктов окисления (CO, H_2). Результаты тестирования можно найти в работах [13, 14, 16, 18, 19].

Для описания разрядной зоны была создана модель, которая подробно описана в [14, 16]. Разряд занимает цилиндрическую область объемом V_{az} на оси симметрии. В ней начальные концентрации компонентов и температура отличаются от значений в не активированной разрядом области. Для описания этой области вводятся следующие параметры: радиус активированной разрядом зоны R_{az} ; доля объема δ , занятая стримерами после обработки в течение $t_d = 555$ мкс (5° ПК); удельный энерговклад в стример за время обработки Q_d ; Q_{az} – удельный энерговклад в объем V_{az} . Эти параметры связаны законом сохранения энергии: $E_{\text{tot}} = Q_d V_{\text{st}} = Q_{\text{az}} V_{\text{az}}$, где E_{tot} – полная энергия, введенная за время действия разряда; V_{st} – объем, занятый стримерами; $\delta = V_{\text{st}}/V_{\text{az}}$. Общее количество импульсов в течение времени t_d при частоте повторения импульсов 5 МГц составляет $N_p = 2750$.

В каждом импульсе создается несколько стримерных каналов с удельным энерговкладом Q_d^0 . В модели радиус активированной зоны обратно пропорционален корню из доли объема, занятой стримерами. В цилиндрической активированной разрядом зоне стримеры распространяются от оси к периферии, вблизи оси область почти полностью занята перекрывающимися стримерами, а на периферии у границы активированной зоны они расходятся. Чем больше радиус активированной зоны, тем дальше каналы отстоят друг от друга и величина δ будет меньше.

Рассматриваются два варианта изменения параметров: первый вариант – изменение E_{tot} при фиксированных значениях R_{az} и δ (поскольку эти величины связаны друг с другом), однако Q_d в стримерный канал – также переменный параметр; второй вариант – изменение R_{az} и δ при фиксированных E_{tot} и Q_d . Принцип описания активированной зоны аналогичен тому, что был использован в задачах по удалению токсичных примесей с помощью наносекундного импульсного разряда [20, 21].

Эффективность наработки (G -факторы) химически активных частиц, образующихся при распространении одиночного стримера, на 100 эВ вложенной энергии, концентрации этих частиц и величина Q_d^0 находились из расчета динамики распространения положительного стримера с использованием двумерной осесимметричной модели [14, 22]. Оценки показывают, чтобы достичь энергии Q_d , необходимой для воспламенения, нужно пропустить несколько стримеров n_{st} (число стримеров) через один и тот же канал, тогда $Q_d = n_{\text{st}} Q_d^0$. На стадии распространения стримера бралась упрощенная кинетическая схема для пропано-воздушной смеси, описывающая образова-

ние первичных активных частиц электронным ударом (О, Н, C_3H_7). В расчете концентрации первичных активных частиц и нагрев газа в стримерном канале находились с учетом изменения состава и температуры смеси от импульса к импульсу [14, 16]. В каждом импульсе учитывалось увеличение концентрации атомов О и Н, радикалов C_3H_7 и температуры газа из-за разрядного воздействия. Мольная доля атомов кислорода $[O]_{st}$, как основного радикала для инициации воспламенения, и температура в стримерном канале T_{st} после обработки смеси представлены в таблице для $\delta = 0.24$, $R_{az} = 0.75$ см и $\alpha_{dis} = 325^\circ$ ПК. Для $\delta = 0.55$, $R_{az} = 0.55$ см, $\alpha_{dis} = 325^\circ$ и 355° ПК значения $[O]_{st}$ даны в работах [14, 16]. За время обработки разрядом активированной области в каждом стримерном канале происходили реакции, которые приводили к наработке долгоживущих пероксидов, в том числе пропилгидропероксида C_3H_7OOH . Состав и температура в активированной зоне осреднялись с учетом доли объема δ , занятой стримерными каналами, в которых температура и концентрации отличались от значений в зоне, свободной от стримеров. Средняя температура T_{aver} в активированной зоне после перемешивания была оценена по закону сохранения энтальпии. В качестве примера в таблице приведены значения T_{aver} (значительно меньше, чем нужно для воспламенения), а также средние значения мольных долей атомов О и некоторых промежуточных долгоживущих компонентов. Эти компоненты участвуют в реакциях с выделением тепла и наработке радикалов для инициации и продолжения горения. Компоненты C_3H_7OOH и CH_3OOH являются основными на низкотемпературной стадии выделения тепла, или стадии холодного пламени; H_2O_2 — на стадии выделения тепла при промежуточных температурах, или на стадии голубого пламени; CO — на стадии высокотемпературного выделения тепла, или на стадии горячего пламени [13, 14, 16]. Видно, что средняя концентрация $[O]_{aver}$ уменьшилась на порядки по сравнению с $[O]_{st}$, однако значительно увеличилась концентрация промежуточных компонентов. Основные реакции на каждой стадии с указанными выше компонентами представлены в [14, 16].

Полученные состав и температура в активированной зоне были начальными условиями для моделирования распространения волны горения вдоль радиуса цилиндра. Время окончания действия разряда соответствовало началу отсчета времени задержки воспламенения и формирования волны горения. Расчеты проводились при варьировании удельного энерговклада в стримерный канал Q_d , доли объема активированной зоны, обработанной разрядом, δ , с соответствующим радиусом R_{az} и момента инициации разряда α_{dis} . Время расчета варьировалось от двух суток до семи дней

на персональном компьютере и зависело от угла инициации разряда (для меньших углов время больше), на 1 мс физического времени приходилось от 6 до 15 ч вычислительного времени в зависимости от температуры газа. Анализ полученных результатов был проведен с точки зрения влияния перечисленных параметров на время задержки воспламенения и режим распространения волны горения. Обсуждаются причины развития сильных осцилляций давления, которые могут быть опасны для двигателя и приводят к нежелательному аудишуму, и также условия резкого роста давления, которое сопровождается значительным тепловыделением и формированием волн самовоспламенения.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Воспламенение активированной разрядом зоны.

На рис. 1 приведена зависимость температуры и давления от угла поворота коленвала в процессе движения поршня без инициации разрядом: температура в ВМТ — 940 К, давление — 44 бара. Видно, что только от сжатия смесь не воспламеняется. При инициации разрядом смесь сначала воспламеняется в активированной зоне, возникает волна горения, которая, распространяясь, поджигает газ перед фронтом.

На рис. 2 для $Q_d = 0.025$ эВ/молекула показана зависимость температуры и давления от времени в активированной разрядом зоне ($r = 0-0.75$ см) и в точках $r = 3.5$ и 4.5 см вдоль радиуса. Резкий рост осцилляций соответствует самовоспламенению оставшегося газа перед фронтом волны горения. Как видно на рис. 2, воспламенение в точках $r = 3.5$ и 4.5 см происходит одновременно в момент времени $t = 4.12$ мс, а активированная разрядом область между $r = 0$ и 0.75 см воспламеняется в момент $t = 3.38$ мс. Момент самовоспламенения соответствует резкому росту амплитуды осцилляций как температуры, так и давления. Однако амплитуда осцилляций давления в активированной зоне (на оси цилиндра) заметно больше, в отличие от осцилляций давления вблизи стенки или на некотором расстоянии от нее.

Полная энергия, вложенная в активированную зону, зависит не только от энерговклада в стример, но и от структуры разрядной зоны, т.е. от доли объема δ активированной зоны радиуса R_{az} , обработанной разрядом. На рис. 3 для фиксированного энерговклада $Q_d = 0.05$ эВ/молекула и $\alpha_{dis} = 325^\circ$ ПК представлена зависимость момента воспламенения от структурных характеристик δ и R_{az} .

На рис. 3 видно, что чем больше величина δ и меньше R_{az} , тем быстрее воспламеняется смесь. Однако чем раньше воспламеняется активированная зона, тем раньше происходит самовоспламенение, тем больше амплитуда осцилляций, а значит, и аудишум. Это видно для случая $\delta = 0.832$, $R_{az} = 0.4$ см, т.е. чем меньше область и больше заполняемость стримерными каналами, тем боль-

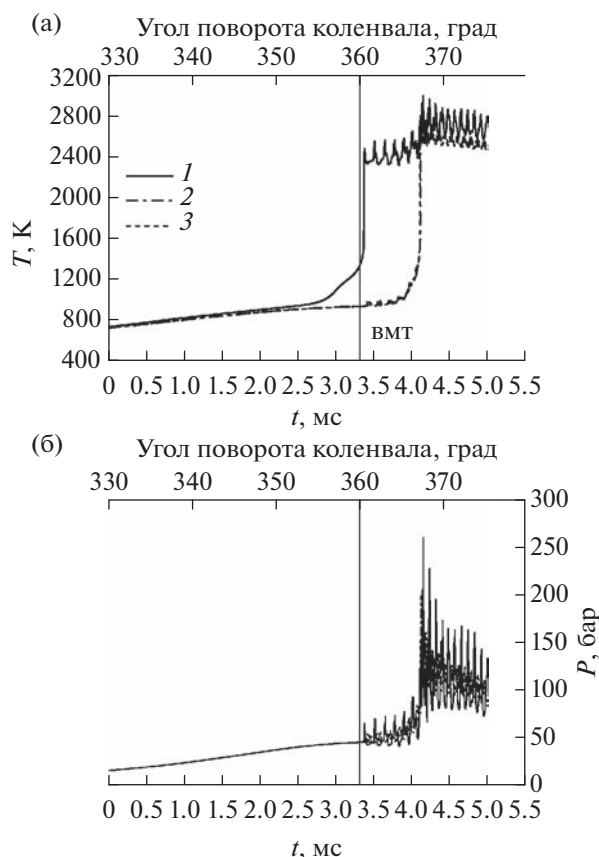


Рис. 2. Зависимости температуры (а) и давления (б) от времени и угла поворота коленвала в разных точках вдоль радиуса цилиндра (0.75 см – активированная зона), $\alpha_{\text{dis}} = 325^\circ$ ПК, $\delta = 0.24$, $R_{\text{az}} = 0.75$ см, $Q_d = 0.025$ эВ/молекула: 1 – $r = 0.75$ см, 2 – 3.5, 3 – 4.5.

ше амплитуда осцилляций давления, до 650 бар. Тогда как для случая $\delta = 0.133$, $R_{\text{az}} = 1$ см амплитуда колебаний в два раза меньше. По скорости распространения волн давления, радиусу цилиндра и положению фронта волны горения были сделаны оценки частоты колебаний, которые дают величину ~ 10 кГц, что является характерной величиной резонансной частоты для реального двигателя [23]. Большие колебания давления по объему приводят к горению со стуком, так как вызывают локальный рост давления в несгоревшем газе, подъем температуры и самовоспламенение, что дает еще больший локальный рост давления. Сильный аудишум при работе двигателя следует избегать. Поэтому либо энерговыход должен быть меньше, либо активированная область должна иметь больший радиус и меньшую долю объема, занятую стримерами.

Если сравнить температуру в активированной зоне на оси цилиндра для разных энерговыходов в стримерный канал: $Q_d = 0.025$ эВ/молекула (рис. 2а) и $Q_d = 0.05$ эВ/молекула (рис. 3), но при одинаковых значениях $\delta = 0.24$ и $R_{\text{az}} = 0.75$ см, то видно, что чем больше энерговыход, тем раньше происходит воспламенение (в данном случае разница

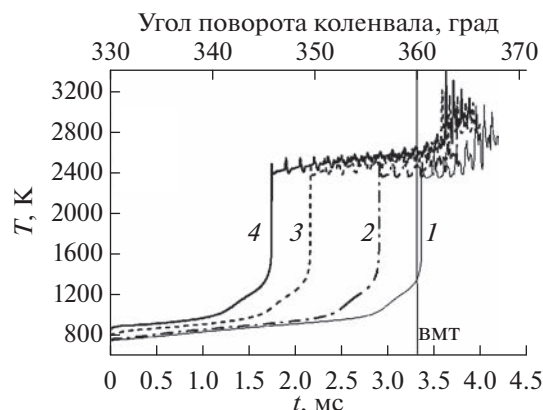


Рис. 3. Зависимости температуры от времени и угла поворота коленвала для разных значений доли объема δ и радиуса активированной зоны R_{az} внутри активированной области, $\alpha_{\text{dis}} = 325^\circ$ ПК, $Q_d = 0.05$ эВ/молекула: 1 – $\delta = 0.133$, $R_{\text{az}} = 1$ см; 2 – 0.24, 0.75; 3 – 0.55, 0.5; 4 – 0.832, 0.4.

$\Delta\alpha = 4.2^\circ$ ПК, или 0.47 мс). Таким образом, нельзя рассматривать влияние энерговыклада отдельно от структуры активированной зоны, созданной стримерными каналами.

Сравнение различных режимов воспламенения активированной разрядной зоны для четырех моментов инициации разряда, указанных в таблице, приводится на рис. 4. Обобщающий график для всех исследуемых значений энерговыкладов Q_d приведен для $\delta = 0.24$, $R_{\text{az}} = 0.75$ см. Штрихами отмечена область, где с точки зрения тепловых (КПД) и мощностных характеристик двигателя, желательно, чтобы происходило воспламенение как до ВМТ, так и после ВМТ, но не дальше 5° ПК [2, 4]. На рис. 5 в качестве примера представлены зависимости температуры и давления от угла поворота коленвала для разных углов инициации разряда при фиксированных значениях $\delta = 0.24$, $R_{\text{az}} = 0.75$ см и $Q_d = 0.05$ эВ/молекула. Во всех случаях происходит самовоспламенение, что обеспечивает полное сгорание топлива. Большая задержка воспламенения относительно ВМТ (как для $\alpha_{\text{dis}} = 355^\circ$ ПК на рис. 4) приводит к большим термодинамическим потерям (уменьшению КПД) и неиспользованию тепловой энергии на стадии расширения при нисходящем движении поршня. На рис. 4, 5 видно, что ранняя инициация высококачественного коронного разряда, задолго до ВМТ, более благоприятна, чем вблизи ВМТ. Этот вывод был сделан также при решении задачи о влиянии стримерного наносекундного разряда на воспламенение в двигателе НСЦИ в нульмерном приближении [13] и из экспериментов [4]. Кроме того, зажег разряд при низких давлениях на стадии сжатия легче, чем вблизи ВМТ. Такая зависимость от угла инициации связана с химической кинетикой стадии холодного пламени, которая обсуждается в работах [13, 14, 16].

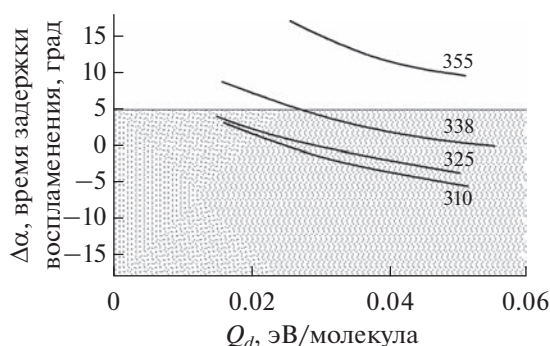


Рис. 4. Зависимость времени задержки воспламенения относительно ВМТ (0°) активированной зоны от энерговклада в стримерный канал для разных углов ПК инициации разряда α_{dis} (числа рядом с кривыми); $\delta = 0.24$, $R_{az} = 0.75$ см.

Распространение волны горения, инициируемой разрядом. Как уже отмечалось при анализе эволюции температуры и давления при воспламенении для разных условий, по характеру осцилляций можно судить, возникло или нет самовоспламенение. Однако развивается ли этот режим горения непосредственно перед фронтом волны горения или

около стенки цилиндра, сказать нельзя. Хотя горение в компрессионном двигателе с гомогенной смесью идеализируется как событие равномерно-самовоспламенения сразу всей топливной смеси в цилиндре, в действительности же воспламенение происходит последовательно в течение короткого времени в разных пространственных точках по всей смеси [2]. Эти последовательные события воспламенения вызваны изменением условий перед фронтом волны горения, идущим от активированной разрядом зоны, за время распространения фронта. В моделировании рассматривалось три режима распространения волны горения: 1) дефлаграционное распространение пламени, 2) последовательное распространение волн самовоспламенения в несгоревшем газе непосредственно перед фронтом, 3) распространение волны самовоспламенения в несгоревшем газе, идущей от стенки в направлении основной волны горения.

В качестве примера на рис. 6 приведены профили температуры и давления для условий рис. 2. В случае инициации разрядом при угле $\alpha_{dis} = 325^\circ$ ПК и радиусе активированной зоны $R_{az} = 0.75$ см смесь сначала воспламеняется в активированной зоне сразу за ВМТ ($\Delta\alpha = 0.45^\circ$ ПК, рис. 2), возникает дефлаграционная волна горения, которая, распространяясь, поджигает газ перед фронтом

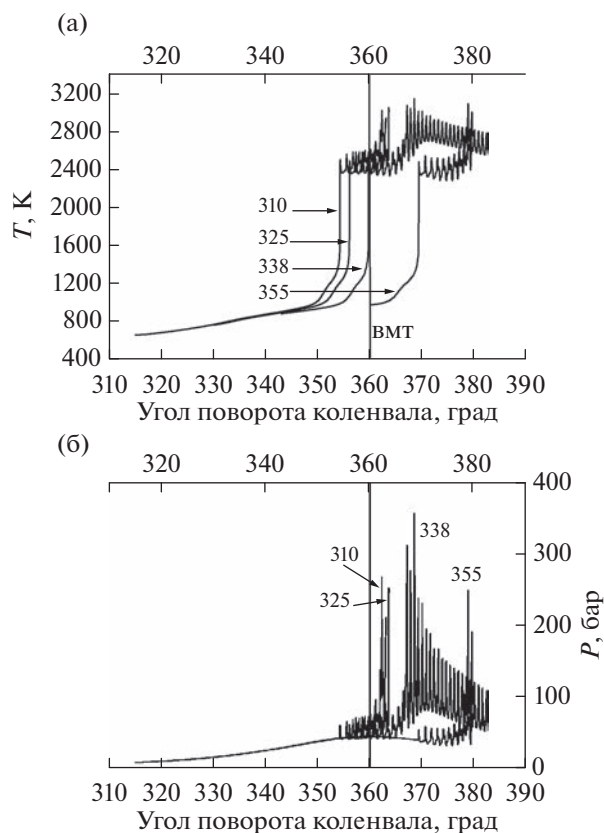


Рис. 5. Зависимости температуры (а) и давления (б) в активированной разрядом зоне ($r = 0.75$ см) от угла поворота коленвала для разных значений углов α_{dis} , при которых инициировался разряд; $\delta = 0.24$, $R_{az} = 0.75$ см, $Q_d \sim 0.05$ эВ/молекула.

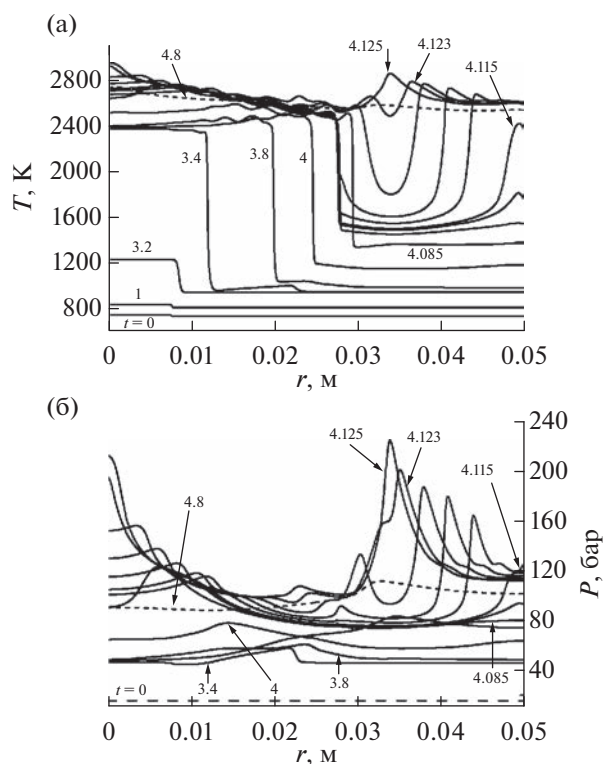


Рис. 6. Зависимости температуры (а) и давления (б) от расстояния вдоль радиуса цилиндра двигателя, $\alpha_{dis} = 325^\circ$ ПК, $\delta = 0.24$, $R_{az} = 0.75$ см, $Q_d = 0.025$ эВ/молекула: числа рядом с кривыми — момент времени в мс.

(рис. 6а). На рис. 2 видно, что сначала давление поднимается до 44 бар и до момента 3.3 мс температура в активированной зоне растет. Как только происходит воспламенение активированной зоны, давление в объеме цилиндра меняется, но в целом растет, хотя поршень движется вниз. Видимая скорость волны горения меняется со временем от 18 м/с при $t = 3.4$ мс до 24 м/с при $t = 4$ мс за счет роста температуры газа перед фронтом из-за химических реакций (рис. 2, точки 3.5 и 4.5 см). Потом фронт волны горения замедляется на расстоянии около 2.5 см от оси цилиндра (рис. 6а), сжимая газ перед фронтом.

Давление (80 бар, рис. 6б) в момент остановки фронта становится почти одинаковым справа и слева от него. Однако за счет колебания давления в объеме в некоторых точках давление и температура растут, особенно у стенки цилиндра, за счет химических реакций, происходящих на стадиях голубого и горячего пламени. Как только температура у стенки достигает 1600 К, смесь воспламеняется и от стенки начинает двигаться волна самовоспламенения со скоростью 1650 м/с навстречу дефлаграционной волне горения, которая тоже движется со средней скоростью 44 м/с. Между двумя волнами образуется щель, пока эти две волны не провзаимодействуют в момент $t = 4.125$ мс, что приводит к росту давления до 220 бар. К моменту $t = 4.8$ мс температура и давление по радиусу цилиндра выравниваются, принимая значения ~ 2600 К и 100 бар.

Сравнение различных режимов распространения волны горения для четырех моментов инициации разряда, указанных в таблице, дано на рис. 7. Обобщающие графики для всех исследуемых значений энерговкладов Q_d приведены для $\delta = 0.24$, $R_{az} = 0.75$ см и $\delta = 0.55$, $R_{az} = 0.5$ см. Заштрихована область, где с точки зрения термодинамических (КПД) и мощностных характеристик двигателя желательнее, чтобы произошло основное выделение тепла [2, 4], т.е. в диапазоне углов не более $\Delta\alpha = 10^\circ$ ПК после ВМТ. Самовоспламенение до ВМТ приводит к отрицательной работе поршня. Чем дальше за ВМТ происходит самовоспламенение, тем меньше осцилляции давления. Однако одним из недостатков позднего времени сгорания ($\alpha_{dis} = 338^\circ$ и 355° ПК) является то, что это приводит к термодинамическим потерям, поскольку имеется меньший объем расширения, доступный для использования рабочего потенциала отходящих газов. В данном исследовании наблюдается воспламенение всего объема, что обеспечивает полное сгорание топлива. Из рис. 7 следует, что самовоспламенение в оптимальном диапазоне углов происходит при инициации разряда задолго до ВМТ ($\alpha_{dis} = 310^\circ$ и 325° ПК) для всех энерговкладов в стримерный канал, которые рассматриваются в данной работе, т.е. $Q_d = 0.01$ – 0.05 эВ/молекула, для $\alpha_{dis} = 338^\circ$ ПК — при $Q_d > 0.025$

эВ/молекула. Самовоспламенение отсутствует при $\alpha_{dis} = 355^\circ$ ПК и $Q_d < 0.038$ эВ/молекула. Таким образом, время задержки самовоспламенения несгоревшего газа перед фронтом волны горения зависит от энерговклада в канал стримера, угла, при котором инициируется разряд, и параметров активированной зоны: ее радиуса и доли объема, обработанного разрядом.

Анализ режимов горения всего объема в диапазоне углов поворота коленвала от 300° до 400° ПК показывает, что характер распространения волны горения зависит от давления, которое определяется сжатием (расширением) при движении поршня, волнами давления, возникшими после воспламенения активированной разрядом зоны, и сжатием несгоревшего газа фронтом пламени. Локальное повышение давления приводит к ускорению химических реакций на стадии голубого пламени (выделения тепла при промежуточных температурах), и, как следствие, к росту температуры [15]. Из-за роста давления перед фронтом волна горения замедляется, из-за роста температуры перед фронтом — ускоряется. От соотношения давления и температуры зависит место формирования волны самовоспламенения: от стенки или от фронта. В данных расчетах за время задержки воспламенения активированной зоны, перед температурным фронтом, а затем и перед фронтом пламени, создается есте-

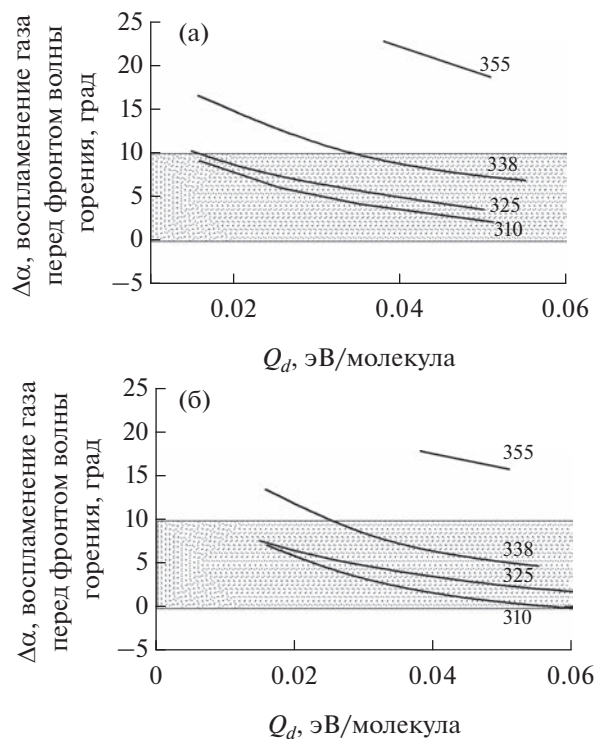


Рис. 7. Зависимость времени самовоспламенения газа перед фронтом волны горения относительно ВМТ (0°) от энерговклада в стримерный канал для разных углов инициации разряда и параметров: (а) — $\delta = 0.24$, $R_{az} = 0.75$ см; (б) — 0.55 , 0.5 .

ственное тепловое и концентрационное распределение, что способствует последовательному, более быстрому воспламенению газа перед фронтом.

Поскольку около ВМТ давление от сжатия максимально, а производная $dP/d\alpha$ — минимальна (α — угол поворота коленвала), то времени, в течение которого у стенки давление остается высоким, достаточно для возникновения волны самовоспламенения. Как только начинается быстрое расширение газа за счет движения поршня вниз, давление за счет сжатия поршнем падает, а величина $dP/d\alpha$ становится значительно больше, давление у стенки меняется быстро и времени на развитие самовоспламенения недостаточно. Быстрое расширение газа за счет движения поршня при этих более поздних углах поворота коленчатого вала теперь сильнее противодействует повышению давления, связанному со сгоранием. Перед фронтом волны горения рост температуры происходит не только за счет химических реакций, ускоренных локальным ростом давления, но и за счет теплопроводности. Уменьшение градиента температуры на фронте пламени (температурное сглаживание) приводит к росту скорости распространения пламени, которая зависит от степени повышения температуры в несгоревшей смеси по мере протекания в ней предшествующих химических реакций. И до определенной величины $dP/d\alpha$ около фронта может возникнуть волна самовоспламенения. При дальнейшем расширении газа при нисходящем движении поршня уже не складываются подходящие условия для развития самовоспламенения около фронта, и волна движется в дефлаграционном режиме.

В рассматриваемых условиях для $\phi = 0.7$ $dP/d\alpha = 0.32$ бар/градус на первых 5° за ВМТ и $dP/d\alpha = 0.922$ бар/градус на следующих 5° . Стоит отметить, что для более бедной смеси самовоспламенение у стенки может возникнуть для меньших углов после ВМТ, так как в бедной смеси время задержки воспламенения больше и для ее воспламенения давление должно меняться медленно. Для более богатой смеси самовоспламенение у стенки может возникнуть на больших углах, чем в рассматриваемых условиях, так как смесь успеет воспламениться при более быстром изменяющемся давлении в результате расширения. Это еще раз подчеркивает важную роль переменного давления от сжатия при решении задачи горения в компрессионном двигателе с гомогенной смесью. В работе [24] также связаны осцилляции давления и возникновение самовоспламенения перед фронтом, но в смеси водород–воздух. Однако расчет сделан для закрытого объема постоянной величины, что существенно меняет сценарий развития распространения волны горения, который может привести к детонации.

Следует отметить, что результаты моделирования, приведенные в этой работе, получены на основе расчетов с адиабатической стенкой. Если учитывать охлаждение стенок, то в зависимости

от условий самовоспламенения у стенки может и не возникнуть или возникнет на стадии холодного пламени, т.е. при низких температурах.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе приведены результаты моделирования возникновения и распространения волны горения при активации небольшой части пропановоздушной смеси высокочастотным коронным разрядом в цилиндре компрессионного двигателя с гомогенной смесью в одномерном приближении. Эффективность активации разрядом связана с ускорением начала стадии холодного пламени (низкотемпературная стадия выделения тепла) и стадии голубого пламени (выделение тепла при промежуточных температурах) и их более быстрым протеканием. Разряд приводит к незначительному нагреву активированной зоны ($\Delta T \sim 25\text{--}180^\circ\text{C}$) и образованию химически активных компонентов, в основном атомов О. Атомы О, которые образуют промежуточные долгоживущие компоненты — органические гидропероксиды, способствующие воспламенению, играют решающую роль в иницировании горения по сравнению с нагревом газа.

Рассмотрены причины возникновения различных сценариев горения: 1) дефлаграционное распространение пламени, 2) переход дефлаграционного горения в последовательное распространение волн самовоспламенения в несгоревшем газе перед фронтом, 3) режим распространения волны самовоспламенения в несгоревшем газе, идущей от стенки в направлении основной волны горения. Наличие у топливной смеси стадии голубого пламени и стадии горячего пламени (высокотемпературное выделение тепла) ускоряет развитие самовоспламенения при локальном повышении давления. Важным моментом для организации горения в гибридном двигателе является то, что при инициации разрядом часть смеси поджигается волной горения, а часть — за счет самовоспламенения, контролируемого стадией выделения тепла при промежуточных температурах. При этом основная часть выделения тепла должна приходиться на времена, соответствующие 10° ПК за ВМТ. Это позволит снизить скорость роста давления в компрессионном двигателе по сравнению с тем, как если бы вся смесь в цилиндре самовоспламенилась одновременно по всему объему.

Приведены зависимости времени задержки воспламенения активированной разрядом зоны и времени самовоспламенения всего объема камеры сгорания от удельного энерговклада в стримерный канал для разных значений связанных друг с другом параметров: радиуса и доли объема активированной зоны, обработанной высокочастотным коронным разрядом. Показано, что воспламенение активированной разрядом зоны и самовоспламенение происходят в оптимальном диапазоне углов поворота коленвала, если разряд

инициируется задолго до ВМТ ($\alpha_{\text{dis}} = 310^\circ, 325^\circ, 338^\circ$ ПК) для энергокладов в стримерный канал, которые рассматриваются в данной задаче, т.е. $Q_d = 0.01\text{--}0.05$ эВ/молекула. И чем ближе к ВМТ возникает самовоспламенение, тем больше амплитуда колебания давления. Моделирование показывает, что нельзя рассматривать влияние энергоклада отдельно от структуры активированной зоны (радиуса и доли объема активированной зоны), созданной стримерными каналами.

Решая уравнения Навье—Стокса с внешним давлением (имитация движения поршня), можно более точно определить оптимальные пределы воспламенения активированной зоны и возникновения самовоспламенения, так как более быстрое расширение горючей смеси при более позднем времени сгорания вызывает более высокие темпы снижения давления, противодействуя значительному повышению давления из-за самовоспламенения. При постоянном объеме в задаче горения в ДВС получаются менее достоверные характеристики, такие как пределы оптимального сгорания.

Работа поддержана Министерством науки и образования РФ (госзадание № 075-00460-21-00).

Авторы благодарят д.ф.-м.н. В.А. Битюрину, д.ф.-м.н. А.Н. Бочарова и д.т.н. В.Е. Мессерле за интерес к работе и полезные обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dahms R., Felsch C., Rohl O., Peters N. Detailed Chemistry Flamelet Modeling of Mixed Mode Combustion in Spark-Assisted HCCI Engines // Proc. Combust. Inst. 2011. V. 33. P. 3023.
2. Saxena S., Bedoya I.D. Fundamental Phenomena Affecting Low Temperature Combustion and HCCI Engines, High Load Limits and Strategies for Extending These Limits // Prog. Energy Combust. Sci. 2013. V. 39. P. 457.
3. Persson H., Johansson B., Remón A. The Effect of Swirl on Spark Assisted Compression Ignition (SACI) // JSAE. 2007. 20077167 (SAE 2007-01-1856).
4. Schenk A., Rixecker G., Bohne S. Results from Gasoline and CNG Engine Tests with the Corona Ignition System EcoFlash // 3rd Laser Ignition Conf. Proc. Argonne, US, 2015. W4A.4.
5. Auzas F., Tardiveau P., Puech P., Makarov M., Agneray A. Heating Effects of a Non-Equilibrium RF Corona Discharge in Atmospheric Air // J. Phys. D: Appl. Phys. 2010. V. 43. 495204.
6. Mariani A., Foucher F. Radio Frequency Spark Plug: An Ignition System for Modern Internal Combustion Engines // Appl. Energy. 2014. V. 122. P. 151.
7. Discepoli G., Cruccolini V., Ricci F., Giuseppe A.D., Papi S., Grimaldi C.N. Experimental Characterisation of the Thermal Energy Released by a Radio Frequency Corona Igniter in Nitrogen and Air // Appl. Energy. 2020. V. 263. 114617.
8. Yu X., Wang L., Yu S., Wang M., Zheng M. Flame Kernel Development with Radio Frequency Oscillating Plasma Ignition // PSST. 2022. V. 31. 055004.
9. Wei H., Chen C., Shu G., Liang X., Zhou L. Pressure Wave Evolution During Two Hotspots Autoignition within End-gas Region under Internal Combustion Engine-Relevant Conditions // Combust. Flame. 2018. V. 189. P. 142.
10. Terashima H., Koshi M. Mechanisms of Strong Pressure Wave Generation in End-gas Autoignition During Knocking Combustion // Combust. Flame. 2015. V. 162. P. 1944.
11. Pan J., Shu G., Zhao P., Wei H., Chen Z. Interactions of Flame Propagation, Auto-ignition and Pressure Wave During Knocking Combustion // Combust. Flame. 2016. V. 164. P. 319.
12. Киверин А.Д., Смыгалина А.Е. Механизмы развития интенсивных динамических процессов при сжигании водорода в камерах сгорания ДВС // ТВТ. 2022. Т. 60. № 1. С. 103.
13. Filimonova E., Bocharov A., Bityurin V. Influence of a Non-equilibrium Discharge Impact on the Low Temperature Combustion Stage in the HCCI Engine // Fuel. 2018. V. 228. P. 309.
14. Filimonova E.A., Dobrovolskaya A.S., Bocharov A.N., Bityurin V.A., Naidis G.V. Formation of Combustion Wave in Lean Propane-Air Mixture with a Non-Uniform Chemical Reactivity Initiated by Nanosecond Streamer Discharges in the HCCI Engine // Combust. Flame. 2020. V. 215. P. 401.
15. Dobrovolskaya A.S., Filimonova E.A., Bityurin V.A., Bocharov A.N. Role of Pressure Waves in the Heating of the End-Gas in HCCI Engine with Activation by Pulsed Corona Discharge // J. Phys.: Conf. Ser. 2021. V. 2100(1). 012016.
16. Филимонова Е.А. Кинетика процессов горения, конверсии оксидов азота и углеводородов, стимулированных наносекундными разрядами. Дис. ... докт. физ.-мат. наук. М.: ОИВТ РАН, 2021. 337 с.
17. Битюрин В.А., Бочаров А.Н. Магнитогидродинамическое взаимодействие при обтекании затупленного тела гиперзвуковым воздушным потоком // МЖГ. 2006. № 5. С. 188.
18. Filimonova E.A. Discharge Effect on the Negative Temperature Coefficient Behaviour and Multistage Ignition in C_3H_8 -Air Mixture // J. Phys. D: Appl. Phys. 2015. V. 48. 015201.
19. Dobrovolskaya A., Filimonova E., Bityurin V., Bocharov A., Klyuchnikov N. Different Numerical Approaches for Simulation of Combustion Wave Initiation by Electrical Discharge // AIP Conf. Proc. 2018. V. 1978(1). 470074.
20. Железняк М.Б., Филимонова Е.А. Моделирование газозафазного химического реактора на основе импульсного стримерного разряда для удаления токсичных примесей. Ч. I // ТВТ. 1998. Т. 36. № 3. С. 374.
21. Железняк М.Б., Филимонова Е.А. Моделирование газозафазного химического реактора на основе импульсного стримерного разряда для удаления токсичных примесей // ТВТ. 1998. Т. 36. № 4. С. 557.
22. Babaeva N.Yu., Naidis G.V. Two-Dimensional Modeling of Positive Streamer Dynamics in Non-Uniform Electric Fields in Air // J. Phys. D: Appl. Phys. 1996. V. 29. P. 2423.
23. Pan J., Shu G., Wei H. Interaction of Flame Propagation and Pressure Waves During Knocking Combustion in Spark-ignition Engines // Combust. Sci. Technol. 2014. V. 186 (2). P. 192.
24. Yu H., Chen Zh. End-gas Autoignition and Detonation Development in a Closed Chamber // Combust. Flame. 2015. V. 162. P. 4102.

О ЗАМКНУТОМ ИНТЕРПОЛЯЦИОННОМ УРАВНЕНИИ СОСТОЯНИЯ ДЛЯ ПРОСТОЙ ЖИДКОСТИ

© 2023 г. В. Б. Бобров*

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*E-mail: vic5907@mail.ru

Поступила в редакцию 17.09.2022 г.

После доработки 10.11.2022 г.

Принята к публикации 06.12.2022 г.

На основе точных соотношений квантовой статистической теории для кулоновских систем и приближения Борна—Оппенгеймера получено замкнутое интерполяционное уравнение, связывающее давление и его производную по плотности при фиксированной температуре, для простой квази-классической жидкости, в которой эффективный парный потенциал межчастичного взаимодействия имеет фурье-преобразование.

DOI: 10.31857/S0040364423030043

ВВЕДЕНИЕ

Хотя задача о построении интерполяционного уравнения состояния простой жидкости имеет длительную историю, до настоящего времени эта задача остается актуальной (см. [1–7] и цитируемую там литературу). В подавляющем большинстве случаев теоретической основой для решения подобной задачи являются результаты применения к описанию термодинамических свойств простой жидкости интегральных уравнений для корреляционных функций, а также теории возмущений по отношению к некоторой “основной системе” (“reference system”), для которой имеются аналитические выражения как для термодинамических, так и для корреляционных функций (см. подробнее [8]). Наиболее часто в качестве основной системы используется жидкость твердых сфер либо приближение идеального газа. В последнем случае существенное значение имеет фурье-преобразование для потенциала межчастичного взаимодействия, при наличии которого интегральные соотношения (уравнения) могут быть “свернуты” в алгебраические, что позволяет упростить рассмотрение задачи.

Однако при описании простой жидкости наибольшее распространение получили модельные потенциалы межчастичного взаимодействия, для которых не существует фурье-преобразования вследствие расходимости соответствующего интеграла на малых расстояниях между частицами простой жидкости, в частности потенциал Леннарда—Джонса (см., например, [9]).

Более того, возникает иллюзия, что фактически единственный потенциал, имеющий фурье-преобразование, описывает кулоновское взаимодействие заряженных частиц. Другими словами, создается впечатление, что постановка вопроса об использовании фурье-преобразования имеет смысл только при рассмотрении кулоновских систем (КС), частным случаем которых являются плазменные системы. Здесь и далее под КС понимается квантовая нерелятивистская модель вещества, в которой заряженные частицы различных сортов взаимодействуют между собой по закону Кулона. Эта модель наиболее адекватно описывает реальное вещество в широком диапазоне термодинамических параметров [10, 11]. Между тем, при теоретическом исследовании равновесных свойств КС до настоящего момента используются два различных подхода: химическая и физическая модели, отличающиеся выбором “исходных частиц” для статистического описания. В качестве исходных частиц в химической модели могут выступать “свободные” электроны, атомы, ионы, молекулы, в то время как в физической модели в нерелятивистском приближении в качестве исходных частиц выступают электроны и ядра (см., например, [10]).

При этом в физической модели атомы, ионы, молекулы рассматриваются как связанные состояния электронов и ядер, которые образуются в результате их сильного взаимодействия. Если такие связанные состояния преобладают, в рамках химической модели из физических соображений вещество рассматривается как система взаимо-

действующих атомов или молекул (нейтральные газ или жидкость) при условии, что энергия их взаимодействия мала по сравнению с энергией связи составных частиц [10]. С ростом температуры возникает необходимость учета несвязанных состояний электронов (“свободные” электроны) и ионов, что означает переход нейтрального газа в плазменное состояние.

Таким образом, *a priori* полагается, что при определенных термодинамических параметрах атомы, ионы, молекулы, являющиеся исходными частицами в химической модели, могут служить подходящей основой для описания свойств вещества, как, например, для нейтральных газов (простых жидкостей) или низкотемпературной газовой плазмы. Однако при других условиях, которые характеризуются высокой температурой или большой плотностью вещества, такие исходные частицы практически не играют роли, например в газовой высокотемпературной полностью ионизованной плазме или в сильно сжатом плотном веществе [11]. В результате пределы применимости химической модели вещества могут быть определены только на основе физической модели, в рамках которой вещество рассматривается как КС.

В этой ситуации как сама концепция, так и выбор модельных потенциалов, описывающих взаимодействие исходных частиц в простой жидкости, включая особенности поведения этих потенциалов в зависимости от расстояния между частицами, нуждаются в обсуждении. При этом необходимо учитывать, что фактически единственным малым параметром в статистической термодинамике КС является отношение масс электрона m_e и ядра m_c ($m_e/m_c \ll 1$), что позволяет применить приближение Борна–Оппенгеймера (адиабатическое приближение) для описания подсистемы ядер. Более того, само представление об атомах и молекулах как об исходных частицах возможно только в приближении Борна–Оппенгеймера (см., например, [12, 13]).

Как показано в [14], равновесные свойства КС, состоящей из электронов и тождественных ядер одного сорта в адиабатическом приближении для подсистемы ядер, определяются термодинамическими характеристиками однородной электронной жидкости в компенсирующем положительном фоне и подсистемы ядер, взаимодействующих между собой посредством эффективного потенциала. В свою очередь этот потенциал, помимо кулоновского взаимодействия ядер между собой, определяется равновесной неоднородной плотностью электронов, находящихся в кулоновском поле тождественных ядер. Однако такой эффективный потенциал зависит от пространственных переменных всех ядер КС. По этой причине ввести в рассмотрение эффективный парный потенциал взаимодействия ядер можно только в

двух предельных случаях: для разреженного газа исходных атомов [15, 16] (см. также [17]) и в случае сильно сжатого вещества, когда влиянием связанных электронных состояний можно пренебречь (см., например, [18]). При этом в обоих случаях соответствующий парный потенциал взаимодействия имеет фурье-преобразование с учетом особенностей такого преобразования для кулоновского потенциала взаимодействия [15, 16, 18]. Тем не менее даже в указанных случаях получение явных аналитических выражений для эффективного парного потенциала взаимодействия ядер не представляется возможным — речь может идти только о численных расчетах. Таким образом, согласно сказанному выше, далее будем считать, что используемые в теории простой жидкости модельные потенциалы межчастичного взаимодействия известны, имеют фурье-преобразование, а их параметры являются подгоночными с точки зрения сравнения теоретических результатов с имеющимися экспериментальными данными.

Необходимо отметить, что, начиная с работы [19] и до настоящего времени (см. подробнее [20–25]), построение интерполяционного уравнения состояния простой жидкости с использованием модельных потенциалов, имеющих фурье-преобразование, реализуется в рамках классической статистической теории на основе канонического распределения Гиббса. Между тем, как известно (см., например, [26]), энтропия и химический потенциал, будучи немеханическими величинами, не имеют классического ($\hbar \rightarrow 0$) предела. Здесь и далее $\hbar$ — постоянная Планка. Это означает, что последовательное рассмотрение термодинамических свойств простой жидкости необходимо проводить в рамках квантовой статистической теории с последующим использованием квазиклассического приближения (см. [27, 28] и цитируемую там литературу).

Более того, как будет показано в настоящей работе, используемое в [20–25] для построения интерполяционного уравнения состояния простой жидкости выражение для свободной энергии имеет область применимости, ограниченную двумя указанными выше предельными случаями при введении в рассмотрение модельного парного потенциала межчастичного взаимодействия. Речь идет о слабонеидеальном разреженном квазиклассическом газе и слабонеидеальном вырожденном квантовом газе.

Для выхода за рамки приближения слабонеидеального газа при построении интерполяционного уравнения состояния простой жидкости в настоящей работе используется ряд точных соотношений квантовой статистической теории. Это предполагает первоначальное рассмотрение не свободной энергии, а термодинамического потенциала Гиббса (так называемого Ω -потенциа-

ла) с применением большого канонического распределения Гиббса и соответствующих результатов диаграммной техники теории возмущений (см., например, [29]). На этой основе в соответствующем приближении будет получено замкнутое интерполяционное уравнение для давления и его производной по плотности при фиксированной температуре с учетом особенностей фурье-преобразования для парного модельного потенциала межчастичного взаимодействия.

ИНТЕРПОЛЯЦИОННОЕ ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ПРОСТОЙ КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЙ ЖИДКОСТИ

Основой для решения задачи о вычислении свободной энергии $F(T, V, N)$ квантовой системы, находящейся в объеме V при температуре T (в энергетических единицах) и состоящей из N частиц с гамильтонианом $\hat{H}(\lambda)$, который зависит от некоторого безразмерного параметра λ , является известное соотношение [30]

$$(\partial F / \partial \lambda)_{T, V, N} = \langle \partial \hat{H}(\lambda) / \partial \lambda \rangle_{C, \lambda}, \quad (1)$$

где угловые скобки с индексами C, λ обозначают осреднение с каноническим распределением Гиббса (индекс C), которое определяется гамильтонианом $\hat{H}(\lambda)$. С учетом сказанного выше запишем оператор $\hat{H}_{SL}(\lambda)$ для простой жидкости в виде

$$\hat{H}_{SL}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{W}_{SL}, \quad \hat{H}_0 = \sum_{p\sigma} \varepsilon_0(p) \hat{a}_{p\sigma}^+ \hat{a}_{p\sigma}. \quad (2)$$

Здесь и далее $\hat{H}_0$ — оператор кинетической энергии для частиц простой жидкости с массой m и спином s , $\varepsilon_0(p) = \hbar^2 p^2 / 2m$ — энергия свободной частицы, $\hat{a}_{p\sigma}^+$ и $\hat{a}_{p\sigma}$ — соответственно операторы рождения и уничтожения частиц простой жидкости с импульсом $\hbar \mathbf{p}$ и проекцией спина σ , $\hat{W}_{SL}$ — гамильтониан взаимодействия частиц простой жидкости

$$\hat{W}_{SL} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\{p\sigma\}} v_{SL}(\mathbf{q}) \times \\ \times \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}/2, \sigma_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}/2, \sigma_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}/2, \sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}/2, \sigma_1}, \quad (3)$$

где $v_{SL}(\mathbf{q})$ — фурье-преобразование для парного модельного потенциала взаимодействия частиц простой жидкости $w_{SL}(r)$

$$w_{SL}(r) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} v_{SL}(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}), \\ v_{SL}(\mathbf{q}) = \int_V d^3r w_{SL}(r) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}). \quad (4)$$

Очевидно, что при $\lambda = 1$ оператор $\hat{H}_{SL}(\lambda)$ (2) соответствует точному гамильтониану простой жид-

кости. Особенности фурье-преобразования для кулоновского потенциала взаимодействия рассмотрены в [31].

Таким образом, с учетом (1)–(4) для свободной энергии простой жидкости

$$F_{SL}(N, V, T) = -T \ln \text{Tr} \exp(-\hat{H}_{LM}(\lambda = 1)/T) \quad (5)$$

справедливо равенство

$$F_{SL}(N, V, T) = F_0(N, V, T) + \Delta F_{SL}(N, V, T), \quad (6)$$

где $F_0(N, V, T) = -T \ln \text{Tr} \exp(-\hat{H}_0/T)$ — свободная энергия идеального газа частиц, Tr обозначает процедуру взятия следа соответствующего оператора,

$$\Delta F_{SL}(N, V, T) = \frac{1}{2} v_{SL}(0) \bar{n} N + \\ + \frac{1}{2} \bar{n} \int_0^1 d\lambda \sum_{\mathbf{q} \neq 0} v_{SL}(\mathbf{q}) \{S_{SL}^{(C, \lambda)}(\mathbf{q}) - 1\}, \quad (7) \\ S_{SL}^{(C, \lambda)}(\mathbf{q}) = N^{-1} \langle \delta \hat{\rho}(\mathbf{q}) \delta \hat{\rho}(-\mathbf{q}) \rangle_{C, \lambda},$$

$S_{SL}^{(C, \lambda)}(\mathbf{q})$ — так называемый статический структурный фактор простой жидкости, который непосредственно связан с соответствующей парной корреляционной функцией и может быть измерен в экспериментах по упругому рассеянию нейтронов [8], а также электронов (в том числе с помощью синхротронного излучения) и рентгеновских лучей,

$$\delta \hat{\rho}(\mathbf{q}) = \hat{\rho}(\mathbf{q}) - N \delta_{\mathbf{q}, 0}, \quad \hat{\rho}(\mathbf{q}) = \sum_{\{p\sigma\}} \hat{a}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}/2, \sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}/2, \sigma},$$

$\bar{n} = N/V$ — средняя плотность числа частиц простой жидкости.

После перехода в (5), (6) к термодинамическому пределу $\lim_T: N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty, \bar{n} = \text{const}$ величина $S_{SL}^{(C, \lambda)}(\mathbf{q})$ для однородной и изотропной жидкости является функцией от модуля волнового вектора $q \equiv |\mathbf{q}|$, поэтому для удельной свободной энергии, приходящейся на единицу объема простой жидкости, которая и имеет физический смысл, находим

$$\Delta \bar{f}_{SL}(\bar{n}, T) \equiv \lim_T \frac{\Delta F_{SL}(N, V, T)}{V} = \frac{1}{2} v_{SL}(0) \bar{n}^2 + \\ + \frac{1}{2} \bar{n} \int_0^1 d\lambda \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} v_{SL}(q) \{S_{SL}^{(C, \lambda)}(q) - 1\}. \quad (8)$$

Обратим внимание, что уже на этапе непосредственного определения свободной энергии $F_0(N, V, T)$ для идеального газа на основе квантового канонического распределения возникает вычислительная проблема. Дело в том, что использование числа частиц N в рассматриваемой системе как независимой переменной для сво-

бодной энергии является ограничивающим условием на собственные значения оператора полного числа частиц $\hat{N} = \sum_{\{\rho\sigma\}} \hat{a}_{\rho\sigma}^+ \hat{a}_{\rho\sigma}$. Это обстоятельство приводит, как известно (см., например, [32]), к невозможности непосредственного вычисления свободной энергии квантового идеального газа при использовании канонического распределения. В результате определение величины $F_0(N, V, T)$ осуществляется с применением большого канонического распределения посредством вычисления термодинамического потенциала Гиббса для идеального квантового газа $\Omega_0(T, V, \mu) = -T \ln \text{Tr} \exp(-(\hat{H}_0 - \mu \hat{N})/T)$, где μ – химический потенциал для рассматриваемой системы как независимая переменная (см. подробнее [30, 32]), в частности:

$$\begin{aligned} \bar{\omega}_0(T, \mu) &= \lim_T \frac{\Omega_0(T, V, \mu)}{V} = -P_0(T, \mu) = \\ &= \frac{2}{3}(2s+1) \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \varepsilon_0(p) f_0(p; T, \mu), \\ \bar{n}_0(T, \mu) &= \lim_T \frac{\langle \hat{N} \rangle_{QC,0}(T, V, \mu)}{V} = \\ &= (2s+1) \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} f_0(p; T, \mu), \end{aligned} \quad (9)$$

где $P_0(T, \mu)$, $\bar{n}_0(T, \mu)$ и $f_0(p; T, \mu)$ – соответственно давление, средняя плотность числа частиц и функция распределения по импульсам (Ферми–Дирака или Бозе–Эйнштейна) в идеальном газе как функции независимых переменных T и μ , угловые скобки с индексом QC обозначают осреднение с большим каноническим распределением.

Далее по определению может быть найдена величина $F_0(T, V, \mu) \equiv \Omega_0(T, V, \mu) + \mu \langle \hat{N} \rangle_{QC,0}$. Нетрудно убедиться, что $(\partial \langle \hat{N} \rangle_{QC} / \partial \mu)_{T,V} > 0$ [30, 32]. Это означает, что величина $\bar{n}(T, \mu) \equiv \lim_T \langle \hat{N} \rangle_{QC} / V$ в простой жидкости, как и в случае идеального газа, является однозначной функцией химического потенциала μ .

Полагая, что результаты применения различных распределений приводят к эквивалентным результатам [30, 32], будем считать, что средняя плотность числа частиц $\bar{n}$, заданная в каноническом распределении, равна функции $\bar{n}_0(T, \mu)$ для идеального газа с заменой химического потенциала μ на функцию $\mu_0(T, \bar{n})$. С учетом (9) это означает, что уравнение для определения функции $\mu_0(T, \bar{n})$ имеет вид

$$\bar{n} = (2s+1) \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} f_0(p; T, \mu_0(T, \bar{n})). \quad (10)$$

Аналитическое решение уравнения (10) возможно только в двух предельных случаях: слабого и сильного вырождения (см. подробнее [30, 32]). В частности, в квазиклассическом пределе ($\hbar \rightarrow 0$) для разреженного идеального газа имеем

$$\begin{aligned} P_0(T, \bar{n}) &= \bar{n} T, \\ \mu_0(T, \bar{n}) &= T \ln(\bar{n} \Lambda^3 / (2s+1)) < 0, \end{aligned} \quad (11)$$

где $\Lambda = (2\pi\hbar^2/mT)^{1/2}$ – тепловая длина волны де Бройля. Как сказано выше, химический потенциал идеального газа $\mu_0(T, \bar{n})$, будучи немеханической величиной, не имеет классического предела. Отметим также явную зависимость величины $\mu_0(T, \bar{n})$ от спина частицы s . Другими словами, соответствие между результатами применения классической и квантовой механики при описании макроскопического тела имеет место только в отношении “механических” величин, например давления.

Перейдем далее к рассмотрению эффектов межчастичного взаимодействия в свободной энергии простой жидкости. Согласно (8) основной проблемой является вычисление статического структурного фактора $S_{SL}^{(C,\lambda)}(q)$ (7). Оператор $\hat{\rho}(\mathbf{q})$ в определении величины $S_{SL}^{(C,\lambda)}(q)$ (7) в “координатном” представлении имеет вид $\hat{\rho}(\mathbf{q}) \rightarrow \sum_{j=1}^N \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j)$, где $\mathbf{r}_j$ – пространственная переменная j -й частицы простой жидкости. С этой точки зрения статический структурный фактор можно отнести к “механической” величине, которая имеет классический предел. Учитывая связь статического структурного фактора $S_{SL}^{(C,\lambda)}(q)$ с фурье-преобразованием парной корреляционной функции $g_{SL}^{(\lambda)}(q) - S_{SL}^{(C,\lambda)}(q) = 1 + \bar{n} g_{SL}^{(\lambda)}(q)$, приходим к выводу, что в квазиклассическом пределе величина (8) полностью определяется классическим конфигурационным интегралом $Q_{SL}^{(cl)}(N, V, T)$, который при заданных величинах N, V, T однозначно зависит только от потенциала межчастичного взаимодействия.

При этом для вычисления конфигурационного интеграла $Q_{SL}^{(cl)}(N, V, T)$ имеется соответствующая диаграммная техника теории возмущений (так называемое λ -разложение), допускающая использование фурье-преобразования для потенциала межчастичного взаимодействия и приводящая, в частности, к виральному разложению для термодинамических функций простой классической жидкости (см. [32] и цитируемую там литературу). В свою очередь применение λ -разложения и процедуры частичного суммирования диаграмм определенного типа приводит к возможности полу-

чения различных замкнутых интегральных уравнений для парной корреляционной функции, которые активно используются при исследовании разных свойств простой классической жидкости (см. подробнее [8, 26, 32] и цитируемую там литературу).

Однако эти рассуждения находятся в противоречии с предшествующим выводом о том, что в рамках квантовой статистической теории имеются существенные ограничения в вычислительных возможностях использования канонического распределения Гиббса, обусловленные фиксированием полного числа частиц N простой жидкости в заданном макроскопическом объеме V . Очевидно, эти ограничения не могут быть преодолены переходом к квазиклассическому пределу. При этом необходимо учитывать, что исходным распределением равновесной статистической теории является микроканоническое распределение Гиббса с заданными значениями N, V, E , где E — полная энергия рассматриваемой замкнутой системы, состоящей из N тождественных частиц, заключенных в макроскопическом объеме V [26, 30, 32]. Но значение энергии E существенным образом зависит от граничных условий для волновой функции замкнутой системы на “бесконечности” [33]. Это означает нахождение рассматриваемой системы в весьма экзотическом “самосжатом” состоянии с нулевыми значениями для волновой функции на бесконечности [34], которое, с одной стороны, не имеет термодинамического предела, а с другой, не может быть использовано для описания разреженной системы. С этой точки зрения применяемый в феноменологической термодинамике подход соответствует понятию замкнутой системы как системы с заданными значениями числа тождественных частиц N , макроскопического объема V и суммарной энергии E , которые фиксируются неким потенциальным внешним полем с “бесконечными потенциальными стенками” [30]. В свою очередь рассмотрение малой, но макроскопической подсистемы, находящейся в термодинамическом равновесии с исходной замкнутой системой при температуре T , приводит, как принято считать [26, 30, 32], к каноническому распределению Гиббса. Однако, если объем малой подсистемы может быть определен посредством фиксации значений волновой функции на поверхности, ограничивающей объем этой подсистемы, то задание числа тождественных частиц в малой подсистеме означает, что эта подсистема, согласно сказанному выше, находится во внешнем поле с “бесконечными потенциальными стенками”. Тем самым для описания малой подсистемы, являющейся равновесной частью замкнутой системы, следует использовать не каноническое распределение Гиббса, а большое каноническое распределение Гиббса, в котором фиксируется значение μ , а не величина N [35].

Обратим внимание, что задание значений химического потенциала μ и температуры T означает, что исходная замкнутая система и ее малая макроскопическая часть находятся в термодинамическом равновесии (условия фазового равновесия) [30]. При этом “отказ” от канонического распределения Гиббса не приводит к умалению результатов применения понятия свободной энергии $F(T, V, N)$. Речь идет только о том, что свободную энергию следует вычислять через термодинамический потенциал Гиббса $\Omega(T, V, \mu)$ по аналогии с тем, как это сделано выше в отношении идеального газа.

В этой связи напомним, что традиционный вывод классического вириального разложения основан на использовании большого канонического распределения Гиббса (см. подробнее [32] и цитируемую там литературу). Соответствующая теория квазиклассических неидеальных газов была одной из первых теорий, построенных с систематическим применением диаграммной техники и использованием соответствия между топологическими свойствами диаграмм и аналитическими свойствами соответствующих интегралов. Эта идея позднее была широко распространена в квантовой теории поля и квантовой статистической теории (см. подробнее [10, 11, 29] и цитируемую там литературу). При этом соотношение (1) остается в силе с точностью до замены свободной энергии $F(T, V, N)$ на термодинамический потенциал Гиббса $\Omega(T, V, \mu)$ [10, 11]:

$$(\partial\Omega/\partial\lambda)_{T,V,\mu} = \langle \partial\hat{H}(\lambda)/\partial\lambda \rangle_{GC,\lambda}, \quad (12)$$

где угловые скобки с индексами GC, λ обозначают осреднение с большим каноническим распределением Гиббса (индекс GC), которое определяется гамильтонианом $\hat{H}(\lambda)$ (2)–(4). Более того, выражения (2), (3) для гамильтониана $\hat{H}(\lambda)$ основаны на использовании полного набора плоских волн, удовлетворяющих периодическим граничным условиям на поверхности, ограничивающей объем рассматриваемой системы V , что и соответствует использованию большого канонического распределения Гиббса [32]. Таким образом, соотношение (8) с учетом (12) принимает вид

$$\Omega_{SL}(\mu, V, T) = -P(T, \mu)V = \Omega_0(\mu, V, T) + \Delta\bar{\Omega}_{SL}(\mu, V, T), \quad (13)$$

где $\Omega_0(\mu, V, T) = -T \ln \text{Tr} \exp(-(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})/T)$ — термодинамический потенциал Гиббса для идеального газа частиц, $P(T, \mu)$ — давление в рассматриваемой системе,

$$\Delta\bar{\Omega}_{SL}(\mu, V, T) = \frac{1}{2V} v_{SL}(0) \langle \hat{N}^2 \rangle_{GC} + \frac{1}{2V} \hat{N}_{GC} \times \int_0^1 d\lambda \sum_{\mathbf{q} \neq 0} v_{SL}(\mathbf{q}) \{ S_{SL}^{(GC, \lambda)}(\mathbf{q}) - 1 \}, \quad (14)$$

$$\Delta\bar{\omega}_{SL}(\mu, T) \equiv \lim_T \frac{\Delta\bar{\Omega}_{SL}(\mu, V, T)}{V} = \frac{1}{2} v_{SL}(0) \bar{n}^2 + \frac{1}{2} \bar{n} \int_0^1 d\lambda \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} v_{SL}(q) \{ S_{SL}^{(GC, \lambda)}(q) - 1 \}, \quad (15)$$

$\bar{n} = \lim_T \langle \hat{N} \rangle_{GC} / V = \bar{n}(\mu, T)$ — средняя плотность числа частиц в рассматриваемой системе. Учитывая проведенное выше обсуждение, статический структурный фактор $S_{SL}^{(GC, \lambda)}(q)$, фигурирующий в соотношении (14), при использовании большого канонического распределения Гиббса определяется через так называемую функцию отклика $\chi_{SL}^{(GC, \lambda)}(q, \omega)$, описывающую поведение средней неоднородной плотности в слабом внешнем скалярном поле:

$$\begin{aligned} \bar{n} S_{SL}^{(GC, \lambda)}(q) &= -\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\text{Im} \chi_{SL}^{(GC, \lambda)}(q, \omega)}{1 - \exp(-\hbar\omega/T)}, \\ \chi_{SL}^{(GC, \lambda)}(q, \omega) &= -\frac{i}{\hbar} \lim_T \frac{1}{V} \times \\ &\times \int_0^{\infty} dt \exp(i\omega t) \langle [\delta\hat{\rho}(\mathbf{q}, t), \delta\hat{\rho}(-\mathbf{q}, 0)] \rangle_{GC, \lambda}, \quad (16) \\ \delta\hat{\rho}(\mathbf{q}, t) &= \exp(i\hat{H}_{SL}(\lambda)t/\hbar) \times \\ &\times \delta\hat{\rho}(\mathbf{q}) \exp(-i\hat{H}_{SL}(\lambda)t/\hbar). \end{aligned}$$

Из определения (16) непосредственно следует, что функция отклика $\chi_{SL}^{(GC, \lambda)}(q, z)$ может быть аналитически продолжена в верхнюю полуплоскость комплексных значений частоты z ($\text{Im} z > 0$). Более того, в точках $\hbar z_n = i\Omega_n$, $\Omega_n = 2\pi n T$ ($n = 0; 1; \dots$) на мнимой оси совпадает с соответствующей температурной функцией Грина $\chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n)$ [10, 11, 29]. При этом, используя спектральные представления для функций $\chi_{SL}^{(GC, \lambda)}(q, \omega)$ и $\chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n)$, можно показать, что [35] (см. также [36]) имеет вид

$$\begin{aligned} \bar{n} S_{SL}^{(GC, \lambda)}(q) &= -T \sum_{\eta=-\infty}^{\infty} \chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n), \quad (17) \\ \lim_{\hbar \rightarrow 0} \bar{n} S_{SL}^{(GC, \lambda)}(q) &= -T \lim_{\hbar \rightarrow 0} \chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, 0). \end{aligned}$$

Таким образом, вычисление величины $\Delta\bar{\omega}_{SL}(\mu, T)$ (15) сводится к определению статической функции Грина $\chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, 0)$. Для вычисления температурных функций Грина разработана диаграммная техника, основанная на методах кван-

товой теории поля (см. подробнее [10, 11, 29] и цитируемую там литературу). В частности, для функции Грина $\chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n)$ имеет место соотношение

$$\begin{aligned} \chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n) &= \Pi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n) + \\ &+ \Pi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n) \lambda v_{SL}(q) \chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n), \end{aligned} \quad (18)$$

где $\Pi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n)$ — так называемый поляризационный оператор (поляризационная функция), который является частью функции $\chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n)$, непригодимой в “ q -канале” по одной линии взаимодействия $\lambda v_{SL}(q)$. Хотя проблема учета эффектов межчастичного взаимодействия в различных корреляционных функциях имеет длительную историю, решение этой задачи остается актуальным до настоящего времени (см., например, [37–39] и цитируемую там литературу). По этой причине наиболее распространенным для поляризационного оператора является хорошо известное приближение хаотических фаз (random phase approximation (RPA)):

$$\begin{aligned} \Pi_{SL}^{\text{RPA}}(q, i\Omega_n) &= (2s+1) \lim_T \frac{1}{V} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{p}} \frac{f_0(\mathbf{p} - \mathbf{q}/2; T, \mu) - f_0(\mathbf{p} + \mathbf{q}/2; T, \mu)}{i\Omega_n + \varepsilon_0(\mathbf{p} - \mathbf{q}/2) - \varepsilon_0(\mathbf{p} + \mathbf{q}/2)}. \end{aligned} \quad (19)$$

Фактически в RPA полностью отсутствует учет эффектов межчастичного взаимодействия для поляризационного оператора. Другими словами, $\Pi_{SL}^{\text{RPA}}(q, i\Omega_n)$ является поляризационным оператором для идеального газа. В свою очередь для функции Грина $\chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n)$, согласно (18), (19), находим

$$\begin{aligned} \chi_{SL}^{\text{RPA}}(q, i\Omega_n) &= \Pi_{SL}^{\text{RPA}}(q, i\Omega_n) \times \\ &\times (1 - \lambda v_{SL}(q) \Pi_{SL}^{\text{RPA}}(q, i\Omega_n))^{-1}. \end{aligned} \quad (20)$$

Соотношение (20) можно считать справедливым при рассмотрении слабонеидеальных газов, которые характеризуются интегральной малостью межчастичного взаимодействия в силу малости параметра неидеальности $\gamma = \bar{n} \bar{v}_{SL} / \bar{\varepsilon}$, где $\bar{v}_{SL}$ и $\bar{\varepsilon}$ — соответственно характерные значения для фурье-преобразования парного потенциала межчастичного взаимодействия и энергии, приходящейся на одну частицу ($\gamma \ll 1$). В частности, при рассмотрении квазиклассической однокомпонентной плазмы условие $\gamma \ll 1$ соответствует приближению Дебая–Хюккеля.

Учитывая (10), (11), (19), (20), нетрудно убедиться, что в квазиклассическом приближении для функций $\Pi_{SL}^{\text{RPA}}(q, 0)$ и $\chi_{SL}^{\text{RPA}}(q, 0)$ имеют место равенства

$$\begin{aligned} T \lim_{h \rightarrow 0} \Pi_{SL}^{\text{RPA}}(q, 0) &= -\bar{n}, \\ T \lim_{h \rightarrow 0} \chi_{SL}^{\text{RPA}}(q, 0) &= -\bar{n}(1 + \lambda v_{SL}(q) \bar{n}/T)^{-1}. \end{aligned} \quad (21)$$

Подставляя (21) в (15)–(17), находим

$$\begin{aligned} \Delta \bar{\omega}_{SL}(\mu, T) &= \frac{1}{2} v_{SL}(0) \bar{n}^2 - \frac{1}{2} \bar{n} T \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} v_{SL}(q) \times \\ &\times \left\{ \ln \left(1 + \frac{v_{SL}(q) \bar{n}}{T} \right) - \frac{v_{SL}(q) \bar{n}}{T} \right\}, \end{aligned} \quad (22)$$

что соответствует известным результатам (см., например, [20, 25]) для поправки, обусловленной учетом межчастичного взаимодействия, к свободной энергии простой жидкости. Однако, как следует из представленного вывода соотношения (22), его справедливость имеет место только для значений параметра неидеальности $\gamma \ll 1$ при условии, что величина средней плотности числа частиц $\bar{n}$ определяется соотношением (10). Это означает, что равенство (22) может быть использовано для описания термодинамических свойств слабонеидеального квазиклассического газа, который характеризуется интегральной малостью межчастичного взаимодействия, и непригодно в отношении конденсированного состояния.

ТЕОРЕМА ВИРИАЛА И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ГИББСА ДЛЯ ПРОСТОЙ КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЙ ЖИДКОСТИ

Для выхода за рамки приближения слабонеидеального газа следует использовать точные соотношения квантовой статистической теории, в частности теорему вириала [32, 40], справедливость которой непосредственно связана с проблемой граничных условий для волновых функций [41, 42]. Особенности применения теоремы вириала для исследования термодинамических характеристик КС рассмотрены в [43, 44] и цитируемой там литературе.

Согласно проведенному выше рассмотрению, используем теорему вириала для простой квантовой жидкости в следующем виде [45]:

$$\begin{aligned} P(T, \mu) &= \frac{2}{3} \lim_T \frac{\langle \hat{H}_0 \rangle_{GC}}{V} + \frac{1}{2} v_{SL}(0) \bar{n}^2 + \\ &+ \frac{1}{6} \bar{n} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \{ 3v_{SL}(q) + \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{q}} v_{SL}(q) \} \times \\ &\times \{ S_{SL}^{(GC)}(q) - 1 \}, \end{aligned} \quad (23)$$

где $\langle \hat{H}_0 \rangle_{GC}$ — точная средняя кинетическая энергия, определяемая с использованием большого канонического распределения Гиббса:

$$\begin{aligned} \lim_T \frac{\langle \hat{H}_0 \rangle_{GC}}{V} &= (2s+1) \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \epsilon_0(p) f(p; T, \mu), \\ f(p; T, \mu) &= \langle \hat{a}_{\mathbf{p}0}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}0} \rangle_{GC}. \end{aligned} \quad (24)$$

Здесь $f(p; T, \mu)$ — точная функция распределения по импульсам как функция независимых переменных T и μ , для вычисления которой за рамками модели идеального газа следует использовать методы квантовой теории поля [10, 11, 29]. В этом случае, согласно (23), уравнение состояния при самосогласованном определении функций $f(p; T, \mu)$ и $S_{SL}^{(GC)}(q)$ полностью определяется двухчастичной температурной функцией Грина [46, 47]. Это означает, что в настоящее время буквальное применение соотношений (23), (24) возможно только для описания слабонеидеального квантового газа. Однако, если ограничиться рассмотрением квазиклассической простой жидкости, соотношения (24) можно существенно упростить [32, 40]:

$$\begin{aligned} \lim_{h \rightarrow 0} \lim_T \frac{\langle \hat{H}_0 \rangle_{GC}}{V} &= \frac{3}{2} \bar{n}(T, \mu) T, \\ \bar{n}(T, \mu) &= (2s+1) \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} f(p; T, \mu). \end{aligned} \quad (25)$$

При этом в (25) можно считать, что функция $\bar{n}(T, \mu)$ определяет точную среднюю плотность числа частиц в простой жидкости в соответствии с термодинамическим равенством $\bar{n}(T, \mu) = -(\partial P(T, \mu)/\partial \mu)_T$ [32, 40]. В результате, согласно (24), (25), в квазиклассическом пределе проблема установления термодинамических функций для простой жидкости, включая уравнение состояния, сводится к определению статического структурного фактора $S_{SL}^{(GC)}(q)$ при точном учете эффектов межчастичного взаимодействия.

Далее обратим внимание на следующее обстоятельство: с одной стороны, согласно (19), имеет место равенство

$$\lim_{h \rightarrow 0} \Pi_{SL}^{\text{RPA}}(q, 0) = \lim_{q \rightarrow 0} \Pi_{SL}^{\text{RPA}}(q, 0). \quad (26)$$

С другой стороны, как показано в [48], при точном учете межчастичного взаимодействия

$$\begin{aligned} \lim_{q \rightarrow 0} \Pi_{SL}^{(T)}(q, 0) &= - \left(\frac{\partial \bar{n}(T, \mu)}{\partial \mu} \right)_T \times \\ &\times \left(1 - v_{SL}(0) \left(\frac{\partial \bar{n}(T, \mu)}{\partial \mu} \right)_T \right)^{-1}, \\ T \lim_{q \rightarrow 0} \chi_{SL}^{(GC)}(q, 0) &= -\bar{n} \lim_{q \rightarrow 0} S_{SL}^{(GC)}(q), \end{aligned} \quad (27)$$

так что выполняется хорошо известное предельное соотношение для статического структурного фактора [32]:

$$\lim_{q \rightarrow 0} S_{SL}^{(GC)}(q) = \bar{n} T \kappa_T, \quad (28)$$

где $\kappa_T = -V^{-1}(\partial V / \partial P)_T$ — изотермическая сжимаемость. Равенство (28) следует из (27) в силу справедливости термодинамического соотношения [32]

$$\bar{n}^2 \kappa_T = (\partial \bar{n}(T, \mu) / \partial \mu)_T. \quad (29)$$

Решающее предположение для построения интерполяционного уравнения состояния для квазиклассической простой жидкости заключается в следующем. При выводе равенства (22), которое справедливо для слабонеидеального газа, использовано соотношение (21), которое, согласно (26), эквивалентно утверждению о том, что для характерных значений волновых векторов q функция $\Pi_{SL}^{RPA}(q, 0)$ мало изменяется в рассматриваемой области термодинамических параметров: $\Pi_{SL}^{RPA}(q, 0) \approx \Pi_{SL}^{RPA}(q \rightarrow 0, 0)$. С учетом (24)–(29) при аналогичном предположении в отношении точного статического поляризационного оператора $\Pi_{SL}^{(T)}(q, 0)$ приходим к замкнутому интегродифференциальному интерполяционному уравнению состояния для простой квазиклассической жидкости при фиксированном значении температуры T

$$P_{\text{int}}(T, \bar{n}) = \bar{n} T + \frac{1}{2} v_{SL}(0) \bar{n}^2 + \frac{1}{6} \bar{n} \times \\ \times \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \{3v_{SL}(q) + \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{q}} v_{SL}(q)\} \{S_{SL}^{(0)}(q) - 1\}, \quad (30)$$

$$S_{SL}^{(0)}(q) = -\frac{T}{\bar{n}} \frac{\Pi_{SL}^{(T)}(q \rightarrow 0, 0)}{1 - v_{SL}(q) \Pi_{SL}^{(T)}(q \rightarrow 0, 0)},$$

$$\Pi_{SL}^{(T)}(q \rightarrow 0, 0) = -(\alpha_T - v_{SL}(0))^{-1},$$

где $\alpha_T = \bar{n}^{-1}(\partial P_{\text{int}}(T, \bar{n}) / \partial \bar{n})_T$. Сходимость интеграла по волновым векторам в первом равенстве (30) обеспечивается условием “быстрого” убывания модельного парного потенциала $v_{SL}(q)$ с увеличением волнового вектора q : $\lim_{q \rightarrow \infty} v_{SL}(q) = 0$ (см. (4)).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный в настоящей работе анализ показывает, что на основе кулоновской модели вещества, представляющей собой совокупность взаимодействующих по закону Кулона электронов и ядер одного сорта, в рамках адиабатического приближения для подсистемы ядер простую жидкость можно рассматривать как систему ядер, которые взаимодействуют между собой посредством эффективного потенциала взаимодействия. Хотя этот эффективный потенциал не является парным, с точки зрения построения интерполяционного уравнения состояния простую жидкость сле-

дует рассматривать как модель исходных атомов, взаимодействующих между собой посредством модельного парного потенциала, имеющего фурье-преобразование. При этом показано, что полученные ранее результаты для интерполяционного уравнения состояния простой квазиклассической жидкости, которая характеризуется наличием фурье-преобразования для парного межчастичного потенциала взаимодействия, могут быть применены только для описания слабонеидеального газа.

Для выхода за рамки приближения слабонеидеального газа в настоящей работе использованы точные соотношения для термодинамических и корреляционных функций с использованием термодинамического потенциала Гиббса и на этой основе получено замкнутое интегродифференциальное уравнение для давления в простой квазиклассической жидкости.

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Беляев А.М., Воробьев В.С., Хомкин А.Л. Широкодиапазонное уравнение состояния воды // ТВТ. 1990. Т. 28. № 3. С. 348.
2. Воробьев В.С. Исследование равновесия жидкость–пар с помощью интерполяционного уравнения состояния // ТВТ. 1995. Т. 33. № 4. С. 557.
3. Воробьев В.С. Расчет дебаевских температур и коэффициентов Грюнайзена для инертных газов в области разрежения // ТВТ. 1996. Т. 34. № 2. С. 203.
4. Apfelbaum E.M., Vorob'ev V.S. Systematization of the Parameters of Substances due to Their Connection with Heat of Evaporation and Boyle Temperature // Int. J. Thermophys. 2020. V. 41. № 1. P. 8.
5. Apfelbaum E.M., Vorob'ev V.S. The Line of the Unit Compressibility Factor (Zero-Line) for Crystal States // J. Phys. Chem. B. 2020. V. 124. № 24. P. 5021.
6. Apfelbaum E.M., Vorob'ev V.S. Modified Virial Expansion and the Equation of State // Rus. J. Math. Phys. 2021. V. 28. № 2. P. 147.
7. Анфельбаум Е.М., Воробьев В.С. Универсальное уравнение состояния для критической и сверхкритических областей // ТВТ. 2021. Т. 59. № 6. С. 852.
8. Physics of Simple Liquids / Eds. Temperley H.N.V., Rowlinson J.S., Rushbrooke G.S. Amsterdam: North-Holland Publ. Company, 1968 (Физика простых жидкостей. Статистическая теория. Пер. с англ. / Под ред. Темперли Г., Роулинсона Дж., Рашбрука Дж. М.: Мир, 1971. 308 с.).
9. Воробьев В.С. К термодинамике леннард-джонсовских систем // ТВТ. 2004. Т. 42. № 3. С. 383.
10. Ebeling W., Kraeft W.D., Kremp D. Theory of Bound States and Ionization Equilibrium in Plasmas and Solids. Berlin: Akademie-Verlag, 1976. (Эбелинг В., Крефт В., Кремп Д. Теория связанных состояний и ионизационного равновесия в плазме и твердом теле. Пер. с англ. М.: Мир, 1979. 264 с.).

11. *Kraeft W.D., Kremp D., Ebeling W., Ropke G.* Quantum Statistics of Charged Particle Systems. Berlin: Akademie-Verlag, 1986 (*Крефт В., Кремп Д., Эбелинг В., Репке Г.* Квантовая статистика систем заряженных частиц. Пер. с англ. М.: Мир, 1988. 408 с.).
12. *Воробьев В.С., Юнгман В.С.* К расчету термодинамических функций газа многоэлектронных атомов // ТВТ. 1979. Т. 17. № 5. С. 897.
13. *Parr R.G., Yang W.* Density-functional Theory of Atoms and Molecules. N.Y.: Oxford University Press, 1989. 333 p.
14. *Бобров В.Б.* Статистическая термодинамика кулоновской системы и адиабатическое приближение // ТВТ. 2022. Т. 60. № 4. С. 496.
15. *Bobrov V.B., Trigger S.A., van Heijst G.J.F., Sokolov I.M.* Effective Pair Potential for Atoms in the Coulomb Model of a Substance // EPL. 2013. V. 101. № 3. P. 35002.
16. *Бобров В.Б.* О статистической теории разреженного газа в кулоновской модели вещества. Тожественность частиц и эффективный потенциал взаимодействия исходных атомов // ТВТ. 2017. Т. 55. № 2. С. 179.
17. *Воробьев В.С., Хомкин А.Л.* Приближение ближайшего соседа в термодинамике кулоновских систем и плазмы // ТМФ. 1976. Т. 26. № 3. С. 364.
18. *Бобров В.Б.* О свободной энергии жидкометаллической плазмы // ТВТ. 2016. Т. 54. № 3. С. 475.
19. *Зубарев Д.Н.* Вычисление конфигурационных интегралов для системы частиц с кулоновским взаимодействием // ДАН СССР. 1954. Т. 35. № 4. С. 757.
20. *Захаров А.Ю., Локтионов И.К.* Классическая статистика однокомпонентных систем с модельными потенциалами // ТМФ. 1999. Т. 119. № 1. С. 167.
21. *Guerin H.* Analytical Equation of State for Double Yukawa and Hard Core Double Yukawa Fluids: Application to Simple and Colloidal Fluids // Physica A. 2002. V. 304. № 3–4. P. 327.
22. *Lin Y.-Z., Li Y.-G., Lu J.-F.* Study on Analytical Solutions and Their Simplification for One-component Multi-Yukawa Fluids, and Test by Monte Carlo Simulation // Mol. Phys. 2004. V. 102. № 1. P. 63.
23. *Bahaa Khedr M., Osman S.M., Al Busaidi M.S.* New Equation of State for Double Yukawa Potential with Application to Lennard-Jones Fluids // Phys. Chem. Liquids. 2009. V. 47. № 3. P. 237.
24. *Локтионов И.К.* Математическое моделирование термодинамических свойств жидкости на основе двойного потенциала Юкавы. Аналитические результаты // ТВТ. 2019. Т. 57. № 5. С. 677.
25. *Локтионов И.К.* Уравнение состояния жидкости с двойным экспоненциальным потенциалом // ТВТ. 2021. Т. 59. № 2. С. 169.
26. *Huang K.* Statistical Mechanics. N.Y.–London: Wiley, 1963 (*Хуанг К.* Статистическая механика. Пер. с англ. М.: Мир, 1966. 520 с.).
27. *Норман Г.Э., Старостин А.Н.* Несостоятельность классического описания невырожденной плотной плазмы // ТВТ. 1968. Т. 6. № 3. С. 410.
28. *Бобров В.Б., Менделеев В.Я., Тригер С.А.* Точное соотношение для химического потенциала квазиклассической системы // ТВТ. 2015. Т. 53. № 4. С. 634.
29. *Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е.* Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: ГИФМЛ, 1962. 444 с.
30. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. Ч. 1. М.: Наука, 1976. 584 с.
31. *Бобров В.Б., Загородний А.Г., Тригер С.А.* Об особенностях фурье-преобразования для кулоновского потенциала в статистической теории // Краткие сообщения по физике ФИАН. 2015. № 11. С. 33.
32. *Balescu R.* Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics. N.Y.: Wiley, 1975 (*Балеску Р.* Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т. 1. Пер. с англ. М.: Мир, 1978. 405 с.).
33. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974. 752 с.
34. *Bobrov V.B., Trigger S.A.* The True Dielectric and Ideal Conductor in the Theory of the Dielectric Function of the Coulomb System // J. Phys. A: Math. Theor. 2010. V. 43. № 36. P. 365002.
35. *Бобров В.Б., Тригер С.А., Петров О.Ф.* О соотношении между микроканоническим и каноническим распределениями Гиббса // ТВТ. 2017. Т. 55. № 1. С. 154.
36. *Bobrov V.B.* The Relation between the Static Structure Factor and the “Density-Density” Response Function in the Longwavelength Limit // J. Phys.: Cond. Matt. 1990. V. 2. № 13. P. 3115.
37. *Бобров В.Б., Ключников Н.И., Тригер С.А.* Точные соотношения для структурного фактора кулоновской системы // ТМФ. 1991. Т. 89. № 2. С. 263.
38. *Ichimaru S.* Strongly Coupled Plasmas: High-Density Classical Plasmas and Degenerate Electron Liquids // Rev. Mod. Phys. 1982. V. 54. № 4. P. 1017.
39. *Dornheim T., Groth S., Bonitz M.* The Uniform Electron Gas at Warm Dense Matter Conditions // Phys. Rep. 2018. V. 744. P. 1.
40. *Зубарев Д.Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971. 411 с.
41. *Bobrov V.B., Trigger S.A., Zagorodny A.* Virial Theorem, One-Particle Density Matrix, and Equilibrium Condition in an External Field // Phys. Rev. A. 2010. V. 82. № 4. P. 044105.
42. *Bobrov V.B., Trigger S.A., van Heijst G.J.F., Schram P.P.J.M.* Virial Theorem for an Inhomogeneous Medium, Boundary Conditions for the Wave Functions, and Stress Tensor in Quantum Statistics // Phys. Rev. E. 2010. V. 82. № 1. P. 010102 (R).
43. *Bobrov V.B., Trigger S.A.* Virial Theorem and Gibbs Thermodynamic Potential for Coulomb Systems // Phys. Plasmas. 2014. V. 21. № 10. P. 100703.
44. *Бобров В.Б.* Об условиях самосогласования в статистической термодинамике кулоновской системы // ТВТ. 2020. Т. 58. № 5. С. 758.
45. *Bobrov V., Trigger S., Litinski D.* Universality of Phonon-Roton Spectrum in Liquids and Superfluidity of ^4He // Z. Naturforsch. A (ZNA). 2016. V. 71. № 6. P. 565.
46. *Бобров В.Б.* Термодинамика квантового газа и двухчастичная функция Грина // Письма в ЖЭТФ. 2017. Т. 106. № 6. С. 365.
47. *Бобров В.Б.* О статистической термодинамике квантовых газов // Физика низких температур. 2019. Т. 45. № 1. С. 151.
48. *Bobrov V.B., Klyuchnikov N.I., Trigger S.A.* Explicit Expressions for the Correlation Functions of the Coulomb and Neutral Systems in Longwavelength Limit // Physica A. 1992. V. 181. № 1–2. P. 156.

УДК 536.44: 536.63: 536.71

РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕТАНА ДО 30 МПА ПО НОВОМУ МАЛОКОНСТАНТНОМУ УРАВНЕНИЮ СОСТОЯНИЯ С РЕГУЛЯРНОЙ И МАСШТАБНОЙ ЧАСТЯМИ

© 2023 г. П. П. Безверхий¹, *, О. С. Дутова²¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, г. Новосибирск, Россия²Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, г. Новосибирск, Россия

*E-mail: ppb@niic.nsc.ru

Поступила в редакцию 14.06.2022 г.

После доработки 18.08.2022 г.

Принята к публикации 13.10.2022 г.

Проведен расчет теплоемкостей C_v , C_p и скорости звука W метана на основе нового термического уравнения состояния с небольшим числом регулируемых констант. Уравнение включает в себя новую регулярную часть с 13 коэффициентами и масштабную часть с шестью коэффициентами с регулярной переходной функцией, содержащей два подгоночных параметра. Для определения констант уравнения состояния использованы только (p , ρ , T)-данные CH_4 , данные по C_v , C_p и W не привлекались, кроме данных по изохорной теплоемкости C_v в идеально-газовом состоянии и значения C_v при 100 К на ветви для жидкости на кривой равновесия жидкость–пар. Расчетные величины C_v , C_p и W близки к экспериментальным и табличным значениям в регулярной области. В критической области при расчете используются универсальные критические показатели α , β , γ в соответствии с трехмерной моделью Изинга. Расхождения с табличными данными в критической области связаны с применением масштабного уравнения состояния. Проведено сравнение с результатами расчетов по известным кроссоверным уравнениям состояния для CH_4 . Среднеквадратичная погрешность описания давления CH_4 составляет $\sigma_p = 0.5\%$, среднее абсолютное отклонение -0.3% , погрешность в C_v — не более 5%.

DOI: 10.31857/S0040364423020035

ВВЕДЕНИЕ

Изучение термодинамических свойств метана необходимо при создании новых технологий для добычи и обработки природного газа, поэтому такие исследования проводятся в настоящее время как в чистых веществах, так и в жидких и газообразных смесях [1–3]. Для получения справочных таблиц по термодинамическим свойствам однокомпонентных веществ обычно применяются уравнения состояния (УС) в виде ряда, содержащие большое число подгоночных коэффициентов при членах с целыми и дробными степенями плотности ρ и температуры T , включая также члены экспоненциального типа [4–7]. Число подгоночных констант в этих уравнениях достигает 54 и более. Известные справочные таблицы для CH_4 [5] (1988 г.) рассчитаны по регулярному УС Шмидта–Вагнера [6] (32 подгоночные константы и 22 целых и дробных степенных индекса). Для расчета справочных таблиц по свойствам CH_4 в работе [7] (1991 г.) применено регулярное УС в виде ряда с 40 коэффициентами и 23 различными степенными и экспоненциальными показателями. Члены этого ряда, кроме степеней ρ и T , содержат также

и экспоненциальные функции от ρ и T . Для кривой равновесия жидкость–пар (бинодали) в [5, 7] предложены отдельные формы зависимостей $\rho(T)$ с девятью подгоночными константами, переходящие в критической области в выражения по масштабной теории. Несмотря на регулярный вид, УС [7] воспроизводит особенности поведения теплоемкости C_v и скорости звука W в критической области. Для получения подгоночных констант в таких УС используются практически все экспериментальные данные по термическим и калорическим свойствам. Расчет свойств по многоконстантным УС возможен, если доступна проверенная программа расчета и константы УС без опечаток. Это не всегда доступно для пользователей, которым требуется расчет свойств в областях состояния, где справочные таблицы не дают подробных сведений. Поэтому позже в [8] предложено более простое регулярное УС Спана–Вагнера (12 подгоночных констант и 9 дробных степенных индексов) для “технических” расчетов свойств метана и веществ метанового ряда. Техническое УС Спана–Вагнера [8] имеет более узкую область применения по ρ и T по сравнению с [7], погрешность описания p в

области состояний жидкости при $T < 120$ К более 10%. В этих УС критические условия не выполняются точно в реальной критической точке. Новые таблицы от 2002 г. [9], в которых также применено УС [7], дополнены справочными данными по вязкости и теплопроводности метана. Справочные таблицы [4, 5, 7, 9] рассчитаны по регулярным УС и не содержат данных в критической области из-за особенностей термодинамических свойств в критической точке, которые учитываются с помощью масштабной теории (скейлинга). С другой стороны, известное кроссоверное масштабное УС для метана [10] является крайне неудобным из-за неявного трансцендентного уравнения для вычисления параметра кроссоверной функции, что затрудняет его практическое применение. Для облегчения расчетов в [10, 11] предложены две модели кроссоверного УС, основанные на применении “классического” кубического УС с добавлением масштабных членов неявного вида и с трансформацией “классических” значений p и T в реальные [11]. Эти модели имеют 13 подгоночных параметров и дают более высокую погрешность при расчете C_v . В работе [12] для ряда углеводородов, в том числе для метана, на основе кроссоверного УС [13] предложено кроссоверное УС, которое получено введением кроссоверной функции в шестичленное разложение Ландау для удельной свободной энергии Гельмгольца с учетом сингулярной части. Для получения 18 подгоночных коэффициентов УС метана использовались все имеющиеся данные в критической области. Преимущество УС [12] состоит в небольшом числе членов в регулярной и масштабной частях, недостатки – в сложном способе расчета кроссоверной функции по неявному уравнению с нецелыми показателями степени, а также в неширокой области применения: $0.3 < p/p_c < 1.7$, $0.95 < T/T_c < 1.3$.

Разработанные в [14–21] комбинированные уравнения состояния (КУС), содержащие регулярную и масштабную части давления (p_{reg} и p_{scal}), с числом регулируемых констант до 20 имеют явную (непараметрическую) форму зависимости от p и T и регулярную кроссоверную функцию в явном виде. Эти уравнения применены для описания свойств SF_6 и CO_2 как в критической области, так и в области регулярного поведения. В качестве p_{reg} в данных КУС использованы регулярные УС [16–21], которые содержат от 8 до 13 подгоночных коэффициентов. Феноменологический подход к конструированию таких полуэмпирических УС для расчета p_{reg} дан в [22, 23]. Теоретическое обоснование уравнения для p_{scal} в явной форме, содержащее шесть системно-зависимых констант, приведено в [14, 15]. Наличие p_{reg} в КУС позволяет избежать применения неасимптотических добавочных членов, которые возникают при расширении области применения скейлинга и заметно усложняют

расчеты теплоемкостей и других тепловых функций. Масштабные УС в явном виде [17–21] легче применять для получения подгоночных коэффициентов и описания (p, ρ, T)-данных в сравнении с УС, в которых переменные p, ρ, T выражены в параметрическом виде [10, 11, 24].

Известные в литературе комбинированные модели для $p(p, T)$ явного вида содержат p_{reg} в виде ряда с целыми и дробными степенями, в которых, как правило, критические условия не выполняются. Например, в [25, 26] p_{reg} представляет чисто эмпирическую форму в отличие от УС [16–20] для p_{reg} , в которых часть членов имеет определенное физическое обоснование. В масштабной части УС [25] применяются скейлингоподобные эмпирические члены и содержится от 30 до 40 подгоночных коэффициентов. В [26] предложено УС, содержащее 108 подгоночных коэффициентов в p_{reg} и 17 коэффициентов в p_{scal} , для их вычисления в УС [26] привлечены данные по всем термическим и калорическим свойствам. По сравнению с [25, 26] КУС явного вида [17–21], в том числе уравнение, предложенное в данной работе, содержат до 22 регулируемых коэффициентов, для нахождения которых использованы (p, ρ, T)-данные.

Различные модификации p_{reg} в составе КУС для CO_2 и SF_6 [17–21] позволили рассчитать C_v с погрешностью от 5 до 10% в различных областях состояния при давлениях до 30 МПа и при плотностях ρ , меньших плотности жидкости ρ_l в тройной точке. Для расчета подгоночных коэффициентов в этих КУС [17–21] никакие данные по другим термодинамическим свойствам не использовались. Исключение составляет расчет C_v в идеальном состоянии, где применялись известные зависимости $C_v(T)$ идеального газа. С помощью дифференциальных уравнений термодинамики C_v, C_p и W рассчитывались по КУС, полученному при описании (p, ρ, T)-данных. Среднеквадратичная погрешность расчета давления s_p по этим КУС не превышает $\sim 0.7\%$ при строгом выполнении в критической точке трех известных физических условий.

В данной работе для расчетов термодинамических свойств CH_4 при p до 30 МПа и T от 100 К и выше предлагается КУС, содержащее p_{reg} и p_{scal} в явном виде. Модифицированный вид p_{reg} с 13 подгоночными коэффициентами разработан на основе регулярного УС с 10 подгоночными константами для метана [27]. Три из 13 коэффициентов этого УС связаны тремя условиями в критической точке и вычисляются по соответствующим формулам, содержащим остальные 10 коэффициентов. Как правило, при соблюдении этих условий для p_{reg} заметно возрастает погрешность описания (p, ρ, T)-поверхности в регулярной области, поэтому удачный выбор формы членов для p_{reg} обеспечи-

вает минимальную погрешность расчета термодинамических свойств. Для масштабной части p_{scal} в КУС используется асимметричная скейлинговая форма с шестью подгоночными коэффициентами, примененная ранее в [17–21] совместно с переходной функцией Y регулярного вида, которая обращается в нуль при $p = 0$ и $p = p_c$.

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ И АППРОКСИМАЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Аппроксимация экспериментальных (p , ρ , T)-данных для CH_4 новым комбинированным УС проведена в интервалах их измерений ($0 < p/p_c < 2.7$, $100 < T < 520$ К, $0 < p \leq 30$ МПа). Для этого использованы (p , ρ , T)-данные [28–31], полученные одно- и двухпоплавоочным методом измерения плотности в широкой области состояний CH_4 , которые считаются наиболее точными и согласованными (обзор экспериментальных (p , ρ , T)-данных приведен в [7]). К сожалению, (p , ρ , T)-данные малы и разрежены в широкой окрестности критической точки (в этой области содержится всего три изотермы [30]). Многоконстантное УС [7] с высокой точностью представляет эти данные всюду (за исключением критической области CH_4), что позволяет использовать табличные данные [7] для сравнения с рассчитанными величинами по КУС настоящей работы в тех областях состояния, где нет экспериментальных данных. Аппроксимационный (p , ρ , T)-массив (677 точек) для CH_4 сформирован из данных работ [28–31] до 30 МПа. Параметры критической и тройной точек для CH_4 взяты из [7]: $T_c = 190.564$ К, $\rho_c = 162.66$ кг/м³, $p_c = 4.5992$ МПа (как близкие к экспериментальным результатам из [30, 31]), $z_c = p_c/(\rho_c R T_c) = 0.2862887$, $T_t = 90.6941$ К, $\rho_t = 451.48$ кг/м³, $\omega_t = \rho_t/\rho_c = 2.775706$ (здесь и далее нижний индекс c означает критическое значение, индекс t – значение в тройной точке). Комбинированное УС имеет форму явной функции p , T и записывается в виде

$$p/p_c = (1 - Y)p_{\text{reg}}/p_c + Yp_{\text{scal}}/p_c. \quad (1)$$

УС (1) включает новую регулярную часть p_{reg} для аппроксимации (p , ρ , T)-данных в жидких и газовых состояниях вне критической области, сингулярную масштабную часть p_{scal} для критической области и переходную (кроссоверную) функцию

$$Y = \omega[(1 - \omega/\omega_t)^2/(1 - 1/\omega_t)^2] \times \times \operatorname{erfc}(\sqrt{\lambda}|\tau|) \exp(-\mu(\Delta\rho)^2), \quad (2)$$

где $t = T/T_c$, $\omega = \rho/\rho_c$, $\tau = t - 1$, $\Delta\rho = \omega - 1$ – относительные “расстояния” от критической точки; λ и μ – подгоночные константы, определяющие область влияния p_{scal} ; $\operatorname{erfc}(\sqrt{\lambda}|\tau|)$ – функция ошибок Лапласа, которая вычислялась с помощью ряда,

приведенного в [19]. Нуль функции Y , кроме $\omega = 0$, находится также и при $\omega = \omega_t$, что позволяет более эффективно гасить влияние p_{scal} при больших плотностях. Отметим, что Y не является функцией переключения между 0 и 1 в некоторой ограниченной области состояний между регулярной и масштабной областью, как в [32]. Существенное отличие Y от введенной в [32] функции переключения состоит в отсутствии границ кроссоверной области. Функция Y действует во всей области состояний, так же как и член p_{reg}/p_c в (1), который не исчезает в околоскритической области, а играет роль неасимптотической добавки. Асимптотическое представление p_{scal} также не имеет конкретной границы для области его применения. Отсутствие промежуточной области состояний с границами позволяет избежать проблемы возникновения “волн” в производных давления для расчета теплоемкости, характерных для [32]. Функция Y в данной форме успешно применялась ранее в [17–21].

В отличие от формы p_{reg} с 10 константами из [27], взятой здесь за основу, в данной работе предложен новый вид для p_{reg} с 13 подгоночными константами:

$$\begin{aligned} p_{\text{reg}}/p_c = & \frac{\omega t}{z_c} \{ 1 + A_1 (e^{1/t} - 1 - 1/t) \omega [1 - \omega/x^2] \times \\ & \times \varphi(\omega) - A_2 \omega/t - A_3 \omega (e^{-1/t} - 1) - A_6 \omega (e^{-2/t} - 1) + \\ & + A_4 (e^{2t} - 1 - 2/t) \omega [1 - 2\omega/x^2] \varphi^2(\omega) + \\ & + A_5 (e^{6/t} - 6/t) \omega^2 [2 - 5z_c \omega/x^2] \varphi^{5z_c}(\omega) + \\ & + A_7 \omega/x + A_8 \omega/x^2 + A_9 \omega^2/x^3 + A_{10} \omega^3/x^4 + \\ & + A_{11} t^{-14} \omega^3 (3 - 3\omega^3) e^{-\omega^3} + A_{12} t^{-3.5} \omega (1 - 2\omega^2) e^{-\omega^2} + \\ & + A_{13} t^{-6} \omega^5 [5 - 4\omega(p\gamma)^3] e^{-(p\gamma)^4} \}. \end{aligned} \quad (3)$$

В уравнении (3) $x = 1 - z_c \omega$, $\varphi(\omega) = \exp(-\omega/x)$, $p\gamma = \omega - 0.82(1/t + 2)$. Температурные функции при некоторых членах с A_i связаны с видом применяемого межмолекулярного потенциала [22, 33] и имеют некоторые отличия от функций из [27]. В (3) добавлены члены с A_{11} и A_{12} из регулярного “технического” УС [8], с которыми погрешность описания расчетного давления p_{reg} при малых и средних плотностях и на газовой ветви бинодали сводится к минимуму. Член с A_{13} позволяет с приемлемой погрешностью описать давление на изотермах жидкости и поведение теплоемкости C_v на ветви жидкости бинодали в области $100 < T < 140$ К. Константы A_5 , A_6 и A_{11} вычисляются по формулам, следующим из условий в критической точке:

$$\begin{aligned} p_{\text{reg}}^{\text{calc}}(\rho_c, T_c) = p_c^{\text{exp}} \left[\frac{\partial(p_{\text{reg}}/p_c)}{\partial\omega} \right]_{T_c, \rho_c}^{\text{calc}} &= 0, \\ \left[\frac{\partial^2(p_{\text{reg}}/p_c)}{\partial\omega^2} \right]_{T_c, \rho_c}^{\text{calc}} &= 0, \end{aligned} \quad (4)$$

и по значениям остальных A_i , получаемых при аппроксимации массива экспериментальных данных. Эти формулы громоздки и здесь не приводятся.

Сингулярная (масштабная) часть p_{scal} в (1) содержит величины p_c , ρ_c , T_c , подгоночные константы q , k , $M - a_p$, C_1 , b , a_p и выбрана с учетом асимметрии в форме [15]

$$\begin{aligned} p_{scal}/p_c = & 1 - k(q_p - q)^\gamma \Delta\rho |\Delta\rho|^{\delta-1} \times \\ & \times [1 + \delta\Delta\rho/(1 + \delta)] + k(\tau + q_p |\Delta\rho|^{1/\beta})^\gamma \times \\ & \times (\Delta\rho + \Delta\rho^2) - k \int_0^{\Delta\rho} x(\tau + q_p |x|^{1/\beta})^\gamma dx + \\ & + C_s \tau^{2-\alpha}/(2 - \alpha) + (M - a_p)(1 - a_p b)^{-1} \tau + \\ & + C_1 \tau^2/2 - b(M - a_p)(1 - a_p b)^{-1} h_1, \\ h_1 = & -k(q_p - q)^\gamma \Delta\rho |\Delta\rho|^{\delta-1} + \\ & + k(\tau + q_p |\Delta\rho|^{1/\beta})^\gamma \Delta\rho. \end{aligned} \quad (5)$$

Для удобства аппроксимации вместо точного вида членов $-k \int_0^{\Delta\rho} x(\tau + q_p |x|^{1/\beta})^\gamma dx + C_s \tau^{2-\alpha}/(2 - \alpha)$ в (5) использовалось выражение $-k |\tau|^{1-\alpha} \Delta\rho^2 \times \times \Delta\rho^2 (\tau/2 + \gamma\beta(1 + 2\beta)^{-1} q_p |\Delta\rho|^{1/\beta})$, которое возникает при разложении подынтегральной скобки $(\tau + q_p |x|^{1/\beta})^\gamma$ с точностью до членов первого порядка ввиду $\gamma \approx 1$. Здесь учтено, что при последующем интегрировании на нижнем пределе этот интеграл сокращается с членом $C_s \tau^{2-\alpha}/(2 - \alpha)$ [15]. Необходимо заметить, что для расчета поведения термодинамических функций в скейлинговой области по температурным производным от p_{scal} следует пользоваться выражением (5), содержащим интеграл (а не его разложение). В уравнении (5) k — коэффициент сжимаемости в асимптотической зависимости $p_c K_T = \tau^{-\gamma}/k$ на критической изохоре. Величина q в (5) является коэффициентом в асимметричной форме пограничной кривой (бинодали) $\Delta\rho_{bin} = \pm(-\tau/q)^\beta + B_1(-\tau)^{1-\alpha}$, $B_1 = -bk \times 2.5314112\gamma\beta/q^{2\beta}$, $q_p = 4.0015q$ [15, 20]. Значения $q = 0.191519$, $B_1 = -0.60439$ получены аппроксимацией экспериментальной бинодали CH_4 [31]. Индексы γ , β , α и $\delta = (\gamma + \beta)/\beta$ являются критическими показателями, их значения $\beta = 0.3255$, $\gamma = 1.239$, $\alpha = 0.11$ взяты в согласии с трехмерной моделью Изинга [34, 35]. $C_s = k\beta\gamma V(\alpha - 1, 2\beta)/q_p^{2\beta}$, $V(\alpha - 1, 2\beta)$ — бэта-функция Эйлера [36], равная 2.6396, α — индекс теплоемкости в температурной зависимости C_v на критической изохоре $\rho = \rho_c$, $M - a_p = s_c T_c/p_c - a_p$, s_c — значение критической эн-

тропии на единицу объема, a_p — константа преобразований Покровского [37]. Асимметричное УС (5) отличается от симметричного УС [17] наличием дополнительного члена, пропорционального скейлинговому полю h_1 , и коэффициента асимметрии b , а также модификацией подгоночного коэффициента $M - a_p$ при линейном члене по τ [15]. Очевидно, что коэффициент асимметрии b в УС (5) не может быть получен независимо из подгонки к (p, ρ, T) -данным CH_4 , так как он непосредственно связан с асимметричным членом в выражении для бинодали ($bk = -0.2018609$) и зависит от значения коэффициента сжимаемости k , получаемого при аппроксимации всего массива (p, ρ, T) -данных.

Методика, применяемая при минимизации квадратичного функционала относительных отклонений расчетных давлений p_{calc} от p_{exp} , подробно описана в [17]. Аппроксимационный (p, ρ, T) -массив включает 29 изотерм и данные на бинодали в интервалах $0.67 \text{ кг/м}^3 < \rho < 440 \text{ кг/м}^3$, $100 < T < 520 \text{ К}$, $0 < p \leq 30 \text{ МПа}$. Константы КУС (1) приведены в таблице. Следует отметить, что из-за малого количества изотерм в критической области параметр λ , отвечающий за температурный интервал влияния масштабных законов в кроссоверной функции Y и определенный по (p, ρ, T) -данным, оказался меньше, чем величина λ , необходимая для корректного описания околоскритической изохоры C_v (таблица). Константа $A_{13} = 0.0000050394$, определенная по (p, ρ, T) -данным, применялась для расчета p_{reg} и производных от p_{reg} , однако для корректного расчета C_v на ветви жидкости бинодали величина $A_{13} = -0.000008734$ была определена по экспериментальному значению C_v [38] на этой ветви при $T = 100 \text{ К}$ и применялась только для расчетов регулярной части C_v . Как показали расчеты, влияние члена с A_{13} регулярного УС (3) становится заметным при $\rho > 370 \text{ кг/м}^3$ и $T < 140 \text{ К}$, в других областях этот член и его производные малы и не влияют на расчетные величины. Среднеквадратичная погрешность аппроксимации (p, ρ, T) -данных для CH_4 по давлению σ_p , определенная с помощью УС (1), составила 0.48%, среднее абсолютное отклонение расчетного давления — 0.29%, плотности — 0.40%.

На рис. 1 представлены относительные отклонения расчетных давлений $\delta p = 100(p_{exp} - p_{calc})/p_{exp}$ по УС (1) от массива аппроксимируемых (p, ρ, T) -данных [28–31]. Отклонения $\delta p = 100(p_{exp} - p_{calc})/p_{exp}$, которые оценивались по линейным отклонениям давления Δp согласно формуле $(p_{exp} - p_{calc})/p_{exp} = (\Delta p/p)/[(p/p)(\partial p/\partial p)_T]$, не превышают 0.1% в области $1.5 < \omega < 2.8$, в критической области при

$\omega \sim 1$ возрастают до 5% из-за малости производной $(\partial p / \partial p)_T$. Непосредственный расчет p_{calc} и отклонений δp по КУС (1), при котором значения T_{exp} , p_{exp} считались точными, дал такие же результаты.

РАСЧЕТ ТЕПЛОЕМКОСТЕЙ C_v , C_p И СКОРОСТИ ЗВУКА W

Коэффициенты УС (1) применены для вычисления теплоемкости C_v по хорошо известному соотношению термодинамики, которое включает производную $[\partial^2(p/p_c)/\partial t^2]_\omega$:

$$C_v = C_{v,\text{reg}} - z_c R t \int_0^{\omega_1} Y [\partial^2(\Delta p_{sr}) / \partial t^2]_\omega \omega^{-2} d\omega - \\ - 2 z_c R t \int_0^{\omega_1} [\partial(\Delta p_{sr}) / \partial t]_\omega (\partial Y / \partial t)_\omega \omega^{-2} d\omega - \\ - z_c R t \int_0^{\omega_1} (\Delta p_{sr}) (\partial^2 Y / \partial t^2)_\omega \omega^{-2} d\omega, \quad (6)$$

где $\Delta p_{sr} = (p_{\text{scal}} - p_{\text{reg}}) / p_c$, ω_1 — значение ω на верхнем пределе при интегрировании по ω ,

$$\partial Y / \partial t = -2\sqrt{\lambda/\pi\omega} [(1 - \omega/\omega_t)^2 / (1 - 1/\omega_t)^2] \times \\ \times \exp(-\lambda\tau^2 - \mu\Delta p^2), \\ \partial^2 Y / \partial t^2 = 4\lambda\sqrt{\lambda/\pi} \tau\omega [(1 - \omega/\omega_t)^2 / (1 - 1/\omega_t)^2] \times \\ \times \exp(-\lambda\tau^2 - \mu\Delta p^2).$$

Интегралы в (6) не выражаются в элементарных функциях (за исключением регулярной части теплоемкости $C_{v,\text{reg}}$) и рассчитывались численно. В уравнении (6) $C_{v,\text{reg}}$ находилась по константам $A_1, A_3-A_6, A_{11}-A_{13}$ согласно выражению

$$C_{v,\text{reg}} = C_{v,\text{id}} - R t \{ A_1 e^{(1/t)} / t^3 \omega \varphi(\omega) - A_3 \omega e^{(-1/t)} / t^3 - \\ - 4 A_6 \omega e^{(-2/t)} / t^3 + 4 A_4 \omega \varphi^2(\omega) e^{(2/t)} / t^3 + \\ + 36 A_5 \omega^2 (\varphi(\omega))^{5z_c} e^{(6/t)} / t^3 + 14 \times 13 A_{11} t^{(-15)} \omega^3 \times \\ \times \exp(-\omega^3) + 3.5 \times 2.5 A_{12} t^{(-4.5)} \omega \exp(-\omega^2) + \\ + 2 A_{13} t^{-7} \omega^5 [15 + 24 \times 0.82 (py)^3 / t - \\ - 6(0.82)^2 (py)^2 / t^2 + \\ + 8(0.82)^2 (py)^6 / t^2] \exp(-(py)^4) \}, \quad (7)$$

где $C_{v,\text{id}}$ — вклад теплоемкости разреженного газа, который вычислялся для CH_4 по интерполяционной формуле, приведенной в [7].

Чтобы вычислить C_v (6) вблизи и вдали от критической точки, применялись следующие выражения для температурных производных от p_{scal} :

Системно зависимые константы комбинированного уравнения состояния (1)

Коэффициент	Значение
Регулярное УС (3)	
A_1	0.053384214
A_2	1.78806772
A_3	-0.074364572
A_4	-0.011325276
A_5 (расчет по условиям (4))	-0.0003954283
A_6 (расчет по условиям (4))	0.51090301
A_7	0.38496324
A_8	0.042439395
A_9	0.0019902140
A_{10}	-0.0001654904
A_{11} (расчет по условиям (4))	-0.0050750180
A_{12}	-0.095702032
A_{13}	0.0000050394 ^a
A_{13}	-0.0000087340 ^b

Масштабное УС (5)

$M - a_p$	5.95075551
q	0.191519
k	7.578
C_1	-11.50
a_p	0.26
b	-0.2018609/ k

Кроссоверная функция $Y(2)$

λ	230.528 ^a
λ	650.530 ^b
μ	28.57
ω_t	2.775606

^a Значения A_{13} и λ для расчета давления и производных от давления.

^b Значения A_{13} для расчета теплоемкости $C_{v,\text{reg}}$, λ — для расчета C_v , C_p и W .

$$(\partial p_{\text{scal}} / \partial t)_\omega / p_c = k\gamma (\tau + q_p |\Delta\rho|^{1/\beta})^{\gamma-1} (\Delta\rho + \Delta\rho^2) - \\ - k\gamma \int \Delta\rho (\tau + q_p |\Delta\rho|^{1/\beta})^{\gamma-1} d\Delta\rho + C_1 \tau + \\ + [(M - a_p) / (1 - a_p b)] \times \\ \times [1 - b k \gamma \Delta\rho (\tau + q_p |\Delta\rho|^{1/\beta})^{\gamma-1}], \\ \left(\frac{\partial^2(p_{\text{scal}}/p_c)}{\partial t^2} \right)_\omega = k\gamma(\gamma-1) (\tau + q_p |\Delta\rho|^{1/\beta})^{\gamma-2} \times \\ \times (\Delta\rho + \Delta\rho^2) - k\gamma(\gamma-1) \int \Delta\rho (\tau + q_p |\Delta\rho|^{1/\beta})^{\gamma-2} \times \\ \times d\Delta\rho + C_1 - (M - a_p)(1 - a_p b)^{-1} \times \\ \times b k \gamma(\gamma-1) \Delta\rho (\tau + q_p |\Delta\rho|^{1/\beta})^{\gamma-2}. \quad (8)$$

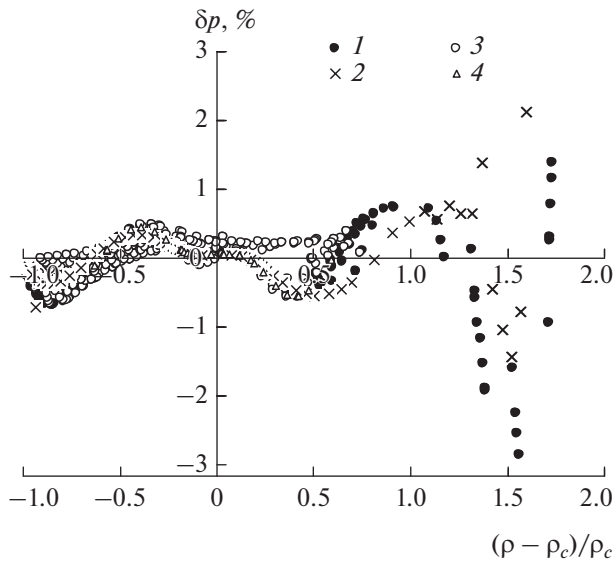


Рис. 1. Отклонения $\delta p = 100(p_{\text{exp}} - p_{\text{calc}})/p_{\text{exp}}$ давлений p_{calc} , рассчитанных по КУС (1), от p_{exp} на 29 изотермах и бинодали [28–31]: 1 – $T < T_c$, 2 – бинодаль, 3 – $T > T_c$, 4 – $T \sim T_c$.

При вычислении в выражениях (8) интегралы заменялись быстросходящимися рядами, которые имеют разную форму при $\tau < 0$ и $\tau > 0$ [17, 20].

При расчете C_v по (6) вдоль изотерм в области жидкого состояния ($\omega > 1$) обнаружено при возрастании ω ($\Delta p > 0.5$) недостаточно быстрое убывание вкладов в C_v от интегралов в (6), содержащих Δp_{sr} , $\partial(\Delta p_{\text{sr}})/\partial t$, которые дают некоторый остаток при прохождении критической области при численном интегрировании по ω от нуля до заданного значения ω_1 . Поэтому при расчете C_v в области жидкости применялась специальная процедура замены значения T_c в кроссоверной функции $Y(\tau, \Delta p)$ и ее температурных производных в (6) на значения температуры T_s ветви жидкости спинодали, соответствующей плотности, при которой рассчитывается C_v . T_s вычислялась по значению ω_1 на верхнем пределе интегралов в (6) согласно формуле

$$\omega_1 - 1 = \pm(-\tau_s/q_s)^\beta + B_2(-\tau_s)^{1-\alpha},$$

где $\tau_s = T_s/T_c - 1$, $q_s = 2.4196q$, $B_2 = -bk\gamma\beta[(q_p - q_s)^{\gamma-1} \times q_s^{\alpha-1}(1-\alpha)^{-1} + 2.6396q_p^{-2\beta}] = -1.9413189 bk$ [15].

В критической области эта замена не оказывает влияния, поскольку величины T_s близки к T_c , а при $\omega > 1$ и $T > T_c$ температурный множитель в $Y(\tau, \Delta p)$ с новым $\tau = (T - T_s)/T_s$ быстро гасит влияние вклада критической области в C_v . Для области $\omega > 1$ и $T < T_c$ применялись значения T_s , получаемые при

“зеркальном” отражении ветви жидкости $\tau_s(\Delta p)$ спинодали относительно линии $T = T_c$ ($\tau = 0$). Для расчетов C_v вдоль изохор при заданном ω_1 в области жидкого состояния при $T < T_c$ ($\tau < 0$) и $\omega_1 > 1.15$ применялась дополнительная процедура исключения сингулярного вклада в интегралы (6) при численном интегрировании по плотности за исключением интервала $-0.15 < \Delta p < 0.15$ в критической области (соответствует интервалу $-0.01 < \tau < 0$), если при этом значения $|\Delta p|_{\text{bin}}$ на бинодали при заданной температуре находились внутри данного интервала. Это позволяет произвести “обрезание” сингулярного вклада в C_v , если изохора находится в области состояний жидкости.

Вычисление C_p проводилось в согласии с общей формулой термодинамики

$$C_p = C_v + z_c R t \omega^{-2} \left[\frac{\partial(p/p_c)}{\partial t} \right]_{\omega} / \left[\frac{\partial(p/p_c)}{\partial \omega} \right]_t, \\ \left[\frac{\partial(p/p_c)}{\partial t} \right]_{\omega} = \frac{\partial(p_{\text{reg}}/p_c)}{\partial t} + \Delta p_{\text{sr}} \frac{\partial Y}{\partial t} + Y \frac{\partial(\Delta p_{\text{sr}})}{\partial t}, \quad (9) \\ \left[\frac{\partial(p/p_c)}{\partial \omega} \right]_t = \frac{\partial(p_{\text{reg}}/p_c)}{\partial \omega} + \Delta p_{\text{sr}} \frac{\partial Y}{\partial \omega} + Y \frac{\partial(\Delta p_{\text{sr}})}{\partial \omega}.$$

Формула (9) при подстановке выражений для производных принимает вид:

$$C_p = C_v + R z_c t \omega^{-2} \frac{(Cp3 + Cp2 + Cp1)^2}{Cp6 + Cp5 + Cp4},$$

где

$$Cp1 = \text{erfc}(\sqrt{\lambda}|\tau|)\omega(1 - \omega/\omega_1)^2 \times \\ \times (1 - 1/\omega_1)^{-2} e^{-\mu(\Delta p)^2} \left[\frac{\partial(\Delta p_{\text{sr}})}{\partial t} \right]_{\omega}, \\ Cp2 = -2\sqrt{\lambda/\pi e}^{-\lambda\tau^2} \omega[(1 - \omega/\omega_1)/(1 - 1/\omega_1)]^2 \times \\ \times e^{-\mu(\Delta p)^2} (\Delta p_{\text{sr}}), \\ Cp3 = \omega z_c^{-1} \{ 1 + A_1 [e^{1/t}(1 - t^{-1}) - 1] \omega(1 - \omega/x^2) \varphi - \\ - A_3 \omega [e^{-1/t}(1 + t^{-1}) - 1] - A_6 \omega [e^{-2/t}(1 + 2t^{-1}) - 1] + \\ + A_4 \omega [e^{2/t}(1 - 2t^{-1}) - 1] (1 - 2\omega/x^2) \varphi^2 + \\ + A_5 e^{6/t} (1 - 6t^{-1}) \omega^2 (2 - 5z_c \omega x^{-2}) \varphi^{5z_c} + \\ + A_7 \omega/x + A_8 \omega/x^2 + A_9 \omega^2/x^3 + A_{10} \omega^3/x^4 - \\ - 13A_{11} t^{-14} \omega^3 (3 - 3\omega^3) e^{-\omega^3} - 2.5A_{12} t^{-3.5} \omega \times \\ \times (1 - 2\omega^2) e^{-\omega^2} - A_{13} t^{-6} \omega^5 [25 - 20\omega(py)^3 + \\ + 12 \times 0.82\omega(py)^2/t + 20 \times 0.82(py)^3/t - \\ - 16 \times 0.82\omega(py)^6/t] \exp(-(py)^4) \},$$

$$\begin{aligned}
Cp4 &= \operatorname{erfc}(\sqrt{\lambda}|\tau|) \left[\frac{(1 - \omega/\omega_t)^2}{(1 - 1/\omega_t)} \right] \times \\
&\times \left[1 - \frac{2(\omega/\omega_t)}{(1 - \omega/\omega_t)} - 2\mu\omega(\Delta\rho) \right] e^{-\mu(\Delta\rho)^2} (\Delta p_{\text{sr}}), \\
Cp5 &= \operatorname{erfc}(\sqrt{\lambda}|\tau|) \omega(1 - \omega/\omega_t)^2 \times \\
&\times (1 - 1/\omega_t)^{-2} e^{-\mu(\Delta\rho)^2} \left[\frac{\partial(\Delta p_{\text{sr}})}{\partial\omega} \right]_t, \\
Cp6 &= \left[\frac{\partial(p_{\text{рег}}/p_c)}{\partial\omega} \right]_t = t z_c^{-1} \{ 1 + A_1 a_2 \omega x^{-2} \times \\
&\times (2x^2 - 4\omega - 2z_c \omega^2/x + \omega^2 x^{-2}) \varphi - A_2 2\omega/t - \\
&- 2(A_3 a_1 + A_6 a_3) \omega + A_4 a_4 2\omega x^{-2} (x^2 - 4\omega - \\
&- 2z_c \omega^2/x + 2\omega^2 x^{-2}) \varphi^2 + A_5 a_5 \omega^2 x^{-2} [6x^2 - \\
&- 20z_c \omega - 10z_c \omega/x + 25z_c^2 \omega^2 x^{-2}] \varphi^{5z_c} + \\
&+ A_7 \omega(1 + x)x^{-2} + 2A_8 \omega/x^3 + 3A_9 \omega^2/x^4 + \\
&+ 4A_{10} \omega^3/x^5 + 3A_{11} t^{-14} \omega^3 (4 - 10\omega^3 + 3\omega^6) e^{-\omega^3} + \\
&+ 2A_{12} t^{-3.5} \omega(1 - 5\omega^2 + 2\omega^4) e^{-\omega^2} + 2A_{13} t^{-6} \omega^5 \times \\
&\times [15 - 24\omega(py)^3 - 6\omega^2(py)^2 + 8\omega^2(py)^6] e^{-(py)^4} \}, \\
a_1 &= (e^{-1/t} - 1), \quad a_2 = (e^{1/t} - 1 - 1/t), \\
a_3 &= (e^{-2/t} - 1), \quad a_4 = (e^{2/t} - 1 - 2/t), \\
a_5 &= (e^{6/t} - 6/t).
\end{aligned}$$

Равновесная адиабатическая скорость звука W рассчитана по стандартной формуле, которая при подстановке выражений для производных записывается в размерном виде

$$\begin{aligned}
W &= (p_c/R)^{0.5} [Cp4 + Cp5 + Cp6 + \\
&+ (Cp3 + Cp2 + Cp1)^2 z_c t / (\omega^2 C_v)]^{0.5}.
\end{aligned} \quad (10)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ТЕПЛОЕМКОСТИ И СКОРОСТИ ЗВУКА

Отметим, что экспериментальные и табличные данные по C_p , C_v [1–4, 7, 38–42] и скорости звука W [3, 43–47] для CH_4 на изохорах и изобарах (за исключением аппроксимационной формулы для расчета $C_{v,\text{id}}$ [7] и одного значения $C_{v,\text{liq}}$ (100 К) [38] на ветви жидкости бинодали) привлекались только для сравнения со значениями C_v , получаемыми расчетом по формулам (6)–(10) с использованием констант КУС (1).

На рис. 2 видно хорошее совпадение расчетных кривых C_v по (6) (сплошные линии) вдоль изохор $\rho > \rho_c$ с экспериментальными данными [38, 40, 41] в области $\omega > 1$ ($\Delta\rho > 0$), пунктирными линиями показаны расчетные изохоры C_v по УС [8]. На околкритической изохоре $162.9 \text{ кг/м}^3 \sim \rho_c$ значения C_v из [38] при $\tau < 0.05$ (область приме-

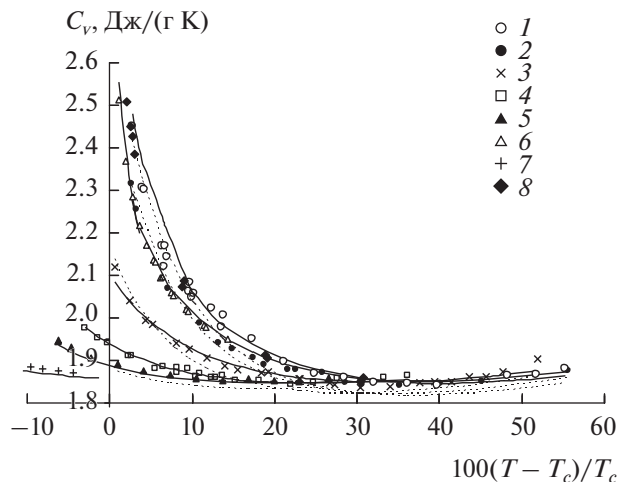


Рис. 2. Теплоемкость C_v на изохорах при $\rho > \rho_c$: точки – экспериментальные данные, сплошные линии – расчет по (6), пунктирные линии – расчет по УС [8]; 1 – 162.9 кг/м^3 ($\sim \rho_c$), 2 – 189.5 , 3 – 229.9 , 4 – 267.5 , 5 – 289.2 [38]; 6 – 189.3 , 7 – 328.7 [40]; 8 – 160.7 ($\sim \rho_c$) [41].

ния скейлинга) ниже расчетной кривой до $\sim 2\%$, возможно, из-за осреднения на большом интервале температуры в $5\text{--}7 \text{ К}$ ($\Delta\tau \sim 0.03$), характерном для измерений в [38].

Для $\rho < \rho_c$ расчетная кривая теплоемкости C_v по (6) в пределах экспериментальной погрешности совпадает с имеющейся одной экспериментальной кривой C_v на изохоре $\rho = 128.0 \text{ кг/м}^3$ [38]. Кривая C_v , рассчитанная по регулярному УС [8] вдоль данной изохоры, проходит до 3% ниже данных [38] при $0.1 < \tau < 0.4$ в регулярной области аналогично штриховым кривым на рис. 2 при $\rho > \rho_c$.

Сравнение расчетных кривых C_v на изохорах, близких к ρ_c , с экспериментальными данными [38, 41] в критической области представлено на рис. 3 в зависимости от принятых значений T_c данной работы и T_c [41], где получены подробные данные C_v вблизи T_c . Расчетные кривые (6) хорошо согласуются с данными [38, 41] во всей области значений $\log \tau > -2.5$. При $\log \tau < -2.5$ наблюдаются расхождения расчетных значений (линия 4) и эксперимента (точки 1) при T_c , принятой для КУС (1). Штриховая линия 5, рассчитанная по (6) при $T_c = 190.663 \text{ К}$ [41], лучше согласуется с экспериментальными точками 2 [41], отнесенными к той же T_c .

Сравнение результатов расчета C_p (9) с экспериментальными данными [39, 42] на изобарах в критической области, а также с кривой по УС [7], приведено на рис. 4. Очевидно хорошее совпадение расчетных кривых C_p (9) с данными [39, 42], которые не использовались при нахождении коэффициентов КУС (1), и с табличными данными

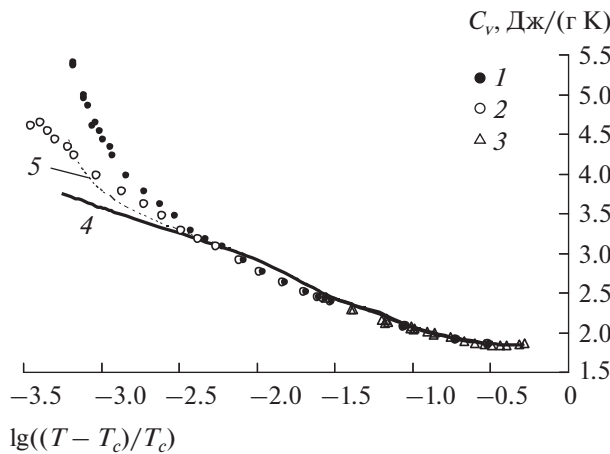


Рис. 3. Теплоемкость C_v на околокритических изохомах $\rho \sim \rho_c$: 1–3 – эксперимент; 1 – $\rho = 160.7 \text{ кг/м}^3$ [41], 3 – 163.2 кг/м^3 [38], $T_c = 190.564 \text{ К}$ из данной работы; 2 – $\rho = 160.7 \text{ кг/м}^3$, $T_c = 190.663 \text{ К}$ [41]; расчет: 4 – $\rho = 163.2 \text{ кг/м}^3$, T_c данной работы; 5 – 160.7 кг/м^3 , T_c из [41].

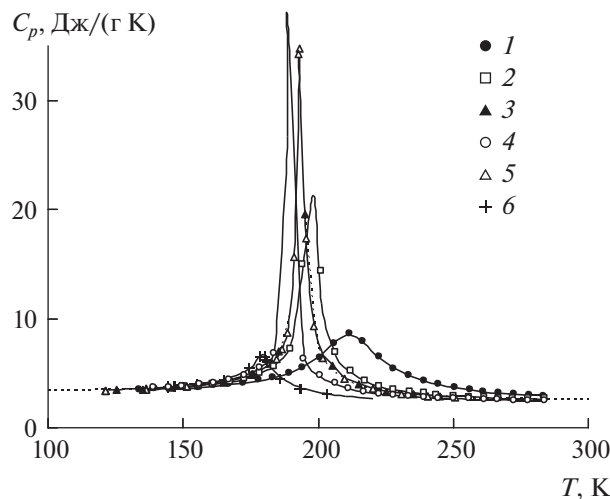


Рис. 4. Теплоемкость C_p на изообах в критической области: точки – эксперимент, сплошные линии – расчет по (9), пунктир – расчет по УС [7] при $p = 5 \text{ МПа}$; 1 – 8.274 МПа , 2 – 5.516 , 3 – 5.00 , 4 – 4.30 [39]; 5 – 5.00 , 6 – 3.20 [42].

[7], рассчитанными по УС [7], константы которого определены с привлечением данных по тепловым свойствам.

На рис. 5 экспериментальные данные C_p [3] на изотермах $T \geq 250 \text{ К}$ в регулярной области при p до 30 МПа совпадают с расчетными кривыми C_p (9).

Расчет $C_p(T)$ на изообах по уравнению (9) показал хорошее совпадение с данными [1–3, 39, 42] в области температур от 100 до 400 К и давлений

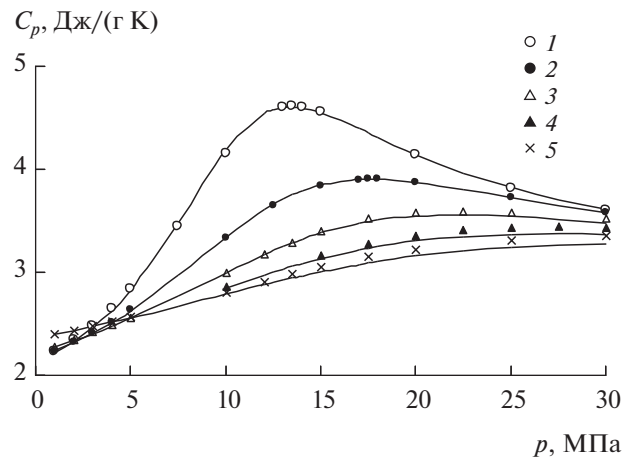


Рис. 5. Теплоемкость C_p на изотермах при $T > T_c$ в зависимости от давления в регулярной области: точки – экспериментальные данные [3], сплошные линии – расчет по (9); 1 – $T = 250 \text{ К}$, 2 – 275 , 3 – 300 , 4 – 325 , 5 – 350 .

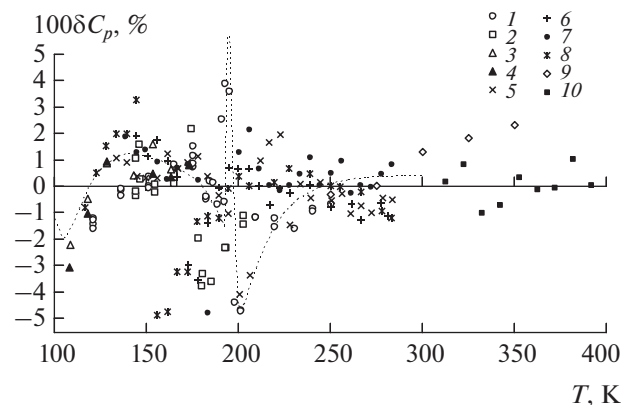


Рис. 6. Отклонения $\delta C_p = (C_{p,\text{exp}} - C_{p,\text{calc}}) / C_{p,\text{exp}}$ на изообах от расчетных значений $C_{p,\text{calc}}$ по (9); эксперимент: 1 – 5.0 МПа , 2 – 3.2 [42]; 3 – 4.33 , 4 – 6.40 [1]; 5 – 8.274 , 6 – 2.413 , 7 – 4.30 , 8 – 1.034 [39]; 9 – 30.0 [3]; 10 – 20.68 [2]; штриховая линия – отклонения табличных данных C_p [7] при 5 МПа от расчетных C_p (9).

до 30 МПа (рис. 6). Отклонения большинства экспериментальных точек от расчетных кривых находятся в интервале от -4 до $+3\%$, что соответствует погрешности измерений. Максимальные отклонения от табличных данных при 5 МПа [7] (штриховая линия) находятся в области вблизи T_c , что, видимо, является следствием учета масштабной части p_{scal} (5) в УС (1) по сравнению с УС [7].

На рис. 7 приведены кривые C_v , рассчитанные по формуле (6) в данной работе (линии 2)

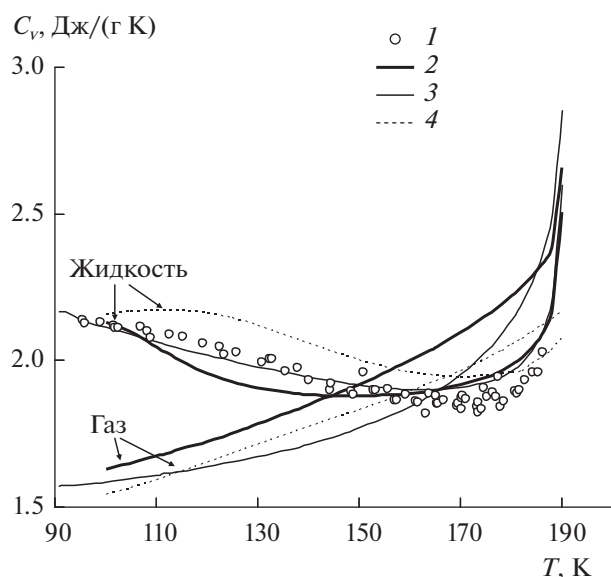


Рис. 7. Поведение C_v на ветвях бинадаль: 1 – эксперимент [38]; 2 – (6), данная работа; 3 – УС [7]; 4 – табличные данные [4].

на бинадаль вдоль ветви газа и жидкости, в сравнении с табличными данными [7] (линии 3) и [4] (линии 4). Экспериментальные данные C_v на бинадаль имеются только для ветви жидкости 1 [38]. При расчете $C_{v, \text{рег}}$ (7) применен коэффициент $A_{13} = -0.0000087340$ из регулярного УС (3), определенный по экспериментальному значению C_v при 100 К [38]. Максимальное отклонение значений C_v (6) на ветви жидкости в интервале

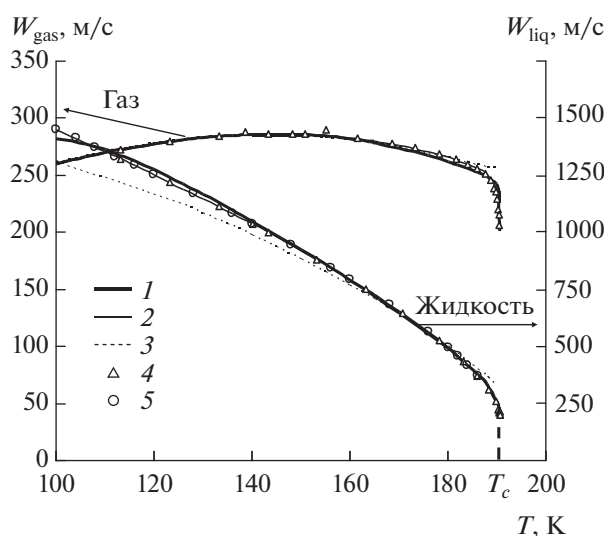


Рис. 8. Скорость звука W вдоль бинадаль: 1 – расчет по (10), данная работа; 2 – УС [7]; 3 – табличные данные [4]; эксперимент: 4 – [46], 5 – [44].

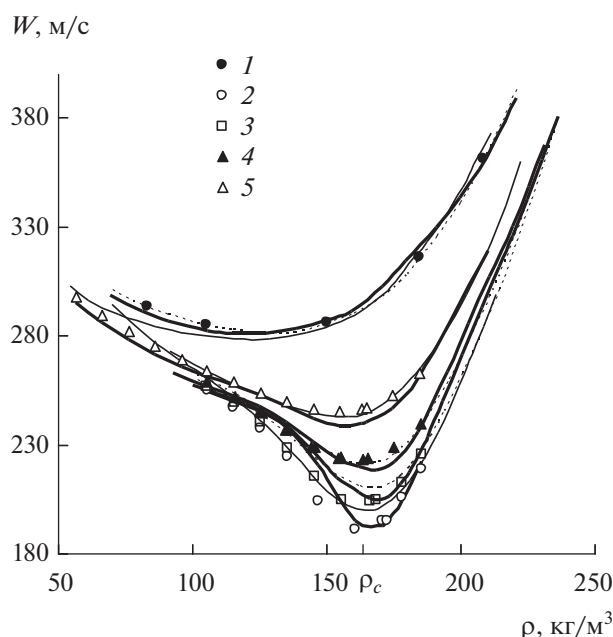


Рис. 9. Скорость звука W на изотермах вблизи T_c : жирные линии – данная работа, (10); тонкие (200.16, 193.05, 190.86 К) – расчет по кроссоверному УС [48]; штриховые (200.16, 191.46, 190.86 К) – УС [7]; эксперимент: 1 – 200.16 К [43], 2 – 190.63, 3 – 190.86, 4 – 191.46, 5 – 193.05 [46].

110 < T < 140 К от кривой [7] (линия 3) не превышает 4%, что находится в пределах погрешности данных [38]. Кривые C_v на газовой ветви бинадаль, рассчитанные по регулярным УС [7] и [4], лежат ниже кривой 2, при расчете которой учтены регулярные и масштабные вклады в C_v (6) и которая лучше отражает реальное поведение C_v .

Скорости звука W_{calc} , рассчитанные по (10) вдоль газовой ветви и ветви жидкости пограничной кривой (рис. 8, линии 1), показывают хорошее совпадение с экспериментальными данными [44, 46]. В области 110 < T < 140 К на ветви жидкости имеется небольшое отличие от справочных данных [7] (линии 2), связанное с меньшими значениями расчетных C_v (6). Отметим, что данные по скорости звука не привлекались для получения коэффициентов КУС (1).

В критической области поведение кривых W_{calc} (10) по настоящей модели в зависимости от плотности на изотермах, близких к T_c , показано на рис. 9 (жирные линии). Видно хорошее соответствие экспериментальным данным [43, 46] и кривым УС [7] (штриховые линии). Здесь заметно более крутое падение кривых W_{calc} (10) к минимальным значениям при ρ_c по сравнению с экспериментальными кривыми в газовой области $120 \text{ кг/м}^3 < \rho < \rho_c$ при $T \sim T_c$. Этот недостаток модели, вероятно, связан с малочисленно-

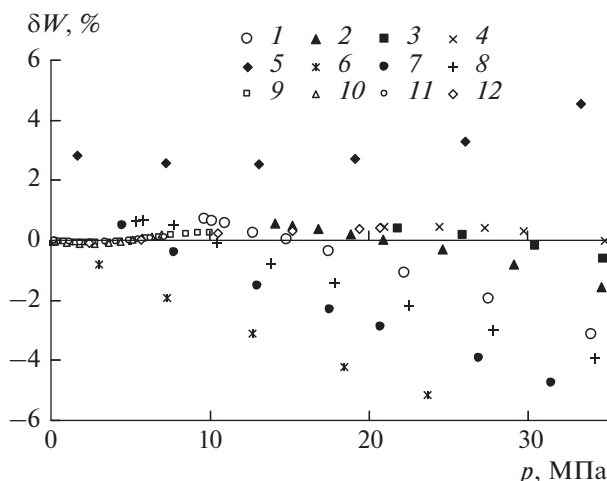


Рис. 10. Отклонения ΔW на изотермах от расчетных значений (10); эксперимент: 1 – 210 К, 2 – 240, 3 – 270, 4 – 300, 5 – 100, 6 – 150, 7 – 170, 8 – 184 [44]; 9 – 275 [47]; 10 – 255, 11 – 300 [45]; 12 – 298 [46].

стью (p, ρ, T)-данных в этой области, вследствие чего температурная область перехода к масштабным законам для производных давления, регулируемая коэффициентом λ^a (см. таблицу) в Y (2), меньше, чем для экспериментальных кривых. Тонкими линиями на рис. 9 для изотерм 200.16, 193.05, 190.86 К показано поведение кривых W_{calc} по кроссоверной модели УС (восемь регулярных и четыре масштабных подгоночных коэффициента) [48] в критической области при $90 < p < 230 \text{ кг/м}^3$. Вне данного интервала заметны растущие отклонения расчетных кривых [48] от значений W_{exp} .

Отклонения значений W_{exp} разных авторов от расчетных W_{calc} (10) в интервале от 100 до 300 К и давлений до 35 МПа (рис. 10) находятся в пределах $\pm 4\%$. В области давлений до 10 МПа W_{calc} наблюдается хорошее согласие с величинами W_{exp} из работ [45–47], в которых авторы оценивают погрешность измерений не более $\pm 0.03\%$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью термического комбинированного уравнения состояния в явной форме, включающего новое 13-константное УС для регулярной области и масштабное 6-константное УС для критической области состояний, предложено описание термических и калорических свойств CH_4 . Описание (p, ρ, T)-данных получено в однофазной области газового и жидкого состояний до 30 МПа от 100 до 520 К с $\sigma_p \sim 0.5\%$. По коэффициентам комбинированного уравнения, найденным при аппроксимации (p, ρ, T)-данных, вычислены теплоемкость C_v и скорость звука в широком диапазоне параметров однофазного состояния, включая кри-

тическую область. Кривые для C_v , рассчитанные на тех же изохорах и изотермах, на которых имеются экспериментальные данные по C_v у разных авторов, показывают хорошее согласие с экспериментом с отклонениями в пределах до 4% в регулярной области состояния и до 8–10% в критической области. Сингулярное поведение C_v в критической области рассчитано с применением критических индексов, полученных для трехмерной модели Изинга. Регулярное поведение расчетных свойств C_v, C_p и W по данной модели хорошо соответствует табличным величинам, найденным по многоконстантному регулярному УС [7] и экспериментальным данным с точностью 2–4% в разных областях состояний.

Сравнение расчетного поведения W по комбинированному УС (1) с расчетами по кроссоверной модели УС для CH_4 [48] показывает расхождение расчетных кривых по обеим моделям и с экспериментом в критической области не более 5%. Кроссоверные УС [12, 48] дают описание C_v, W с меньшей погрешностью в критической области, поскольку их подгоночные константы получены с применением термических и калорических данных, но они пригодны в ограниченной области вокруг критической точки и неудобны для практических расчетов из-за неявной формы производных от давления и кроссоверной функции [48].

Предлагаемое комбинированное УС, включающее кроссоверную функцию, регулярную и масштабную части в явных формах с относительно малым числом подгоночных констант, позволяет проще рассчитывать термодинамические свойства CH_4 в разных областях состояния на уровне экспериментальной погрешности. Отметим, что данные по C_v, C_p и W не привлекались для получения подгоночных коэффициентов для настоящей модели. Поэтому практическое применение рассмотренной модели для расчетов теплофизических свойств других жидкостей требует меньше данных и является более удобным. Ранее аналогичный метод расчета термических и калорических свойств был применен для CO_2 и SF_6 , включая критическую область [18–21].

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования РФ (проекты №№ 121031700314-5, 121031800219-2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Syed T.H., Hughes T.J., Marsh K.N., May E.F. Isobaric Heat Capacity Measurements of Liquid Methane, Ethane, and Propane by Differential Scanning Calorimetry at High Pressures and Low Temperatures // J. Chem. Eng. Data. 2012. V. 57. № 12. P. 3573.
2. Xiong Xiao, Al Ghafri Saif Z.S., Rowland D., Hughes T.J., Hnedkovsky L., Hefter G., May E.F. Isobaric Heat Capacity Measurements of Natural Gas Model Mixtures

- (Methane + *n*-heptane) and (Propane + *n*-heptane) by Differential Scanning Calorimetry at Temperatures from 313 K to 422 K and Pressures up to 31 MPa // *Fuel*. 2021. V. 296. 120668.
3. Ernst G., Keil B., Wirbser H., Jaeschke M. Flow-calorimetric Results for the Massic Heat Capacity c_p and the Joule–Thomson Coefficient of CH₄, of (0.85 CH₄ + 0.15 C₂H₆), and of a Mixture Similar to Natural Gas // *J. Chem. Thermodyn.* 2001. V. 33. P. 601.
 4. Сычев В.В., Вассерман А.А., Загорученко В.А., Козлов А.Д., Спиридонов Г.А., Цымарный В.А. Термодинамические свойства метана. М.: Изд-во стандартов, 1979. 348 с.
 5. Friend D.G., Ely J.F., Ingham H. Thermophysical Properties of Methane // *J. Phys. Chem. Ref. Data*. 1988. V. 18. № 2. P. 583.
 6. Schmidt R., Wagner W. A New Form of the Equation of State for Pure Substances and Its Application to Oxygen // *Fluid Phase Equilib.* 1985. V. 19. № 3. P. 175.
 7. Setzmann U., Wagner W. A New Equation of State and Tables of Thermodynamic Properties for Methane Covering the Range from the Melting Line to 625 K at Pressures up to 1000 MPa // *J. Phys. Chem. Ref. Data*. 1991. V. 20. № 6. P. 1061.
 8. Span R., Wagner W. Equations of State for Technical Applications. II. Results for Nonpolar Fluids // *Int. J. Thermophys.* 2003. V. 24. № 1. P. 41.
 9. Козлов А.Д., Мамонов Ю.В., Роговин М.Д., Рыбаков С.И., Степанов С.А., Сычев В.В., Дрегуляс Э.К., Ставцев А.Ф. ГСССД 195-01. Таблицы стандартных справочных данных. Метан жидкий и газообразный. Термодинамические свойства, коэффициенты динамической вязкости и теплопроводности при температурах 91–700 К и давлениях 0.1–100 МПа. МТК-180 “ГСССД”, 2002.
 10. Kiselev S.B., Ely J.F. Generalized Crossover Description of the Thermodynamic and Transport Properties in Pure Fluids // *Fluid Phase Equilib.* 2004. V. 222–223. P. 149.
 11. Kiselev S.B., Ely J.F. Generalized Crossover Description of the Thermodynamic and Transport Properties in Pure Fluids. II. Revision and Modifications // *Fluid Phase Equilib.* 2007. V. 252. P. 57.
 12. Григорьев Б.А., Герасимов А.А., Григорьев Е.Б. Фундаментальные уравнения состояния углеводородов в критической области // *Химия и химическая промышленность*. 2010. № 3. С. 52.
 13. Chen Z.Y., Abbaci A., Tang S., Sengers J.V. Global Thermodynamic Behavior of Fluids in the Critical Region // *Phys. Rev. A*. 1990. V. 42. P. 4470.
 14. Безверхий П.П., Мартынец В.Г., Матизен Э.В. Не-параметрическое масштабное уравнение состояния для жидкостей // *ЖФХ*. 2007. Т. 81. № 6. С. 978.
 15. Безверхий П.П., Мартынец В.Г., Матизен Э.В. Не-параметрическое масштабное уравнение состояния для флюидов с учетом асимметрии // *ЖЭТФ*. 2009. Т. 136. Вып. 2 (8). С. 311.
 16. Bezverkhy P.P., Martynets V.G., Matizen E.V. Equation of Fluid and Gas State, Including Classical and Scaling Parts // *J. Mol. Liq.* 2009. V. 147. № 3. P. 162.
 17. Безверхий П.П., Мартынец В.Г., Станкус С.В. Описание теплоемкости C_v простых жидкостей с помощью термического уравнения состояния, включающего регулярную и масштабную части // *ТВТ*. 2015. Т. 53. № 3. С. 356.
 18. Bezverkhy P.P., Martynets V.G. Calculation of Thermodynamic Properties of CO₂ Using the Combined Thermal Equation of State with a Small Number of Adjustable Parameters // *High Temp.–High Press.* 2016. V. 45. P. 145.
 19. Безверхий П.П., Мартынец В.Г., Каплун А.Б., Мешалкин А.Б. Расчет термодинамических свойств SF₆, включая критическую область. Комбинированное термическое уравнение состояния с малым числом параметров // *ТВТ*. 2017. Т. 55. № 5. С. 706.
 20. Безверхий П.П., Мартынец В.Г., Каплун А.Б., Мешалкин А.Б. Расчет термодинамических свойств SF₆, включая критическую область. Тепловые функции и скорость звука // *ТВТ*. 2017. Т. 55. № 5. С. 716.
 21. Bezverkhy P.P., Martynets V.G., Kaplun A.B., Meshalkin A.B. The Thermodynamic Properties of CO₂ up to 200 MPa Including the Critical Region, Calculated by a New Combined Equation of State with Few Parameters // *Int. J. Thermophys.* 2020. V. 41 № 2. <https://doi.org/10.1007/s10765-019-2576-3>
 22. Kaplun A.B., Meshalkin A.B. Phenomenological Method for Construction of the Liquid and Gas Equation of State // *J. Chem. Eng. Data*. 2010. V. 55. P. 4285.
 23. Kaplun A., Meshalkin A. Simple Self-empirical Equation of State of Liquid and Gas for Engineering Calculation // *Chem. Eng. Data*. 2011. V. 56. P. 1463.
 24. Lee Y., Shin M.S., Yeo J.K., Kim H. A Crossover Cubic Equation of State Near to and Far from the Critical Region // *J. Chem. Thermodyn.* 2007. V. 39. № 9. P. 1257.
 25. Рыков А.В., Кудрявцева И.В., Рыков С.В. Непараметрическое масштабное уравнение состояния, не содержащее дифференциальных биномов // *Науч. журн. НИУ ИТМО. Сер. Холодильная техника и кондиционирование*. 2013. № 2.
 26. Кудрявцева И.В., Рыков А.В., Рыков В.А. Метод расчета равновесных свойств сверхкритических флюидов, используемых в СКФ-технологиях // *Науч. журн. НИУ ИТМО. Сер. “Процессы и аппараты пищевых производств”*. 2013. № 3. С. 29.
 27. Meshalkin A.B., Dutova O.S. Equation of Liquid, Gas, and Fluid State for Methane // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2020. V. 1677. 012171.
 28. Haendel G., Kleinrahm R., Wagner W. Measurements of the (Pressure, Density, Temperature) Relation of Methane in the Homogeneous Gas and Liquid Regions in the Temperature Range from 100 K to 260 K and at Pressures up to 8 MPa // *J. Chem. Thermodyn.* 1992. V. 24. P. 685.
 29. Klimeck J., Kleinrahm R., Wagner W. Measurements of the (p ; ρ ; T) Relation of Methane and Carbon Dioxide in the Temperature Range 240 K to 520 K at Pressures up to 30 MPa Using a New Accurate Single-sinker Densimeter // *J. Chem. Thermodyn.* 2001. V. 33. P. 251.
 30. Kleinrahm R., Duschek W., Wagner W. (Pressure, Density, Temperature) Measurements in the Critical Region of Methane // *J. Chem. Thermodyn.* 1986. V. 18. P. 1103.
 31. Kleinrahm R., Wagner W. Measurement and Correlation of the Equilibrium Liquid and Vapour Densities and the Vapour Pressure Along the Coexistence Curve of Methane // *J. Chem. Thermodyn.* 1986. V. 18. P. 739.

32. Woolley H.W. A Switch Function Applied to the Thermodynamic Properties of Steam near and not near the Critical Point // *Int. J. Thermophys.* 1983. V. 4. № 1. P. 51.
33. Каплун А.Б., Мешалкин А.Б. Простое фундаментальное уравнение состояния жидкости, газа и флюида для аргона, азота и диоксида углерода // *Теплофизика и аэромеханика*. 2017. Т. 24. № 4. С. 529.
34. Agayan V.A., Anisimov M.A., Sengers J.V. Crossover Parametric Equation of State for Ising-like Systems // *Phys. Rev. E*. 2001. V. 64. 026125.
35. Sengers J.V., Shanks J.G. Experimental Critical Exponent Values for Fluids // *J. Stat. Phys.* 2009. V. 137. P. 857.
36. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматгиз, 1962. 1097 с.
37. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука, 1982. 382 с.
38. Younglove B.A. The Specific Heats C_σ and C_v of Compressed and Liquified Methane // *J. Res. NBS (Phys. Chem.)*. 1974. V. 78A. № 3. P. 401.
39. Jones M.L., Mage D.T., Faulkner R.C., Katz D.L. Measurement of the Thermodynamic Properties of Gases at Low Temperature and High Pressure – Methane // *Chem. Eng. Prog. Symp. Ser.* 1963. V. 59. № 44. P. 52.
40. Roder H.M. Measurements of the Specific Heats, C_σ and C_v of Dense Gaseous and Liquid Ethane // *J. Res. NBS (Phys. Chem.)*. 1976. V. 80A. № 5–6. P. 739.
41. Анисимов М.А., Бекетов В.Г., Воронов В.П., Нагаев В.Б., Смирнов В.А. Экспериментальное исследование T , ρ -зависимости вдоль кривой сосуществования и изохорной теплоемкости метана // *Теплофизические свойства веществ и материалов*. М: Изд-во стандартов, 1982. Вып. 16. С. 124.
42. Kasteren H.G., Zeldenrust H. A Flow Calorimeter for Condensable Gases at Low Temperatures and High Pressures. 2. Compilation of Experimental Results and Comparison with Predictions Based on a Modified Redlich–Kwong Equation of State // *Ind. Eng. Chem. Fundam.* 1979. V. 18. № 4. P. 339.
43. Sivaraman A., Gammon B.E. Speed-of-sound Measurements in Natural Gas Fluids. Gas Research Institute Report. 1986. № 86-0043.
44. Straty G.C. Velocity of Sound in Dense Fluid Methane // *Cryogenics*. 1974. V. 14. P. 367.
45. Ewing M.B., Goodwin A.R.H. Speed of Sound, Perfect-gas Heat Capacities, and Acoustic Virial Coefficients for Methane Determined Using Spherical Resonator at Temperatures between 255 K and 300 K and Pressures in the Range 171 kPa to 7.1 MPa // *J. Chem. Thermodyn.* 1992. V. 24. P. 1257.
46. Gammon B.E., Douslin D.R. The Velocity of Sound and Heat Capacity in Methane from Near-critical to Subcritical Conditions and Equation-of-state Implications // *J. Chem. Phys.* 1976. V. 64. P. 203.
47. Trusler J.P.M., Zarari M. The Speed of Sound and Derived Thermodynamic Properties of Methane at Temperatures between 275 K and 375 K and Pressures up to 10 MPa // *J. Chem. Thermodyn.* 1992. V. 24. № 9. P. 973.
48. Kurumov D.S., Olchoway G.A., Sengers J.V. Thermodynamic Properties of Methane in the Critical Region // *Int. J. Thermophys.* 1988. V. 9. № 1. P. 73.

УДК 536.412

ПЛОТНОСТЬ И МОЛЯРНЫЙ ОБЪЕМ ЖИДКИХ АМАЛЬГАМ ТАЛЛИЯ, СВИНЦА И ВИСМУТА

© 2023 г. В. С. Саввин^{1, 2, *}¹Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, Россия²Институт атомной энергетики, г. Обнинск, Россия

*E-mail: savvin-vs@yandex.ru

Поступила в редакцию 05.09.2022 г.

После доработки 23.10.2022 г.

Принята к публикации 06.12.2022 г.

С помощью откачанного двухкапиллярного пикнометра измерены плотность и молярный объем жидких растворов таллия, свинца и висмута в ртути. Измерения проведены во всем интервале составов при температурах от ликвидуса до 400–500°C.

DOI: 10.31857/S0040364423030195

ВВЕДЕНИЕ

Сведения о молярном объеме и плотности необходимы для интерпретации строения и свойств жидких металлов и сплавов, для технических расчетов и расчетов некоторых физических характеристик [1–3].

Во всех известных публикациях, где представлены результаты измерений плотности перечисленных в заголовке амальгам, применялись пикнометрический или dilatометрический методы.

В работах [4–10] результаты измерений плотности растворов системы Hg–Tl приведены в области концентраций, в которой жидкие растворы стабильны при комнатной температуре, т.е. от чистой ртути до линии ликвидуса (~43% Tl¹). В [4] даны численные результаты измерений плотности амальгам таллия при 20 и 30°C. В [5] приведены численные значения при 25°C, которые дополнены значениями плотности при 50 и 80°C в [6]. В [7] сообщаются численные значения плотности при 20°C. Кроме того, показан график изотермы молярного объема для температуры 573 К с добавлением точки, соответствующей чистому таллию. Сообщается, что данные значения получены в результате расчета с применением коэффициента термического расширения для комнатной температуры. Кроме сведений о плотности растворов таллия в ртути, в [7] сообщаются результаты измерений плотности растворов других систем. В частности, приведена плотность амальгам с содержанием 0.39 и 1.07 мол. % Pb и 0.67 и 1.52 мол. % Bi при 20°C.

В [8] результаты представлены в виде коэффициентов трехчленных квадратичных полиномов,

аппроксимирующих изотермы Hg–Tl от 25 до 90°C. Отдельно даны численные значения плотности четырех растворов из того же концентрационного интервала для 105, 125 и 160°C. На основе рассчитанных по полиномам изотерм значений плотности приведены коэффициенты термического расширения для 25°C.

На графиках в [9] показаны политермы плотности для пяти составов, полученных по измерениям от комнатной температуры до ~200°C. Кроме того, показан участок изотермы плотности для 200°C, рассчитанный по политермам.

Наиболее полные сведения о молярном объеме сплавов системы Hg–Tl приведены в [11]. Здесь охвачен весь концентрационный интервал при температурах от комнатной до 530–760 К. Результаты представлены коэффициентами линейных политерм для исследованных сплавов.

В [10] приведены сведения о девяти двухкомпонентных системах, в их числе Hg–Tl, Hg–Pb и Hg–Bi. Определено изменение объема при растворении твердого металла в ртути. Полученные результаты пересчитаны для процесса смешения ртути с переохлажденным жидким металлом при 158°C. Для этого использованы данные по объемному эффекту плавления чистых металлов при температуре плавления. Измерениями охвачены концентрационные интервалы 0–40 мол. % Tl, 0–33 мол. % Pb и 0–40 мол. % Bi. Результаты представлены графически.

Обзор опубликованных работ показывает, что плотность амальгам системы Hg–Tl измерена в сплавах, богатых ртутью при температурах ниже 200°C. Исключением является работа [11], где система Hg–Tl исследована во всем концентраци-

¹ <https://himikatus.ru/art/phase-diagr1/Hg-Tl.php>

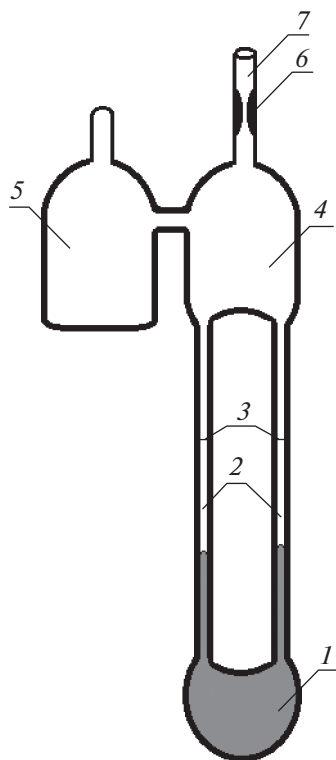


Рис. 1. Двухкапиллярный вакуумный пикнометр: 1 — пикнометрический баллон, заполненный исследуемым расплавом; 2 — капилляры; 3 — метки; 4 — вспомогательный баллон; 5 — отделяемый резервуар для сбора расплава после пикнометрических измерений; 6 — сужение для отпайки пикнометра после откачки и заполнения расплавом; 7 — трубка, соединяющая пикнометр с вакуумной установкой.

онном интервале. По системам Hg–Pb и Hg–Bi имеются лишь отрывочные сведения.

Целью настоящей работы является измерение плотности и молярного объема жидких растворов Hg–Tl, Hg–Pb и Hg–Bi в широких интервалах температуры и концентрации.

МЕТОДИКА ИЗМЕРЕНИЙ

Для измерения плотности применен двухкапиллярный вакуумный пикнометр [12], изготовленный из стекла. Схема устройства приведена на рис. 1.

Двухкапиллярный пикнометр имеет преимущество по сравнению с однокапиллярным: он легко заполняется исследуемым расплавом, и при необходимости расплав можно переливать из резервуара 1 в резервуар 4 и возвращать обратно.

Определение плотности сводится к определению объема и массы расплава. Объем определяется по высоте столбиков расплава в капиллярах 2 пикнометра относительно меток 3.

Для приготовления сплавов использовались ртуть марки Р-0Д (99.9997), таллий Тл-000

(99.9995), свинец С-0000 (99.9999), висмут Ви-000 (99.9995). Для предотвращения десорбции газов при нагреве пикнометр и используемые металлы, кроме ртути, подвергались циклической термовакуумной обработке в интервале температур от 300 до 500°C. Заполнение пикнометра происходило при непрерывной откачке при давлении газов, неконденсируемых жидким азотом, порядка 10^{-5} Па. Перед заполнением пикнометра ртуть подвергалась дистилляции [13], а металлы отфильтровывались в стеклянных воронках с оттянутыми концами. Необходимые количества ртути и второго металла переводились под вакуумом из дозаторов в пикнометр.

После заполнения пикнометр отпаивался от вакуумной установки и на специальной раме, позволяющей поворачивать пикнометр, помещался в воздушный термостат. Температура в термостате измерялась с помощью ртутного термометра с погрешностью $\pm 2^\circ\text{C}$. Отсутствие значимого градиента температуры фиксировалось с помощью дифференциальной термопары, спаи которой находились над и под прибором. Пикнометр с загруженными компонентами термостатировался при температуре несколько выше температуры ликвидуса исследуемого сплава. Для гомогенизации расплава он периодически переводился из баллона 1 в баллон 4 и обратно (рис. 1).

Высота столбиков металла в капиллярах 2 пикнометра определялась с помощью катетометра после термостатирования. Градуировка пикнометра производилась по ртути в интервале температур от комнатной до 300°C. Использовались значения плотности ртути, рекомендованные в [14]. Объем вещества в пикнометре определялся по формуле

$$V = (a + bh)(1 + 3\alpha t),$$

где t — температура в $^\circ\text{C}$; h — осредненное значение высот столбиков металла в капиллярах 2 относительно меток 3; α — коэффициент линейного расширения стекла марки С52; a, b — постоянные прибора, определяемые методом наименьших квадратов по результатам градуировки.

После завершения измерений прибор поворачивался таким образом, чтобы весь расплав оказался в баллоне 5. После остывания сплав извлекался из баллона 5 и взвешивался.

Состав сплава предварительно оценивался по убыли компонентов в дозаторах при приготовлении сплава. Окончательное содержание компонентов сплава определялось путем отгонки ртути из сплава. Отгонка ртути из сплавов осуществлялась в вакууме в течение 4 ч при постепенном возрастании температуры до 400°C.

Для апробации данной методики производились контрольные эксперименты, в которых навески висмута непосредственно растворялись в

Таблица 1. Коэффициенты политерм молярного объема жидких металлов

Металл/ молярная масса, г/моль/температура плавления, °С (К)	Молярный объем при температуре плавления, $10^{-6} \text{ м}^3 \text{ моль}^{-1}$	$\partial v / \partial T$, $10^{-9} \text{ м}^3 \text{ моль}^{-1} \text{ К}^{-1}$	Температурный интервал измерений, °С
Hg/200.592/–38.83 (234.32)	14.623 ± 0.006	2.8715 ± 0.0018	20–500
Tl/204.3835/304 (577)	18.230 ± 0.008	2.33 ± 0.06	314–500
Pb/207.2/327.46 (600.61)	19.412 ± 0.003	2.336 ± 0.003	350–493
Bi/208.98040/271.44 (544.59)	20.8194 ± 0.0017	2.5976 ± 0.0012	278–476

ртути, полученный сплав охлаждался до кристаллизации, а затем подвергался разгонке по описанной методике. Исходная доля ртути в сплаве составляла в разных экспериментах от 0.115 до 0.967 по массе. Наибольшая разность исходной и определенной долей ртути в сплаве составила 0.004. Средняя квадратическая погрешность относительной разности между исходным и определенным значениями концентрации ртути в сплаве для отдельного измерения составила 0.6%.

При оценке погрешности измерений молярного объема и плотности с помощью пикнометра учитывались погрешности табличных значений плотности ртути, определения массы компонентов, определения высоты столбиков металла с помощью катетометра, измерения температуры.

Следует оценить погрешность, возникающую из-за непостоянства количества жидкой ртути в пикнометре при изменении температуры. При нагреве чистой ртути от 20 до 300 °С в свободный объем пикнометра, оцениваемый в 50 см^3 , переходит 0.07 г в виде пара, что соответствует объему жидкой ртути 0.005 см^3 и составляет 0.05% объема расплава в пикнометре.

Важным источником погрешности измерений является отклонение истинной формы капилляров от формы идеального прямого цилиндра с постоянным круглым сечением вдоль всей рабочей области капилляра. Погрешности, вносимые этими отклонениями, а также другими неучтенными факторами, могут быть оценены средним квадратичным отклонением единичного измерения, получаемым при обработке градуировочных данных методом наименьших квадратов. Для использованного пикнометра данная погрешность составила 0.2% объема расплава, что существенно превышает другие перечисленные погрешности. Эта погрешность принята за погрешность прибора.

Молярный объем и плотность расплава определялись при нескольких температурах и аппроксимировались линейной зависимостью от температуры. Количество точек выбиралось таким образом, чтобы погрешность получаемого результата при доверительной вероятности 95% была в разы меньше указанной приборной погрешности. Обыч-

но достаточно было сделать измерения при четырех–шести температурах.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗМЕРЕНИЙ

Результаты для чистых металлов аппроксимированы линейными зависимостями от температуры и представлены в табл. 1, 2. Во всех таблицах погрешности аппроксимации приведены для доверительной вероятности 95%. Коэффициенты политерм для ртути рассчитаны по данным [14].

Политермы молярного объема и плотности таллия, свинца и висмута в данной работе необходимы для построения изотерм плотности соответствующих амальгам в полном концентрационном интервале. Одновременно накоплена обширная база значений параметров политерм плотности чистых жидких металлов, полученных в различных лабораториях разными методами. Сравнение результатов настоящей работы с данными ранее опубликованных работ позволяет судить об адекватности применяемой методики. Некоторые из этих результатов представлены в табл. 2.

В табл. 3 даны коэффициенты уравнений регрессии молярного объема и плотности амальгам таллия, свинца и висмута, которые имеют вид

$$v = v_0 + \frac{\partial v}{\partial T} T,$$

$$\rho = \rho_0 + \frac{\partial \rho}{\partial T} T,$$

где температура T выражается в кельвинах.

На рис. 2 приведены результаты измерения плотности в системе Hg–Tl при 25 °С. Здесь и далее значения плотности и молярного объема настоящей работы получены на политермах, коэффициенты которых приведены в таблицах. Плотности системы Hg–Tl при 25 °С лучше всего соответствуют результатам работы [9].

На рис. 3 представлены изотермы молярного объема исследованных амальгам при 350 °С. Для построения графиков использованы политермы, приведенные в табл. 3. Линиями показаны соответствующие аппроксимации. Молярный объем в системах Hg–Tl и Hg–Bi изменяется почти линейно. В системе Hg–Pb наблюдается компрес-

Таблица 2. Коэффициенты политерм плотности жидких металлов

Металл	Плотность при температуре плавления, 10^3 кг м^{-3}	$-\partial\rho/\partial T$, $\text{кг м}^{-3} \text{ К}^{-1}$	Температурный интервал измерений, $^{\circ}\text{C}$	Источник, метод
Tl	11.211 ± 0.006	1.39 ± 0.04	314–500	Данная работа
	11.21	1.42	304–500	[15], ареометр
	11.221	1.4390	314–508	[16], пикнометр
Pb	10.6728 ± 0.0018	1.255 ± 0.018	350–493	Данная работа
	10.660	1.2220	320–530	[17], пикнометр
	10.676	1.2887	373–1056	[18], гамма-метод
Bi	10.0368 ± 0.0015	1.220 ± 0.011	278–476	Данная работа
	10.031	1.2367	340–430	[19], пикнометр
	10.049 ± 0.002	1.24	271–600	[20], гидростатическое взвешивание

Таблица 3. Коэффициенты политерм плотности и молярного объема расплавов ртути с различными металлами

Молярная доля второго компонента	v_0 , $10^{-6} \text{ м}^3 \text{ моль}^{-1}$	$\partial v/\partial T$, $10^{-9} \text{ м}^3 \text{ моль}^{-1} \text{ К}^{-1}$	ρ_0 , 10^3 кг м^{-3}	$-\partial\rho/\partial T$, $\text{кг м}^{-3} \text{ К}^{-1}$	Температурный интервал измерений, $^{\circ}\text{C}$
Ртуть–таллий					
0	13.9504 ± 0.011	2.87 ± 0.02	14.2513 ± 0.0016	2.407 ± 0.003	20–500
0.08	14.28 ± 0.02	2.70 ± 0.05	13.979 ± 0.016	2.23 ± 0.03	20–412
0.13	14.450 ± 0.012	2.67 ± 0.02	13.827 ± 0.003	2.164 ± 0.006	26–423
0.47	15.459 ± 0.009	2.478 ± 0.017	13.011 ± 0.010	1.776 ± 0.018	100–450
0.84	16.567 ± 0.012	2.251 ± 0.019	12.226 ± 0.012	1.42 ± 0.02	260–450
1	16.89 ± 0.04	2.33 ± 0.06	12.01 ± 0.04	1.39 ± 0.06	314–510
Ртуть–свинец					
0	13.9504 ± 0.011	2.87 ± 0.02	14.2513 ± 0.0016	2.407 ± 0.003	20–500
0.09	14.405 ± 0.014	2.32 ± 0.03	13.884 ± 0.006	1.910 ± 0.012	100–405
0.29	15.106 ± 0.011	2.316 ± 0.019	13.322 ± 0.014	1.74 ± 0.02	150–442
0.50	15.924 ± 0.003	2.172 ± 0.005	12.735 ± 0.005	1.497 ± 0.009	173–460
0.65	16.508 ± 0.013	2.09 ± 0.02	12.352 ± 0.008	1.776 ± 0.018	214–412
0.78	16.97 ± 0.06	2.17 ± 0.09	12.06 ± 0.06	1.32 ± 0.09	300–450
1	18.01 ± 0.03	2.34 ± 0.04	11.427 ± 0.015	1.26 ± 0.02	350–493
Ртуть–висмут					
0	13.9504 ± 0.011	2.87 ± 0.02	14.2513 ± 0.0016	2.407 ± 0.003	20–500
0.10	14.579 ± 0.007	2.509 ± 0.013	13.728 ± 0.003	2.003 ± 0.006	100–400
0.34	15.974 ± 0.018	2.28 ± 0.03	12.665 ± 0.006	1.553 ± 0.010	147–450
0.83	18.67 ± 0.05	2.41 ± 0.08	11.06 ± 0.02	1.23 ± 0.03	260–450
1	19.405 ± 0.010	2.598 ± 0.016	10.701 ± 0.009	1.220 ± 0.014	278–476

сия, достигающая 1.8% для средних составов. Для этой системы пунктирной линией показана аддитивная зависимость.

На рис. 4 представлена зависимость объемного коэффициента теплового расширения

$\beta = (dv/dT)/v$ от концентрации. Учтено, что в рассматриваемых условиях влияние давления на объем конденсированной фазы пренебрежимо мало. Сплошные линии получены аппроксимацией результатов методом наименьших квадра-

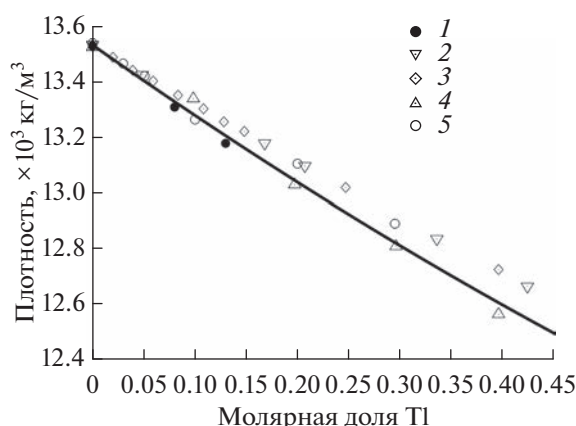


Рис. 2. Плотность амальгам таллия при 25°C: 1 – результаты настоящей работы, 2 – [4], 3 – [5, 6], 4 – [9], 5 – [11]; линия – аппроксимация результатов настоящей работы с включением точек, полученных экстраполяцией политерм в область жидкости в метастабильном состоянии.

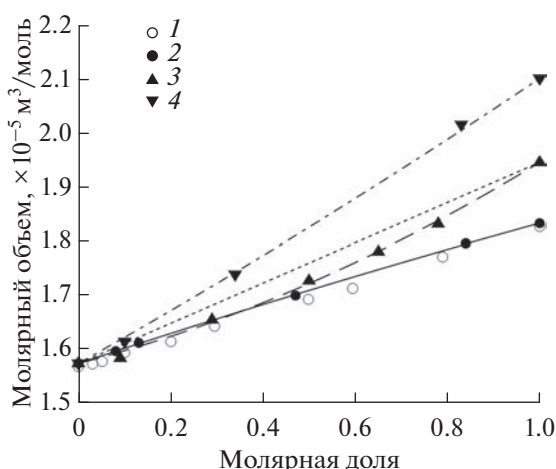


Рис. 3. Молярный объем жидких амальгам при 350°C: 1 – Hg–Tl по [11]; результаты настоящей работы: 2 – Hg–Tl, 3 – Hg–Pb, 4 – Hg–Bi.

тов. Наблюдается отрицательное отклонение β от зависимости, характерной для идеальных растворов, при образовании которых происходит аддитивное смешение объемов компонентов:

$$\beta_{\text{add}} = \frac{(1-x)v_1\beta_1 + xv_2\beta_2}{(1-x)v_1 + xv_2},$$

где x – молярная доля второго компонента в растворе; индексы 1, 2 обозначают ртуть и второй компонент раствора соответственно.

Обращает на себя внимание тот факт, что значения ряда физических свойств, например температурный коэффициент электропроводности [21], быстро уменьшаются при добавлении к ртути поли-

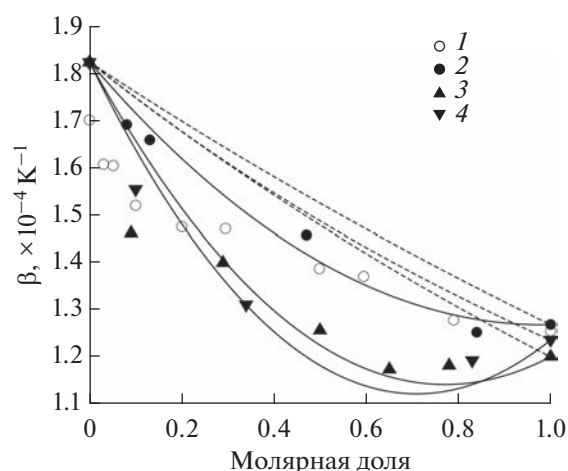


Рис. 4. Объемный коэффициент теплового расширения при 350°C: 1 – Hg–Tl по [11]; результаты настоящей работы: 2 – Hg–Tl, 3 – Hg–Pb, 4 – Hg–Bi; пунктирные линии – расчет в предположении идеальности растворов.

валентного металла, как это наблюдается для объемного коэффициента теплового расширения β (рис. 4).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Пикнометрическим методом измерены молярный объем и плотность жидких растворов Hg–Tl, Hg–Pb и Hg–Bi во всем концентрационном интервале. Результаты представлены в виде уравнений политерм исследованных сплавов.

2. Объемный коэффициент теплового расширения исследованных систем имеет отрицательное отклонение от зависимости, характерной для идеальных растворов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Степанов В.П. Плотность и адиабатическая сжимаемость смесей LiF + KBr в двухфазной области // ТВТ. 2019. Т. 57. № 3. С. 371.
2. Алчагиров Б.Б., Мозговой А.Г., Шампаров Т.М. Плотность расплавленного висмута при высоких температурах // ТВТ. 2004. Т. 42. № 3. С. 487.
3. Станкус С.В., Хайрулин Р.А., Мозговой А.Г., Рошупкин В.В., Покрасин М.А. Плотность жидкого сплава Pb–Bi эвтектического состава при температурах до 700 К // ТВТ. 2004. Т. 42. № 6. С. 982.
4. Richards T.W., Daniels F. Concentrated Thallium Amalgams: Their Electro-chemical and Thermochemical Behavior, Densities and Freezing Points // J. Am. Chem. Soc. 1919. V. 41. № 11. P. 1732.
5. Olsen D.A., Johnson D.C. The Surface Tension of Mercury–Thallium and Mercury–Indium Amalgams // J. Phys. Chem. 1963. V. 67. № 12. P. 2529.
6. Olsen D.A., Bunde R.E., Johnson R.E., Johnson D.C. Viscosity and Density of Mercury–Thallium Amalgams // J. Chem. Eng. Data. 1970. V. 15. № 1. P. 190.

7. *Abowitz G., Gordon R.B.* Compressibility of the Mercury Alloys // *Trans. Met. Soc. AIME.* 1963. V. 227. № 1. P. 51.
8. *Foley W.T., Basak A.K., Delorey J.R.* Density and Viscosity of Thallium Amalgams // *Can. J. Chem.* 1964. V. 42. P. 2749.
9. *Predel B., Emam A.* Überschußvolumina flüssiger Legierungen der Systeme Bi–Sn, Sn–Tl, Pb–Sn, Bi–Tl, Hg–In, Hg–Tl und Pb–Tl // *Mat. Sci. Eng.* 1969. Bd. 4. № 5. S. 287.
10. *Kleppa O.J., Kaplan M., Thalmayer C.E.* The Volume Change on Mixing in Liquid Metallic Solutions II. Some Binary Alloys Involving Mercury, Zinc and Bismuth // *J. Phys. Chem.* 1961. V. 65. № 5. P. 843.
11. *Sato T., Itami T., Shimoji M.* The Volume of Liquid Hg–Tl and Hg–Cs Alloys // *J. Phys. Soc. Jap.* 1982. V. 51. № 8. P. 2493.
12. *Ибрагимов Х.И., Покровский Н.Л., Пугачевич П.П.* Вакуумный двухкапиллярный пикнометр для измерения плотности металлических расплавов // *ЖФХ.* 1966. Т. 40. № 4. С. 957.
13. *Пугачевич П.П.* Работа со ртутью в лабораторных и производственных условиях. М.: Химия, 1972. 320 с.
14. *Вукалович М.П., Иванов А.И., Фокин Л.Р., Яковлев А.Т.* Теплофизические свойства ртути. М.: Изд-во стандартов, 1971. 314 с.
15. *Карамурзов Б.С.* Поверхностное натяжение, плотность и работа выхода электрона легкоплавких бинарных систем на основе галлия. Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. Нальчик.: Каб.-Балк. гос. ун-т, 1975. 20 с.
16. *Crawley A.F.* The Density and Viscosity of Liquid Thallium // *Trans. Met. Soc. AIME.* 1968. V. 242. № 11. P. 2309.
17. *Thresh H.R., Crawley A.F., While D.W.G.* The Density of Liquid Tin, Lead and Tin–Lead Alloys // *Trans. Met. Soc. AIME.* 1968. V. 242. № 5. P. 819.
18. *Басин А.С., Соловьев А.Н.* Исследование плотности жидких свинца, цезия и галлия гамма-методом // *ПМТФ.* 1967. № 6. С. 83.
19. *Crawley A.F., Kiff D.R.* Density of Liquid Bismuth // *Met. Trans. V. 2.* № 2. P. 609.
20. *Bedon P., Desre P.* Densité du bismuth et des allages bismuth–zinc à l'état liquide // *C.r. Acad. Sci. C.* 1972. V. 274. P. 40.
21. *Devis H.A., Leach J.S.L.* Electron Transport Properties of Liquid Mercury Alloys. In: *The Properties of Liquid Metals.* London: Taylor & Francis, 1973. P. 229.

УДК 669.2:669.715

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ТЕПЛОЕМКОСТИ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ АЛЮМИНИЕВОГО ПРОВОДНИКОВОГО СПЛАВА AlTi0.1 СО СТРОНЦИЕМ

© 2023 г. И. Н. Ганиев¹, *, Р. Дж. Файзуллоев², Ф. Ш. Зокиров³, Н. И. Ганиева³¹Институт химии им. В.И. Никитина НАН Таджикистана, Душанбе, Таджикистан²Институт энергетики Таджикистана, Душанбе, Таджикистан³Таджикский технический университет им. М.С. Осими, Душанбе, Таджикистан

*E-mail: ganievizatullo48@gmail.com

Поступила в редакцию 16.06.2022 г.

После доработки 02.09.2022 г.

Принята к публикации 13.10.2022 г.

В работе определяется теплоемкость алюминиевого проводникового сплава AlTi0.1 (Al + 0.1 мас. % Ti) со стронцием в режиме охлаждения по известной теплоемкости эталонного образца из особо чистого алюминия марки А5N (99.999% Al). Получены уравнения, описывающие скорости охлаждения образцов сплава AlTi0.1 со стронцием и эталона. По рассчитанным величинам скоростей охлаждения образцов сформированы уравнения температурной зависимости теплоемкостей сплавов и эталона. Интегрированием удельной теплоемкости вычислены температурные зависимости изменений энтальпии, энтропии и энергии Гиббса исследуемого сплава. Теплоемкость, энтальпия и энтропия алюминиевого сплава AlTi0.1 с ростом концентрации стронция уменьшаются, а от температуры увеличиваются, значение энергии Гиббса при этом имеет обратную зависимость.

DOI: 10.31857/S0040364423030110

ВВЕДЕНИЕ

Исходя из анализа научно-технической литературы, в настоящее время для изготовления неизолированных силовых проводов линии электропередач на отечественных заводах преимущественно используется алюминиевая катанка (диаметром 9–19 мм) из сплавов технически чистого алюминия марок А5Е и А7Е. Алюминий по электропроводности среди всех известных металлов занимает четвертое место после серебра, меди и золота. Электропроводность отожженного алюминия составляет приблизительно 62% IACS¹ электропроводности отожженной стандартной меди, которая при 20°C принимается за 100% IACS. Однако благодаря малому удельному весу алюминий имеет проводимость на единицу массы в 2 раза большую, чем медь. Это свойство алюминия дает представление об экономической выгоде применения его в качестве материала для проводников. При равной проводимости (одна и та же длина) алюминиевый проводник имеет площадь поперечного сечения на 60% большую, чем медный, а масса его составляет только 48% массы меди. В соответствии с ГОСТ 13843-78 катанка АКЛП, производимая на литейно-прокатных агрегатах, имеет сравнительно низкую прочность и удельное элект-

тросопротивление, равное 0.0282 Ом мм²/м, что в 1.62 раза больше электросопротивления меди [1]. При этом максимально возможная рабочая температура такой катанки не превышает 100°C. Недостаток электропроводности алюминия по сравнению с медными проводами можно компенсировать увеличением токопроводящей жилы, однако такой прочности и термостойкости недостаточно, чтобы обеспечить надежную работу линий, исключая обрывы. В связи с этим современные исследования направлены на поиск способов упрочнения и повышения термической устойчивости алюминиевой катанки [1].

В большинстве случаев в электротехнике использование алюминия в качестве проводника затруднено, а часто и просто невозможно из-за его низкой механической прочности. Упрочненный холодной деформацией проводниковый алюминий теряет свою прочность при температурах около 100°C. Повышение механической прочности алюминия возможно за счет введения легирующих добавок, т.е. создания сплавов. В таком случае механическая прочность возрастает, вызывая заметное снижение электропроводности [1].

Влияние различных легирующих элементов на электропроводность и прочность алюминия показали, что наибольший рост твердости отмечают при введении малорастворимых легирующих

¹ Международным стандартом отожженной меди.

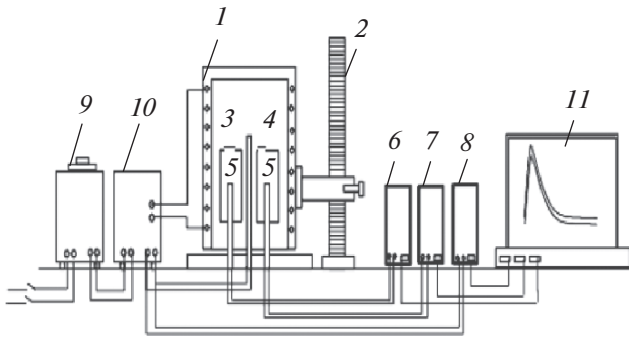


Рис. 1. Установка для определения теплоемкости твердых тел в режиме охлаждения.

элементов: Fe, Zr, Mn, Cr, Ti, Ca и Mg. Эти элементы существенно отличаются по атомным диаметрам от алюминия. Так как электропроводность является основным параметром проводникового материала, то легирующие элементы следует выбирать с учетом их влияния на изменения электропроводности [2–6].

В настоящее время существует несколько теорий модифицирования, однако нет единого мнения в решении этой проблемы применительно к алюминиевым сплавам [2, 7, 8]. Это обусловлено, во-первых, сложностью процесса модифицирования и его зависимостью от условий плавки и литья и, во-вторых, влиянием неконтролируемых примесей и компонентов, которые могут влиять на измельчение исходного зерна сплава. Вводимая в алюминий в качестве модификатора добавка, в данном случае титан, должна удовлетворять следующим требованиям: обладать достаточной устойчивостью в расплаве без изменения химического состава; температура плавления добавки должна быть выше температуры плавления алюминия. Кроме того, необходимо структурное и размерное соответствие кристаллических решеток модификатора и алюминия [9–13].

Цель работы заключается в исследовании влияния добавок стронция на температурные зависимости удельной теплоемкости и изменений термодинамических функций алюминиевого проводникового сплава AlTi0.1 (Al + 0.1 мас. % Ti).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Сплавы для исследования синтезировались в шахтной лабораторной печи сопротивления типа СШОЛ (сопротивление шахтное опытное лабораторное) в интервале температур 800–850°C из алюминия марки А5 (ГОСТ 110669-01), титана марки ТГ-90 (ГОСТ 19807-91) в виде лигатуры с алюминием и стронция металлического марки СтМ-1 (ТУ 48-4-173-72). Лигатура алюминия с 2 мас. % титана предварительно изготавливалась в ваку-

умной печи сопротивления типа СНВ 2.4.2/16. Из полученных далее в шахтной печи сопротивления СШОЛ сплавов в графитовую изложницу отливались цилиндрические образцы диаметром 16 мм и длиной 30 мм.

Алюминиевый проводниковый сплав AlTi0.1 со стронцием подвергался химическому анализу на содержание основных компонентов и примесей в Центральной заводской лаборатории Алюминиевой компании ГУП «ТАЛКО». Содержание стронция в сплаве колебалось от 0.01 до 0.5 мас. %. Состав полученных сплавов контролировался также взвешиванием образцов до и после сплавления. В дальнейшем исследовались сплавы, у которых разница в массе до и после сплавления не превышала 2% (отн.).

Как известно [14–18], теплоемкость твердых тел в режиме охлаждения определяется по уравнению

$$C_{p_2}^0 = C_{p_1}^0 \frac{m_1 \left(\frac{dT}{d\tau} \right)_1}{m_2 \left(\frac{dT}{d\tau} \right)_2}, \quad (1)$$

где $m_1 = \rho_1 V_1$ – масса эталона; $m_2 = \rho_2 V_2$ – масса исследуемого образца; $(dT/d\tau)_1$, $(dT/d\tau)_2$ – скорости охлаждения образцов из эталона и исследуемых сплавов при данной температуре. Для определения скорости охлаждения строятся кривые охлаждения образцов.

Теплоемкость измерялась по методике, описанной в работах [19–23], на установке, схема которой представлена на рис. 1. Электропечь 1 смонтирована на стойке 2, по которой она может перемещаться вверх и вниз (стрелка показывает направление перемещения). Образец 3 и эталон 4 (тоже могут перемещаться) представляют собой цилиндры длиной 30 мм и диаметром 16 мм с высверленными каналами с одного конца, в которые вставлены термопары 5. Концы термопар подведены к цифровым термометрам «Digital Multimeter DI9208L» (6–8).

Электропечь запускается через лабораторный автотрансформатор (ЛАТР) 9, нужная температура устанавливается с помощью терморегулятора 10. По показаниям цифровых термометров фиксируется значение начальной температуры. Образец и эталон нагреваются в электропечи до нужной температуры, которая контролируется по показаниям цифровых термометров на компьютере 11. Образец и эталон одновременно извлекаются из электропечи, и с этого момента фиксируется их температура. Показания цифровых термометров записываются на компьютер через каждые 10 с до охлаждения образца и эталона ниже комнатной температуры.

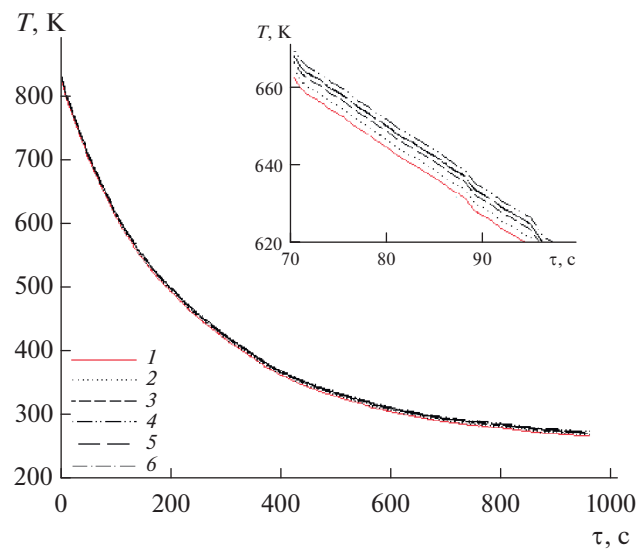


Рис. 2. Графики изменения температуры во времени при охлаждении образцов эталона (1) и исследуемых сплавов: 2 – AlTi0.1, 3 – AlTi0.1 + 0.01 мас. % стронция, 4 – 0.05, 5 – 0.1, 6 – 0.5.

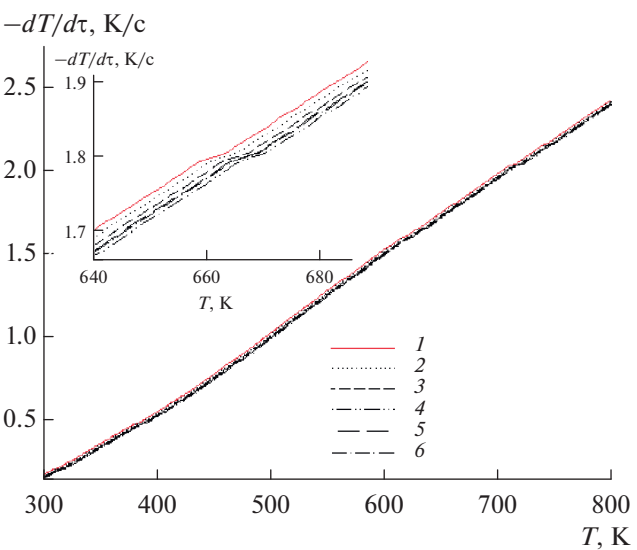


Рис. 3. Графики изменения скорости охлаждения от температуры при охлаждении образцов эталона (1) и исследуемых сплавов: 2 – AlTi0.1, 3 – AlTi0.1 + 0.01 мас. % стронция, 4 – 0.05, 5 – 0.1, 6 – 0.5.

Обработка результатов измерений и построение графиков производились с помощью программ MS Excel и Sigma Plot. Коэффициент корреляции составил $R > 0.998$, что подтверждает правильность выбора аппроксимирующей функции. Относительная ошибка измерения теплоемкости в интервале от 40 до 400°C составила $\pm 1\%$, а выше 400°C – $\pm 2.5\%$ [24, 25].

Полученные кривые охлаждения образцов сплавов описываются уравнением вида

$$T = ae^{-b\tau} + pe^{-k\tau}, \tag{2}$$

где a, b, p, k – постоянные для данного образца, τ – время охлаждения.

Результаты исследования температуры охлаждения изучаемых сплавов представлены на рис. 2. В общем случае полученные графики температуры T от времени охлаждения τ для образцов алюминиевого сплава AlTi0.1 со стронцием показывают не-

прерывное уменьшение температуры образцов и эталона по мере охлаждения. На кривых охлаждения термических эффектов, связанных с фазовым превращением или переходом, не обнаружено.

Дифференцируя уравнение (2) по τ , получаем уравнение для определения скорости охлаждения образцов

$$\frac{dT}{d\tau} = -abe^{-b\tau} - pke^{-k\tau}. \tag{3}$$

Кривые скоростей охлаждения образцов (рис. 3) описываются уравнением (3). Обработкой экспериментальных кривых скоростей охлаждения образцов получены значения a, b, p, k в (3), которые представлены в табл. 1.

С использованием экспериментальных данных по скоростям охлаждения образцов по уравнению (1) вычислялась удельная теплоемкость алюминиевого сплава AlTi0.1 со стронцием и эта-

Таблица 1. Значения коэффициентов a, b, p, k в уравнении (2) для алюминиевого проводникового сплава AlTi0.1 со стронцием и эталона (Al A5N)

Содержание стронция в сплаве, мас. %	a , К	$b \times 10^{-3}$, с	p , К	$k \times 10^{-4}$, с
0.0	495.45	4.94	321.62	2.24
0.01	495.52	4.94	323.66	2.22
0.05	495.60	4.94	326.62	2.20
0.1	495.29	4.94	325.19	2.22
0.5	495.31	4.94	325.59	2.22
Эталон	495.26	4.94	319.82	2.26

Таблица 2. Температурная зависимость удельной теплоемкости (Дж/(кг К)) алюминиевого проводникового сплава AlTi0.1 со стронцием и эталона (Al A5N)

Содержание стронция в сплаве, мас. %	T, К					
	300	400	500	600	700	800
0.0	903.33	949.02	991.11	1035.04	1086.25	1150.21
0.01	903.27	946.56	986.45	1028.38	1077.79	1140.15
0.05	903.03	946.32	986.21	1028.14	1077.55	1139.91
0.1	902.73	945.61	985.03	1026.37	1075.12	1136.65
0.5	900.34	943.22	982.63	1023.98	1072.72	1134.26
Эталон	903.70	949.58	991.97	1036.35	1088.21	1153.00

Таблица 3. Значения коэффициентов c, d, g, f в уравнении (4) для сплава AlTi0.1 со стронцием и эталона (Al A5N)

Содержание стронция в сплаве, мас. %	c , Дж/(кг К)	d , Дж/(кг К ²)	$g \times 10^{-7}$, Дж/(кг К ³)	$f \times 10^{-7}$, Дж/(кг К ⁴)	R
0.0	690.11	1.01	−12.7	9.08	0.9999
0.01	698.45	0.98	−12.6	9.08	0.9998
0.05	698.21	0.98	−12.6	9.08	0.9998
0.1	698.89	0.97	−12.6	9.05	0.9998
0.5	696.50	0.97	−12.6	9.05	0.9998
Эталон	690.35	1.01	−12.7	9.13	1.0

лона. Результаты с шагом 100 К представлены в табл. 2 и на рис. 4. Теплоемкость алюминиевого сплава AlTi0.1 с ростом температуры увеличивается, а с увеличением концентрации стронция уменьша-

ется. Полученные значения теплоемкости для особо чистого алюминия (эталона) совпадают с данными, приведенными в справочнике [26].

После проведения полиномиальной регрессии получено следующее общее уравнение, описывающее температурную зависимость удельной теплоемкости сплава AlTi0.1 со стронцием:

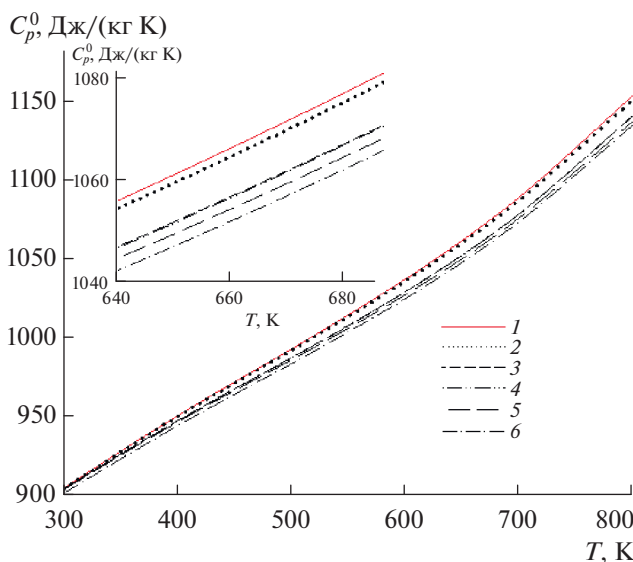
$$C_p^0 = c + dT + gT^2 + fT^3. \quad (4)$$

Значения коэффициентов c, d, g, f в уравнении (4) представлены в табл. 3.

С использованием значений удельной теплоемкости и скоростей охлаждения образцов вычислялись коэффициенты теплоотдачи сплава AlTi0.1 со стронцием по уравнению

$$\alpha_T = \frac{C_p^0 m \frac{dT}{d\tau}}{(T - T_0)S}, \quad (5)$$

где T и T_0 — температуры образца и окружающей среды; S, m — площадь поверхности и масса образца соответственно. Температурная зависимость коэффициента теплоотдачи сплава AlTi0.1 со стронцием представлена на рис. 5. Видно, что добавки стронция несколько уменьшают коэффициент теплоотдачи исходного сплава AlTi0.1.

**Рис. 4.** Температурные зависимости теплоемкости эталона (1) и исследуемых сплавов: 2 — AlTi0.1, 3 — AlTi0.1 + 0.01 мас. % стронция, 4 — 0.05, 5 — 0.1, 6 — 0.5.

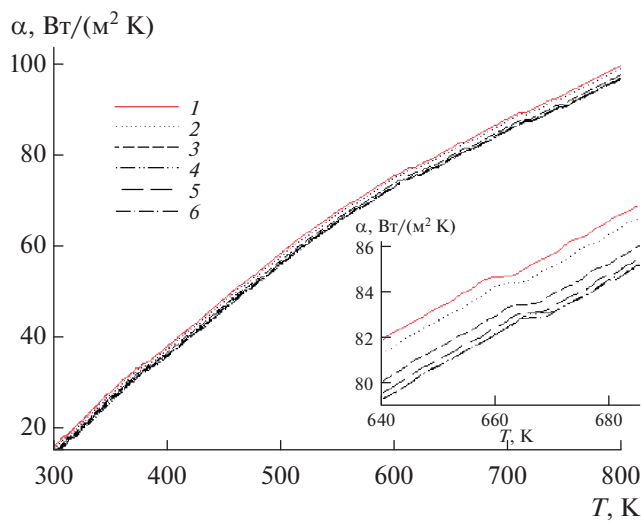


Рис. 5. Температурные зависимости коэффициента теплоотдачи эталона (1) и исследуемых сплавов: 2 – AlTi0.1, 3 – AlTi0.1 + 0.01 мас. % стронция, 4 – 0.05, 5 – 0.1, 6 – 0.5.

При получения температурных зависимостей изменений энтальпии, энтропии и энергии Гиббса использовалось уравнение (4):

$$H^0(T) - H^0(T_0) = c(T - T_0) + \frac{d}{2}(T^2 - T_0^2) + \frac{g}{3}(T^3 - T_0^3) + \frac{f}{4}(T^4 - T_0^4), \tag{6}$$

$$S^0(T) - S^0(T_0) = c \ln \frac{T}{T_0} + d(T - T_0) + \frac{g}{2}(T^2 - T_0^2) + \frac{f}{3}(T^3 - T_0^3), \tag{7}$$

$$G^0(T) - G^0(T_0) = [H^0(T) - H^0(T_0)] - T[S^0(T) - S^0(T_0)], \tag{8}$$

где $T_0 = 298.15 \text{ K}$.

Результаты расчета температурных зависимостей изменений энтальпии, энтропии и энергии Гиббса по (6)–(8) для сплава AlTi0.1 со стронцием представлены в табл. 4.

Таблица 4. Температурные зависимости изменений энтальпии, энтропии и энергии Гиббса сплава AlTi0.1 со стронцием и эталона (Al A5N)

Содержание стронция в сплаве, мас. %	T, K					
	$H^0(T) - H^0(T_0^*)$, кДж/кг					
	300	400	500	600	700	800
0.0	1.6703	94.3405	191.3547	292.6241	398.6054	510.2997
0.01	1.6702	94.2129	190.8693	291.5711	396.7948	507.5614
0.05	1.6698	94.1885	190.8210	291.4989	396.6986	507.4413
0.1	1.6692	94.1380	190.6761	291.2069	396.1969	506.6557
0.5	1.6648	93.8944	190.1932	290.4848	395.2357	505.4553
Эталон	1.6709	94.3869	191.4710	292.8481	398.9913	510.9213
$S^0(T) - S^0(T_0)$, кДж/(кг K)						
0.0	0.0056	0.2719	0.4881	0.6726	0.8359	0.9850
0.01	0.0056	0.2715	0.4870	0.6705	0.8326	0.9804
0.05	0.0056	0.2714	0.4869	0.6703	0.8324	0.9802
0.1	0.0056	0.2713	0.4865	0.6697	0.8315	0.9789
0.5	0.0055	0.2706	0.4853	0.6681	0.8294	0.9765
Эталон	0.0056	0.2719	0.4884	0.6731	0.8367	0.9860
$G^0(T) - G^0(T_0^*)$, кДж/кг						
0.0	−0.0052	−14.406	−52.732	−110.988	−186.565	−277.708
0.01	−0.0052	−14.393	−52.647	−110.740	−186.042	−276.790
0.05	−0.0052	−14.389	−52.634	−110.712	−185.995	−276.721
0.1	−0.0052	−14.383	−52.603	−110.633	−185.839	−276.453
0.5	−0.0051	−14.345	−52.467	−110.351	−185.371	−275.764
Эталон	−0.0052	−14.412	−52.759	−111.054	−186.690	−277.922

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате исследований температурной зависимости теплоемкости алюминиевого проводникового сплава AlTi0.1 со стронцием установлено, что с ростом температуры теплоемкость, коэффициент теплоотдачи, энтальпия и энтропия сплавов растут, а по мере увеличения концентрации стронция в сплаве уменьшаются. Энергия Гиббса с ростом температуры уменьшается, а с увеличением концентрации стронция увеличивается.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Захаров М.В., Лисовская Т.Д.* Влияние различных элементов на электропроводность, твердость и температуру рекристаллизации алюминия марки АВ000 // Изв. вузов. Цветная металлургия. 1965. № 3. С. 51.
2. *Мальцев М.В.* Модифицирование структуры металлов и сплавов. М.: Металлургия, 1984. 282 с.
3. *Zhang L., Palm M., Stein F., Sauthoff G.* Formation of Lamellar Microstructures Al-rich TiAl Alloys between 900 to 1100°C // J. Intermetallics. 2001. V. 9. P. 229.
4. *Palm M., Zhang L., Stein F., Sauthoff G.* Phase and Phase Equilibria in the Al-rich Part of the Al-Ti System Above 900°C // J. Intermetallics. 2002. V. 10. № 6. P. 523.
5. *Nakano T., Negishi A., Hayashi K., Umakoshi Y.* Ordering Process of Al₃Ti₃, h-Al₂Ti and r-Al₂Ti with FCC-base Long-period Superstructures in Rapid Solidified Al-rich TiAl Alloys // J. Acta Mater. 1999. V. 47. № 4. P. 1091.
6. *Witusiewicz V.T., Bondar A.A., Hecht U. et al.* The Al-B-Nb-Ti System. III. Thermodynamic Reevaluation of the Constituent Binary System Al-Ti // J. Alloys Compd. 2008. V. 465. № 1–2. P. 64.
7. *Куцова В.З., Погребна Н.Е., Хохлова Т.С.* Алюміній та сплави на його основі: навч. посібник. Дніпропетровськ: Пороги, 2004. 135 с.
8. *Оно А.* Затвердевание металлов. М.: Металлургия, 1980. 147 с.
9. *Benci J.T., Ma J.C., Feist F.* Evaluation of the Intermetallic Compound Al₃Ti for Elevated-temperature Application // Mater. Sci. Eng. A. 1995. V. 192. P. 38.
10. *Wu Z.L., Pope D.P.* L1₂ Al₃Ti-based Alloys with Al₂Ti Precipitates – I. Structure and Stability of the Precipitates // Acta Metall. Mater. 1994. V. 42. № 2. P. 509.
11. *Wu Z.L., Pope D.P.* L1₂ Al₃Ti-based Alloys with Al₂Ti Precipitates – II. Deformation Behavior of Single Crystals // Acta Metall. Mater. 1994. V. 42. № 2. P. 519.
12. *Sturm D., Heilmaier M., Saage H. et al.* Creep Strength of Centrifugally Cast Al-rich TiAl Alloys // J. Mater. Sci. Eng. A. 2009. V. 51–511. P. 373.
13. *Деменок А.О., Ганеев А.А., Деменок О.Б., Кулаков Б.А.* Выбор легирующих элементов для сплавов на основе алюминидов титана // Вестн. ЮжУрГУ. Сер. Металлургия. 2013. № 1. С. 95.
14. *Киров С.А., Козлов А.В., Салецкий А.М., Харабадзе Д.Э.* Измерение теплоемкости и теплоты плавления методом охлаждения. М.: ООП; Физ. фак. МГУ, 2012. 23 с.
15. *Булкин П.С., Попова И.И.* Общий физический практикум: молекулярная физика. Учеб. пособ. М.: Изд-во МГУ, 1988. С. 52.
16. *Матвеев А.Н.* Молекулярная физика. Учеб. пособ. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2010. 368 с.
17. *Сивухин Д.В.* Общий курс физики. В 5-ти т. Т. 2. Термодинамика и молекулярная физика. М.: Физматлит, 2006. 544 с.
18. *Кикоин И.К., Кикоин А.К.* Молекулярная физика. СПб.: Лань, 2008. 484 с.
19. *Ганиев И.Н., Муллоева Н.М., Низомов З., Обидов Ф.Ю.* Температурная зависимость теплоемкости и термодинамических функций сплавов системы Pb–Ca // ТВТ. 2014. Т. 52. № 1. С. 138.
20. *Зокиров Ф.Ш., Ганиев И.Н., Сангов М.М., Иброхимов Н.Ф.* Влияние кальция на температурную зависимость теплоемкости и изменений термодинамических функций сплава АК12М2 // ТВТ. 2018. Т. 56. № 6. С. 867.
21. *Ганиев И.Н., Отаджонов С.Э., Иброхимов Н.Ф., Махмудов М.* Температурная зависимость теплоемкости и изменений термодинамических функций сплава АК1, легированного стронцием // ТВТ. 2019. Т. 57. № 1. С. 22.
22. *Ганиев И.Н., Сафаров А.Г., Одинаев Ф.Р., Якубов Ю.С., Кабутов К.* Температурная зависимость теплоемкости и термодинамических функций сплава Al + 4.5% Fe, легированного оловом // Изв. вузов. Цветная металлургия. 2019. № 1. С. 50.
23. *Ганиев И.Н., Отаджонов С.Э., Иброхимов Н.Ф., Махмудов М.* Температурная зависимость теплоемкости и изменений термодинамических функций сплава АК1М2, легированного стронцием // Изв. вузов. Материалы электронной техники., 2018. Т. 21. № 1. С. 35.
24. *Герашенко Ю.А., Гордов А.Н., Лах Р.И., Ярышев Н.Я.* Температурные измерения. Спр. Киев: Наукова думка, 1984. 495 с.
25. *Гортышов Ю.Ф., Дресвянников Ф.Н., Иднатулин Н.С.* Теория и техника теплофизического эксперимента. М.: Энергоатомиздат, 1993. 448 с.
26. *Зиновьев В.Е.* Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. Спр. изд. М.: Металлургия, 1984. 384 с.

УДК 544.62: 539.22

ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ ИЗУЧЕНИЕ ПЕРЕНОСА ПРОТОНА В МЕТАЛЛ-ОКСИДНОМ ПЕРОВСКИТЕ

© 2023 г. А. Е. Галашев^{1, 2, *}¹ФГБУН Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия²Уральский федеральный университет им. первого президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*E-mail: galashev@ihte.uran.ru

Поступила в редакцию 11.06.2022 г.

После доработки 01.11.2022 г.

Принята к публикации 06.12.2022 г.

В настоящей работе методом *ab initio* молекулярной динамики исследуется механизм протонной проводимости бездефектного перовскита LaScO_3 . Рассмотрено влияние начальных местоположения и скорости протона, электрического поля и температуры системы на поведение протона в металлических оксидах перовскитного типа. Показано, что температура системы выступает основным фактором, влияющим на скорость перемещения протона. Установлено аррениусовское температурное поведение протонной проводимости. В отсутствие кислородных вакансий направление движения протона в кристалле со структурой перовскита определяется его взаимодействием с фоновыми решетками, т.е. миграция протона по металл-оксидному перовскиту имеет поляронный характер. Совершенствование механизма миграции протонов по совершенному перовскиту служит одним из путей улучшения характеристик устройств чистой энергии.

DOI: 10.31857/S0040364423030109

ВВЕДЕНИЕ

Одним из наиболее важных применений протонпроводящих электролитов является их использование в твердооксидных топливных элементах (ТОТЭ) [1]. Когда топливом для этих устройств служит водород, они используют его почти на 100% и не загрязняют атмосферу продуктами сгорания, которые изменяют геосферный тепловой баланс [2]. Высокая эффективность выработки электроэнергии ставит ТОТЭ в ряд кандидатов для источников энергии будущего. Однако из-за высоких рабочих температур (800–1000°C) существуют трудности с быстрым запуском этих устройств. Достижение рабочих температур ниже 600°C является важным для расширения возможностей применения ТОТЭ и снижения его стоимости. Кроме природного газа или водорода, высокая рабочая температура твердооксидных топливных элементов позволяет использовать для них другие виды топлива. В частности, на основе ТОТЭ разработана технология преобразования отходов в энергию [3, 4]. Однако химическая стабильность таких устройств пока не удовлетворительна [5, 6].

Еще одним предназначением ТОТЭ является его использование в качестве электролизера для расщепления воды и производства водорода с затратой на это электроэнергии. ТОТЭ, работающий в таком режиме, определяется как ячейка твердооксидного электролиза. Ожидается, что благодаря своей способности использовать и производить

водород ТОТЭ будут играть важную роль в переходе к водородной энергетике [7].

Существует область применения протонпроводящих электролитов и при более низких температурах. В частности, они могут использоваться для литий-ионных аккумуляторов (ЛИА). Среди твердых электролитов рассматриваются некоторые стекла и кристаллические соединения, в том числе легированный LaScO_3 , где ионы Li^+ диффундируют через вакансии. Применение твердых электролитов для металл-ионных батарей имеет ряд преимуществ перед использованием жидких электролитов. Твердые электролиты могут обеспечить пожаробезопасность и помочь избежать утечки электролитов. Их применение увеличит плотность энергии и приведет к более длительному сроку службы аккумулятора за счет усиления жизнеспособности при циклировании. Увеличится кулоновская эффективность, появится более широкое окно электрохимической стабильности, расширится диапазон рабочей температуры. Однако достичь этого можно, используя твердый электролит с высокой ионной проводимостью.

Металл-оксидные перовскиты имеют структуру ABO_3 , показанную на рис. 1а, в которой плотноупакованные слои AO_3 уложены один над другим через упорядоченные прослойки из ионов В и О. При этом катионы В занимают октаэдрические пустоты (рис. 1б), окруженные кислородом, разме-

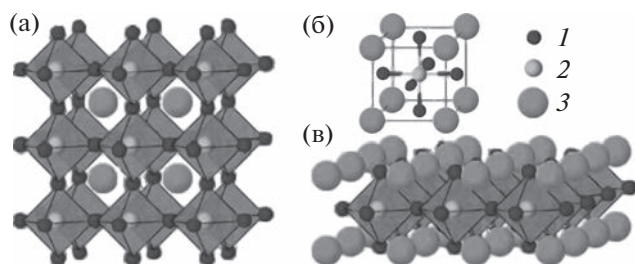


Рис. 1. Общий вид структуры ABO_3 металл-оксидного перовскита (а); (б) — ион В (2) в окружении ионов О (3) и А (1); (в) — упаковка слоев в перовските ABO_3 .

шенным в вершинах октаэдров (рис. 1в). В соединении $LaScO_3$ в качестве А иона выступает La, а иона В — Sc.

Из группы оксидов высокую проводимость при комнатной температуре ($> 10^{-3}$ См см $^{-1}$) показывает перовскит $Li-La-Ti-O$ [8]. Для его получения требуются высокие температуры ($> 1000^\circ\text{C}$). Главным недостатком перовскита является восстановление элемента Ti^{4+} до Ti^{3+} во время электрохимического процесса, что создает нежелательную электронную проводимость [9]. В данной перовскитной структуре ионная проводимость достигается за счет введения литиевых вакансий в А-позиции [10]. Однако на практике чаще встречаются случаи, когда литий заполняет междоузлия перовскита.

Перовскит $LaScO_3$ рассматривается как исходная структура твердого электролита, пригодного для использования в ЛИА [11]. Показано, что катион В-позиции Sc^{3+} имеет более высокую устойчивость к электрохимическому восстановлению, чем Ti^{4+} [12]. Когда катион Li^+ с низкой валентностью частично замещает катион La^{3+} с высокой валентностью, образуются структурные дефекты. Дефектообразование связано с компенсацией заряда, производимой междоузельными атомами лития. После введения лития в $LaScO_3$, т.е. получения соединения $(Li_xLa_{1-x/3})ScO_3$, для улучшения его ионной проводимости проводят дальнейшую модификацию путем введения дополнительных структурных дефектов. В качестве легирующей примеси для достижения наибольшей проводимости могут быть выбраны Ce^{4+} и Zr^{4+} или Nb^{5+} [8]. Они частично замещают А- или В-позиции в $(Li_xLa_{1-x/3})ScO_3$. Малоизученным остается поведение катионов H^+ и Li^+ в бездефектном перовските $LaScO_3$.

Перовскиты широко используются при изготовлении элементов солнечных батарей, КПД которых достигает 25.7% [13]. Увеличения КПД путем снижения потерь можно достичь пассивированием дефектов на границах зерен и на поверхности перовскитной пленки [14]. Дефекты негативно влияют на производительность солнечной батареи.

Цель настоящей работы — изучить влияние температуры, электрического поля, начальных местоположения и скорости протона в бездефектном оксидном перовските $LaScO_3$.

ТВЕРДООКСИДНЫЙ ТОПЛИВНЫЙ ЭЛЕМЕНТ НА ВОДОРОДЕ

Водород — очень привлекательное топливо, но в отличие, например, от угля и ветра, он труднодоступен. Это связано с тем, что свободного водорода в нашей среде практически нет. Наиболее доступными источниками водорода на сегодняшний день являются вода и природный газ. Привлекательность водорода как топлива заключается не только в его высокой энергоемкости. Водород является источником энергии, который не загрязняет окружающую среду при высвобождении энергии. Преобразование химической энергии водорода в электрическую осуществляется с помощью топливного элемента.

Топливный элемент — это устройство, которое эффективно вырабатывает тепло и постоянный ток в результате электрохимической реакции. Для проведения реакции используется богатое водородом топливо или чистый водород. Топливный элемент по принципу действия похож на аккумулятор, но имеет от него и принципиальные отличия. Конструктивно топливный элемент представлен катодом, анодом и электролитной мембраной (рис. 2). В отличие от батареи водородный топливный элемент не накапливает электрическую энергию, не требует электрической зарядки для возобновления работы, не разряжается. Элемент вырабатывает электроэнергию до тех пор, пока есть запас воздуха и топлива.

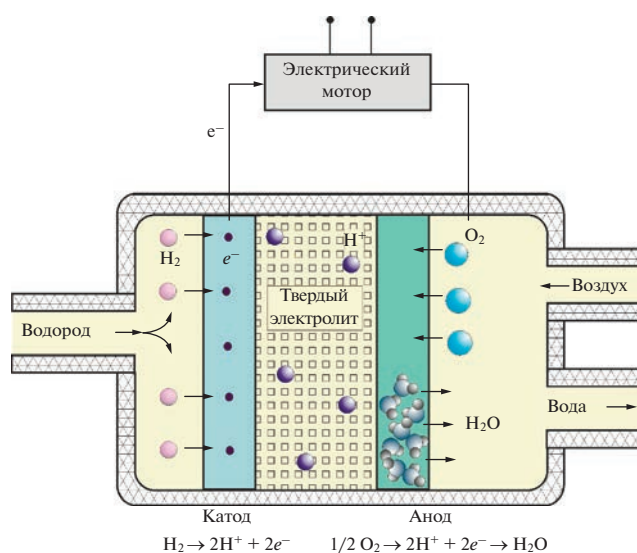


Рис. 2. Принципиальная схема водородного топливного элемента.

Проблема хранения водорода является одним из основных препятствий на пути его использования. При нормальных условиях водород занимает чрезвычайно большое пространство. Есть два способа сделать хранилище водорода более компактным. Для этого необходимо использовать сжиженный водород или сжатый газообразный водород. Однако водород становится жидким при очень низкой температуре, всего на несколько градусов выше абсолютного нуля. Кроме того, для сжижения водорода требуется слишком много энергии, а именно около 40% вырабатываемой с его использованием электрической энергии. При этом в атмосферу выбрасывается огромное количество CO_2 . Второй способ хранения водорода более приемлем. Для более широкого потребления, в том числе в автомобилях, газообразный водород сжимают до давления $\sim 60\text{--}70$ МПа. Многостадийный процесс сжатия водорода требует затрат от 10 до 15% электроэнергии, вырабатываемой с помощью полученного сжатого водорода.

Преимущество водорода перед традиционным автомобильным топливом (бензином) заключается в снижении опасности, связанной с утечкой топлива и наличием искры. В случае утечки водород просто улетучится в атмосферу, а газообразный водород нетоксичен. В то же время водород имеет крайне низкую энергию воспламенения (почти в 20 раз ниже, чем у бензина). Поэтому утечка водорода в помещение с повышенным содержанием кислорода не освобождает от пожароопасности. Эффективность топливных элементов составляет $\sim 50\text{--}60\%$, а при объединении ТОТЭ с гибридными системами газовых турбин, эффективность может увеличиться до 70%.

Электролитные мембраны имеют первостепенное значение для непрерывного и эффективного функционирования всего топливного элемента. Их низкая пористость является одним из обязательных условий, чтобы предотвратить переход в них топлива и потерю напряжения между анодом и катодом. В то же время твердый электролит должен обладать высокой протонной проводимостью, чтобы обеспечить перенос протонов между электродами. Также необходима его хорошая химическая и термическая стабильность в рабочих условиях топливных элементов. В связи с вышесказанным изучение механизма перемещения протона по твердому электролиту представляется чрезвычайно важной задачей.

КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ

Молекулярно-динамические (МД) *ab initio* расчеты, основанные на теории функционала плотности в рамках приближения локальной электронной плотности (ЛЭП), выполнены с использованием пакета программ SIESTA. Расчет обменно-корреляционного функционала основывался на

формализме Пердью–Берка–Эрнзергофа [15]. Суперячейка состояла из 16 атомов La, 16 атомов Sc и 48 атомов кислорода. В расчетах использовались периодические граничные условия Борна–Кармана. Параметры исходной решетки определялись как $a = 11.6$, $b = 8.1$, $c = 11.3$ Å, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, а объем созданной системы равен 1068.8 Å³.

SIESTA — это программное обеспечение, основанное на псевдопотенциалах, поэтому псевдопотенциалы GGA взяты из базы данных SIESTA. В расчетах использовались ультрамягкие псевдопотенциалы [16]. Данные псевдопотенциалы оптимизированы путем минимизации разницы результатов расчета различных электронных конфигураций, полученных в приближении псевдопотенциалов, и учета энергии всех электронов.

Гамильтониан для рассматриваемой системы многих тел включает оператор кинетической энергии для электронов, потенциал, действующий на электроны со стороны ядра, электрон–электронное взаимодействие, оператор кинетической энергии для ядра, межъядерное взаимодействие. В SIESTA реализуются строго локализованные числовые атомные орбитали. Иными словами, уравнение Шредингера для изолированного атома решается на основе потенциального удержания, которое делает орбиталь нулевой за пределами заданного радиуса обрезания. Использование такого приближения сокращает число используемых базовых функций, что приводит к очень высокой эффективности метода, когда значительно сокращаются используемая память и процессорное время. Простая физическая интерпретация (возможность анализа заселенности и плотности состояния) и достижение высокой точности также являются достоинствами такого подхода. Однако выбор хорошего базиса в SIESTA и способа его расширения (для улучшения сходимости) не является тривиальной задачей.

Можно выделить три важных части механизма SIESTA: псевдопотенциалы, базис, функционирование k -сетки.

Задание базисного набора выполнялось на основе данных [16]. Использовалась опция DZP, обеспечивающая кардинальность базисного набора (радиус обрезания, главное квантовое число оболочки, угловой момент базисных орбиталей этой оболочки). При этом SIESTA руководствуется внутренней эвристикой, чтобы решить, какие орбитали действительно необходимы. Использование данной опции предполагает нахождение равновесной конфигурации путем выполнения структурной релаксации с помощью сопряженных градиентов для выбранного двойного базиса. Расчеты с использованием ЛЭП выполняются по коду с прямой диагонализацией матрицы Гамильтона. Базис псевдоатомных орбиталей представляет собой локальный базис с простой конструкцией радиальной

Характеристики начальных данных и рассчитанной температуры для серии из девяти *ab initio* молекулярно-динамических расчетов

№ расчета	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$E_x, 10^{10}$ В/м	0.5	0.5	0	1.5	1.5	1.5	3.5	3.5	3.5
$E_y, 10^{10}$ В/м	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$E_z, 10^{10}$ В/м	0.5	0.5	0	1.5	1.5	1.5	3.5	3.5	3.5
$E, 10^{10}$ В/м	0.7071	0.7071	0	2.1213	2.1213	2.1213	4.9497	4.9497	4.9497
$v_{0x}, 10^5$ м/с	0.1058	0.2645	0.1058	0.2645	0.1058	0.2645	0	0	0
$v_{0y}, 10^5$ м/с	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$v_{0z}, 10^5$ м/с	0	0.2645	0	0.2645	0.1058	0.2645	0	0	0
$v_0, 10^5$ м/с	0.1058	0.3741	0.1058	0.3741	0.1496	0.3741	0	0	0
Начальная локализация протона*	1 (0.44, 0.75, 0.23)	1 (0.44, 0.75, 0.23)	1 (0.44, 0.75, 0.23)	2 (0.56, 0.75, 0.23)	3 (0.33, 0.75, 0.94)	3 (0.33, 0.75, 0.94)	3 (0.33, 0.75, 0.94)	3 (0.33, 0.75, 0.94)	3 (0.33, 0.75, 0.94)
T, K	684.78	848.31	682.05	904.31	134.91	255.00	153.43	668.80	1099.17

* В скобках приведены координаты начальных местоположений протона в нм.

функции $R_{nl\zeta}(r)$, умноженной на соответствующую сферическую гармонику. Значение радиальной функции определяется главным квантовым числом n , орбитальным угловым моментом l и ζ — количеством функций на l канал, задаваемый через сферическую функцию.

Применена не слишком плотная, а значит не очень “дорогая” для SIESTA сетка, которая тем не менее обеспечивала приемлемую сходимости. Зона Бриллюэна определена по $10 \times 10 \times 1$ k -точкам, которые генерировались с помощью алгоритма Monkhorst-Pack [17]. Плотность трехмерной сетки, используемой для расчета электронной плотности, задавалась с помощью энергии отсечки, равной 400 Ry (Ry — постоянная Ридберга, используемая в формулах для расчета уровней энергии и частот излучения атомов, $Ry = 2.179872 \times 10^{-18}$ Дж).

Интегрирование уравнений движения при реализации *ab initio* молекулярной динамики проводилось методом Верле с шагом по времени 1 фс. Перед каждым МД *ab initio* расчетом выполнялась геометрическая оптимизация. Динамическая релаксация атомов продолжалась до тех пор, пока изменение полной энергии системы не становилось меньше 10^{-4} эВ. Затем после релаксации в систему помещали протон, который занимал разные положения:

а) в плоскости октаэдра Sc между атомами кислорода в точке 1;

б) в плоскости октаэдра Sc вблизи атома кислорода в точке 2;

в) в плоскости нахождения атомов La с локализацией вблизи атома кислорода в точке 3.

МД-расчеты из первых принципов для систем, содержащих протон, выполнялись с начальной скоростью протона, которая изменялась от $v_0 = 0$ до 0.37418×10^5 м/с. На протон действовало электрическое поле, вектор напряженности которого лежал в плоскости xz . Направления этого вектора менялись, а величина напряженности изменялась от 0 до 3.5×10^{10} В/м. Проведено девять расчетов протяженностью ~ 1000 временных шагов в диапазоне температур от 153 до 1100 К. Последнее значение температуры близко к рабочей температуре ТОТЭ, использующих в качестве электролита соединения на основе $LaScO_3$. Данные о температуре, приложенном электрическом поле, начальной скорости протона и его начальном местонахождении представлены в таблице. Для определения моментов времени, в которые происходил скачок протона от одного атома кислорода к другому, разработан соответствующий алгоритм, код которого реализован на языке Python 3.8. Этот алгоритм основан на отслеживании изменения потенциальной энергии протона. Пики на этой зависимости отражают виртуальные оседлые положения протона, а временной интервал между этими пиками определяет время его перехода от одного атома кислорода к другому.

Коэффициент диффузии D протона в металлооксидном перовските рассчитывался по временной зависимости среднего квадрата его смещения. Коэффициент D может быть выражен через

протонную проводимость σ с использованием соотношения Нернста–Эйнштейна

$$D = \frac{\sigma k T}{e^2 C_H},$$

где k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, e – элементарный заряд и C_H – концентрация протонов.

Энергия активации определялась по соотношению

$$\sigma = \sigma_0 \exp(-E_a/kT),$$

где σ_0 – предэкспоненциальный множитель; E_a – энергия активации, рассчитанная по наклону линейной зависимости $\ln(\sigma(1000/T))$.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА

На рис. 3 показаны горизонтальные проекции конфигураций кристалла LaScO_3 , соответствующие моменту времени 1 пс. В эксперименте № 1 на протон действовало постоянное электрическое поле с напряженностью $E = 0.7071 \times 10^{10}$ В/м, эксперимент № 3 проводился в отсутствие электрического поля. При наличии поля траектория протона заключена в более ограниченную область пространства, чем при его отсутствии. Примечательно, что большая часть пути протона проходит не по направлению, определяемому напряженностью электрического поля, а по направлению, образуемому некоторый угол с направлением вектора $\mathbf{E}$. В обоих случаях траектория иона оказывается довольно запутанной. Он мог попадать в окрестность другого (отличного от исходного) атома кислорода и оставаться там какое-то время. Он также мог сближаться с соседними атомами La и Sc, изначально с ним не соседними. Кроме того, протон мог не только удаляться от своего первоначального местоположения, но и вновь приближаться к нему, двигаясь в направлении, противоположном направлению уже пройденного пути. Таким образом, электрическое поле не оказывает существенного влияния на выбор предпочтительного направления движения протона в кристалле LaScO_3 . Скорее всего, место его виртуального нахождения определяется притяжением протона к любому из ближайших к нему атомов кислорода.

Температурная зависимость потенциальной энергии перовскита LaScO_3 не является монотонной (рис. 4). Резкие изменения энергии U в небольшом диапазоне температур наблюдаются при температурах $T < 153$ К и в интервале $668 \leq T \leq 685$ К. В этом диапазоне температур наибольшая энергия U соответствует состоянию с наибольшим значением электрического поля, а наименьшая энергия появляется, когда поле отсутствует. Самая высокая энергия U во всем рассматриваемом интервале температур наблюдается при $T = 1099$ К. Данное

состояние также получено при максимальном значении напряженности электрического поля.

Поведение протона в системе существенно зависит от температуры перовскита. Можно с уверенностью сказать, что скачков протонов при температурах ниже 400 К не наблюдается; протон колеблется вокруг атома кислорода, возле которого он изначально находился. В интервале температур 600–800 К возникают случайные пере-скоки протонов между атомами кислорода. Одна-

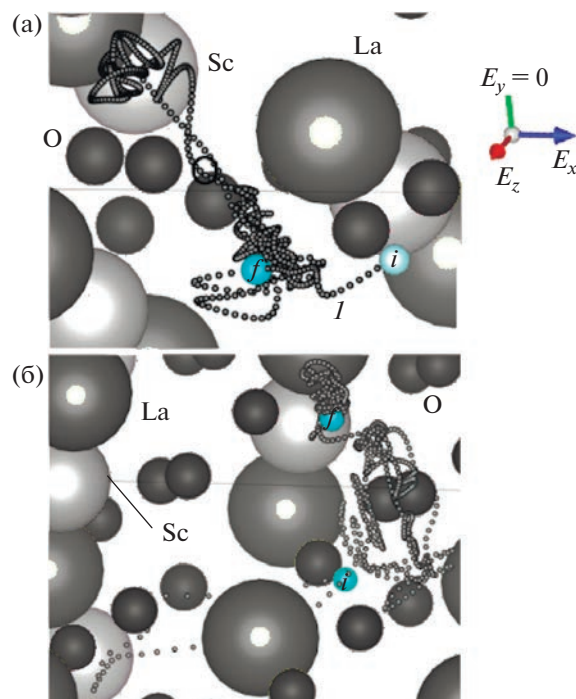


Рис. 3. Горизонтальные проекции конфигураций кристалла LaScO_3 , соответствующие моменту времени 1 пс: (а) – при наличии электрического поля напряженностью $E = 0.7071 \times 10^{10}$ В/м, (б) – при его отсутствии; I – траектории протона за указанный интервал времени; i, f – начало и конец траектории соответственно.

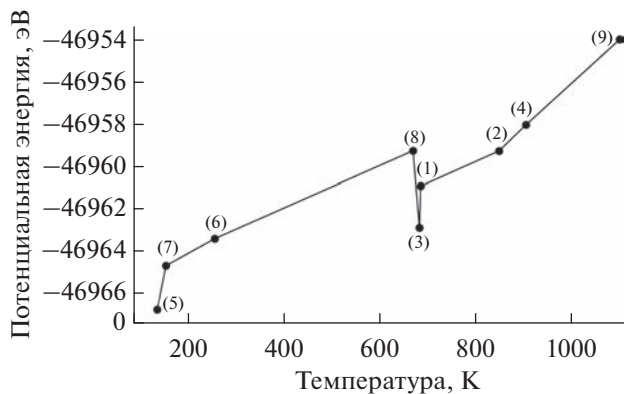


Рис. 4. Зависимость потенциальной энергии от температуры для расчетных состояний перовскита LaScO_3 ; цифры – номера расчетов из таблицы.

ко такие скачки оказываются довольно редкими. Большинство прыжков протонов наблюдалось при температурах выше 800 К, когда протон имеет достаточную скорость для преодоления потенциального барьера.

Наблюдение за поведением протона в перовскитной системе в интервале температур 680–850 К позволяет выделить временной интервал, в течение которого протон совершил перескок к соседнему атому кислорода или к другому месту временной локализации. Во временной развертке потенциальной энергии такой интервал всегда содержится между локальными экстремумами функции $U(t)$. На рис. 5 показаны функции $U(t)$, полученные в расчетах №№ 1–3, определенных в таблице. Интервалы времени, в течение которых протон перескакивал в новое оседлое положение, выделены на рисунке затененными полосами. Во всех случаях длительность интервала совершения скачка не превышала 100 фс, т.е. 100 временных шагов. Очевидно, что за такой промежуток времени протон полностью “забывает” начальное направление своей скорости. Дальнейшая скорость протона на определяется межатомным взаимодействием, температурой и частично направлением напряженности электрического поля. Электрическое поле не определяет полностью направление движения протона, но влияет на мгновенные значения потенциальной энергии: чем больше электрическое поле, тем значительнее флуктуации функции $U(t)$. Сравнение рис. 5а, 5б свидетельствует в пользу того, что на частоту скачков протона могут влиять направление и величина его начальной скорости. В частности, при большем значении скорости увеличиваются временные интервалы между скачками протона. В то же время сравнение рис. 5а, 5в показывает, что количество перескоков протонов в присутствии электрического поля может не увеличиваться, а наоборот, уменьшаться.

На рис. 6 представлены типы возможных прыжков протона в перовските LaScO_3 . Направления движения протона показаны светлыми отрезками, соединяющими светлые кружки (обозначения протонов). В случае I протон меняет свое положение, переходя от атома кислорода, принадлежащего одному октаэдру, к атому кислорода, принадлежащему другому октаэдру, и происходит переход между атомами La. В случае II протон, минуя только один атом La, переходит от одного атома кислорода к другому по ребру октаэдра, причем оба атома кислорода принадлежат одному и тому же октаэдру. В случаях III и IV протон также проходит один атом La, но атомы кислорода, между которыми он движется, разделены октаэдром, т.е. вместе принадлежат трем соседним октаэдрам. Прямой и обратный пути протона в этих случаях не эквивалентны из-за различия атомного окружения. Поэтому рассмотрим их от-

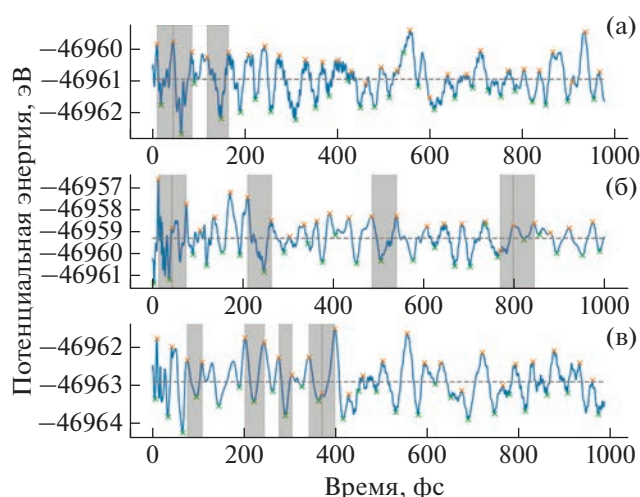


Рис. 5. Изменение потенциальной энергии перовскитной системы во времени в расчетах 1 (а), 2 (б), 3 (в); затененные полосы — периоды скачков протона между атомами кислорода; штриховая линия — средняя потенциальная энергия.

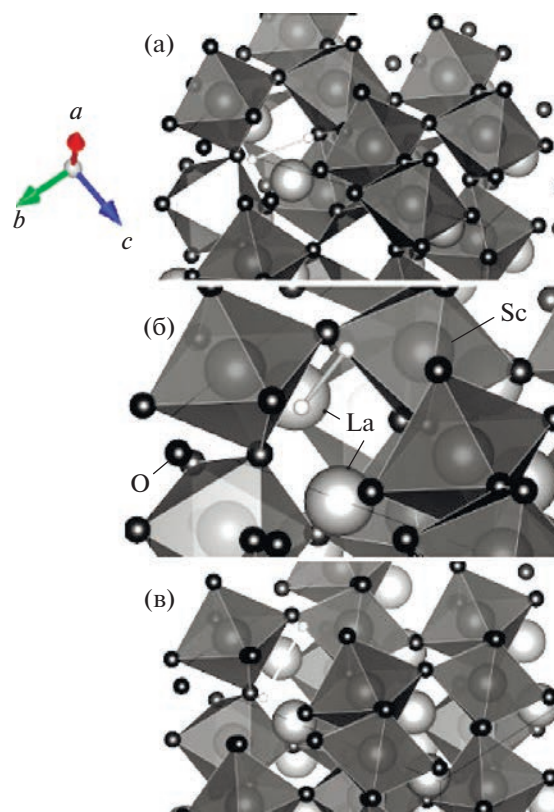


Рис. 6. Типы перескоков протона в перовските I (а), II (б), III или IV (в).

дельно, полагая, что случай III соответствует прямому переходу, т.е. попаданию протона в плоскость октаэдра, а случай IV соответствует обратному переходу.

На рис. 7 показаны характеристики прыжков протонов, классифицированных по четырем ти-

пам, определенным выше. Скачки первого типа I можно охарактеризовать как миграцию протона в лантановой плоскости (плоскость между октаэдрами). Второй тип скачков II происходит на плоскости скандия (в плоскости октаэдров). Скачки третьего типа III включают движение протона из плоскости лантана в плоскость скандия (переход в плоскость октаэдра). Четвертый тип IV перехода выражает выход протона из плоскости скандия и его возвращение в плоскость лантана.

Скачки первого типа характеризуются наибольшей высотой энергетического барьера, наименьшим временем прыжка (поскольку в этом случае протон приобретает наибольшую кинетическую энергию), а количество прыжков этого типа минимально. Для совершения прыжка второго типа протону также необходимо приобрести достаточно большую кинетическую энергию, чтобы преодолеть второй по величине энергетический барьер. В этом случае время прыжка самое большое. Количество таких прыжков составляет четверть всех выполненных прыжков. Барьер для совершения прыжков третьего типа несколько меньше, чем для прыжков второго типа, а время выполнения таких прыжков заметно меньше, чем для прыжков второго типа, но несколько больше, чем для прыжков первого типа. Доля прыжков третьего типа оказывается наибольшей. Прыжки четвертого типа характеризуются наименьшим энергетическим барьером и занимают немного больше времени, чем прыжки третьего типа. Количество таких прыжков, как и прыжков второго типа, составляет четверть всех прыжков.

Время миграции протона между плоскостями лантана и скандия практически не зависит от направления, а доля переходов в плоскость скандия значительно больше, чем из нее. Следовательно, этот прыжок выгоднее для протона, чем движение в плоскости лантана, поэтому он предпочитает двигаться в направлении плоскости скандия. Одновременно движение протона в плоскости скандия и выход из нее равновероятны (доли прыжков этих типов одинаковы), но для движения в Sc-плоскости протону необходимо преодолеть более значительный потенциальный барьер, чем для того, чтобы выйти из него. Поэтому время скачка в плоскости скандия больше.

Согласно закону Аррениуса (при учете соотношения Нернста–Эйнштейна), зависимость протонной проводимости σ от обратной температуры можно представить в виде линейной зависимости $\ln \sigma(1/T)$. Для расчета средней энергии активации для перемещения протона использовались данные, представленные на рис. 7а, 7б, т.е. средняя энергия активации определялась с учетом вклада каждого типа скачка протона. Зависимость

$$\ln \sigma(1000/T) = 0.028 - 7.328(1000/T), \quad (1)$$

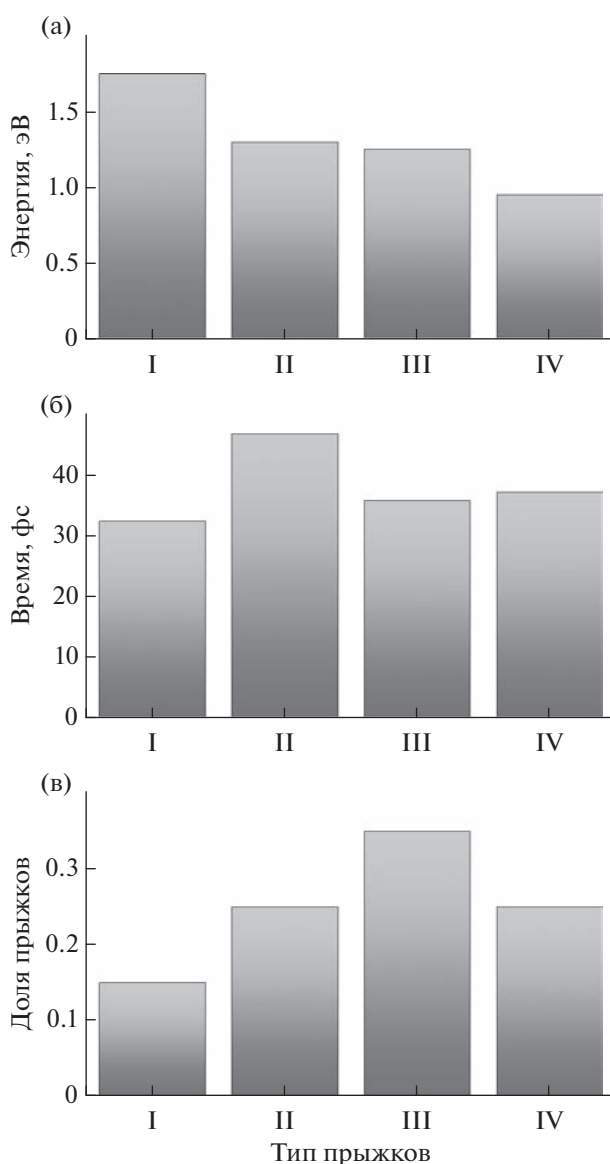


Рис. 7. Параметры выполнения различных типов прыжков протонов: (а) – средняя высота энергетического барьера, (б) – среднее время прыжка, (в) – доля прыжков данного типа от всех прыжков.

отражающая расчетную температурную зависимость проводимости протонов в перовските LaScO_3 , представлена на рис. 8. Аналогичная зависимость определена для ионов кислорода, дырок и протонов, диффундирующих в легированном кальцием кристаллическом перовските $\text{La}_{0.9}\text{Ca}_{0.1}\text{ScO}_{3-\delta}$ в узком диапазоне (от 626 до 867 К) методом электрохимического импеданса [18]. Получено удовлетворительное согласие наклонов зависимостей $\ln \sigma(1000/T)$ для $\text{La}_{0.9}\text{Ca}_{0.1}\text{ScO}_{3-\delta}$ и LaScO_3 . Керамика $\text{La}_{0.9}\text{Ca}_{0.1}\text{ScO}_{3-\delta}$ является одним из наиболее высокопроводящих твердых ионных проводников ($\sigma = 1.8 \times 10^{-3}$ См/см при $T = 867$ К и $\sigma = 5.8 \times 10^{-5}$ См/см при $T = 626$ К) [18]. Заметим, что

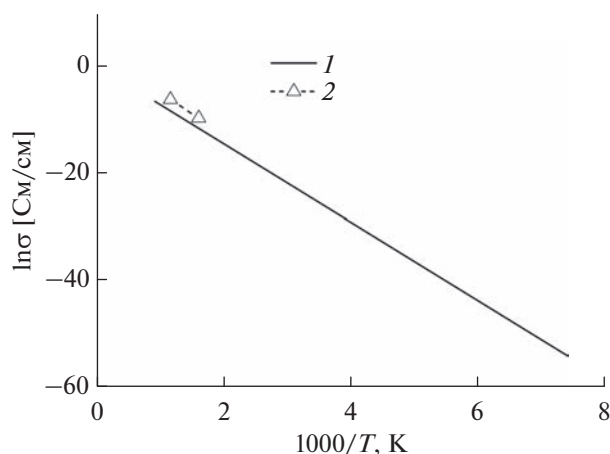


Рис. 8. Зависимость $\ln \sigma$ от параметра $1000/T$ при постоянной средневзвешенной энергии активации $E_a = 1.255$ эВ для движения протона по бездефектному перовскиту LaScO_3 , полученная методом *ab initio* МД (1); 2 — значения аналогичной характеристики для $\text{La}_{0.9}\text{Ca}_{0.1}\text{ScO}_{3-\delta}$, полученные методом электрохимического импеданса [18].

уровень ионной проводимости традиционного жидкого электролита, как правило, составляет $\sim 10^{-2}$ См/см [19]. За счет легирования двухвалентным Са в перовските создаются кислородные вакансии, что увеличивает общую проводимость. Зависимость $\ln \sigma(1000/T)$ для $\text{La}_{0.9}\text{Ca}_{0.1}\text{ScO}_{3-\delta}$ находится несколько выше соответствующей зависимости для LaScO_3 .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследована протонная проводимость в бездефектном перовските LaScO_3 . Понимание механизма протонной проводимости в бездефектном материале, занимающем не менее 80% даже в легированных и обогащенных кислородными вакансиями кристаллах металлооксидов со структурой перовскита, важно для дальнейшего совершенствования экологически чистых энергетических устройств. В настоящей работе исследовано поведение протона в кристалле LaScO_3 в зависимости от начального местоположения и скорости, внешнего электрического поля и температуры. Установлен прерывистый характер диффузии протонов в исследуемом перовските и выделены четыре типа скачков, определяемых структурными особенностями этого соединения. Ряд фактов свидетельствует в пользу поляронного характера миграции протонов в перовските LaScO_3 . В частности, это подтверждается тем, что траектория движения протона в гораздо большей степени определяется его ближайшим окружением и температурой системы, чем внешним электрическим полем.

Среднее время выполнения всех типов протонных прыжков составляет от 32 до 47 фс, а

энергия активации для перемещения протона изменяется в диапазоне $0.95 \leq E_a \leq 1.75$ эВ. Разница в частотах разных типов прыжков может составлять 2.3 раза. Установлено, что миграция протонов в твердом бездефектном перовските LaScO_3 характеризуется уравнением (1).

Переносу протона способствуют кооперативные процессы, такие как колебания решетки. В перовскитах типа ABO_3 уровень протонной проводимости зависит от природы атомов в этом соединении. Обычно протонная проводимость увеличивается с уменьшением электроотрицательности элементов А и В. Увеличение протонной проводимости за счет легирования перовскита имеет принципиальные ограничения. Во-первых, образование кислородной вакансии связано с разрывом связи кислород–металл (О–М), что требует определенного количества энергии. Во-вторых, образование электрически нейтральной вакансии сопровождается восстановлением соседних катионов [20] и, следовательно, производит изменение химической энергии. В-третьих, при избыточном количестве кислородных вакансий может нарушаться стабильность содержащего их соединения [21]. Таким образом, в перовските типа ABO_3 может быть создано лишь ограниченное число кислородных вакансий.

Несмотря на значительные усилия, направленные на поиск удовлетворительных твердых электролитов, задача достижения благоприятной ионной проводимости все еще не решена. Одним из основных пробелов является отсутствие систематических знаний о механизмах переноса ионов, которые могли бы способствовать повышению ионной проводимости. Другими словами, научное понимание этих механизмов рассматривается как критический элемент для продуктивного использования твердых электролитов. Общепринятой фундаментальной физической картиной миграции ионов в ионных проводниках служит представление о скачкообразном характере их перемещения с одной занятой позиции на другую [22]. Существует множество обзоров, предлагающих различные механизмы ионного транспорта в твердых электролитах [23, 24]. Однако универсальная схема для повышения ионной проводимости все еще не разработана.

Скачкообразное движение протона по твердому электролиту является термически управляемым процессом. Для создания быстрой диффузии протона чаще всего используют дефектную регуляцию, так как это удобно и эффективно. Однако увеличение протонной проводимости путем легирования ограничено предельной концентрацией дефектов, при которой возможно поддерживать существование кристаллической структуры. В случае нескольких типов носителей заряда (т.е. разных ионов) применение механизма согла-

сованной миграции в твердых электролитах также может значительно повысить ионную проводимость. Тесное взаимодействие решеточного остова с подвижными ионами тормозит движение ионов и уменьшает ионную проводимость.

Таким образом, основные концепции повышения ионной (и в частности, протонной) проводимости состоят в обеспечении быстрой диффузии для мобильных ионов и в снижении сопротивления окружающего их потенциального поля. Значительное улучшение характеристик устройств чистой энергии возможно благодаря не только усилению влияния кислородных вакансий, но и совершенствованию механизма миграции протонов по совершенному перовскиту.

Работа частично поддержана Правительством РФ, госзадание № 075-03-2022-011 от 14.01.2022 (FEUZ-2020-0037), часть работы выполнена в рамках научной темы Института высокотемпературной электрохимии УрО РАН № FUME-2022-0005, регистрационный номер 122020100205-5.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zhang W., Hu Y.H. Progress in Proton-conducting Oxides as Electrolytes for Low-temperature Solid Oxide Fuel Cells: From Materials to Devices // *Energy Sci. Eng.* 2021. V. 9. P. 984.
2. Смирнов Б.М. Проблемы глобальной энергетики атмосферы // *TBT*. 2021. Т. 59. № 4. С. 589.
3. Wang Q., Wei H.-H., Xu Q. A Solid Oxide Fuel Cell (SOFC)-based Biogas-from-waste Generation System for Residential Buildings in China: A Feasibility Study // *Sustainability*. 2018. V. 10. P. 2395.
4. Хасхачих В.В., Ларина О.М., Сычев Г.А., Герасимов Г.Я., Зайченко В.М. Пиролитические методы термической переработки твердых коммунальных отходов // *TBT*. 2021. Т. 59. № 3. С. 467.
5. Kreuer K.D., Paddison S.J., Spohr E., Schuster M. Transport in Proton Conductors for Fuel-cell Applications: Simulations, Elementary Reactions, and Phenomenology // *Chem. Rev.* 2004. V. 104. P. 4637.
6. Горелов В.П., Строева А.Ю. Протонные твердые электролиты на основе LaScO_3 // *Электрохимия*. 2012. Т. 48. № 10. С. 1044.
7. Caramanico N., Di Florio G., Baratto M.C., Cigolotti V., Basosi R., Busi E. Economic Analysis of Hydrogen Household Energy Systems Including Incentives on Energy Communities and Externalities: A Case Study in Italy // *Energies*. 2021. V. 14. P. 5847.
8. Inaguma Y., Liquan C., Itoh M., Nakamura T. High Ionic Conductivity in Lithium Lanthanum Titanate // *Solid State Commun.* 1993. V. 86. P. 689.
9. Birke P., Scharner S., Huggins R.A., Weppner W. Electrolytic Stability Limit and Rapid Lithium Insertion in the Fast-ion-conducting $\text{Li}_{0.29}\text{La}_{0.57}\text{TiO}_3$ Perovskite-type Compound // *J. Electrochem. Soc.* 1997. V. 144. P. L167.
10. Stramare S., Thangadurai V., Weppner W. Lithium Lanthanum Titanates: A Review // *Chem. Mater.* 2003. V. 15. P. 3974.
11. Zhao G., Suzuki K., Hirayama M., Kanno R. Syntheses and Characterization of Novel Perovskite-type LaScO_3 -based Lithium Ionic Conductors // *Molecules*. 2021. V. 26. P. 299.
12. Hellstrom E.E., Van Gool W. Li Ion Conduction in Li_2ZrO_3 , Li_4ZrO_4 , and LiScO_2 // *Solid State Ion.* 1981. V. 2. P. 59.
13. Hui W., Chao L., Lu H. et al. Stabilizing Black-phase Formamidinium Perovskite Formation at Room Temperature and High Humidity // *Science*. 2021. V. 371. № 6536. P. 1359.
14. Fang Z., Jia L., Yan N. et al. Proton-transfer-induced *in situ* Defect Passivation for Highly Efficient Wide-bandgap Inverted Perovskite Solar Cells // *InfoMat*. 2022. V. 4. № 6. e12307.
15. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 77. P. 3865.
16. Siesta-pro/siesta-pseudos-and-basis-database. <https://www.simuneatomistics.com/siesta-pro/siesta-pseudos-and-basis-database/>
17. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special Points for Brillouin-zone Integrations // *Phys. Rev. B*. 1976. V. 13. P. 5188.
18. Belova K., Egorova A., Pachina S., Animits I. Crystal Structure, Electrical Conductivity and Hydration of the Novel Oxygen-deficient Perovskite $\text{La}_2\text{ScZnO}_{5.5}$, Doped with MgO and CaO // *Appl. Sci.* 2022. V. 12. P. 1181.
19. Wang C., Xu B.B., Zhang X., Sun W., Chen J., Pan H., Yan M., Jiang Y. Ion Hopping: Design Principles for Strategies to Improve Ionic Conductivity for Inorganic Solid Electrolytes // *Small*. 2022. V. 18. № 43. 2107064.
20. Pavone M., Muñoz-García A.B., Ritzmann A.M., Carter E.A. First-principles Study of Lanthanum Strontium Manganite: Insights into Electronic Structure and Oxygen Vacancy Formation // *J. Phys. Chem.* 2014. V. 118. P. 13346.
21. Park M.H., Lee D.H., Yang K., Park J.-Y., Yu G.T., Park H.W., Materano M. et al. Review of Defect Chemistry in Fluorite-structure Ferroelectrics for Future Electronic Devices // *J. Mater. Chem.* 2020. V. 8. P. 10526.
22. Журифалько Л. Статистическая физика твердого тела / Под ред. Креси́на В.З., Струнина Б.М. М.: Мир, 1975. 382 с.
23. Zhang B., Tan R., Yang L. et al. Mechanisms and Properties of Ion-transport in Inorganic Solid Electrolytes // *Energy Storage Mater.* 2018. V. 10. P. 139.
24. Yang H., Wu N. Ionic Conductivity and Ion Transport Mechanisms of Solid-state Lithium-ion Battery Electrolytes: A Review // *Energy Sci. Eng.* 2022. V. 10. № 5. P. 1643.

ПРОЦЕСС ПЕРЕНОСА ТЕПЛА В УГОЛЬНОМ ПЛАСТЕ С ИЗМЕНЯЮЩИМИСЯ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ¹

© 2023 г. И. М. Абдулагатов^{1, 2, *}, А. Э. Рамазанова¹

¹Институт проблем геотермии и возобновляемой энергетики – филиал
Объединенного института высоких температур РАН, Махачкала, Россия

²Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

*E-mail: ilmutdina@gmail.com

Поступила в редакцию 20.08.2022 г.

После доработки 09.02.2023 г.

Принята к публикации 11.05.2023 г.

Приведены новые экспериментальные термодинамически согласованные данные температурной зависимости температуропроводности, теплоемкости и рассчитанной на их основе теплопроводности ($\lambda = \alpha \rho C_p$) черного угля. Экспериментально исследовано влияние термического разложения (пиролиза) угля вблизи 700 К, испарения влаги и других легко летучих компонентов угля при 380 К на поведение теплоемкости и теплопроводности. Измерения проводились бесконтактным методом лазерной вспышки (Netzsch LFA 457) в интервале температур 301–823 К. По измеренным значениям температуропроводности черного угля исследован процесс переноса тепла в угольном пласте. Показано, что учет температурной зависимости температуропроводности среды при решении уравнения теплопереноса существенно влияет на распределение температуры в пласте.

DOI: 10.31857/S0040364423030018

ВВЕДЕНИЕ

Уголь является основным источником энергии в мире и одним из самых популярных видов энергетического топлива. Теплофизические свойства угля — температуропроводность, теплоемкость и теплопроводность — необходимы для моделирования процессов переноса тепла в угольных пластах. Тепловые характеристики угля зависят от многих факторов: температуры, состава, пористости, содержания влаги и др. На поведение теплофизических свойств сильно влияют такие физико-химические процессы, как пиролиз (термическое разложение длинных углеводородных цепочек на более простые за счет обрыва связей) и удаление летучих компонентов, образующихся в угле при нагревании. Точное описание данных процессов необходимо для понимания угольной технологии на разных ее этапах: от добычи угля до его конечного использования в промышленных печах, высокоинтенсивных камерах сгорания.

Распределение температуры в пластах зависит от теплофизических характеристик среды (температуропроводности, теплоемкости, теплопроводности) и их температурных зависимостей, которые в настоящее время недостаточно изучены. Причина в том, что уголь является сложным веще-

ством и при его термическом разложении трудно выделить одно явление, чтобы изучить его отдельно. Для численного моделирования процессов теплопереноса в угольных пластах, т.е. решения системы дифференциальных уравнений теплового и энергетического баланса, необходимы точные экспериментальные данные о термодинамических и транспортных свойствах угля как функции температуры в широком диапазоне температур.

Цель данной работы — экспериментально исследовать температуропроводность и теплоемкость черного угля в широком интервале температур и на их основе с помощью решения уравнения теплопроводности с изменяющимися коэффициентами изучить процесс переноса тепла в угольном пласте.

ЭКСПЕРИМЕНТ

Основные характеристики образца. Образец черного угля предоставлен лабораторией “Использование глубинного тепла Земли” университета Монаш, Мельбурн, Австралия, из шахты Аппин в бассейне Сиднея (проф. Ranjith). Плотность угля $\rho = 1.6 \times 10^3 \text{ кг/м}^3$ при 298.15 К, пористость — 5%, глубина залегания — 1500 м, влагосодержание — 3 мас. %, выход золы — 10 мас. %. Элементный химический анализ образца (таблица) проведен на EDX-детекторе (OmegaMax, FEI).

Метод измерения температуропроводности. Измерение температуропроводности черного угля

¹ По материалам Восьмой Российской национальной конференции по теплообмену (РНКТ-8). Москва. 17–22 октября 2022 г.

Химический состав черного угля, %

C	O	H	N	S	Si	Al	Fe	K	Mn
79.65	9.350	5.130	1.470	0.347	2.475	1.043	0.295	0.229	0.011

проводилось бесконтактным методом лазерной вспышки с помощью прибора Netzsch LFA 457. Метод лазерной вспышки — абсолютный (без процедуры калибровки), он позволяет измерять истинную (присущую материалу) температуропроводность образца, обусловленную переносом тепла. При этом происходит отделение радиационной (фотонной) составляющей и учитываются тепловые потери для температуропроводности с использованием математической модели, заложенной в программное обеспечение. Метод имеет ряд преимуществ по сравнению с традиционными контактными методами: 1) отсутствует контактное сопротивление образца с термопарами и источником тепла, что увеличивает точность измерения теплового потока, проходящего через образец, и точность измерения температуропроводности; 2) упрощается подготовка образца с учетом его небольших размеров (6–25.4) мм; 3) время измерения занимает несколько секунд для одной температуры или несколько часов для полной температурной области исследования; 4) повышается точность измерения (от 2 до 3% для температуропроводности и 5% для теплопроводности); 5) увеличивается диапазон измерений температуропроводности ($0.1\text{--}2000\text{ м}^2\text{ с}^{-1}$) и теплопроводности ($0.1\text{--}2000\text{ Вт м}^{-1}\text{ К}^{-1}$); 6) исследованный образец можно использовать далее для измерения теплоемкости или температуропроводности другими методами.

Метод лазерной вспышки достаточно полно и подробно описан в литературе [1–8], а также в публикациях [9–12]. Данный метод успешно применен для измерения температуропроводности горных пород в [1, 2, 4–8] и изоляционных материалов в [3]. Погрешность измерения температуропроводности данным методом составляет 3%, что подтверждено в [13], а также в [14] на стандартном образце в интервале температур 293–973 К. Процедура измерения температуропроводности методом лазерной вспышки полностью удовлетворяет признанным во всем мире требованиям [15, 16].

Процесс измерения полностью автоматизирован и управляется программным обеспечением с использованием математической модели для подгонки кривой к сигналу детектора (T – t -профиль). Измеренные данные анализируются с учетом тепловых потерь и эффектов конечных импульсов. Используются модель [17] при низких температурах (около комнатной температуры) и модель [18] при высоких температурах (выше 373 К). Для измерения применялся цилиндрический образец

угля высотой $h = 1.23$ мм, диаметром $d = 10$ мм. Плоскости образца отшлифованы параллельно друг другу с точностью до 0.05 мм. Полученная погрешность измерения температуропроводности с вероятностью 95% и коэффициентом охвата $k = 2$ составляет 3%. Измерения проводились в атмосфере азота.

Метод измерения изобарной теплоемкости. Изобарная теплоемкость того же образца черного угля измерена с использованием метода DSC 204 F1 сканированием со скоростью 10 град/мин (скорость нагрева) в атмосфере азота, погрешность измерения составила 2–3%. DSC — чувствительный метод, который позволяет исследовать структурные изменения при нагревании и их влияние на свойства материалов. Из полученных данных легко определить изменение энтальпии фазовых переходов. Подробно методика и процедура измерений описаны в [9–11, 19]. Данный метод успешно применен в работах [20, 21] для измерения температурной зависимости теплоемкости и температуропроводности резервуарных пород, насыщенных тяжелой нефтью.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Описанный выше метод лазерной вспышки использован для измерения температуропроводности a и теплоемкости C_p в интервале температур от 301 до 823 К. Все измерения a и C_p проводились на сухом (осушение образца выполнялось при температуре 105°C), влажном и термически обработанном (после 850 К) образцах черного угля. Полученные экспериментальные значения температуропроводности угля показаны на рис. 1.

У углей, в отличие от твердых веществ, не содержащих органических соединений, насыщения температуропроводности не наблюдается, поскольку при высоких температурах происходят улетучивание и структурные изменения органических компонентов угля. Это приводит к росту температуропроводности угля при высоких температурах. При температуре около 485 К наблюдается минимум температуропроводности, который отсутствует у обычных твердых материалов. Как показал эксперимент, данные по температуропроводности угля для влажного и сухого образцов до и после температурного воздействия (теплового стресса) практически совпадают (расхождения в пределах экспериментальной погрешности). Для описания температурной зависимости температуропроводности угля $a(T)$ во всем диапазоне

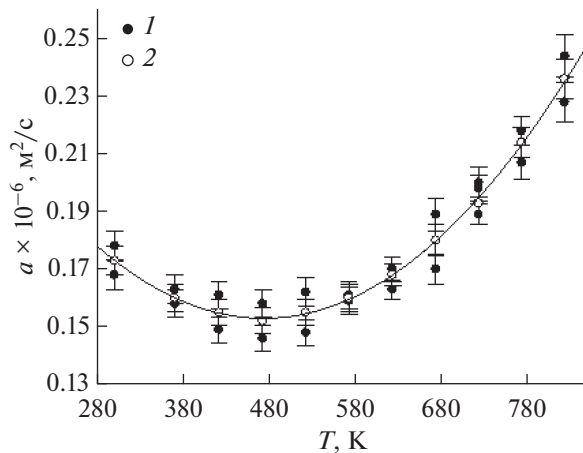


Рис. 1. Температуропроводность черного угля в зависимости от температуры при атмосферном давлении: 1 — прямой и обратный ход измерений для сухого и влажного образца; 2 — усредненные значения; сплошная кривая — результаты расчета по (1).

температур использовано простое полиномиальное уравнение второго порядка

$$a = A + BT + CT^2 \quad (1)$$

с коэффициентами $A = 0.306117 \text{ мм}^2/\text{с}$, $B = -6.46113 \times 10^{-4} \text{ мм}^2/(\text{с К})$, $C = 6.80700 \times 10^{-6} \text{ мм}^2/(\text{с К}^2)$, T в К. Коэффициент корреляции равен 0.998. Максимальное отклонение рассчитанных значений температуропроводности по (1) от экспериментальных во всем интервале температур составляет 0.9%, что значительно меньше экспериментальной погрешности температуропроводности (3%).

На рис. 2 представлены результаты измерений температуропроводности различных типов углей, полученные разными авторами вместе с данными настоящей работы, которые качественно хорошо согласуются с характерным минимумом $0.152 \text{ мм}^2 \text{ с}^{-1}$ около 485 К.

Измерения теплоемкости сухого и влажного образцов угля выполнены в интервале температур от 304.15 до 771.15 К. Результаты измерений до и после термической обработки при высоких температурах приведены на рис. 3. Поведение C_p (рис. 3а) указывает на влияние влагонасыщения и реакции пиролиза на температурное поведение теплоемкости, которое имеет сложный характер и сильно отличается в различных диапазонах температуры. На рис. 3а видны отчетливые изменения теплоемкости на разных стадиях нагрева, когда в порах угля происходят физико-химические процессы, которые по-разному влияют на его свойства. В начальном низкотемпературном диапазоне (до 380 К) теплоемкость угля быстро увеличивается с ростом температуры, проходит через максимум, затем резко падает при дальнейшем нагревании до 485 К, что связано с уменьшением

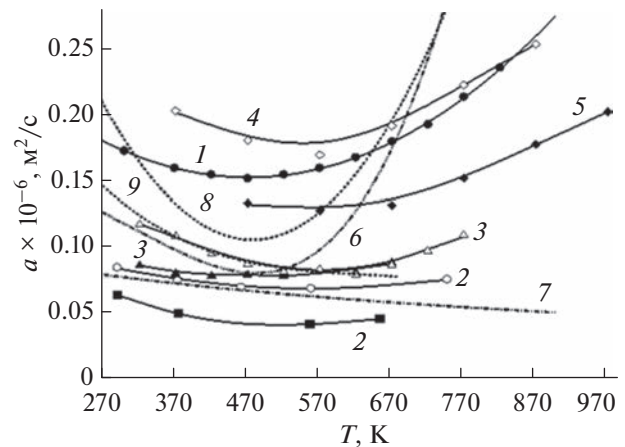


Рис. 2. Температуропроводность как функция температуры для различных типов углей: 1 — данная работа (черный уголь); 2 — [22] (из разных месторождений); 3 — [23] (из разных месторождений); 4 — [24] (черный уголь); 5 — [24] (бурый уголь); 6 — [25] (битуминозный уголь); 7 — [26] (битуминозный уголь); 8 — рассчитанные значения (черный уголь) [26]; 9 — [24], обобщенные результаты для различных типов угля из различных месторождений.

массы образца за счет выделения летучих веществ и испарения поровой (свободной) воды — основного источника потери массы в диапазоне температур 373–480 К. Для сухого образца максимум C_p значительно меньше и обусловлен испарением связанной воды в порах и удалением легколетучих компонентов угля (метан, этан, водород, азот и т.д.).

Подобная интерпретация поведения теплоемкости угля приведена в работе [27]. Аналогичное поведение C_p наблюдается и для горных пород, насыщенных тяжелыми углеводородами [9, 11, 12]. Выше 753 К теплоемкость угля монотонно возрастает и ее значения для влажных и сухих образцов угля почти совпадают, а при высоких температурах показывают одинаковое качественное температурное поведение C_p . Значительный рост теплоемкости выше 730 К в первую очередь связан с большой эндотермической теплотой карбонизации.

После термической обработки (стресса) температурное поведение C_p (рис. 3б) как для сухого, так и для влажного образцов практически не отличается, поскольку отжиг упорядочивает структуру угля. Все физико-химические процессы при высоких температурах в угле завершаются, т.е. при высокой температуре уголь претерпевает необратимые изменения, связанные с выходом летучих и разложением тяжелых компонентов.

Сравнение настоящих измерений $C_p(T)$ для черного угля со значениями из опубликованных работ для различных типов углей из разных месторождений показано на рис. 4.

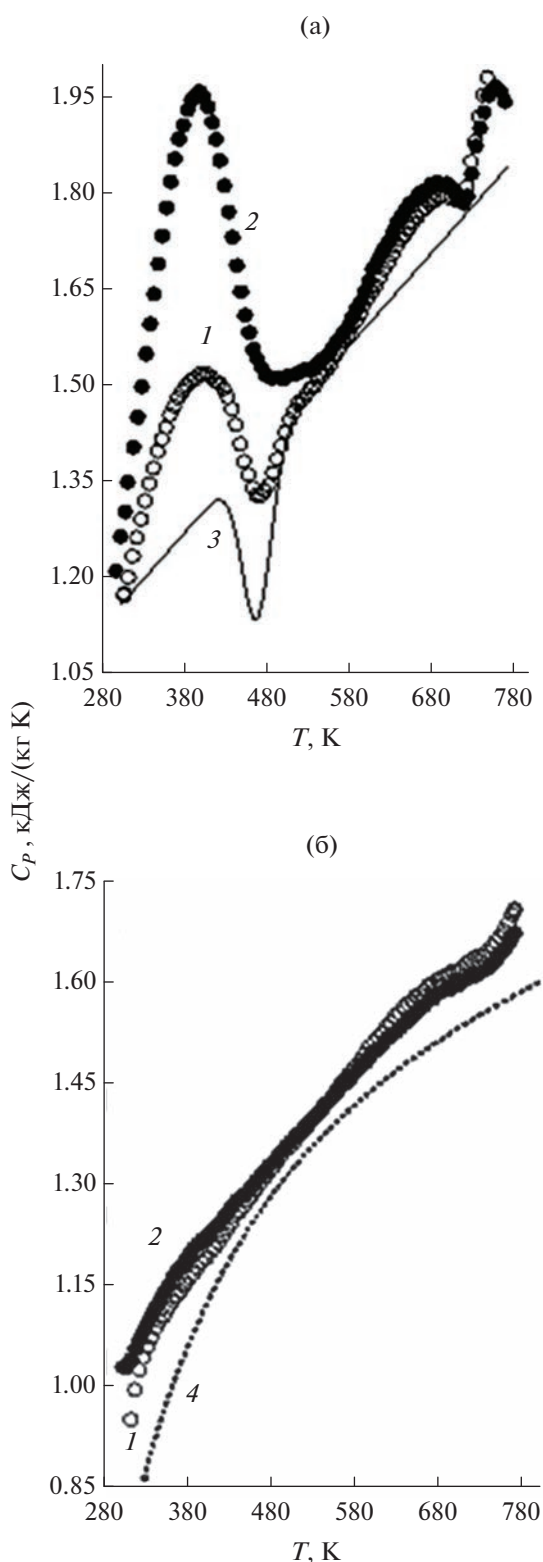


Рис. 3. Теплоемкость угля при прямом (а) и обратном (б) температурном ходе: 1 – сухой образец, 2 – влажный образец (данная работа); 3 – результаты расчета на основе корреляционной модели [27] для битуминозного угля; 4 – графит по данным [28].

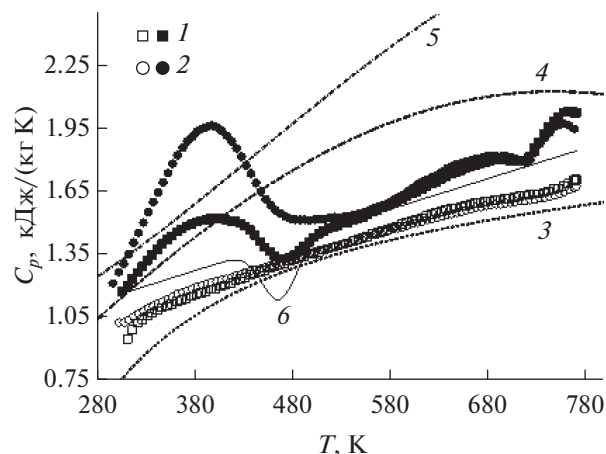


Рис. 4. Теплоемкость как функция температуры для различных типов углей: 1, 2 – сухой и влажный образцы до и после термообработки соответственно (данная работа); 3 – данные [28]; 4 – [29]; 5 – [30]; 6 – результаты расчета на основе корреляционной модели [27] для высокотетучих битуминозных углей.

На рис. 5 приведены рассчитанные значения теплопроводности из термодинамического соотношения $\lambda = \alpha \rho C_p$ с использованием измеренных значений α , ρ , C_p для сухого, влажного и термически обработанного образцов черного угля. Из-за отсутствия данных о температурной зависимости плотности черного угля использовано значение $\rho = 1.6 \times 10^3 \text{ кг/м}^3$ при 298.15 K, что существенно не влияет на точность полученных значений теплопроводности. Температурный ход теплопроводности на рис. 5 отражает температурное поведение теплоемкости (рис. 3). Это означает, что при определении теплопроводности ($\lambda = \alpha \rho C_p$) поведение теплоемкости доминирует над характером изменения температуропроводности.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПЕРЕНОСА ТЕПЛА В ПЛАСТЕ

Как известно, процесс теплопереноса в пласте может быть представлен объединением законов Фурье и сохранения энергии [31]

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial \tau} + \nabla(-\lambda \nabla T) = 0. \quad (2)$$

Уравнение (2) описывает процесс переноса тепла в угольном пласте, где материал пласта имеет теплоемкость C_p , температуропроводность α , теплопроводность λ и плотность ρ , которые являются функциями температуры. Большинство исследователей, которые занимаются моделированием процессов переноса тепла в нефтяных, угольных и геотермальных пластах, из-за отсутствия надежных экспериментальных данных по температурным зависимостям $\alpha(T)$, $C_p(T)$ и $\lambda(T)$

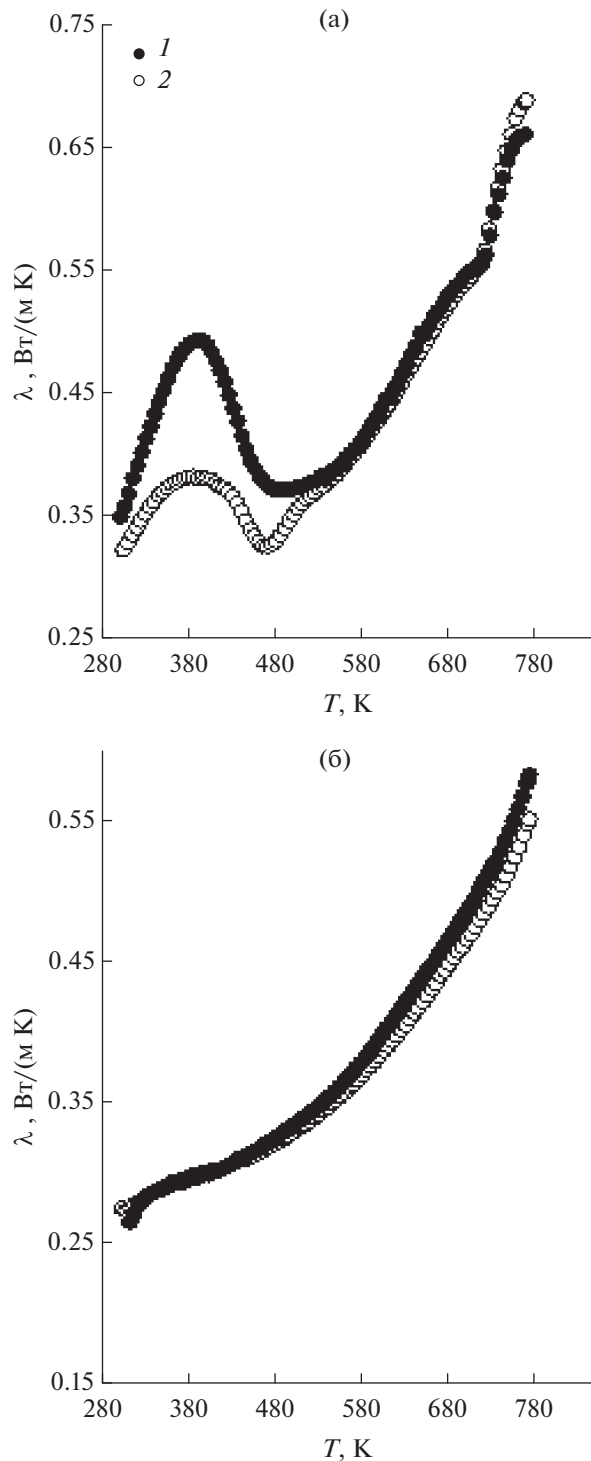


Рис. 5. Рассчитанные значения теплопроводности черного угля по экспериментальным данным температуропроводности, теплоемкости и плотности (данная работа): 1 – сухой образец, 2 – влажный образец; (а) – до термической обработки; (б) – после.

используют в уравнении (2) их постоянные значения (как правило, при комнатной температуре). Это приводит к неточности расчетов температур-

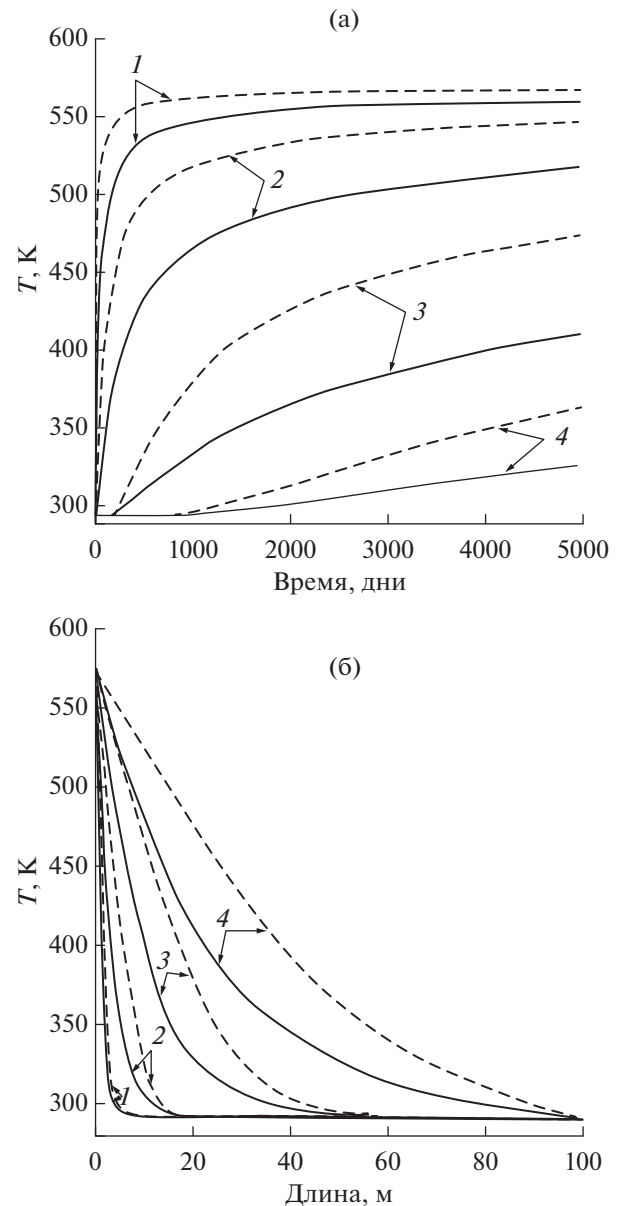


Рис. 6. Распределение температуры $T(x, \tau)$ в угольном пласте, когда температуропроводность постоянна (штриховые кривые) и зависит от температуры (сплошные кривые): (а) 1 – 1 м, 2 – 5, 3 – 20, 4 – 50; (б) 1 – 10 дней, 2 – 100, 3 – 1000, 4 – 5000.

ного профиля $T(x, \tau)$ пласта (распределения температуры в пласте). Для решения данного уравнения использовались измеренные в настоящей работе a , C_p и λ угля в зависимости от температуры, т.е. исследовался процесс переноса тепла в среде, где основные тепловые характеристики среды меняются с температурой.

Для простоты рассмотрен случай, когда распространение тепла во все направления симметрично одинаково. Тогда уравнение (2) можно представить в упрощенном одномерном виде

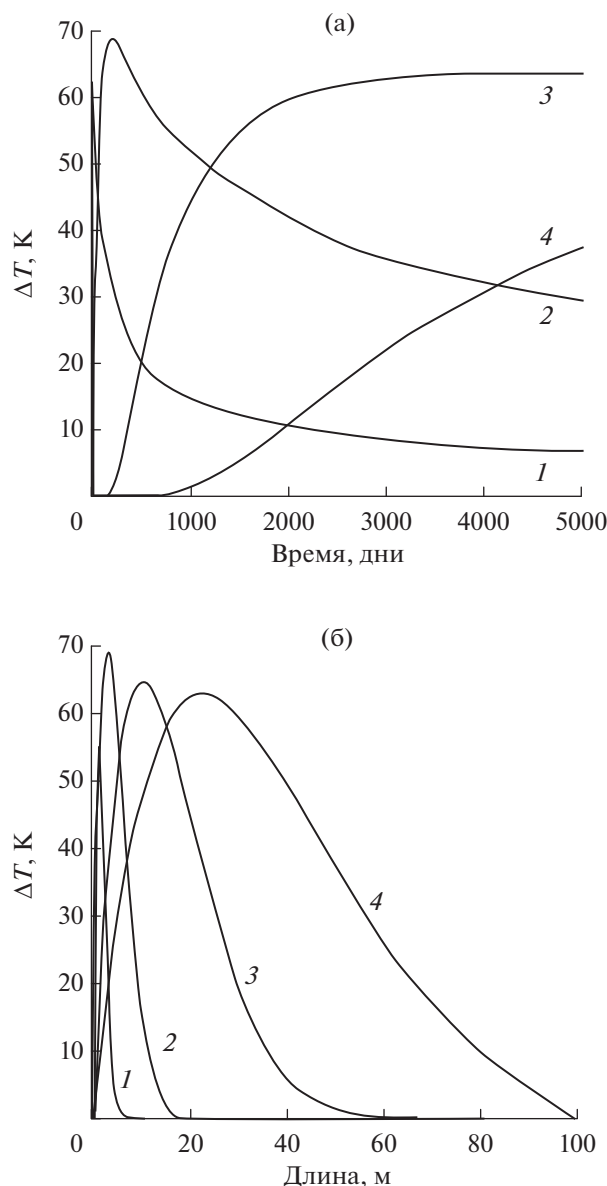


Рис. 7. Распределение разности температур $\Delta T(x, \tau)$ в угольном пласте: (а) 1 – 1 м, 2 – 5, 3 – 20, 4 – 50; (б) 1 – 10 дней, 2 – 100, 3 – 1000, 4 – 5000.

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} - a \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) = 0, \quad (3)$$

где $a = \lambda / (\rho C_p)$ – функция температуры. Решение уравнения (3) позволяет определить температуру в различных точках пласта и в разное время, т.е. пространственное и временное распределения температуры – термодинамическую модель угольного пласта $T(x, \tau)$. Для проведения расчетов сделаны следующие предположения: 1) угольный пласт нагревается от постоянного источника тепла (например, пожар в шахте, закачка горячего пара и т.д.); 2) единственным механизмом передачи теп-

ла является кондуктивный; 3) пласт представляет собой однородную пористую среду.

Начальные и граничные условия выбраны в следующем виде:

$\tau = 0, T = T_0 = 293.15 \text{ K}, 0 \leq x \leq L$ ($L = 100 \text{ м}$), L – длина пласта;

1) $x = 0, T = T_{\text{ист}} = 573.15 \text{ K}, \tau > 0$ (источник тепла с постоянной температурой);

2) $x = L, T = T_L = 293.15 \text{ K}, \tau > 0$.

Уравнение (3) решалось с помощью программы COMSOL – мультифизическое моделирование. Рассмотрены два случая, когда температуропроводность является функцией температуры и $a = \text{const}$ (значение при комнатной температуре). Распределение температуры $T(x, \tau)$ по угольному пласту, рассчитанное по уравнению (3) для обоих случаев, приведено на рис. 6. Полученная разница ΔT между профилями $T(t, x)$ показана на рис. 7.

Разница в решениях уравнения (3) для обоих случаев существенная. В зависимости от координаты и времени максимальное расхождение достигает 70 К. Этот факт позволяет сделать вывод, что процесс переноса тепла в пласте зависит от изменяющихся тепловых характеристик среды.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Приведены новые надежные экспериментальные данные по температуропроводности и теплоемкости черного угля в широком интервале температур (301.75–823.15 К). Обнаружены некоторые особенности поведения теплоемкости сухого, влажного и термически обработанного черного угля в различных температурных областях (низких, вблизи температуры кипения воды, и высоких, вблизи температуры разложения тяжелых углеводородов). На основе измеренных значений температуропроводности и теплоемкости рассчитана теплопроводность по соотношению $\lambda = \rho C_p$. Полученные значения температуропроводности как функции температуры использованы для решения уравнения теплопереноса с переменными коэффициентами. Расчеты показали, что использование постоянного значения коэффициента температуропроводности вместо его температурной зависимости приводит к неточности в оценке пространственно-временного распределения температуры угольного пласта (до 70 градусов). Это влияет на понимание реальных термодинамических условий в пласте и, таким образом, зависимость свойств от температуры следует учитывать при моделировании глубинных процессов в угольном пласте.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hofmeister A.M. Thermal Diffusivity of Garnets at High Temperature // Phys. Chem. Miner. 2006. V. 33. P. 45.

2. *Hofmeister A.M.* Inference of High Thermal Transport in the Lower Mantle from Laser-flash Experiments and the Damped Harmonic Oscillator Model // *Phys. Earth Planet. Inter.* 2008. V. 170. P. 201.
3. *Zhang L.* Potential Assessment of CO₂ Injection for Heat Mining and Geological Storage in Geothermal Reservoirs of China // *Appl. Energy.* 2014. V. 122. P. 237.
4. *Holt J.B.* Thermal Diffusivity of Olivine // *Earth Planet. Sci.* 1975. V. 27. P. 404.
5. *Buttner R., Zimanowski B., Blumm J., Hagemann L.* Thermal Conductivity of a Volcanic Rock Material (Olivine–Melilitite) in the Temperature Range between 288 and 1470 K // *J. Volcanol. Geotherm. Res.* 1998. V. 80. P. 293.
6. *Degiovanni A., Andre S., Mailet D.* Phonic Conductivity Measurement of a Semi-transparent Material // *Thermal Conductivity*. Ed. Tong T.W. Lancaster, PN: Technomic, 1994. V. 22. P. 623.
7. *Popov Y.A., Pribnow D., Sass J.H., Williams C.F., Burkhardt H.* Characterization of Rock Thermal Conductivity by High-resolution Optical Scanning // *Geothermics.* 1999. V. 28. P. 253.
8. *Pertermann M., Whittington A.G., Hofmeister A.M., Spera F.J., Zayak J.* Transport Properties of Low-silica Single-crystals, Glasses and Melts at High Temperature // *Contrib. Mineral. Petrol.* 2008. V. 155. P. 689.
9. *Abdulagatov I.M., Abdulagatova Z.Z., Grigor'ev B.A., Kallaev S.N., Omarov Z.M., Bakmaev A.G., Ramazanova A.E., Rabadanov K.M.* Thermal Diffusivity, Heat Capacity, and Thermal Conductivity of Oil Reservoir Rock at High Temperatures // *Int. J. Thermophys.* 2021. V. 42. P. 135.
10. *Abdulagatov I.M., Abdulagatova Z.Z., Kallaev S.N., Bakmaev A.G., Ranjith P.G.* Thermal-diffusivity and Heat-Capacity Measurements of Sandstone at High Temperatures Using Laser-Flash and DSC Methods // *Int. J. Thermophys.* 2015. V. 36. P. 658.
11. *Abdulagatova Z.Z., Kallaev S.N., Omarov Z.M., Bakmaev A.G., Grigor'ev B.A., Abdulagatov I.M.* Temperature Effect on Thermal-Diffusivity and Heat-Capacity and Derived Values of Thermal-conductivity of Reservoir Rock Materials // *Geomechanics and Geophysics for Geo-Energy and Geo-Resources.* 2020. V. 6. P. 8.
12. *Abdulagatov I.M., Abdulagatova Z.Z., Kallaev S.N., Bakmaev A.G., Omarov Z.M.* Heat Capacity and Thermal Diffusivity of Heavy Oil Saturated Rock Materials at High Temperatures // *J. Therm. Anal. Calorim.* 2020. V. 142 (1). P. 519.
13. *Min S., Blumm J., Lindemann A.* A New Laser-Flash System for Measurement of the Thermophysical Properties // *Thermochim. Acta.* 2007. V. 455. P. 46.
14. *Vozar V., Hohenauer W.* Uncertainty of Thermal Diffusivity Measurements Using the Laser-flash Method // *Int. J. Thermophys.* 2005. V. 26. P. 1899.
15. ASTM E1461-13 Standard Test Method for Thermal Diffusivity by the Flash Method, 2013.
16. ISO 22007-4:2008. Plastics-determination of Thermal Conductivity and Thermal Diffusivity. Part 4: Laser Flash Method, 2008.
17. *Cowan R.D.* Pulse Method of Measuring Thermal Diffusivity at High Temperatures // *J. Appl. Phys.* 1963. V. 34. P. 926.
18. *Mehling H., Hautzinger G., Nilsson O., Fricke J., Hofmann R., Hahn O.* Thermal Diffusivity of Semi-transparent Materials Determined by the Laser-flash Method Applying a New Analytical Model // *Int. J. Thermophys.* 1998. V. 19. P. 941.
19. *Abdulagatov I.M., Abdulagatova Z.Z., Kallaev S.N., Bakmaev A.G., Omarov Z.M., Ranjith P.G.* Heat-capacity Measurements of Sandstone at High Temperatures // *J. Zhao (Australia).* 2016. P. 493.
20. *Абдулагатов И.М., Григорьев Б.А., Абдулагатова З.З., Каллаев С.Н., Бакмаев А.Г., Омаров З.М.* Температуропроводность, теплоемкость и теплопроводность резервуарных пород // *Вести газовой науки. Актуальные вопросы исследований пластовых систем месторождений углеводородов.* М.: ВНИИГАЗ, 2021. № 1(46). С. 129.
21. *Абдулагатов И.М., Григорьев Б.А., Абдулагатова З.З., Каллаев С.Н., Бакмаев А.Г., Омаров З.М.* Экспериментальное исследование тепловых свойств (теплопроводности, температуропроводности, теплоемкости) естественных резервуарных пород, насыщенных тяжелой нефтью // *Вести газовой науки. Актуальные вопросы исследований пластовых систем месторождений углеводородов.* М.: ВНИИГАЗ, 2022. № 4(49). С. 75.
22. *Gu Y.-Q.* Thermophysical Properties of Chinese Coals // *Science in China (Ser. A).* 1991. V. 34. P. 201.
23. *Gosset D., Guillois O., Papoular R.* Thermal Diffusivity of Compacted Coal // *Carbon.* 1996. V. 34. P. 369.
24. *Il'chenko K.D., Revenko M.B.* Thermophysical Properties of Ukraine Coals // *Metallurgy Thermal Engineering.* Dnepropetrovsk: NMAU, 2009. V. 1. P. 110.
25. *Wen H., Lu J.-H., Xiao Y., Deng J.* Temperature Dependence of Thermal Conductivity, Diffusivity and Specific Heat Capacity for Coal and Rocks from Coalfield // *Thermochim. Acta.* 2015. V. 619. P. 41.
26. *Dindi H., Ba X.-H., Krantz W.B.* Thermal and Electrical Property Measurements for Coal // *Fuel.* 1989. V. 68. P. 185.
27. *MacDonald R.A., Callanan J.E., McDermott K.M.* Heat Capacity of a Medium-volatile Bituminous Premium Coal from 300 to 520 K. Comparison with a High-volatile Bituminous Nonpremium Coal // *Energy & Fuels.* 1987. V. 1. P. 535.
28. *Szarawa J.* Heat Capacity of Coal Over a Wide Temperature Range // *Termodynamika Chemiczna.* Warszawa, 1969. P. 74.
29. *Tomeczek J., Palugniok H.* Specific Heat Capacity and Enthalpy of Coal Pyrolysis at Elevated Temperatures // *Fuel.* 1996. V. 75. P. 1089.
30. *Leśniak B., Słupik Ł., Jakubina G.* The Determination of the Specific Heat Capacity of Coal Based on Literature Data // *Chemik.* 2013. V. 67. P. 566.
31. *Schloemer S., Teschner B., Poggenburg J., Seeger Ch.* Gas and Temperature Monitoring of a Spontaneous Coal Fire in Wuda Coal Mining Area // *Report of Coal Fire Project Phase A. Part B: Innovative Technologies for Exploration, Extinction and Monitoring of Coal Fires in North China,* 2007.

УДК 536.21; 532.536

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА НА ЗАТУПЛЕННЫХ ТЕЛАХ В УСЛОВИЯХ АЭРОДИНАМИЧЕСКОГО НАГРЕВА ВЫСОКОСКОРОСТНЫХ ЛЕТАТЕЛЬНЫХ АППАРАТОВ

© 2023 г. В. Ф. Формалев*, Б. А. Гарибян**, С. А. Колесник***

Московский авиационный институт (Национальный исследовательский университет), Москва, Россия

*E-mail: formalev38@yandex.ru

**E-mail: bagarib@yandex.ru

***E-mail: sergey@oviont.com

Поступила в редакцию 24.09.2022 г.

После доработки 25.11.2022 г.

Принята к публикации 06.12.2022 г.

Рассматривается тепломассоперенос между диссоциирующим пограничным слоем и поверхностью затупленных носовых конусов высокоскоростных летательных аппаратов в широком диапазоне чисел Маха. С использованием переменных Дородницына—Лиза система уравнений пограничного слоя сведена к системе нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений. С помощью обоснованных допущений получены приближенно-аналитические решения для динамического, теплового и диффузионного пограничных слоев, позволившие определить тепловые и диффузионные тепловые потоки, которые на границе газ—твердое тело сопряжены с уравнением теплопроводности в теле с параметром сопряжения в виде температуры границы газ—твердое тело. По найденным тепловым потокам определены температурные поля в теле в широком диапазоне чисел Маха набегающего потока и коэффициента каталитической рекомбинации. Полученные тепловые потоки на лобовой части носового конуса в точности совпадают с экспериментальными данными.

DOI: 10.31857/S0040364423030092

ВВЕДЕНИЕ

Моделирование тепломассопереноса в условиях аэрогазодинамического нагрева является комплексной проблемой, предполагающей решение следующих задач:

- определение тепловых потоков от газодинамического течения к телу, для чего в качестве одного из граничных условий должна быть известна температура поверхности тела;

- расчет теплопереноса в теле, в том числе и распределения температур на поверхности тела с использованием тепловых потоков из предыдущего пункта;

- сопряжение температурных полей в пограничном слое и теле на границе газ—твердое тело с помощью граничных условий IV рода по А.В. Лыкову [1], если температура поверхности тела задавалась в качестве параметра в обеих перечисленных задачах. Такое сопряжение достигается требованием непрерывности тепловых потоков и температур на границе газ—твердое тело. Эта задача наиболее сложна, особенно в многомерном случае, поскольку сопрягаются тепловые характеристики в различных средах со своими физическими процессами, описываемыми уравнениями различных типов.

Сложность решения сопряженных задач теплообмена в условиях аэродинамического нагрева определяет относительно небольшое количество публикаций по этой тематике.

Из последних работ по аэродинамическому нагреву скоростных летательных аппаратов (ЛА) можно отметить работы [2–9]. Среди публикаций по теории теплопроводности при сложном конвективно-кондуктивном и лучистом теплообмене следует отметить статьи [10–12] и монографию [13]. Подобные подходы могут применяться также при исследовании термостойкости композиционных материалов и изделий из них [14–20].

При высокоскоростном (при числах Маха $M_\infty > 5$) обтекании затупленных тел воздух диссоциирует на атомы с поглощением значительного количества теплоты, а на более холодной стенке рекомбинирует с выделением того же количества теплоты, причем это выделение может ускоряться за счет каталитичности стенки. Возникает проблема обтекания и теплообмена в многокомпонентном газе с учетом каталитичности. При этом для определения тепловых и диффузионных потоков к стенке необходимо решать существенно нелинейные уравнения для динамического, тепло-

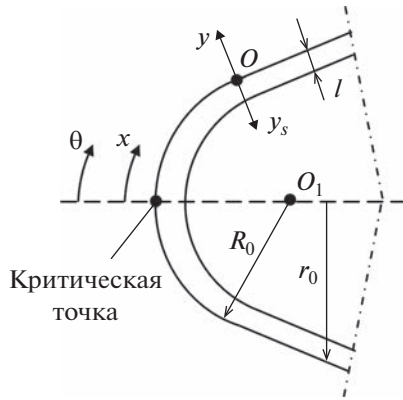


Рис. 1. Область передней критической точки затупленного конуса.

вого и диффузионных пограничных слоев в условиях аэродинамического нагрева.

Наиболее полно тепломассоперенос в реагирующем многокомпонентном газе рассмотрен в работах [21–23].

В [24–26] на основе соотношений подобия получены приближенно-аналитические решения для пространственного обтекания затупленных тел гиперзвуковым потоком химически неравновесного вязкого газа.

В данной работе на основе приближенно-аналитического решения существенно нелинейной системы для динамического, теплового и диффузионного пограничных слоев в сопряжении с уравнением теплопроводности в тепловой защите ЛА определены конвективные и диффузионные потоки к телу с учетом степени каталитической рекомбинации атомарной компоненты газовой смеси и температуры поверхности тела с учетом теплоотвода внутрь тела и излучения.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И МЕТОД РЕШЕНИЯ

Тепловые потоки и температура поверхности ЛА могут быть получены из решения следующей системы уравнений для динамического, теплового и диффузионного пограничных слоев в локальной системе координат (рис. 1) относительно компонент скорости $u(x, y)$, $v(x, y)$, давления $p(x, y)$, плотности $\rho(x, y)$, концентраций компонентов бинарной смеси C_i , $i = 1, 2$, полной энтальпии $I(x, y)$:

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} = - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right); \quad (1)$$

$$0 = - \frac{\partial p}{\partial y}, \quad p = p_e(x); \quad (2)$$

$$\frac{\partial (\rho u r_0)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v r_0)}{\partial y} = 0; \quad (3)$$

$$p = \rho \bar{R} T, \quad \bar{R} = \sum_i C_i R_i = \sum_i \frac{\rho_i}{\rho} R_i, \quad i = 1, 2; \quad (4)$$

$$\rho u \frac{\partial C_i}{\partial x} + \rho v \frac{\partial C_i}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_{12} \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) + w_i, \quad i = 1, 2; \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \rho u \frac{\partial I}{\partial x} + \rho v \frac{\partial I}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial I}{\partial y} + \mu \left(1 - \frac{1}{Pr} \right) \frac{\partial u^2}{\partial y} \right] - \\ - \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\frac{1}{Le} - 1 \right) \rho D_{12} \sum_i h_i \frac{\partial C_i}{\partial y} \right]; \end{aligned} \quad (6)$$

$$I = \frac{u^2}{2} + \sum_i C_i (c_{pi} T + h_i^0).$$

Граничные условия

при $y = 0$

$$\begin{aligned} u(x, 0) = 0, \quad v(x, 0) = 0, \quad \rho(x, 0) = \rho_w, \\ I(x, 0) = I_w, \quad C_i(x, 0) = C_{iw}; \end{aligned} \quad (7)$$

при $y = \delta(x)$

$$\begin{aligned} u(x, \delta(x)) = u_e(x), \quad v(x, \delta(x)) = v_e(x), \\ \rho(x, \delta(x)) = \rho_e(x), \quad \frac{\rho_e}{\rho_0} = \left(\frac{p_e(x)}{p_0} \right)^{1/k}, \\ \frac{T_e(x)}{T_0} = \left(\frac{p_e(x)}{p_0} \right)^{\frac{k-1}{k}}, \quad \frac{C_{Ae}}{C_{A0}} = \left(\frac{p_{Ae}}{p_{A0}} \right)^{1/k}. \end{aligned} \quad (8)$$

Давление на внешней границе пограничного слоя на затупленном конусе принимается по интерполяционной формуле [24]

$$\frac{p_e(x)}{p_0} = 1 - 1.17 \sin^2 \frac{x}{R_0} + 0.225 \sin^6 \frac{x}{R_0}. \quad (9)$$

Для определения температур в теле необходимо, используя q_w , полученные из решения системы (1)–(9), решить следующую задачу теплопроводности (рис. 1):

$$\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial y_s} \Big|_{y_s=0} + \varepsilon \sigma T_{ws}^4 = q_w; \quad (10)$$

$$\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial y_s} \Big|_{y_s=l} = 0; \quad (11)$$

$$c_s \rho_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y_s} \left(\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial y_s} \right), \quad 0 < y_s < l, \quad t > 0; \quad (12)$$

$$T_s(y_s, 0) = T_{нач}, \quad (13)$$

где

$$q_w = \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} + \rho D_{12} h_A^0 \frac{\partial \alpha}{\partial y} \right)_{y=0}.$$

Здесь C_i , $i = 1, 2$ – концентрации атомарного $C_A = \alpha$ ($i = 1$) и молекулярного C_M ($i = 2$) компонентов, причем $C_M = 1 - C_A = 1 - \alpha$, μ – вязкость,

$\bar{R}$ – газовая постоянная бинарной смеси; D_{12} – коэффициент бинарной диффузии; $Pr = \mu c_p / \lambda$ – число Прандтля; $Le = Pr / Sc$ – число Льюиса; Sc – число Шмидта, $Sc = \mu / \rho D_{12}$; c_p , λ – теплоемкость при постоянном давлении и теплопроводность; h_i^0 – энтальпия образования i -го компонента; c , ρ – теплоемкость, плотность; ε – степень черноты; индекс “ s ” относится к твердому телу; “ e ” – к наружной границе пограничного слоя.

Существенно нелинейная система уравнений реагирующего пограничного слоя (1)–(9) может быть решена только численными методами, однако с помощью переменных Дородницына–Лиза ее можно свести к нелинейной системе обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), которая при некоторых упрощениях допускает приближенно-аналитическое решение. Подставив в систему (1)–(9) переменные

$$\eta = \frac{\rho_e u_e r_0}{\sqrt{2\bar{x}}} \int_0^y \frac{\rho}{\rho_e} dy, \quad \bar{x} = \int_0^x \rho_e u_e \mu_e r_0^2 dx, \quad (14)$$

получаем следующую систему ОДУ:

– уравнение сохранения импульса

$$(Df'')' + ff'' + \frac{2\bar{x}}{u_e} \frac{du_e}{d\bar{x}} \left[\frac{\rho_e}{\rho} - (f')^2 \right] = 0; \quad (15)$$

– уравнение концентраций

$$\left(\frac{D}{Sc} \bar{C}_i' \right)' + f \bar{C}_i' = \frac{2\bar{x} f \bar{C}_i}{C_{ie}} \left(\frac{dC_{ie}}{d\bar{x}} \right) - \frac{2\bar{x} w_i}{\rho \rho_e u_e^2 \mu_e r_0^2 C_{ie}}; \quad (16)$$

– уравнение сохранения энергии

$$\left(\frac{D}{Pr} \bar{I}' \right)' + f \bar{I}' = \frac{2\bar{x} f \bar{I}}{I_e} \frac{dI_e}{d\bar{x}} + \left[\frac{D}{Sc} \left(\frac{1}{Le} - 1 \right) \sum_i \frac{h_i C_{ie}}{I_e} C_i' \right] + \frac{u_e^2}{I_e} \left[\left(1 - \frac{1}{Pr} \right) Df' f'' \right], \quad (17)$$

где штрихи обозначают дифференцирование по переменной η , $D = \rho \mu / \rho_e \mu_e$, $\bar{C}_e(\eta) = C_i(\eta) / C_{ie}$, $\bar{I}(\eta) = I(\eta) / I_e$, f – относительная функция тока, связанная со скоростью соотношением $f'(\eta) = u / u_e(x)$.

Граничные условия

при $y = 0$ ($\eta = 0$)

$$f'(0) = 0, \quad f(0) = f_w, \quad \bar{C}_i(0) = \bar{C}_{iw} = C_{iw} / C_{ie};$$

при $y \rightarrow \infty$ ($\eta \rightarrow \infty$) или $\eta = \bar{\delta}(\bar{x})$

$$f'(\infty) = f_e' \rightarrow 1, \quad f(\infty) = f_e \rightarrow 0, \\ \bar{C}_i(\infty) = \bar{C}_{ie} \rightarrow 1, \quad \bar{I}(\infty) = \bar{I}_e \rightarrow 1.$$

Для получения приближенно-аналитического решения задачи (15)–(17) сделаны следующие допущения:

– пограничный слой является бинарным с атомарной концентрацией $C_A = \alpha$ и молекулярной $C_M = 1 - \alpha$;

– газ “заморожен”, т.е. $w_i = 0$;

– Le и Pr примерно равны единице;

– в правой части уравнения (15) $(f')^2 - \rho_e / \rho \approx 0$, что можно предположить для окрестности критической точки;

– в правых частях уравнений, содержащих $\bar{x}$, положено $\bar{x} \approx 0$ (окрестность критической точки), а сомножители $\frac{\bar{x}}{u_e} \frac{du_e}{d\bar{x}}$, $\frac{\bar{x}}{\alpha_e} \frac{d\alpha_e}{d\bar{x}}$, $\frac{\bar{x}}{I_e} \frac{dI_e}{d\bar{x}}$ постоянны.

Пограничный слой полагается замороженным, так как скорости диссоциации и рекомбинации малы по сравнению со скоростью газа на внешней границе пограничного слоя. Например, коэффициент каталитической рекомбинации, равный 10 м/с по работе [22], считается уже бесконечным, в то время как скорость потока на внешней границе пограничного слоя в окрестности критической точки составляет десятки, а то и сотни м/с. На боковой поверхности скорости $u_e(x) \approx 10^3$ м/с.

При этих предположениях система уравнений (15)–(17) трансформируется в систему

$$(Df'')' + ff'' = 0, \quad (18)$$

$$(D\bar{\alpha})' + f\bar{\alpha}' = 0, \quad (19)$$

$$(D\bar{I})' + f\bar{I}' = 0. \quad (20)$$

Интегрируя уравнения (18)–(20) с учетом граничных условий, формируя конвективный тепловой поток на стенке $\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=0, \eta=0}$ и диффузионный

тепловой поток $\rho D_{12} \frac{\partial \alpha}{\partial y} \Big|_{y=0, \eta=0}$ и учитывая $\frac{d\eta}{dy} = \frac{1}{\sqrt{2\mu_e}} \times$

$\times \left(\rho_e \frac{du_e}{dx} \right)^{1/2}$, получаем решение системы (18)–(20)

$$f(\eta) = \frac{D}{f} e^{-(f/D)\eta} + \ln \eta - D/f, \quad (21)$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=0, \eta=0} = \frac{\lambda}{(c_p)_{cp}} (c_{pe} T_e - c_{pw} T_w) \left(\frac{f}{D} \right) \times \\ \times \frac{1}{\sqrt{2\mu_e}} \left(\rho_e \frac{du_e}{dx} \right)^{1/2} \Big|_{y=0, \eta=0}, \quad (22)$$

$$\rho D_{12} \frac{\partial \alpha}{\partial y} \Big|_{y=0, \eta=0} = \rho D_{12} (\alpha_e - \alpha_w) \times \\ \times \left(\frac{f}{D} \right) \frac{1}{\sqrt{2\mu_e}} \left(\rho_e \frac{du_e}{dx} \right)^{1/2} \Big|_{y=0, \eta=0}. \quad (23)$$

В конвективный (22) и диффузионный (23) тепловые потоки входит относительная функция тока $f(\eta)$, которая при $\eta = 0$ равна нулю, т.е. тепловые потоки (22), (23) равны нулю, что недопустимо. Однако $f(\eta)$ можно разложить в ряд Тейлора по степеням переменной η в окрестности $\eta = 0$ и тогда

$$f(\eta) = f(0) + f'(0)\eta + f''(0)\frac{\eta^2}{2} + \dots \approx f''(0)\frac{\eta^2}{2}. \quad (24)$$

В [27] табулировано относительно $f(\eta)$ численное решение задачи

$$f''' + ff'' - f'^2 + 1 = 0, \quad f(0) = 0, \quad f'(0) = 0, \quad f'(\infty) = 1, \quad (25)$$

которое обработано методом наименьших квадратов с получением функции в виде кубического многочлена по степеням переменной η :

$$f(\eta) = -3.095 \times 10^{-3} \eta^3 + 0.251 \eta^2 + 0.248 \eta - 0.025, \quad (26)$$

откуда

$$f(\eta) = f''(0)\frac{\eta^2}{2} = 0.502\frac{\eta^2}{2}, \quad f''(0) = 0.502. \quad (27)$$

Производные du_e/dx в (22), (23) определяются из уравнения Бернулли

$$\frac{dp_e}{dx} = -\rho_e u_e \frac{du_e}{dx} = -\rho_e x \left(\frac{du_e}{dx} \right)^2,$$

откуда

$$\frac{du_e}{dx} = \sqrt{-\frac{1}{x\rho_e} \frac{dp_e}{dx}}, \quad \frac{dp_e}{dx} < 0. \quad (28)$$

Формулы (22)–(28) определяют конвективные и диффузионные тепловые потоки в окрестности критической точки без учета константы k_R – скорости каталитической рекомбинации.

ТЕПЛОМАССООБМЕН В КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКЕ

Формулы (22)–(28) не годятся для критической точки, поскольку в ней $x = 0$, $f(0) = 0$ и уравнения пограничного слоя не выполняются. Поэтому в критической точке затупленного конуса тепловые и диффузионные потоки определяются непосредственно.

По закону Фика диффузионный тепловой поток в стенку равен

$$(q_w)_{\text{дифф}} = \rho_w D_{12} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial y} \right)_w = (k_R \rho \alpha)_w, \quad (29)$$

поскольку реакция рекомбинации является реакцией первого порядка, т.е. $\partial \alpha / \partial y$ пропорциональна массовой концентрации $(\rho \alpha)_w$.

Разделив (29) на α_e и используя равенство

$$\frac{\partial \bar{\alpha}}{\partial y} = \frac{\partial \bar{\alpha}}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y}, \quad (30)$$

переменные Дородницына–Лиза (14), соотношения для критической точки

$$\frac{u_e}{2x} = 2 \left. \frac{du_e}{dx} \right|_{x=0}, \quad \left. \frac{du_e}{dx} \right|_{x=0} = \frac{1}{R_0} \sqrt{\frac{p_0}{\rho_0}}, \quad (31)$$

получаем из (30)

$$\frac{\partial \bar{\alpha}(0)}{\partial \eta} = \left[\frac{\rho_e \mu_e}{2(du_e/dx)} \right]^{1/2} \frac{(k_R)_w}{\rho_w D_{12}} \bar{\alpha}(0). \quad (32)$$

Из точного решения уравнения (16) с правой частью при $Pr \neq 1$ и $D \neq 1$ известно [21], что

$$\bar{\alpha}'(0) \approx 0.47 Sc^{1/3} (1 - \bar{\alpha}(0)). \quad (33)$$

Тогда из (31)–(33) находим

$$\bar{\alpha}(0) = \left\{ 1 + \left[\frac{\rho_e \mu_e}{2(du_e/dx)} \right]^{1/2} \frac{(k_R)_w}{0.47 Sc^{1/3} \rho_w D_{12}} \right\}^{-1}. \quad (34)$$

Подставляя (34) в (32) и учитывая, что $\rho_e \mu_e \approx \rho_w \mu_w$, а также $\rho_w D_{12} = \mu / Sc$, получаем поток атомарной компоненты $\bar{\alpha}(0)$ в стенку в критической точке с учетом коэффициента каталитической рекомбинации k_R :

$$\frac{\partial \bar{\alpha}}{\partial \eta} = 0.47 Sc^{1/3} \varphi,$$

$$\varphi = \left\{ 1 + \frac{0.47 Sc^{-2/3} [2(du_e/dx)_0 \rho_e \mu_e]^{1/2}}{\rho_w (k_R)_w} \right\}^{-1}.$$

Тогда

$$(q_w)_{\text{дифф}} = \rho D_{12} \left. \frac{\partial \bar{\alpha}(0)}{\partial \eta} \right|_w = \left(\rho D_{12} h_A^0 \frac{\partial \alpha}{\partial y} \right)_w,$$

где h_A^0 – теплота образования атомарной компоненты.

Аналогично, из точного решения уравнения энергии (17) при $Pr \neq 1$, $D \neq 1$ и $Sc \neq 1$ имеем [21]

$$\bar{I}(0) = 0.47 Pr^{1/3} [1 - I(0)].$$

Используя соотношение

$$q_w = \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} + \rho D_{12} h_A^0 \frac{\partial \alpha}{\partial y} \right)_{y=0},$$

переменные Дородницына–Лиза (14), $\bar{I} = I/I_e$, $\bar{\alpha} = \alpha/\alpha_e$, для течения замороженного реагирующего вязкого газа получаем выражение для кон-

вективно-диффузионного теплового потока в критической точке затупленного конуса с учетом рекомбинации атомарной компоненты

$$q_{w0} = 0.66 \text{Pr}^{-2/3} [\rho_e \mu_e (du_e/dx)]^{1/2} (I_e - h_w) \times \left[1 + \left(\text{Le}^{2/3} \varphi - 1 \right) \frac{h_e^0 \alpha_e}{I_e - h_w} \right]. \quad (35)$$

При определении температуры стенки необходимо составить баланс тепловой энергии, подводимой к стенке (35) и отводимой от нее излучением и теплопроводностью в глубь тела:

$$\begin{aligned} \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial y_s} \Big|_{y_s=0} + \varepsilon \sigma T_{ws}^4 = \\ = 0.66 \text{Pr}^{-2/3} [\rho_e \mu_e (du_e/dx)]^{1/2} \times \\ \times (I_e - h_w) \left[1 + \left(\text{Le}^{2/3} \varphi - 1 \right) \frac{h_e^0 \alpha_e}{I_e - h_w} \right], \end{aligned} \quad (36)$$

где $h_w = c_{pw}(T_w)T_w$.

Аналитическое решение задачи теплопроводности (10)–(13) без учета излучения зависит от времени, однако в стационарном случае отвод теплоты за счет теплопроводности можно приближенно оценить по соотношению

$$\lambda_s \frac{T_{ws} - T_{\text{снач}}}{l} \approx \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial y_s} \Big|_{y_s=0},$$

где l — толщина тепловой защиты, $T_{\text{снач}}$ — температура на внутренней границе тела.

Таким образом, выражения (35), (36) определяют конвективно-диффузионные тепловые потоки и температуры поверхности в критической точке затупленного конуса соответственно.

Для определения тепловых потоков на затуплении вниз по потоку от критической точки необходимо вычислить тепловые и диффузионные потоки (22), (23) с учетом скорости $u_e(x)$ и ее производной du_e/dx , для чего тепловые потоки (22) достаточно умножить на комплекс [21]:

$$F(x) = \frac{(p_e(x)/p_0) \mu_e (r_0/\sqrt{2}) u_e(x)/u_\infty}{\left[\int_0^x (p_e(x)/p_0) \mu_e r_0^2 (u_e(x)/u_\infty) dx \right]^{1/2}}, \quad (37)$$

где u_∞ — скорость набегающего потока, p_0 — давление торможения,

$$q_w(x) = q_{w0} F(x), \quad (38)$$

где q_{w0} — тепловой поток (35) в критической точке.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И АНАЛИЗ

На рис. 2 представлены тепловые потоки на лобовой поверхности, вычисленные по формулам (35), (37), (38), в зависимости от продольной пере-

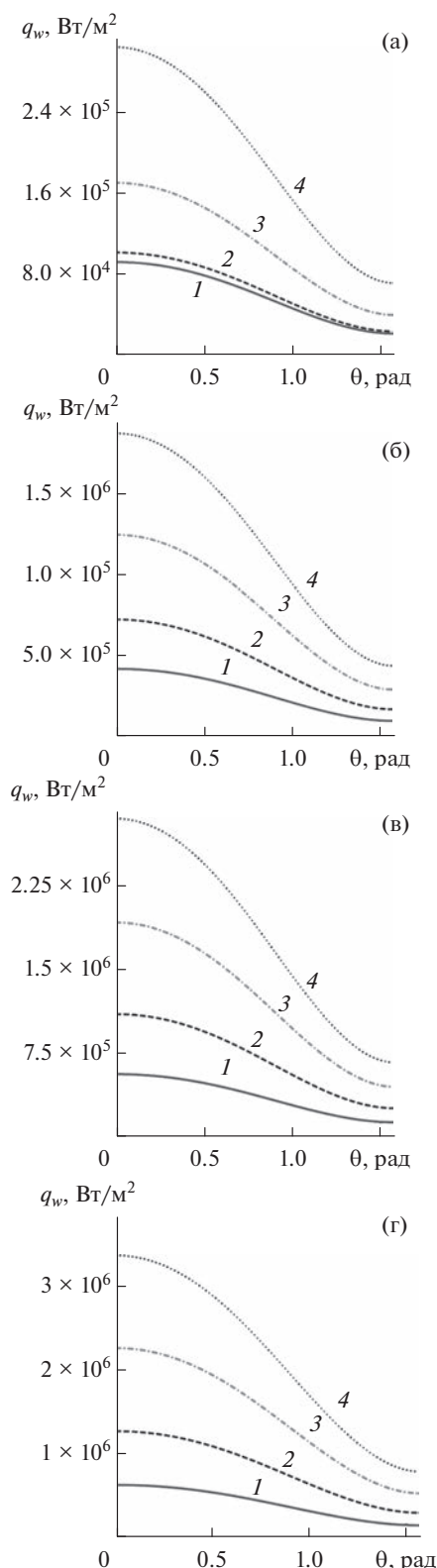


Рис. 2. Изменения тепловых потоков в окрестности критической точки в зависимости от угловой переменной локальной системы координат тела для разных чисел Маха ($1 - M_\infty = 5$, $2 - 10$, $3 - 15$, $4 - 20$) при $\alpha = 0.25$ и (а) — $k_R = 1$, (б) — 5 , (в) — 10 , (г) — 15 .

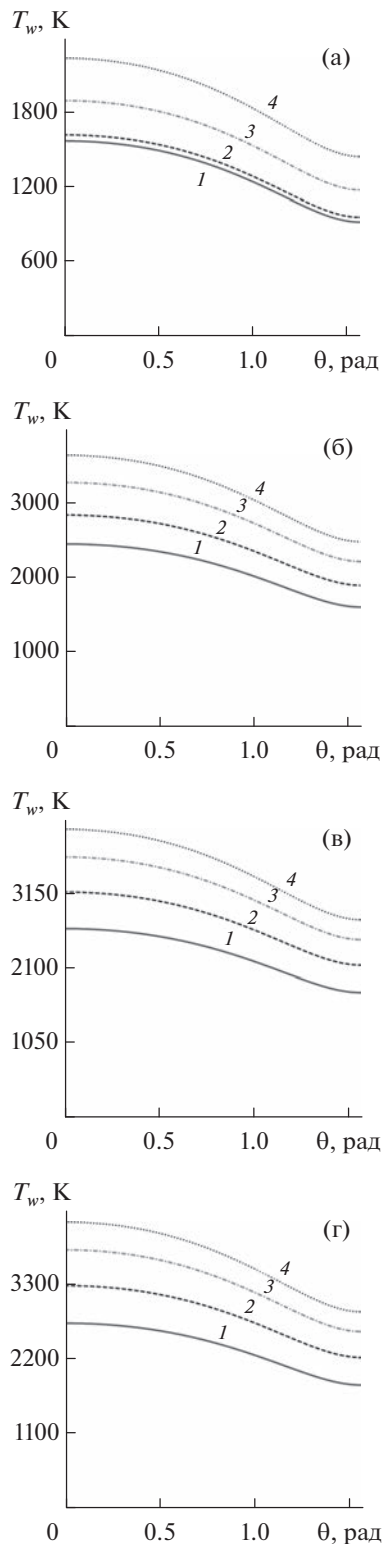


Рис. 3. Изменения температур в окрестности критической точки в зависимости от угловой переменной локальной системы координат тела для разных чисел Маха (1 – $M_\infty = 5$, 2 – 10, 3 – 15, 4 – 20) при $\alpha = 0.25$ и (а) – $k_R = 1$, (б) – 5, (в) – 10, (г) – 15.

менной x (или угловой переменной $\theta = x/R_0$) в широком диапазоне $M_\infty = 5\text{--}20$ и коэффициента каталитической рекомбинации ($k_R = 1\text{--}15$) для высоты полета $H = 20$ км и концентрации атомарной компоненты $\alpha = 0.25$. Результаты расчетов полностью совпадают с результатами стендовых испытаний, приведенных в [21].

Распределения температур по лобовой поверхности, представленные на рис. 3, определены по формуле (36) с использованием полученных тепловых потоков (38), приведенных на рис. 2.

Как тепловые потоки, так и температура поверхности очень сильно зависят от k_R . Так, при увеличении k_R от 1 до 15 тепловые потоки увеличиваются на порядок (достаточно сравнить графики на рис. 2а, 2г). При этом температура поверхности (рис. 3) увеличивается в 1.7 раза, что приводит к уносу массы теплозащитного покрытия, поскольку ни один материал не выдержит температуру более 3000 К.

По сравнению с результатами экспериментов в ударной трубе, приведенными в [21], максимальная погрешность по тепловым потокам в окрестности критической точки не превышает 7.4%. Погрешность определения температуры поверхности значительно меньше, так как в балансовом соотношении (36) лучистый тепловой поток и тепловой поток, отводимый тепловой защитой, вычисляются точно.

Результаты, приведенные на рис. 3, можно использовать для построения номограмм, с помощью которых определяются ограничения по M_∞ , k_R , α , x ($\theta = x/R_0$) с целью рекомендации рабочих режимов полета ЛА в условиях отсутствия уноса массы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Получены приближенные аналитические решения задачи тепломассопереноса на основе применения переменных Дородницына–Лиза в критической точке затупленного конуса высокоскоростных летательных аппаратов с учетом диссоциации, рекомбинации, излучения и теплоотвода внутрь тела.

Проведены расчеты тепловых потоков и температур на лобовой поверхности затупленного конуса в широком диапазоне чисел Маха и коэффициента каталитической рекомбинации атомарной компоненты. Выявлена сильная зависимость тепловых потоков и температуры тела при увеличении значений коэффициента каталитической рекомбинации. С увеличением значений данного коэффициента от 1 до 15 тепловые потоки возрастают на порядок, а температура в 1.7 раза. Результаты позволяют построить ограничения по числам Маха, коэффициентам каталитической рекомбинации и высотам полета, при которых ЛА

функционирует в условиях отсутствия уноса массы с сохранением первоначальной геометрии, что важно для многоразовых ЛА и аппаратов, функционирующих длительное время при высоких скоростях.

Полученные аналитические решения можно использовать для экспресс-оценки тепловых потоков и температур, которые затем должны быть уточнены при численном решении уравнений диссоциирующего пограничного слоя.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант РНФ № 22-19-00420).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лыков А.В. Теплообмен. М.: Энергия, 1978. 480 с.
2. Зарубин В.С., Зимин В.Н., Леонов В.В., Зарубин В.С. Равновесная температура поверхности затупления баллистической капсулы при возвращении на Землю с параболической скоростью // Тепловые процессы в технике. 2021. Т. 13. № 11. С. 482.
3. Формалев В.Ф., Колесник С.А. Математическое моделирование сопряженного теплообмена между вязкими газодинамическими течениями и анизотропными телами. Изд. 2-е, испр. и сущ. доп. М.: Ленанд, 2022. 348 с.
4. Формалев В.Ф., Колесник С.А., Гарибян Б.А. Аналитическое решение задачи о сопряженном теплообмене между газодинамическим пограничным слоем и анизотропной полосой // Вестн. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2020. № 5(92). С. 44.
5. Формалев В.Ф., Колесник С.А., Гарибян Б.А. Математическое моделирование тепломассопереноса при аэродинамическом нагреве носовых частей гиперзвуковых летательных аппаратов // Вестн. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2022. № 1(100). С. 107.
6. Формалев В.Ф., Колесник С.А., Кузнецова Е.Л. Влияние компонентов тензора теплопроводности теплозащитного материала на величину тепловых потоков от газодинамического пограничного слоя // ТВТ. 2019. Т. 57. № 1. С. 66.
7. Формалев В.Ф., Колесник С.А., Кузнецова Е.Л. Тепломассоперенос на боковых поверхностях затупленных носовых частей гиперзвуковых летательных аппаратов // ТВТ. 2021. Т. 59. № 5. С. 797.
8. Быков Л.В., Никитин П.В., Пашков О.А. Математическая модель тепломассообмена на поверхностях теплонапряженных элементов гиперзвукового летательного аппарата // Тепловые процессы в технике. 2016. Т. 8. № 11. С. 482.
9. Зотов А.А., Пашков О.А., Волков А.Н. Концепция системы активной тепловой защиты трехслойной конструктивно-силовой схемы гиперзвукового летательного аппарата с дискретным наполнителем // Деформация и разрушение материалов. 2022. № 3. С. 2.
10. Кувыркин Г.Н., Савельева И.Ю., Журавский А.В. Моделирование теплофизических процессов при нанесении полупрозрачного покрытия на охлаждаемую криволинейную подложку // ТВТ. 2022. Т. 60. № 6. С. 916.
11. Кузенов В.В., Рыжков С.В. Численное моделирование взаимодействия мишени магнитно-инерциального термоядерного синтеза с плазменным и лазерным драйверами // ТВТ. 2021. Т. 59. № 4. С. 492.
12. Ryzhkov S.V., Kuzenov V.V. Analysis of the Ideal Gas Flow over Body of Basic Geometrical Shape // Int. J. Heat Mass Transfer. 2019. V. 132. P. 587.
13. Карташов Э.М., Кудинов В.А. Аналитические методы теории теплопроводности и ее приложений. М.: Ленанд, 2018. 1078 с.
14. Butusova O.A. Surface Modification of Titanium Dioxide Microparticles under Ultrasonic Treatment // Int. J. Pharmaceutical Res. 2020. V. 12. № 4. P. 2292.
15. Butusova O.A. Stabilization of Carbon Microparticles by High-molecular Surfactants // Int. J. Pharmaceutical Res. 2020. V. 12. Suppl. № 2. P. 1147.
16. Butusova O.A. Adsorption Behaviour of Ethylhydroxyethyl Cellulose on the Surface of Microparticles of Titanium and Ferrous Oxides // Int. J. Pharmaceutical Res. 2020. V. 12. Suppl. № 2. P. 1156.
17. Ioni Yu.V., Butusova O.A. Preparation of Polymer Composite Material with Fe₂O₃ Nanoparticles Synthesized with Low-temperature Plasma under Ultrasonic Action // AIP Conf. Proc. 2021. V. 2402. 020035.
18. Kaptakov M.O. Synthesis and Characterization of Polymer Composite Materials Based on Polyethylene and CuO Nanoparticles // AIP Conf. Proc. 2021. V. 2402. 020027.
19. Bulychiev N.A. Preparation of Stable Suspensions of ZnO Nanoparticles with Ultrasonically Assisted Low-temperature Plasma // Nanosci. Technol.: Int. J. 2021. V. 12. № 3. P. 91.
20. Bulychiev N.A. Study of Interaction of Surface-Active Polymers with ZnO Nanoparticles Synthesized in Ultrasonically Assisted Plasma Discharge // Nanosci. Technol.: Int. J. 2022. V. 13. № 1. P. 55.
21. Дорренс У.Х. Гиперзвуковые течения вязкого газа. М.: Мир, 1966. 440 с.
22. Никитин П.В., Сотник Е.В. Катализ и излучение в системах тепловой защиты космических аппаратов. М.: Янус-К, 2013. 435 с.
23. Суржигов С.Т. Расчетное исследование аэротермодинамики гиперзвукового обтекания затупленных тел на примере анализа экспериментальных данных. М.: ИПМех РАН, 2011. 192 с.
24. Лунев В.В. Гиперзвуковая аэродинамика. М.: Машиностроение, 1975.
25. Брыкина И.Г. Приближенные аналитические решения для тепловых потоков при трехмерном гиперзвуковом обтекании затупленных тел // Изв. РАН. МЖГ. 2017. № 4. С. 125.
26. Брыкина И.Г., Русаков В.В., Щербак В.Г. Соотношения подобия для расчета пространственного химически неравновесного гиперзвукового вязкого обтекания затупленных тел. Отчет НИИ механики МГУ № 3971. М., 1990. 47 с.
27. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. М.: Наука, 1969.

ИНВЕРСИЯ КРИВОЙ КИПЕНИЯ НА МИКРОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОРИСТЫХ ПОКРЫТИЯХ¹

© 2023 г. Д. А. Швецов^{1, *}, А. Н. Павленко¹, А. Е. Брестер², В. И. Жуков^{1, 2}

¹Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск, Россия

²Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия

*E-mail: shvetsov.kh301@ya.ru

Поступила в редакцию 15.09.2022 г.

После доработки 30.11.2022 г.

Принята к публикации 06.12.2022 г.

В работе представлено экспериментальное исследование теплообмена при кипении в тонком горизонтальном слое жидкости на капиллярно-пористом покрытии. Образец покрытия из нержавеющей стали изготовлен с помощью аддитивной технологии 3D-печати методом селективного лазерного спекания. На покрытии наблюдалась инверсия кривой кипения, которая приводила к пятикратному снижению температурного напора по сравнению с поверхностью без покрытия. После 350 ч испытательного цикла значение плотности теплового потока, при котором возникала инверсия кривой кипения, уменьшалось в семь раз.

DOI: 10.31857/S0040364423020163

ВВЕДЕНИЕ

В связи с широким внедрением микроэлектроники и постоянным увеличением требований к ее функциональности и надежности охлаждение остается важной технической задачей. Для большинства электронных устройств важно поддержание постоянного значения температуры, которое должно быть не выше 85°C. Одним из вариантов решения данной задачи является использование пузырькового кипения в системе охлаждения. Применение различных модифицированных поверхностей нагрева позволяет существенно уменьшить температурный напор при кипении, делая данный способ охлаждения более эффективным. В обзорах [1, 2] представлены современные исследования по интенсификации теплообмена и рассмотрены методы модификации и структурирования поверхности кипения. Среди перспективных отечественных методов модифицирования поверхностей можно выделить: микродуговое оксидирование [3, 4], метод деформирующего резания [5–7], нанесение оксидных пленок [8, 9] и капиллярно-пористых покрытий [10, 11]. Для дальнейшего поиска оптимальных поверхностей нагрева необходимо понимание физики процессов парообразования. Учет специфики различных механизмов пузырькового кипения позволит проектировать более эффективные системы охлаждения.

В данном исследовании теплообмена при кипении рассмотрено явление, при котором температурный напор уменьшается с ростом теплового потока. Авторы работы [12] назвали данное явление инверсией кривой кипения. Впервые инверсия наблюдалась в [13] на вертикальных гладких поверхностях, когда с увеличением плотности теплового потока происходило формирование с устойчивым существованием стационарных регулярных структур при росте количества центров парообразования. В [14] инверсия кривой кипения получена при кипении воды на горизонтальных трубах со спеченным покрытием из нержавеющей стали. На рис. 1 представлены экспериментальные данные по кипению воды при атмосферном давлении, полученные различными коллективами исследователей. В зависимости от геометрии и материала покрытий инверсия кривой кипения наблюдалась как в предкризисных режимах кипения, так и при более низких тепловых потоках. Среди модифицированных поверхностей нагрева представлены: микроканалы, в которых пористое покрытие нанесено по бокам и дну каналов [15]; микроканалы, изготовленные резанием [16]; микроканалы, изготовленные фотолитографией в сочетании с электрохимическим осаждением [17]; микроканалы с покрытием из оксида меди [18]; пористое покрытие, изготовленное фемтосекундным лазером [19]; покрытые наночастицами микротрубочки [20]. Низкие значения температурного напора (2–5 К) достигались на упорядоченных микроканальных поверхностях [15–18], причем инверсия кривой кипения

¹ По материалам Восьмой Российской национальной конференции по теплообмену (РНКТ-8). Москва. 17–22 октября 2022 г.

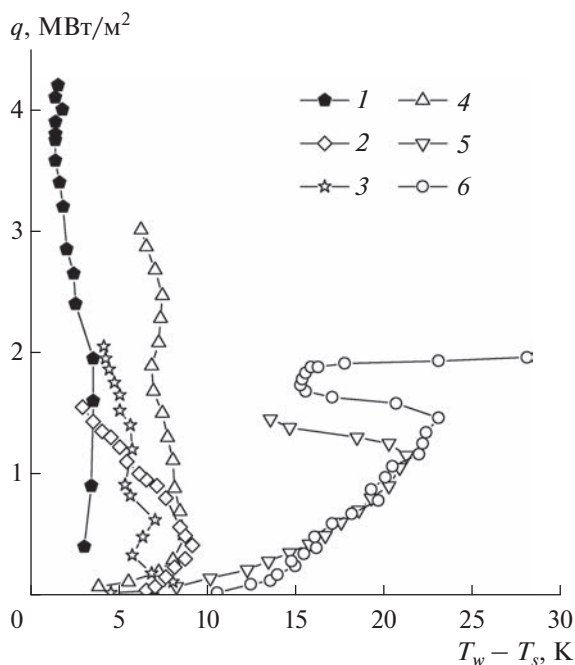


Рис. 1. Обобщение экспериментальных данных, полученных при кипении воды на микроструктурированных поверхностях: 1 – [15], 2 – [16], 3 – [17], 4 – [18], 5 – [19], 6 – [20].

на таких поверхностях происходила несколько раз по мере увеличения плотности теплового потока (рис. 1).

Эксперименты, проведенные с использованием воды и этанола [21], пропана [22], а также фреона-113 и этанола [23], показали, что на капиллярно-пористых покрытиях может наблюдаться гистерезис кривой кипения. Он обусловлен тем, что центры парообразования, активированные в области высоких тепловых потоков, остаются активными при понижении теплового потока. Увеличенное количество активированных центров являлось причиной более низкого температурного напора, полученного при понижении теплового потока в [24] с водой в качестве рабочей жидкости. На рис. 2 показаны инверсия и гистерезис кривой кипения, полученные в [25]. Гистерезис на рис. 2 был результатом того, что центры парообразования оставались активированными после уменьшения теплового потока. Инверсия и гистерезис наблюдались при кипении тонкого горизонтального слоя жидкости на капиллярно-пористом покрытии из нержавеющей стали [26].

Анализ перечисленных выше работ показывает, что причины возникновения инверсии кривой кипения изучены недостаточно, а воспроизводимость экспериментальных данных практически не исследовалась. Необходимо понимание физики процесса, которое позволит эффективно проекти-

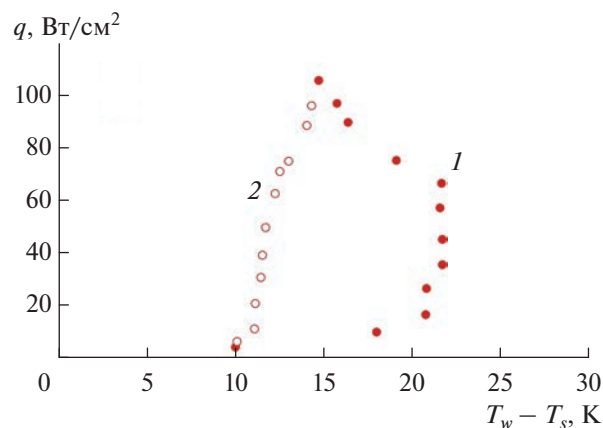


Рис. 2. Инверсия и гистерезис кривой кипения, полученные в работе [25]: 1 – точки при нагреве, 2 – точки при охлаждении.

ровать и эксплуатировать теплообменные поверхности.

Целью данной работы является экспериментальное исследование теплообмена при кипении тонкого горизонтального слоя жидкости на капиллярно-пористом покрытии до и после испытательного цикла.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА И РЕЗУЛЬТАТЫ

Детальное описание экспериментального стенда приведено в [27]. Рабочая камера выполнена в виде цилиндрического сосуда из стали 12X18H10T с толщиной стенок 1 мм, внутренним диаметром 120 мм и высотой 300 мм. Нагрев днища рабочей камеры осуществляется электронагревателем с мощностью 2 кВт. Для равномерного распределения теплового потока, направленного к поверхности нагрева, между электронагревателем и днищем рабочей камеры расположена латунная пластина. В целях уменьшения контактного термического сопротивления зазор между днищем и латунной пластиной заполнен специальной пастой с высокой теплопроводностью. Для измерения плотности теплового потока в днище сбоку на различной высоте просверлено пять отверстий диаметром 1.5 мм, в которые вставляются в нержавеющей капиллярах медь-константановые термопары. Тепловой поток рассчитывается посредством уравнения Фурье по температурному градиенту, измеренному вдоль центральной линии верхней части дна, с использованием линейной аппроксимации выходного сигнала пяти термопар. Расчетная ошибка определения теплового потока составила около $\pm 16\%$ при тепловом потоке $q = 10^3$ Вт/м², $\pm 10\%$ при $q = 10^4$ Вт/м² и $\pm 6\%$ при $q = 10^5$ Вт/м². Температура поверхности T_w определялась по показаниям термопары, находившейся под поверхностью нагре-

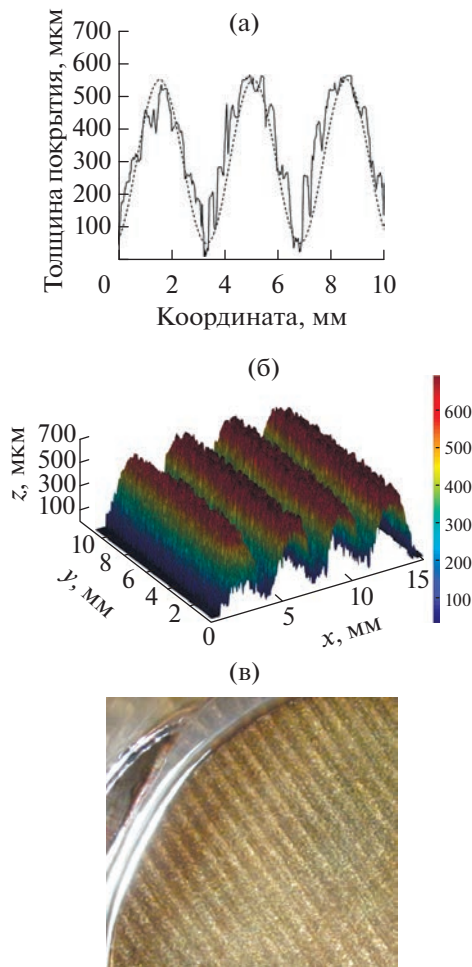


Рис. 3. Фотография капиллярно-пористого покрытия из нержавеющей стали с соответствующими (а) 2D- и (б) 3D-профилограммами; (в) — вид поверхности сверху.

ва, с учетом измеренного температурного градиента. Общая погрешность измерения температуры поверхности составила около $\pm 0.8^\circ\text{C}$ при тепловых потоках $q \sim 10^5 \text{ Вт/м}^2$.

Капиллярно-пористое покрытие из нержавеющей стали LPW 155 (15-5PH) наносилось на нижнее основание (днище) специально изготовленной камеры с использованием технологии лазерной 3D-печати методом селективного лазерного спекания. Подробно технология нанесения покрытия описана в работах [26, 27]. Морфология образца из нержавеющей стали анализировалась с помощью сканирующего электронного микроскопа Hitachi S-3400N. Для создания профилограмм покрытия применялся профилометр оптического микроскопа BRUKER Contour GT-K1. Топографические карты с распределением толщины и фотографией покрытия представлены на рис. 3, а изображение с микроскопа — на рис. 4. Теплопроводность материала покрытия $\lambda \approx 20 \text{ Вт/(м К)}$ [28],

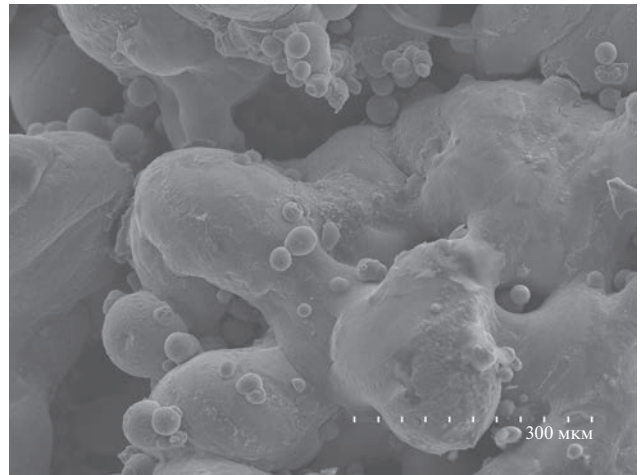


Рис. 4. Изображение капиллярно-пористого покрытия из нержавеющей стали, полученное с помощью сканирующего электронного микроскопа.

пористость $\varepsilon = 44\%$. Максимальная высота гребней $\delta = 550 \text{ мкм}$, минимальная высота (остаточный слой) $\delta_0 = 50 \text{ мкм}$, амплитуда $A = \delta - \delta_0 = 500 \text{ мкм}$. Уравнение профиля покрытия $z = (A/2)\sin(2\pi x/\lambda_m) + A/2 + \delta_0$, где z — вертикальная координата, x — горизонтальная. Длина волны модуляции $\lambda_m = 3500 \text{ мкм}$. Длина волны модуляции покрытия выбиралась кратной двум капиллярным постоянным для исследуемой жидкости. В качестве рабочей жидкости использовался *n*-додекан. В данной работе представлены результаты, полученные при давлении над слоем $P_s(P_s/P_{cr}) = 20 \text{ кПа}$ (1.1×10^{-2}), где P_s и P_{cr} — давление насыщения и критическое давление соответственно. Температура насыщения $T_s = 158^\circ\text{C}$ определялась с помощью зависимости давления паров от температуры, взятой из справочника [29]. Приборная погрешность измерения давления приводила к погрешности определения температуры насыщения $\pm 0.3^\circ\text{C}$. Высота исследуемого в работе слоя жидкости h (h/l_σ) = 4 мм (2.32), где l_σ — капиллярная постоянная жидкости (для *n*-додекана $l_\sigma = 1.78 \text{ мм}$). Экспериментальные результаты сравнивались с данными [30], полученными на гладкой поверхности.

На рис. 5 представлено сравнение экспериментальных данных, полученных на капиллярно-пористом покрытии и на гладкой поверхности. При увеличении плотности теплового потока выше величины, соответствующей точке *a* на кривой 1 ($q = 92 \text{ кВт/м}^2$), наблюдалась инверсия кривой кипения — происходило уменьшение температурного напора с ростом плотности теплового потока. За начало инверсии кривой кипения принималась точка, после которой с увеличением плотности теплового потока происходило значительное снижение температурного напора по сравнению с

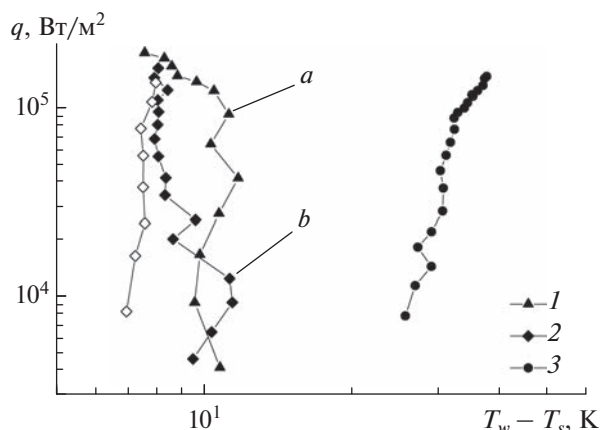


Рис. 5. Зависимости плотности теплового потока от температурного напора: 1 — данные, полученные на капиллярно-пористом покрытии; 2 — данные, полученные на покрытии после 350 ч испытательного цикла; 3 — данные, полученные на поверхности без покрытия; черные маркеры — точки при нагреве (прямой ход), белые — при охлаждении (обратный ход).

предыдущими точками с меньшими значениями плотности тепловых потоков. В точке, соответствующей значению критической плотности теплового потока ($q = 195 \text{ кВт/м}^2$), наблюдалось пятикратное снижение температурного напора по сравнению с данными, полученными на поверхности без покрытия (кривая 3). По-видимому, данное снижение происходило за счет активации дополнительных центров парообразования внутри пористой структуры из низкотеплопроводной нержавеющей стали. Этому мог способствовать значительный перепад температур от основания до вершины гребня, приводящий к постепенному прогреву и активации центров парообразования внутри капиллярно-пористого покрытия. В работах [19, 25], проведенных при кипении в большом объеме жидкости, температурный градиент по высоте низкотеплопроводных покрытий приводил к активации центров парообразования при высоких тепловых потоках, что отражалось в виде инверсии кривой кипения.

После 350 ч работы покрытия с перерывами при различных давлениях над слоем жидкости был проведен повторный эксперимент с целью воспроизведения полученной ранее инверсии кривой кипения. Эксперимент на приработанном покрытии проводился сначала при повышении мощности, подаваемой на нагреватель (прямой ход), а затем при постепенном ее снижении (обратный ход). В точке *b* на кривой 2 (рис. 5) при $q = 12 \text{ кВт/м}^2$ видно, что начало инверсии кривой кипения на приработанном покрытии происходит при меньшей в семь раз плотности теплового потока по сравнению с точкой *a*. Визуально после точки *b*, соответствующей началу инверсии кривой кипения

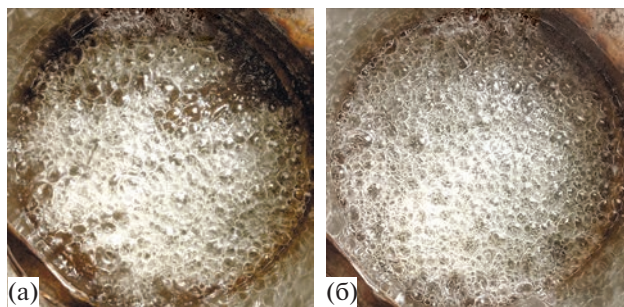


Рис. 6. Фотографии процесса пузырькового кипения на капиллярно-пористом покрытии: (а) — при нагреве (прямой ход), $q = 9.3 \text{ кВт/м}^2$, $T_w - T_s = 11.4 \text{ К}$; (б) — при охлаждении (обратный ход), 8.4 кВт/м^2 , 6.9 К .

на приработанном покрытии, с ростом плотности теплового потока наблюдалось резкое увеличение количества активированных центров парообразования по всей площади покрытия. В предкризисных режимах теплообмена кривые 1 и 2 практически совпадают. Температурные напоры при нагреве и охлаждении отличались незначительно в отличие от показанной в работе [25] кривой. При низких тепловых потоках разница в температурных напорах становилась более существенной, поскольку при обратном ходе центры парообразования оставались активированными (рис. 6). Количество активных центров парообразования при обратном ходе было значительно больше, чем при прямом, что позволило отводить плотность теплового потока $q = 8.4 \text{ кВт/м}^2$ при меньшем температурном напоре.

Таким образом, на изготовленном с использованием технологии лазерной 3D-печати капиллярно-пористом покрытии наблюдалась инверсия кривой кипения. Со временем свойства данного покрытия менялись, в результате чего инверсия происходила при более низких тепловых потоках.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе проведено экспериментальное исследование теплообмена при кипении тонкого горизонтального слоя жидкости на капиллярно-пористом покрытии до и после продолжительных испытаний. На покрытии наблюдалась инверсия кривой кипения, которая приводила к пятикратному снижению температурного напора по сравнению с поверхностью без покрытия. Инверсия кривой кипения на приработанном покрытии начиналась при меньшей в семь раз плотности теплового потока.

Исследования выполнены в рамках госзадания ИТ СО РАН (№ 121031800216-1).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дедов А.В. Обзор современных методов интенсификации теплообмена при пузырьковом кипении // Теплоэнергетика. 2019. Т. 66. № 12. С. 18.
2. Володин О.А., Печеркин Н.И., Павленко А.Н. Интенсификация теплообмена при кипении и испарении жидкостей на модифицированных поверхностях // ТВТ. 2021. Т. 59. № 2. С. 280.
3. Васильев Н.В., Вараксин А.Ю., Зейгарник Ю.А., Ходаков К.А. Характеристики кипения воды, недогретой до температуры насыщения, на структурированных поверхностях // ТВТ. 2017. Т. 55. № 6. С. 712.
4. Pecherkin N.I., Volodin O.A., Pavlenko A.N., Kataev A.I., Mironova I.B. Heat Transfer Enhancement Experiments in R21 Falling Film over a Bundle of MAO-coated Horizontal Tubes // Int. Commun. Heat Mass Transfer. 2021. V. 129. P. 105743.
5. Попов И.А., Щелчков А.В., Гортышов Ю.Ф., Зубков Н.Н. Интенсификация теплоотдачи и критические тепловые потоки при кипении на поверхностях с микрооребрением // ТВТ. 2017. Т. 55. № 4. С. 537.
6. Аксянов Р.А., Коханова Ю.С., Куимов Е.С., Лэй Р.А., Попов И.А. Обобщение экспериментальных данных по теплоотдаче и критическим тепловым потокам на микроструктурированных поверхностях при кипении различных жидкостей // Тепловые процессы в технике. 2020. Т. 12. № 7. С. 301.
7. Volodin O.A., Pecherkin N.I., Pavlenko A.N., Zubkov N.N. Surface Microstructures for Boiling and Evaporation Enhancement in Falling Films of Low-viscosity Fluids // Int. J. Heat Mass Transfer. 2020. V. 155. P. 119722.
8. Zabirow A., Kanin P., Vinogradov M., Sliva A., Dedov A., Fedorovich S., Yagov V. Influence of Carbon Coating and Oxide Layer on Film Boiling Regime // Mater. Today: Proc. 2018. V. 5. № 12. P. 26171.
9. Molotova I., Zabirow A., Yagov V., Vinogradov M., Kanin P., Molotov I., Antonov N. Influence of Coolant and Material Properties on Cooling High-temperature Steel Spheres in Subcooled Ethanol-water Mixtures // Int. J. Therm. Sci. 2022. V. 179. P. 107659.
10. Павленко А.Н., Цой А.Н., Суртаев А.С., Кузнецов Д.В., Калита В.И., Комлев Д.И., Иванников А.Ю., Радюк А.А. Экспериментальное исследование повторного смачивания перегретой пластины со структурированным капиллярно-пористым покрытием стекающей пленкой жидкости // ТВТ. 2018. Т. 56. № 3. С. 424.
11. Starodubtseva I.P., Kuznetsov D.V., Pavlenko A.N. Experiments and Modeling on Cryogenic Quenching Enhancement by the Structured Capillary-porous Coatings of Surface // Int. J. Heat Mass Transfer. 2021. V. 176. P. 121388.
12. Jaikumar A., Kandlikar S.G. Pool Boiling Inversion Through Bubble Induced Macroconvection // Appl. Phys. Lett. 2017. V. 110. № 9. P. 094107.
13. Pavlenko A.N., Lel. V.V. Heat Transfer and Crisis Phenomena in Falling Films of Cryogenic Liquid // Russ. J. Eng. Therm. 1997. V. 7. № 3–4. P. 177.
14. Cieřliński J.T. Nucleate Pool Boiling on Porous Metallic Coatings // Exp. Therm. Fluid Sci. 2002. V. 25. № 7. P. 557.
15. Jaikumar A., Kandlikar S.G. Ultra-high Pool Boiling Performance and Effect of Channel Width with Selectively Coated Open Microchannels // Int. J. Heat Mass Transfer. 2016. V. 95. P. 795.
16. Hai F., Zhu W., Liang S., Yang X., Deng Y. Enhanced Pool Boiling Performance of Microchannel Patterned Surface with Extremely Low Wall Superheat Through Capillary Feeding of Liquid // Nanoscale Microscale Thermophys. Eng. 2020. V. 24. № 2. P. 66.
17. Li J., Zhu G., Kang D., Fu W., Zhao Y., Miljkovic N. Endoscopic Visualization of Contact Line Dynamics During Pool Boiling on Capillary-activated Copper Microchannels // Adv. Funct. Mater. 2021. V. 31. № 4. P. 2006249.
18. Rahman M.M., McCarthy M. Effect of Length Scales on the Boiling Enhancement of Structured Copper Surfaces // J. Heat Transfer. 2017. V. 139. № 11. P. 111508.
19. Kruse C., Tsubaki A., Zuhlke C., Anderson T., Alexander D., Gogos G., Ndao S. Secondary Pool Boiling Effects // Appl. Phys. Lett. 2016. V. 108. № 5. P. 827.
20. Song Y., Díaz-Marín C.D., Zhang L., Cha H., Zhao Y., Wang E.N. Three-tier Hierarchical Structures for Extreme Pool Boiling Heat Transfer Performance // Adv. Mater. 2022. V. 34. № 32. P. 2200899.
21. Малышенко С.П., Андрианов А.Б. О начальном участке кривой кипения на поверхностях с пористыми покрытиями и гистерезисе закипания // ТВТ. 1987. Т. 25. № 3. С. 563.
22. Васильев Л.Л., Журавлев А.С., Овсянник А.В., Новиков М.Н., Васильев Л.Л. Теплоотдача при кипении сжиженного пропана в капиллярно-пористых структурах // Вести НАН Беларуси. 2002. № 4. С. 114.
23. Poniewski M.E. Peculiarities of Boiling Heat Transfer on Capillary-porous Coverings // Int. J. Therm. Sci. 2004. V. 43. № 5. P. 431.
24. Wang Y.Q., Luo J.L., Heng Y., Mo D.C., Lyu S.S. Wettability Modification to Further Enhance the Pool Boiling Performance of the Micro Nano Bi-porous Copper Surface Structure // Int. J. Heat Mass Transfer. 2018. V. 119. P. 333.
25. Costa-Greger J., Tsubaki A., Gerdes J., Anderson M., Zuhlke C., Alexander D., Shield J., Gogos G. Pool Boiling Inversion and Hysteresis with Femtosecond Laser Processed 304 Stainless Steel Surfaces for Heat Transfer Enhancement // 19th IEEE Intersociety Conference on Thermal and Thermomechanical Phenomena in Electronic Systems (ITherm). IEEE. 2020. P. 298.
26. Бессмельцев В.П., Павленко А.Н., Жуков В.И. Разработка технологии создания структурированных капиллярно-пористых покрытий методом 3D-печати для интенсификации теплообмена при кипении // Автометрия. 2019. Т. 55. № 6. С. 25.
27. Zhukov V.I., Pavlenko A.N., Shvetsov D.A. The Effect of Pressure on Heat Transfer at Evaporation/Boiling in Horizontal Liquid Layers of Various Heights on a Microstructured Surface Produced by 3D Laser Printing // Int. J. Heat Mass Transfer. 2020. V. 163. P. 120488.
28. Зубченко А.С., Колосков М.М., Каширский Ю.В. и др. Марочник сталей и сплавов. 2-е изд., доп. и испр. / Под ред. Зубченко А.С. М.: Машиностроение, 2003. 784 с.
29. Yaws C.L. Handbook of Thermodynamic and Physical Properties of Chemical Compounds. N.Y.: Knovel, 2003. P. 597.
30. Zhukov V.I., Pavlenko A.N. Heat Transfer and Critical Phenomena During Evaporation and Boiling in a Thin Horizontal Liquid Layer at Low Pressures // Int. J. Heat Mass Transfer. 2018. V. 117. P. 978.

УДК 536.24

ПРОЦЕССЫ В ФАКЕЛЕ РАСПЫЛА ТЕПЛОНОСИТЕЛЯ

© 2023 г. А. Т. Комов*, А. В. Захаренков, В. В. Толмачев, В. С. Штелинг

ФГБОУ ВО «НИУ «Московский энергетический институт», Москва, Россия

*E-mail: komovat@mpei.ru

Поступила в редакцию 05.07.2022 г.

После доработки 14.10.2022 г.

Принята к публикации 06.12.2022 г.

Рассмотрены вопросы генерации диспергированного потока теплоносителя; распределения капель в потоке по размерам в зависимости от расхода, давления и теплофизических свойств теплоносителя; процессы дробления и коагуляции капель; области размеров капель, устойчивых к дроблению. На базе уравнения движения и распределения капель в потоке по радиусу у сопла форсунки разработана программа расчета эволюции параметров факела распыла.

DOI: 10.31857/S0040364423020102

ВВЕДЕНИЕ

Защита первой стенки термоядерных реакторов, подвергающейся разрушительному воздействию высокотемпературной плазмы, является важным научно-техническим вопросом. На первом этапе эту проблему планировалось решить при помощи тугоплавких материалов, таких как вольфрам. Однако этот вариант защиты связан с опасностью попадания в плазму атомов с высоким атомным числом. В качестве альтернативного варианта рассматривается возможность применения капиллярно-пористых структур (КПС), насыщенных жидким литием [1, 2]. Применение КПС требует дополнительного комплексного исследования внутри плазменного объема, кроме того, необходимо решить задачу термостабилизации и съема тепловых потоков высокой плотности. По-видимому, этим требованиям достаточно хорошо удовлетворяет теплосъем диспергированным потоком теплоносителя. Наиболее систематизированное описание физики процессов такого метода теплосъема приведено в [3]. Для понимания физики процессов данного сложного явления необходимо сочетание аналитических и экспериментальных методов исследования. Ниже приведено подробное описание физики отдельных процессов применительно к исследуемому способу теплосъема и термостабилизации.

Особенности теплосъема от высокотемпературной поверхности диспергированным потоком изучены, например, в [4–9]. В этих работах рассмотрены виды теплообмена и значения показателей теплоотдачи от высокотемпературной поверхности. Показано, что наиболее высокий коэффициент теплообмена — свыше $60 \text{ кВт}/(\text{м}^2 \text{ } ^\circ\text{C})$ — достигается при теплосъеме диспергированным потоком теплоносителя. В работах [4–6] приведе-

ны обзоры применения спреев для охлаждения разнообразных элементов, систем от микроэлементов электронных схем до стенок реактивных двигателей. В [10] показана эффективность применения спреев для охлаждения поверхности с высокой температурой. Авторами [11, 12] представлены материалы по созданию поверхностей с заданными свойствами (структурированные поверхности).

В [13] изучалось влияние параметров распыления (средний размер капель, плотность орошения охлаждаемой поверхности и скорость капель) на критический тепловой поток (КТП). При этом авторы [13] на основе собственных экспериментальных данных делают вывод о сильном влиянии на интенсивность теплообмена скорости капель и заметно более слабом воздействии размера капель. Последнее утверждение представляется спорным, справедливость его возможна, видимо, только в исследуемых авторами режимах, поскольку эффективность применения обсуждаемого метода теплосъема определяется именно фазовым переходом, доля которого тем выше, чем меньше радиус капель. В пневматических форсунках для увеличения скорости капель имеется существенно больше возможностей и по этой причине достижимые значения тепловых потоков при сопоставимых параметрах заметно выше.

Механизм теплоотвода, в том числе и в пневматической форсунке, исследовался в работе [14], авторы которой предположили существование на поверхности теплосъема пленки пара, через которую с высокой скоростью проникают капли жидкости, на месте пленки пара на поверхности образуется тонкий слой кипящей жидкости с поверхностными центрами кипения и образованием так называемых вторичных центров парообразования, которые возникают при увлечении каплями

частиц воздуха или пара [14, 15]. При этом интенсивный теплообмен складывается из трех ключевых механизмов: 1) пузырькового кипения за счет как поверхностных, так и вторичных зародышей; 2) конвективного теплообмена; 3) прямого испарения с поверхности пленки жидкости [16–21]. Тилтон [20], используя распыляемые под давлением водяные струи, получил тепловые потоки до 10 МВт/м² при перегреве поверхности $\Delta T_c \leq 40^\circ\text{C}$. Средний диаметр капель и средние скорости в этом исследовании составляли приблизительно 80 мкм и 10 м/с соответственно. Автор [20] пришел к выводу, что, хотя уменьшение диаметра капель увеличивает коэффициент теплоотдачи, массовый расход G может не быть фактором, увеличивающим КТП.

Авторы работ [22, 23] предположили, что КТП можно увеличить, уменьшив диаметр капли. В [24] показано, что капли меньшего размера могут давать те же значения КТП при меньших скоростях потока, что и капли большего размера при больших скоростях потока. Эти результаты зависимости КТП от размера капель, по мнению авторов [13], противоречивы, поскольку параметры распыления не были выделены для систематического исследования. Следует отметить, что данная модель теплообмена [22–24] вполне соответствует представлениям авторов настоящей статьи.

Тем не менее работ по изучению влияния параметров диспергированных потоков на значения тепловых потоков явно недостаточно: не выявлены механизмы воздействия внешних факторов на такие параметры, как распределение капель в потоке по радиусу и скорости капель; не изучены процессы эволюции факела распыла и т.д. Авторам неизвестны работы, посвященные анализу процесса генерации, распределения по размерам и скоростям капель, эволюции диспергированного потока вдоль оси, направленной от сопла форсунки охлаждаемой поверхности.

В случае диспергированного потока имеет смысл говорить об осредненном диаметре капель. Результаты статьи опираются на данные оптических и теплофизических исследований авторов. Здесь данные для воды получены при следующих значениях чисел гидродинамического подобия: число Вебера $We = 60\text{--}120$, число Бонда $Bo = (0.7\text{--}2.0) \times 10^{-4}$, число Ландау $La = (4.0\text{--}6.0) \times 10^5$, число Рейнольдса $Re = 1500\text{--}2500$. Наиболее высокая эффективность была достигнута при следующих параметрах диспергированного потока: $w \geq 10$ м/с, температура поверхности $T_c = 105\text{--}160^\circ\text{C}$. Давление теплоносителя в сопле регулировалось в диапазоне $p = (4\text{--}7) \times 10^5$ Па.

Целью данной статьи является изучение параметров, характеризующих диспергированный поток теплоносителя (распределение по радиусу капель и расчет осредненного по потоку радиуса ка-

пель); влияния процессов дробления и коагуляции капель; математической записи уравнения движения и эволюции капель факела распыла.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОСРЕДНЕННОГО РАДИУСА КАПЕЛЬ ДИСПЕРГИРОВАННОГО ПОТОКА ДЛЯ ЦЕНТРОБЕЖНОЙ ФОРСУНКИ

После испытания различных типов форсунок было установлено, что характеристиками, наиболее полно удовлетворяющими условиям эксперимента, обладает центробежная форсунка с коническим вкладышем. Данный тип форсунок обеспечивает наиболее равномерное распыление и лучшую дисперсность капель.

На рис. 1 изображена схема модернизированной авторами центробежной форсунки с вкладышем, с использованием которой были проведены эксперименты. Часть теплоносителя проходит через центральное цилиндрическое отверстие вставки (типовая форсунка без отверстия). Другая часть жидкости подводится тангенциально в камеру смешения, проходя по винтовым периферийным каналам вставки. Струи жидкости взаимодействуют друг с другом в камере смешения сферической формы. Диспергированный поток на выходе из сопла образует факел распыла в виде заполненного теплоносителем конуса.

Форсунка (рис. 1а) состоит из корпуса 1, вкладыша, содержащего выходное сопло 2, и вкладыша-завихрителя 4, которые совместно образуют коническую камеру смешивания 3. Вкладыши фиксируются с помощью ограничителя 5.

Конструкция вкладыша-завихрителя представлена на рис. 1б. Вкладыш содержит один центральный канал диаметром 0.4 мм и четыре тангенциальных канала шириной 0.8 мм и глубиной 0.4 мм.

Поток жидкости после выхода из сопла форсунки под действием избыточной энергии, возникающей вследствие перепада давления ($p_c > p_{\text{кам}}$), разбивается на фрагменты — капли различного размера, которые под действием сил поверхностного натяжения и в соответствии с принципом минимального уровня энергии принимают сферическую форму. При этом уравнение энергетического баланса в упрощенном виде можно представить как:

$$p_c \dot{V}_c = \sum_{(i)} p_{\text{кам}} \dot{V}_{i,j} + \sum_{(i)} \sigma S_i \dot{N}_i + \sum_{(i)} m_{k,i} \frac{w_i^2}{2} \dot{N}_i.$$

Здесь p_c , $\dot{V}_c$ — давление и объемный расход теплоносителя в сопле форсунки; $p_{\text{кам}}$ — давление в камере; $\dot{V}_{i,j}$, S_i — объемный расход теплоносителя и поверхность капли i -й фракции; $\sum_{(i)} \sigma S_i = \sum_{(i)} \sigma \dot{N}_i 4\pi r_i^2$ — работа сил поверхностного натяжения по образованию $\dot{N}_i$ капель в еди-

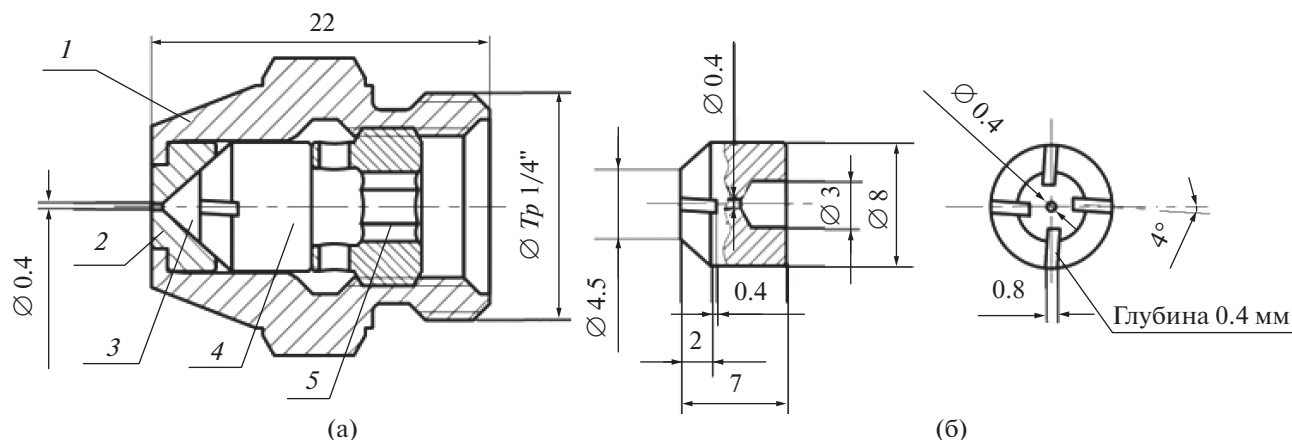


Рис. 1. Общий вид центробежной форсунки.

ницу времени; $\sum_{(i)} m_{k,i} \frac{w_i^2}{2} \dot{N}_i$ – суммарная кинетическая энергия капель всех фракций.

Поскольку давление в камере можно считать величиной постоянной, а при условии, что рассматривается сечение уже сформировавшегося диспергированного потока в окрестности сопла форсунки, следует принять, что $\sum_{(i)} \dot{V}_{i,j} = \dot{V}_j$, а с учетом несжимаемости жидкости и $\dot{V}_c = \dot{V}_j$. Поэтому можно записать

$$p_c \dot{V}_c = p_{\text{кам}} \dot{V}_c + \sum_{(i)} \sigma 4\pi r_i^2 \dot{N}_i + \sum_{(i)} \frac{4}{3} \pi r_i^3 \rho_j \frac{w_i^2}{2} \dot{N}_i. \quad (1)$$

Уравнение (1) с применением непрерывной функции имеет вид

$$p_c \dot{V}_c = p_{\text{кам}} \dot{V}_c + 4\pi \sigma \int_0^\infty r_i^2 \dot{N}_i \varphi(r_i) dr + \frac{2\pi \rho_j}{3} \int_0^\infty w_i^2 r_i^3 \dot{N}_i \varphi(r_i) dr.$$

Расход теплоносителя в факеле диспергированного потока записывается как

$$G = \frac{4}{3} \pi \rho_j \bar{r}^3 \dot{N}_\Sigma,$$

где $\bar{r}$ – осредненный по всему массиву диспергированного потока радиус капли, $\dot{N}_\Sigma = \sum_{(i)} \dot{N}_i$ – общее количество капель всех размеров (фракций), образовавшихся в единицу времени. Кроме того, примем во внимание, что

$$\sum_{(i)} \sigma \dot{N}_i 4\pi r_i^2 = \sigma 4\pi \dot{N}_\Sigma \bar{r}^2,$$

$$\sum_{(i)} \frac{4}{3} \pi r_i^3 \rho_j \dot{N}_i \frac{w_i^2}{2} = \dot{N}_\Sigma \frac{4}{3} \pi \bar{r}^3 \rho_j \frac{\bar{w}^2}{2}.$$

В этом случае уравнение (1) имеет вид

$$p_c \dot{V}_{j,c} = p_{\text{кам}} \dot{V}_{j,c} + 4\pi \bar{r}^2 \sigma \dot{N}_\Sigma + \frac{4}{3} \pi \bar{r}^3 \rho_j \frac{\bar{w}^2}{2} \dot{N}_\Sigma,$$

откуда

$$\dot{N}_\Sigma = \frac{(p_{j,c} - p_{\text{кам}}) \dot{V}_{j,c}}{4\pi \bar{r}^2 \sigma + \frac{4}{3} \pi \bar{r}^3 \rho_j \frac{\bar{w}^2}{2}}.$$

С другой стороны,

$$\dot{N}_\Sigma = \frac{G_j}{\rho_j \frac{4}{3} \pi \bar{r}^3} = \frac{\dot{V}_j}{\frac{4}{3} \pi \bar{r}^3},$$

тогда для осредненного радиуса диспергированного потока можно записать

$$\bar{r} = \frac{3\sigma}{p_{j,c} - p_{\text{кам}} - \rho_j \frac{\bar{w}^2}{2}}. \quad (2)$$

Задачей диспергирования является достижение параметров потока, при которых обеспечивается максимальная эффективность теплообмена охлаждаемой поверхности с теплоносителем, что становится возможным при таких размерах капель, при которых происходит их наиболее полный переход в паровую фазу. Расчеты по (2) дают возможность оценить перспективность конструкции форсунки. Однако надо иметь в виду, что процесс коагуляции идет сразу же после начала формирования диспергированного потока. Об этом свиде-

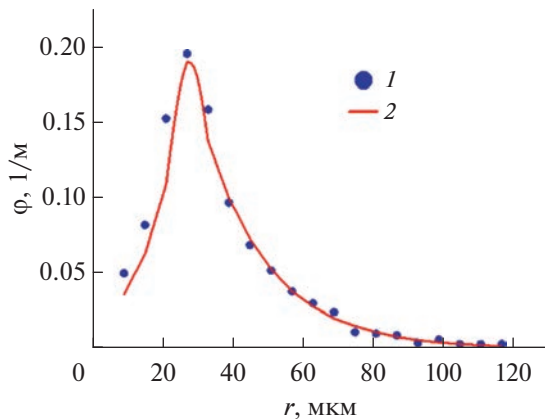


Рис. 2. Сравнение экспериментальных данных с рассчитанными по формуле (3) для форсунки Danfoss 8.5 при $p = 4 \times 10^5$ Па, $G = 5.58 \times 10^{-3}$ кг/с: 1 — эксперимент, 2 — расчет.

тельствуют измерения распределения по размерам капли сформировавшегося диспергированного потока уже на расстоянии 20 мм от среза сопла.

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КАПЕЛЬ ПОТОКА ПО РАДИУСУ

Экспериментальное определение распределения капель по радиусам — крайне трудоемкий процесс, требующий высокой квалификации персонала. Поэтому первостепенной задачей является описание этой зависимости формулой, которая включает в себя характеристики потока на выходе из сопла форсунки: давление и массовый расход. Очевидно, что распределение во многом должно зависеть и от теплофизических свойств распыляемой жидкости. Естественно, что теплофизические свойства распыляемой жидкости определяют основные параметры факела распыла.

Размерным масштабом капиллярных явлений считается капиллярная константа

$$b = \sqrt{\frac{\sigma}{g(\rho_{\text{ж}} - \rho_{\text{п}})}},$$

где $\rho_{\text{ж}}$, $\rho_{\text{п}}$ — плотность жидкости и пара соответственно.

Если радиус канала $r_k < b$, то канал следует считать капилляром, в котором надо учитывать влияние сил поверхностного натяжения. В диспергированном потоке имеет место распределение капель по размерам, при этом справедливо выражение

$$\varphi(r)dr = \frac{dN}{N},$$

где $\varphi(r)$ — вероятность того, что капля имеет радиус в диапазоне $\{r_i, r_i + dr\}$.

Из экспериментальных данных видно, что распределение можно условно разделить на две части: восходящую и убывающую.

Исходя из перечисленных выше соображений, с учетом установленной зависимости распределения от давления и расхода теплоносителя функцию распределения капель потока по размерам, расходу и давлению можно записать в виде

$$\varphi(r, p, G) = \alpha \sqrt{\frac{g\rho}{\sigma}} e^{\beta \frac{r}{r_*}} \left(\frac{p}{p_*}\right)^{n_1} \left(\frac{G}{G_*}\right)^{n_2}, \quad (3)$$

где α , β , n_1 , n_2 — эмпирические коэффициенты; ρ — плотность распыляемого теплоносителя; σ — коэффициент поверхностного натяжения; g — ускорение свободного падения; p — давление потока на выходе из сопла; p_* , G_* — давление и расход в некотором базовом состоянии; r — радиус капли; r_* — радиус, на который приходится максимум функции распределения.

В итоге для давлений $p \leq 5 \times 10^5$ получены следующие коэффициенты:

$\alpha = 4.40 \times 10^{-5}$, $\beta = 2.47$ для восходящего участка;

$\alpha = 2.20 \times 10^{-3}$, $\beta = -1.44$ для убывающего участка.

При давлениях $p > 5 \times 10^5$ Па осредненный радиус распределения значительно сдвигается влево (в сторону капель меньшего размера), и для описания таких режимов следует использовать коэффициенты

$\alpha = 4.40 \times 10^{-5}$, $\beta = 2.47$ для восходящего участка;

$\alpha = 1.55 \times 10^{-3}$, $\beta = -1.10$ для убывающего участка.

Коэффициенты n_1 и n_2 , а также базовые давление p_* и расход G_* одинаковы для всех режимов и составляют $n_1 = 0.025$, $n_2 = -0.033$, $p_* = 2 \times 10^5$ Па, $G_* = 10 \times 10^{-3}$ кг/с.

Функция (3) с представленными значениями коэффициентов позволяет достаточно точно описать распределение капель по радиусу и отображает долю капель фракции, имеющей радиус в диапазоне $\{r_i, r_i + dr\}$. На рис. 2–4 представлено сравнение рассчитанных по (3) и экспериментальных данных для типовых форсунок Danfoss, полученных в Уральском отделении РАН в Институте механики сплошных сред (лаборатория физической гидродинамики). Состав оборудования и описание метода измерений приведены в [25, 26].

Анализ совокупного влияния разнонаправленных процессов позволяет заключить следующее.

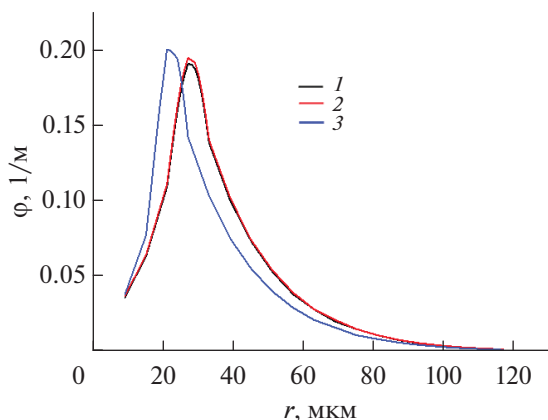


Рис. 3. Сравнение распределения капель по радиусам при разных режимах потока для форсунки Danfoss 6.5 в сечении на расстоянии $x = 2 \times 10^{-2}$ м: 1 – $p = 2 \times 10^5$ Па, $G = 4.04$ г/с, $\bar{r} = 53.25$ мкм; 2 – 4×10^{-5} , 5.58, 53; 3 – 7×10^{-5} , 6.83, 50.5.

1. Согласно формуле (3), с ростом давления максимум функции распределения смещается в сторону меньших размеров капель (рис. 3).

2. В результате процесса коагуляции происходит укрупнение капель и максимум функции распределения смещается в сторону более крупных капель, что можно увидеть на рис. 3–5.

3. Капли в результате процесса коагуляции становятся крупнее, достигают значения максимального диаметра устойчивой капли (см. ниже), и актуальным становится процесс дробления крупных капель. Подтверждение этого процесса можно видеть из анализа характера распределения, изображенного на рис. 4, 5.

ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПО СКОРОСТИ КАПЕЛЬ ДЛЯ ДИСПЕРГИРОВАННОГО ПОТОКА

Выделим из потока, выходящего из сопла форсунки со скоростью w_c , элементарную массу dm_i . Согласно фундаментальной теореме об изменении кинетической энергии, можно записать

$$W_{kd,п} - W_{кн} = A(F_\sigma), \quad (4)$$

где $W_{кн}$ – кинетическая энергия элементарной массы на выходе из сопла; $W_{kd,п}$ – кинетическая энергия капель N_i , сформировавшихся из этой массы в диспергированном потоке; $A(F_\sigma)$ – затраты энергии на формирование капель сферической формы. При этом полагается, что из выделенной из общего потока элементарной массы dm_i образуются капли только i -й фракции. При записи (4) другие эффекты, кроме сил поверхностного натяжения, не учитываются.

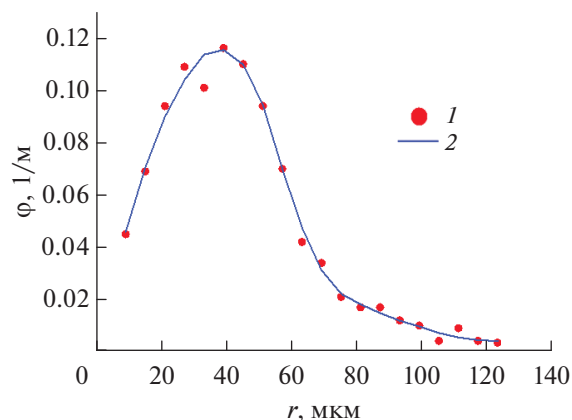


Рис. 4. Сравнение экспериментальных (1) и рассчитанных (2) данных для сечения в 5 см от сопла форсунки, $\bar{r} = 66.5$ мкм.

Силы поверхностного натяжения F_σ направлены на сохранение цилиндрической формы потока, а избыток кинетической энергии на выходе из сопла форсунки стремится разрушить поток на отдельные капли, таким образом, $A(F_\sigma) < 0$. Тогда уравнение (4) принимает вид

$$\frac{4}{3} \pi \rho_{ж} \dot{N}_i r_i^3 \frac{w_i^2}{2} - \frac{dm_i w_c^2}{2} = -4 \pi \dot{N}_i \sigma r_i^2,$$

где w_i – скорость капли i -й фракции сформировавшегося диспергированного потока, w_c – скорость потока на выходе из сопла.

Так как, согласно закону сохранения массы, масса капель i -й фракции равна d

$$m_i = \frac{4}{3} \pi \rho_{ж} \dot{N}_i r_i^3,$$

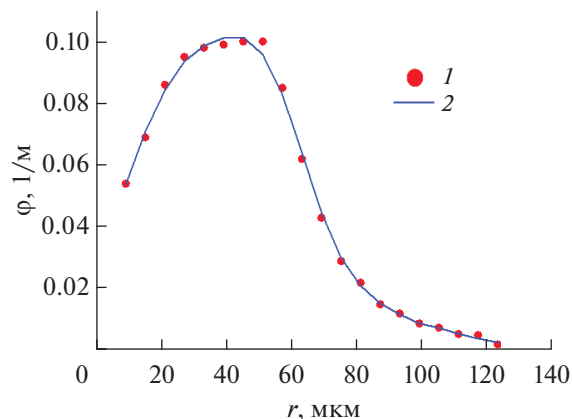


Рис. 5. Сравнение экспериментальных (1) и рассчитанных (2) данных для сечения в 8 см от сопла форсунки, $\bar{r} = 66.2$ мкм.

тогда получаем

$$\frac{4}{3}\pi\rho_{\text{ж}}\dot{N}_i r_i^3 (w_c^2 - w_i^2) = 8\pi\dot{N}_i \sigma r_i^2.$$

Из этого выражения следует, что скорость капля i -й фракции равна

$$w_i = \left(w_c^2 - \frac{6\sigma}{\rho_{\text{ж}} r_i} \right)^{1/2}. \quad (5)$$

Расчеты по (5) распределения каплей по скоростям с учетом влияния процессов коагуляции представлены на рис. 6. По соотношению (5) можно рассчитывать и скорость капли осредненного радиуса.

ДРОБЛЕНИЕ КАПЕЛЬ В ПОТОКЕ. МАКСИМАЛЬНЫЙ УСТОЙЧИВЫЙ РАДИУС КАПЕЛЬ

Диспергированный поток представляет собой поток каплей с размерами порядка 10 мкм, для которого актуальными являются процессы коагуляции (слияния) и дробления относительно крупных каплей. В любом случае эти процессы носят признаки индивидуального взаимодействия каплей. В разрабатываемой авторами модели предполагается, что капля движется поступательно со скоростью w в паровой среде вдоль оси факела распыла. Угол между осью факела распыла и направлением скорости не превышает 15° , поэтому предположение о направлении движения каплей вдоль оси можно признать вполне корректным. Визуальные наблюдения свидетельствуют об отсутствии вихревых структур в потоке, и положение о поступательном характере движения каплей в модели более чем обоснованно.

Под действием капиллярных сил давление внутри капли выше давления окружающего пара. На каплю сферической формы действует сила сопротивления поступательному движению капли F_c , действие которой уравнивают капиллярные силы F_k (рис. 7). Рассмотрим условие стабилизированного состояния капли. Условие устойчивого равновесия капли $F_c + F_k = 0$, откуда $F_k = F_c$. Силу лобового сопротивления при движении сферической капли можно представить как $F_c = \Delta p_c S_{\perp}$, а результирующую капиллярную силу определить через миделево сечение как $F_k = \Delta p_k S_{\perp}$, где $\Delta p_k = p_{\text{кап}} - p_{\text{п}} = \frac{2\sigma}{r_k}$, $S_{\perp} = \pi r_k^2$. Из условия устойчивости сферической формы капли следует, что равнодействующие этих сил равны по модулю и приложены в одной точке, т.е. $\Delta p_c S_{\perp} = \Delta p_k S_{\perp}$. Отсюда следует, что $\Delta p_c = \Delta p_k$. Последнее уравнение можно представить в следующем виде:

$$C_D \frac{\rho_{\text{п}} w^2}{2} = \frac{4\sigma}{d_{\text{кап}}}. \quad (6)$$

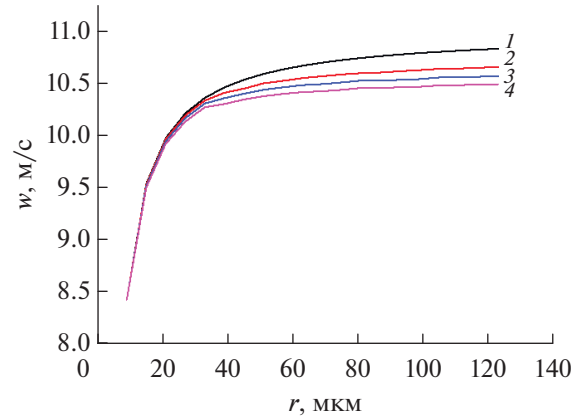


Рис. 6. Распределение скорости каплей диспергированного потока в исследуемых сечениях: 1 — $x = 2 \times 10^2$ м, 2 — 5×10^2 , 3 — 8×10^2 , 4 — 11×10^2 .

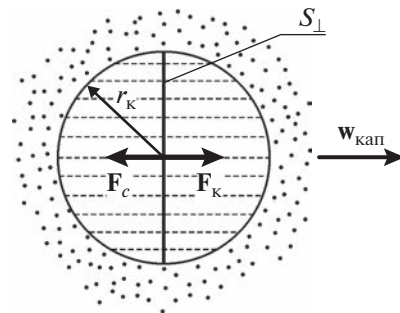


Рис. 7. Реактивная сила при коагуляции каплей.

Здесь $d_{\text{кап}}^* = d_{\text{max}}$ — максимальное значение диаметра капли, при котором сохраняется сферическая форма и капля не распадается на более мелкие; C_D — коэффициент “лобового” сопротивления капли.

При движении капли на ее поверхности возникают пульсации (внутренняя циркуляция), которые оказывают влияние и на силу сопротивления движению капли. Значение скорости внутренней циркуляции v в работе [27] оценивается как величина, примерно равная скорости капли $v \approx w_{\text{кап}}$. Скорость внутренней циркуляции v может быть оценена как

$$v = \gamma \left(\frac{\rho_{\text{ж}} \epsilon_R \lambda}{\rho_{\text{п}}} \right)^{1/3}, \quad (7)$$

где γ — эмпирический коэффициент, ϵ_R — масштаб турбулентных пульсаций, λ — характерный размер.

В случае, если с макроскопической точки зрения пар (диспергированная среда) неподвижен, имеет место только диффузионная скорость пара к кон-

денсатору, но значение этой скорости на порядок и более ниже значения скорости капли $u_{\text{диф}} \ll w_{\text{кап}}$, поэтому (6) принимает следующий вид:

$$C_D \frac{\rho_n w_{\text{кап}}^2}{2} = \frac{4\sigma}{d_{\text{макс}}}. \quad (8)$$

Согласно литературным источникам, предполагается, что эффективность влияния турбулентных пульсаций высокого уровня (частоты) невысокая, но низкочастотные пульсации сильно влияют на процессы слияния и распада капель. Следуя гипотезе Колмогорова [28], масштаб турбулентных

пульсаций можно оценить как $\epsilon_R = \frac{v_n^3}{\lambda^4}$, где v_n —

кинематическая вязкость пара. Физический смысл размера пульсаций в непрерывном и диспергированном потоках различный. Если в непрерывном потоке размер пульсаций уменьшается до некоторого значения λ_0 , при котором энергия пульсаций переходит в тепловую, то во втором случае турбулентные пульсации ограничены размерами капли.

После включения формулы для масштаба турбулентных пульсаций в уравнение (7) и в предположении, что $d_{\text{макс}} = \lambda$, а $v \approx w_{\text{кап}}$, из уравнения (8) можно получить

$$d_{\text{макс}} = \frac{C_D}{8} \gamma^2 (\rho_n \rho_{\text{ж}}^2)^{1/3} \frac{v_n^2}{\sigma}. \quad (9)$$

Если $d_i > d_{\text{макс}}$, то капля разделяется на более мелкие капли, при $d_i \leq d_{\text{макс}}$ капли сохраняют устойчивость воздействию силы сопротивления.

Для рассматриваемого случая охлаждения высокотемпературной поверхности диспергированным потоком теплоносителя $0.1 \leq \text{Re}_d \leq 100$, $\text{Re}_d = \frac{w d_{\text{кап}}}{v_n}$, а согласно [28], $C_D = \frac{16}{\text{Re}_d}$, тогда итоговая формула (9) принимает вид

$$d_{\text{макс}} = C \left[\frac{v_n^3}{w_{\text{кап}} \sigma} \right]^{1/2} (\rho_n \rho_{\text{ж}}^2)^{1/6}, \quad (10)$$

где C — эмпирический коэффициент. По оценкам авторов статьи для относительно крупных капель (см. рис. 6), для которых актуален процесс дробления, скорость капель не ниже $w_{\text{кап}} = 10$ м/с. Тогда, согласно расчетам по (10), $C \approx 40$.

УРАВНЕНИЕ ДВИЖЕНИЯ КАПЛИ

При движении системы капель предполагается, что капли данной фракции обладают одинаковой скоростью. В этом случае достаточно рассмотреть уравнение движения капли произволь-

ного радиуса, причем это уравнение составляется для центра масс движущейся капли, которая рассматривается как материальная точка. Уравнение движения капли массой m в этом случае имеет вид

$$m \left(\frac{d\mathbf{w}}{d\tau} \right) = \mathbf{F}_m + \mathbf{F}_c + \mathbf{F}_{\text{гр}},$$

где $\mathbf{F}_m$ — реактивная сила, $\mathbf{F}_c$ — сила аэродинамического сопротивления, $\mathbf{F}_{\text{гр}}$ — гравитационная сила, $\mathbf{w}(t, x)$ и ее полная производная составляют

$$\frac{dw(t, x)}{d\tau} = \frac{\partial w}{\partial t} + w(x) \frac{\partial w(x)}{\partial x}.$$

При стабилизированном движении $\frac{\partial w}{\partial t} = 0$. Тогда уравнение движения принимает вид

$$mw(x) \frac{\partial w(x)}{\partial x} = \mathbf{F}_m + \mathbf{F}_c + \mathbf{F}_{\text{гр}}.$$

Реактивную силу (рис. 8), возникающую вследствие поглощения каплей i -й фракции капли j -й фракции, можно найти, используя уравнение Мещерского

$$dF_m = \frac{dm_i}{dt} (w_i - w_j),$$

где $\frac{dm_i}{dt}$ — скорость изменения массы капли i -й фракции за счет присоединения капель фракции dm_j , которая определяется как

$$\begin{aligned} \frac{dm_i}{dt} &= k_{i,j} dm_j t_* = k_{i,j} m_j dN_j \frac{\Delta x}{w_i - w_j} = \\ &= k_{i,j} \frac{4}{3} \pi r_j^3 \rho_{\text{ж}} N_{\Sigma} \frac{\Delta x}{w_i - w_j} \varphi(r_j) dr. \end{aligned}$$

Здесь $k_{i,j}$ — коэффициент коагуляции капель i -й и j -й фракций; dm_j — масса присоединившихся капель; t_* — время, в течение которого капли находятся в элементарном объеме $\Delta V(x)$,

$$t_* = \frac{\Delta x}{w_i - w_j}, \quad dm_j = m_j dN_j = m_j N_{\Sigma} \varphi(r_j) dr.$$

Реактивная сила за счет присоединения капли m_i каплей фракции dm_j :

$$\begin{aligned} dF_m &= k_{i,j} m_j dN_i \frac{\Delta x}{w_i - w_j} (w_i - w_j) = \\ &= k_{i,j} \frac{4}{3} \pi \rho_{\text{ж}} r_j^3 N_{\Sigma} \varphi(r_j) dr \Delta x = B k_{i,j} \varphi(r_j) dr, \end{aligned}$$

где

$$B = \frac{4}{3} \pi \rho_{\text{ж}} N_{\Sigma} \Delta x = \frac{4}{3} \pi \rho_{\text{ж}} \frac{G}{\frac{4}{3} \pi r_{\text{ж}}^3} \Delta x = \frac{G}{r^3} \Delta x.$$

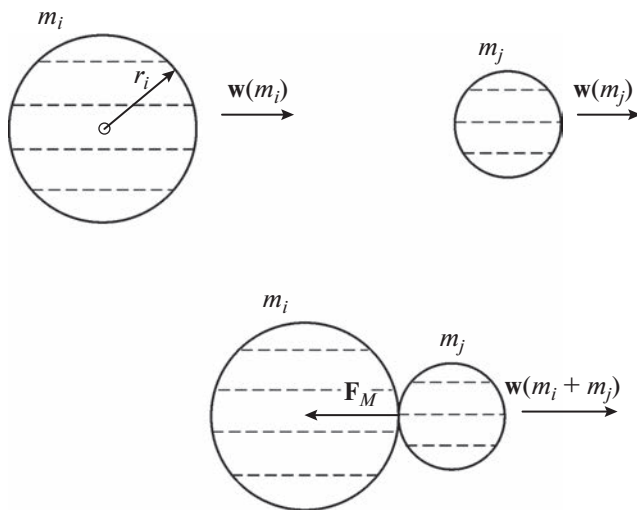


Рис. 8. Схема движения капли и действующих на нее сил.

Коэффициент коагуляции с учетом геометрических размеров и введения понятий концентрации капель и числа столкновений капель i -й и j -й фракций имеет следующий вид:

$$k_{i,j} = \frac{\pi(r_i^2 - r_j^2)}{\Delta V(x)}(w_i - w_j) = \frac{l_{\Phi}^2}{R_m^2 x^2 \Delta x}(r_i^2 - r_j^2)(w_i - w_j),$$

где x — расстояние рассматриваемого сечения от среза сопла, Δx — ширина элементарного объема (масштаб расчетной сетки), R_m — характерный размер поверхности.

Полная реактивная сила в единицу времени есть сумма сил, обусловленных присоединением капель отдельных фракций:

$$F_m = \int_0^m \xi k_{i,j} N_{\Sigma} m_j [w(m_i) - w(m_j)] \varphi(r_j) dr,$$

при дискретном описании:

$$F_m = \sum_{(i)} \xi k_{i,j} [w(m_i) - w(m_j)] m_j N_{\Sigma} \varphi(r_j) dr,$$

где ξ — вероятность присоединения капли, dr — ширина рассматриваемого диапазона радиуса капли, $dr \equiv \Delta r$. Учитывая, что в настоящее время этот вопрос мало исследован, в первом приближении можно принять $\xi = 1$.

Сила лобового сопротивления рассчитывается по формуле

$$F_c = C_D \frac{\rho \bar{w}^2}{2} N_{\Sigma} = \frac{16}{Re_d} \frac{\rho \bar{w}^2}{2} N_{\Sigma},$$

где Re_d — число Рейнольдса, в котором в качестве определяющего размера принят диаметр капли.

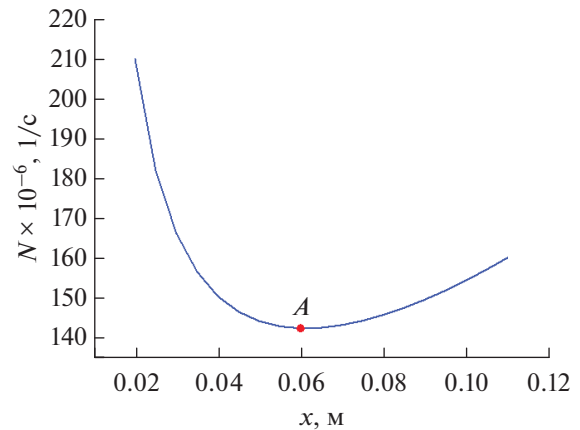


Рис. 9. Изменение общего количества капель в сечениях по оси факела распыла.

На основании изложенных выше рассуждений написана программа, позволяющая рассчитать распределение капель по размерам на любом расстоянии от сопла форсунки, которая опирается на представленные выше формулы. В программе учтено то, что в первую очередь в коагуляцию вступают капли, размеры которых различаются больше всего, и, следовательно, имеют наибольшую разность скоростей. На рис. 9 представлено сравнение результатов расчетов по программе с экспериментальными данными для сечений, удаленных на расстояния 5, 8 и 11 см от среза форсунки.

Области, в которых актуальны процессы коагуляции и дробления, хорошо видны на рис. 9. В области факела распыла, прилегающей к форсунке, суммарное количество капель среднего размера убывает, что свидетельствует о преобладании процесса коагуляции. Затем начинает превалировать процесс дробления крупных капель и суммарное количество капель в потоке возрастает. Точка A является характерной для диспергированного потока: на более близком к соплу расстоянии ($x < x_A$) превалирует процесс коагуляции, а при приближении к охлаждаемой поверхности ($x > x_A$) — дробления.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Представлено выражение для осредненного радиуса капель диспергированного потока на выходе из форсунки.

2. Получены уравнения, описывающие распределения капель в факеле распыла по радиусу и скорости капель для типовой центробежной форсунки и учитывающие в том числе такие параметры форсунки, как давление и расход теплоносителя.

3. Определена область устойчивых к дроблению капель потока в зависимости от теплофизических свойств жидкости.

4. Разработана модель расчета, учитывающая процессы коагуляции, влияние сил лобового со-

противления движущейся в паре капли. Данная модель позволяет получить параметры диспергированного потока перед взаимодействием с охлаждаемой поверхностью.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (соглашение № 21-79-10179).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Варава А.Н., Дедов А.В., Захаренков А.В., Комов А.Т., Мирнов С.В., Люблинский И.Е. Применение диспергированного газожидкостного потока для охлаждения лимитера токамака Т-15 // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. 2018. Т. 41. Вып. 1. С. 57.
2. Lyubinski I.E., Vertkov A.V., Zharkov M.Yu. et al. Complex of Lithium and Tungsten Limiters for 3 MW of ECR Plasma Heating in T-10 Tokamak. Design, First Results // Nuclear Fusion. 2017. V. 57. № 6. 066006.
3. Исаченко В.П., Кушнырев В.И. Струйное охлаждение. М.: Энергоатомиздат, 1984. 216 с.
4. Xu R., Wang G., Jiang P. Spray Cooling on Enhanced Surfaces: A Review of the Progress and Mechanisms // J. Electron. Packag. 2022. V. 144. P. 010802-1.
5. Liang G., Mudawar I. Review of Spray Cooling. Part 1: Single-Phase and Nucleate Boiling Regimes, and Critical Heat Flux // Int. J. Heat Mass Transfer. 2017. № 115. P. 1174.
6. Liang G., Mudawar I. Review of Drop Impact on Heated Walls // Int. J. Heat Mass Transfer. 2017. № 106. P. 103.
7. Lin L.C., Ponnappan R. Cooling in a Closed Loop // Int. J. Heat Mass Transfer. 2003. № 46(20). P. 3737.
8. Benthier J.D., Pelaez-Restrepo J.D., Stanley C., Rosengarten G. Heat Transfer During Multiple Droplet Impingement and Spray Cooling: Review and Prospects for Enhanced Surfaces // Int. J. Heat Mass Transfer. 2021. V. 178. 121587.
9. Bernardin J.D., Stebbins C.J., Mudavar I. Mapping of Impact and Heat Transfer Regimes of Water Drops Impinging on a Polished Surface // Int. J. Heat Mass Transfer. 1997. V. 40. № 2. P. 247.
10. Liu L., Zhang Y., Cai G., Tsai P.A. High-Speed Dynamics and Temperature Variation During Drop Impact on a Heated Surface // Int. J. Heat Mass Transfer. 2022. V. 189. 122710.
11. Cheng W.L., Zhang W.W., Chen H., Hu L. Spray Cooling and Flash Evaporation Cooling: The Current Development and Application // Renewable Sustainable Energy Rev. 2016. № 55. P. 614.
12. Sehmbe M.S., Chow L.C., Pais M.R., Mahefkey V. High Heat Flux Spray Cooling of Electronics // AIP Conf. Proc. 1995. № 324(1). P. 903.
13. Chen R.-H., Chow L.C., Naved J.E. Effects of Spray Characteristics on Critical Heat Flux in Subcooled Water Spray Cooling // Int. J. Heat Mass Transfer. 2002. № 45. P. 4033.
14. Chow L.C., Sehmbe M.S., Pais M.R. High Heat Flux Spray Cooling // Ann. Rev. Heat Transfer. 1997. № 8. P. 291.
15. Rini D.P., Chen R.-H., Chow L.C. Bubble Behavior and Nucleate Boiling Heat Transfer in Saturated FC-72 Spray Cooling // J. Heat Transfer. 2002. № 24. P. 63.
16. Rini D.P., Chen R.-H., Chow L.C. Bubble Behavior and Heat Transfer Mechanism in FC-72 Pool Boiling // Exp. Heat Transfer. 2001. № 14. P. 27.
17. Toda S. A Study of Mist Cooling, 1st Report: Investigation of Mist Cooling // Heat Transfer – Jpn. Res. 1972. V. 1. P. 39.
18. Toda S. A Study of Mist Cooling, 2nd Report: Theory of Mist Cooling and its Fundamental Experiments // Heat Transfer – Jpn. Res. 1974. V. 3. P. 1.
19. Toda S., Uchida H. Study of Liquid Film Cooling with Evaporation and Boiling // Heat Transfer – Jpn. Res. 1973. V. 2. P. 44.
20. Tilton D.E. Spray Cooling. Ph.D. Diss. Lexington: University of Kentucky, 1989.
21. Kopchikov L.A., Voronin G.I., Kolach T.A., Labuntsov D.A., Lebedev P.D. Liquid Boiling in a Thin Film // Int. J. Heat Mass Transfer. 1969. V. 12. P. 791.
22. Pais M.R., Chow L.C., Mahefkey E.T. Surface Roughness and its Effect on the Heat Transfer Mechanism in Spray Cooling // Int. J. Heat Transfer. 1992. V. 114. P. 211.
23. Estes K.A., Mudawar I. Correlation of Sauter Mean Diameter and Critical Heat Flux for Spray Cooling of Small Surfaces // Int. J. Heat Mass Transfer. 1995. V. 38. P. 2985.
24. Sehmbe M.S., Chow L.C., Hahn O.J., Pais M.R. Spray Cooling of Power Electronics at Cryogenic Temperatures // AIAA J. Thermophys. Heat Transfer. 1995. V. 9. P. 123.
25. Баталов В.Г., Степанов Р.А., Сухановский А.Н. Оптические измерения размеров капель в факеле распыла топливной форсунки // Вестн. Пермск. ун-та. 2017. Вып. 3(37). С. 40.
26. Степанов Р.А., Баталов В.Г. Определение размеров капель спрея методом вейвлет-анализа интерферометрических изображений // Измерительная техника. 1921. № 9. С. 23.
27. Kelbaliyev G., Ceylan K. Estimation of the Minimum Stable Drop Sizes, Break-up Frequencies, and Size Distributions in Turbulent Dispersions. Turkey: Inonu University, 2006.
28. Левич В.Г. Физико-химическая гидродинамика. Изд. 3-е, испр. Сер. Нефтегазовый инжиниринг. М.—Ижевск: ИКИ, 2016.

УДК 534.2:532.51

ИМПУЛЬСНОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ НА КОЛЛАПС КАВИТАЦИОННОГО ПУЗЫРЬКА

© 2023 г. А. А. Аганин*, Н. А. Хисматуллина**, Р. И. Нигматулин

*Институт механики и машиностроения – ОСП ФГБУН “Федеральный
исследовательский центр “Казанский научный центр РАН”, Казань, Россия***E-mail: aganin_aa@imm.knc.ru****E-mail: nailya_hism@mail.ru*

Поступила в редакцию 14.07.2022 г.

После доработки 09.09.2022 г.

Принята к публикации 13.10.2022 г.

Рассматривается влияние концентрического импульсного воздействия (скачкообразного повышения давления жидкости на некотором удалении от поверхности коллапсирующего пузырька) на коллапс сферического кавитационного пузырька в воде. Динамика пара в пузырьке и движение окружающей жидкости описываются уравнениями газовой динамики, которые замыкаются широкодиапазонными уравнениями состояния. Учитываются теплопроводности обеих фаз, тепломассообмен на поверхности пузырька. В методике расчета применяются подвижные сетки со сгущением к поверхности пузырька, которая выделяется явно. Используется модификация метода С.К. Годунова повышенного порядка точности. Показано, что в результате импульсного воздействия коллапс пузырька ускоряется, радиус пузырька и давление в его полости в конце коллапса увеличиваются. При импульсном воздействии коллапс пузырька сопровождается периодической фокусировкой в центре пузырька радиально сходящихся волн сжатия. В моменты фокусировки давление в малой окрестности центра пузырька очень сильно возрастает. С повышением амплитуды импульсного воздействия отмеченные особенности усиливаются.

DOI: 10.31857/S004036442303002X

ВВЕДЕНИЕ

Известно, что коллапс пузырьков в жидкости сопровождается разнообразными интересными особенностями [1]. В частности, при коллапсе пузырьков в жидкости в окрестности пузырька могут формироваться расходящиеся ударно-волновые импульсы [2]. Такие импульсы обладают большим разрушительным потенциалом, вносящим вклад в серьезные повреждения поверхностей близко расположенных твердых тел (гребных винтов, лопаток гидротурбин, клапанов, регулирующих поток жидкости, и т.д.) [3]. Разрушительный потенциал расходящихся импульсов находит и полезное применение. Он способствует дроблению камней в почках при литотрипсии [4], очистке твердых поверхностей от загрязнений [5] и т.д. С учетом этого большое внимание уделяется исследованию зависимости коллапса пузырьков от самых разнообразных факторов, в частности таких, как давление и температура жидкости [6, 7], форма пузырьков [8], амплитуда и частота периодического акустического воздействия [9], наличие близости твердых тел [10], свободных поверхностей [11], других пузырьков [12], твердых частиц [13], импульсное воздействие на пузырьки [14] и т.д.

Импульсное воздействие на пузырьки может быть создано ударными волнами, целенаправленно генерируемыми в жидкости, как, например, при литотрипсии [4, 14]. Оно может быть также вызвано ударно-волновыми импульсами, в общем случае неконтролируемо возникающими в результате коллапса соседних пузырьков [15], что характерно для совместной динамики пузырьков, когда важную роль играет их взаимодействие. В случае коллапса соседних пузырьков конфигурация падающего на пузырек ударно-волнового импульса определяется интерференцией импульсов, возникающих при коллапсе пузырьков. При этом необходимо иметь в виду, что даже в результате коллапса одиночного пузырька в жидкости могут одновременно возникать несколько импульсов. Так, при коллапсе пузырька около стенки образуются импульсы, обусловленные 1) ударом кумулятивной струи по противоположной части поверхности пузырька, 2) захлопыванием газового кармана между концом струи и противоположной частью поверхности пузырька, 3) расширением пузырька после коллапса (отскоком) [16, 17]. Поэтому конфигурация падающего на пузырек импульса может быть весьма разнообразной даже при наличии лишь одного соседнего пузырька. Очевидно, что еще более сложная структура пада-

ющего импульса возникает тогда, когда пузырек окружен большим количеством пузырьков.

Другим аспектом, от которого во многом зависит результат импульсного воздействия на пузырьки, является его состояние в начале воздействия. Испытывающий воздействие пузырек может находиться на стадии расширения или коллапса, перемещаться относительно жидкости, иметь несферическую форму и т.д. Все это может быть следствием взаимодействия рассматриваемого пузырька с другими пузырьками, в том числе и с теми, в результате коллапса которых создается падающий импульс.

К настоящему времени наиболее подробно исследован коллапс газового пузырька при падении на него плоской ударной волны. Такие исследования выполнялись как экспериментально [18], так и с применением 2D [19] и 3D [20] численного моделирования. В том случае, когда пузырек до начала воздействия находится вблизи твердой стенки, исследования проводились, главным образом, с целью выяснения механизмов разрушения камней в литотрипсии [19]. С учетом этого профиль падающей ударной волны при моделировании принимался в виде, характерном для ударно-акустических импульсов, создаваемых используемыми в литотрипсии генераторами.

В настоящей работе изучаются особенности влияния сферически-симметричного ударно-волнового импульса на коллапс кавитационного пузырька в том случае, когда концентрический ударно-волновой импульс падает на пузырек в процессе его коллапса. Задача рассматривается в одномерной сферически симметричной постановке. Как известно, сферические ударно-волновые импульсы могут возникать в сферических кластерах [15]. При определенных условиях подобные ударно-волновые импульсы распространяются от периферии кластера к его центру. В таком случае пузырек, находящийся в центре кластера, испытывает воздействие, близкое к сферическому. По мере радиального схождения амплитуда сферических импульсов возрастает, поэтому центральный пузырек подвергается в кластере наиболее сильному сжатию, что и представляет значительный интерес. Наиболее близкое к сферическому воздействие на пузырек реализуется тогда, когда пузырек находится в центре шаровой области, на поверхности которой одновременно коллапсирует большое количество симметрично расположенных (например, в вершинах додекаэдра [21]) одинаковых пузырьков. В результате коллапса в окрестности каждого из этих периферийных пузырьков на стадии их отскока (расширения после коллапса) образуются радиально расходящиеся сферические ударно-волновые импульсы. Интерференция таких импульсов в конечном счете и формирует импульс, падающий на центральный пузырек. По мере увеличения числа периферийных

пузырьков геометрия падающего импульса становится все более близкой к сферической.

Исследование проводится численно с помощью математической модели, в которой динамика пара в пузырьке и окружающей жидкости описывается уравнениями газовой динамики. Для их замыкания используются широкодиапазонные уравнения состояния [22]. Учитывается влияние теплопроводностей обеих фаз, тепломассообмен на поверхности пузырька. Алгоритм расчета основан на модификации [8, 23] метода С.К. Годунова [24], имеющей повышенный порядок точности (второй вне экстремумов решения). Применяются подвижные расчетные сетки со сгущением к поверхности пузырька, которая выделяется явно. Отметим, что в исследовании настоящей работы падающий на пузырек ударно-волновой импульс приводит к формированию довольно интенсивных волн внутри пузырька. Наличие ударно-волнового импульса в жидкости и интенсивных волн в пузырьке означает, что для настоящей работы не подходят как упрощенные модели с гомобарическим пузырьком (например, [25, 26]), так и модели, в которых жидкость считается несжимаемой (например, [26]) или слабосжимаемой (например, [25, 27]). Кроме того, сжатие пара в пузырьке является весьма сильным, так что для адекватного описания его состояния нельзя применять модели, в которых пар рассматривается как совершенный газ (например, [25, 26]).

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Изучается динамика сферического коллапсирующего кавитационного пузырька в воде при воздействии на него в ходе коллапса концентрического (сферически-симметричного) ударно-волнового импульса (рис. 1). Пузырек заполнен водяным паром. В начале коллапса (в момент времени $t = 0$) пар в пузырьке и окружающая жидкость неподвижны, температура пара и жидкости равна T_∞ , пар находится в состоянии насыщения с давлением $p_{b0} = p_s(T_\infty)$, где $p_s(T)$ — зависимость давления насыщенного пара от температуры. Начальный радиус пузырька — R_0 . Коллапс пузырька происходит под действием более высокого давления окружающей жидкости, которое на сферической поверхности $r = R_{ex}(t)$ равно $p_{ex}(t)$, где r — расстояние от центра пузырька. Радиус $R_{ex}(t)$ определяется уравнением $\dot{R}_{ex} = u_{ex}(t)$, где точка сверху означает производную по времени, $u_{ex}(t)$ — радиальная скорость частиц жидкости на поверхности $r = R_{ex}(t)$.

Импульсное воздействие моделируется скачкообразным повышением давления $p_{ex}(t)$ на поверхности $R_{ex}(t)$

$$p_{ex}(t) = \begin{cases} p_L & \text{при } 0 \leq t < t_{ex}, \\ p_L + p_a & \text{при } t \geq t_{ex}. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь p_L – давление на поверхности $R_{ex}(t)$ до прихода импульса, t_{ex} – момент прихода импульса на границу $R_{ex}(t)$, p_a – амплитуда приходящего импульса. При отсутствии импульсного воздействия $p_a = 0$ (или $p_{ex}(t) = p_L$).

Принимается, что в начале коллапса давление в жидкости (рис. 1) определяется выражением

$$p(r) = \left[p_L \left(1 - \frac{R_0}{r} \right) + \left(p_{b0} - \frac{2\sigma_0}{R_0} \right) \left(\frac{R_0}{r} - \frac{R_0}{R_{ex}(0)} \right) \right] \times \left(1 - \frac{R_0}{R_{ex}(0)} \right)^{-1}, \quad (2)$$

где σ_0 – коэффициент поверхностного натяжения при температуре T_∞ . Физически соответствующий (2) профиль давления в жидкости реализуется, например, при лазерном или искровом пробое жидкости в момент перехода образованного пробоем пузырька от его расширения к сжатию (т.е. в начале коллапса). В этот момент влияния сжимаемости жидкости несущественно. Поэтому выражение (2) легко находится в рамках модели несжимаемой жидкости, если принять, что давление жидкости на границе $R_{ex}(t)$ равно p_L , или что давление жидкости p_∞ на бесконечном удалении от пузырька определяется выражением

$$p_\infty = \left[p_L - \left(p_{b0} - \frac{2\sigma_0}{R_0} \right) \frac{R_0}{R_{ex}(0)} \right] \left(1 - \frac{R_0}{R_{ex}(0)} \right)^{-1}. \quad (3)$$

Цель исследования – выявление особенностей влияния импульса (1) и его амплитуды p_a на динамику пузырька.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Динамика пара и жидкости описывается уравнениями [1, 28]

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho r^2)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u r^2)}{\partial r} &= 0, \\ \frac{\partial(\rho u r^2)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 r^2 + p r^2)}{\partial r} &= 2rp, \\ \frac{\partial(\rho e r^2)}{\partial t} + \frac{\partial[u r^2 (pe + p)]}{\partial r} &= \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \kappa \frac{\partial T}{\partial r} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь t – время, ρ – плотность, u – радиальная скорость, p – давление, $e = U + u^2/2$ – удельная полная энергия, U – удельная внутренняя энергия, T – температура, κ – коэффициент теплопроводности. Уравнения (4) замыкаются широкодиапазонными уравнениями состояния вида $p(\rho, T)$, $U(\rho, T)$ из [22] без учета эффектов диссоциации и ионизации.

Граничные условия в центре пузырька $r = 0$, на межфазной границе $r = R$ и на поверхности $r = R_{ex}$ в жидкости имеют вид

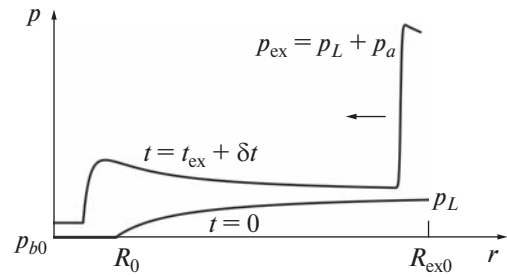


Рис. 1. Радиальное распределение давления в начале коллапса пузырька и вскоре после воздействия импульса (1) на границу $r = R_{ex}(t)$; стрелка – направление распространения импульса, $R_{ex0} = R_{ex}(0)$.

$$\begin{aligned} r = 0: \quad u &= 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \\ r = R: \quad \dot{R} &= u_L + \frac{j}{\rho_L} = u_G + \frac{j}{\rho_G}, \\ p_L &= p_G - \frac{4\mu_L u_L}{R} - \frac{2\sigma}{R}, \\ \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial r} \right)_L - \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial r} \right)_G &= jl(p_G), \quad T_L = T_G, \\ r = R_{ex}: \quad p &= p_{ex}, \quad T = T_\infty, \end{aligned}$$

где $\dot{R}$ – скорость изменения радиуса пузырька; μ_L – динамический коэффициент вязкости жидкости; σ – коэффициент поверхностного натяжения; j – скорость фазовых превращений (испарения/конденсации), отнесенная к единице поверхности. Нижние индексы L и G относятся соответственно к параметрам жидкости и пара. Скорость фазовых превращений j определяется выражениями [25]

$$\begin{aligned} j &= \frac{\alpha_{ac}}{\sqrt{2\pi R_G}} \left(\frac{p_s(T)}{\sqrt{T}} - \frac{\chi p_G}{\sqrt{T}} \right), \\ \Omega &= \frac{j\sqrt{R_G T}}{\sqrt{2p_G}}, \quad \chi = e^{-\Omega^2} - \Omega\sqrt{\pi} \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\Omega e^{-x^2} dx \right). \end{aligned}$$

Здесь α_{ac} – коэффициент аккомодации, R_G – газовая постоянная пара.

Численное решение уравнений (4) находится с применением методики [8]. Расчетной областью в жидкости является сферический слой $R \leq r < R_{ex}$, на внешней поверхности которого ставятся условия $p = p_{ex}$, $T = T_\infty$. Применяются подвижные сетки [2], в которых поверхность пузырька $r = R$ выделяется явно. В пузырьке и жидкости ячейки сетки расширяются от поверхности пузырька по геометрической прогрессии со знаменателями q_G и q_L , с числом ячеек N_G и N_L и размером примыкающих к поверхности пузырька ячеек Δr_G и Δr_L . Размер Δr_G определяется как $\Delta r_G = \alpha_G R / N_G$, где $0 < \alpha_G \leq 1$. Полагается, что $\Delta r_L = \alpha \Delta r_G$, где $0 < \alpha \leq 1$. Знамена-

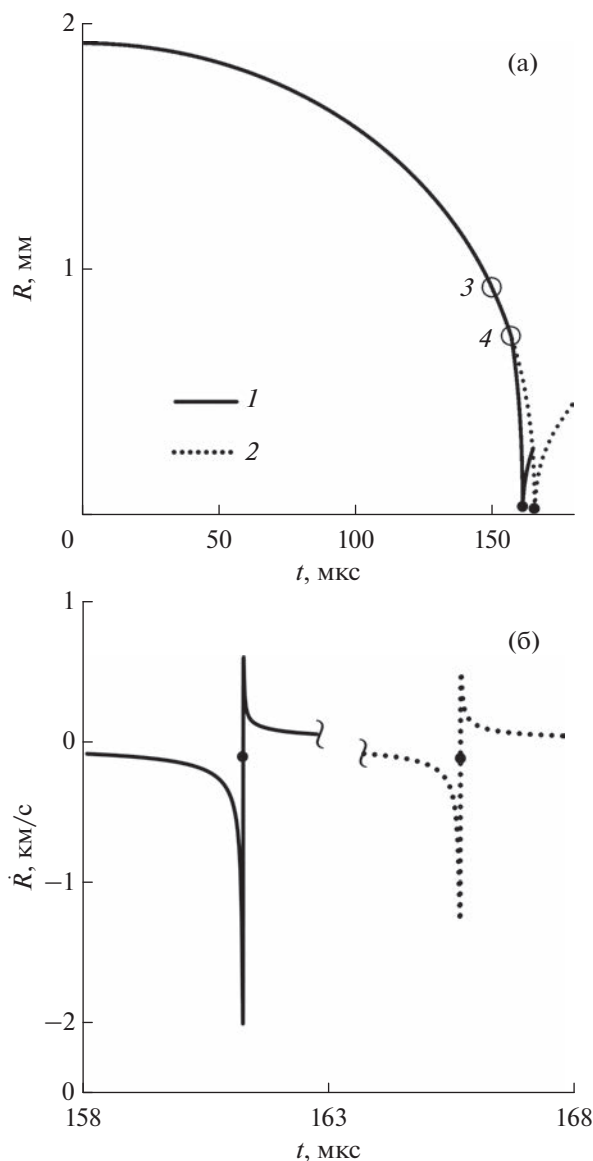


Рис. 2. Коллапс пузырька при наличии (1) и отсутствии (2) импульсного воздействия с амплитудой $p_a = 19$ бар: (а) — изменение радиуса пузырька R , (б) — радиальной скорости $\dot{R}$ при коллапсе и в начале расширения; 3, 4 — моменты начала воздействия импульса на границу $R_{ex}(t)$ (момент t_{ex}) и на поверхность пузырька, точки — момент t_c экстремального сжатия пузырька.

тель q_G определяется по известным значениям N_G , Δr_G и R . Аналогично, знаменатель q_L находится по известным значениям N_L , Δr_L и $R_{ex} - R$.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Исследования особенностей влияния импульсного воздействия на коллапс пузырька проводятся при $T_\infty = 20^\circ\text{C}$, $p_L = 1$ бар, $p_{b0} = 0.022$ бар. Начальный радиус пузырька принимается равным

$R_0 = 1.92$ мм. При таком значении R_0 влияние поверхностного натяжения мало, так что для простоты полагается $\sigma_0 = 0$. Принимается, что в начале коллапса $R_{ex}(t = 0) = 6R_0$. Отметим, что при таком значении $R_{ex}(0)$ выражение (3) с учетом $\sigma_0 = 0$ сводится к следующему: $p_\infty = (6p_L - p_{b0})/5$. Считается, что импульсное воздействие на границу $r = R_{ex}(t)$ начинается в момент $t_{ex} = 0.905t_R$, где $t_R = 0.915R_0[\rho_\infty/(p_\infty - p_s(T_\infty))]^{1/2}$ — время захлопывания пустой полости в несжимаемой жидкости (время Релея [29]), $\rho_\infty = 998.2$ кг/м³ — плотность жидкости. При принятых значениях радиус пузырька R к моменту начала воздействия падающего импульса на поверхность пузырька уменьшается примерно в два раза.

Амплитуда падающего импульса p_a на поверхности R_{ex} варьируется в диапазоне 0–19 бар. В таком случае давление p_{ex} на этой поверхности меняется, согласно (1), в диапазоне 1–20 бар.

Рис. 2 демонстрирует влияние импульсного воздействия на кинематические характеристики коллапса и последующего расширения пузырька (радиус R и скорость $\dot{R}$). Видно, что в результате воздействия импульса скорость коллапса, включая ее экстремальное значение $|\dot{R}|_{\max}$, заметно возрастает. По этой причине при наличии импульсного воздействия коллапс пузырька завершается раньше, чем в его отсутствие. При наличии импульсного воздействия радиус пузырька в конце коллапса R_c , достигаемый в момент t_c ($R_c = R(t_c)$), оказывается больше, чем при его отсутствии.

Графики на рис. 3 характеризуют влияние импульсного воздействия на массообмен через поверхность пузырька. Видно, что в ходе всего коллапса и в начале последующего расширения пузырька масса пара уменьшается (пар конденсируется). Исключение составляет лишь очень малая окрестность (в масштабе рис. 3 ее не видно)

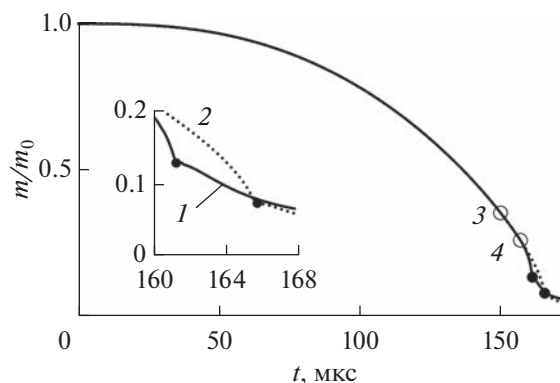


Рис. 3. Коллапс пузырька при наличии ($p_a = 19$ бар) и отсутствии ($p_a = 0$) импульсного воздействия: 1–4 то же, что и на рис. 2а, но для массы пара в пузырьке; на вставке — окрестность области в конце коллапса.

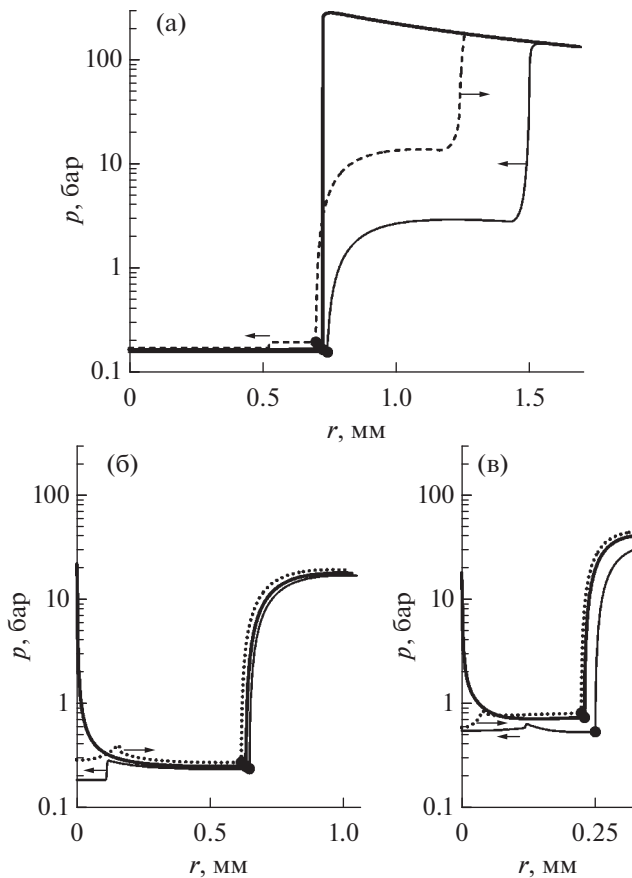


Рис. 4. Коллапс пузырька при импульсном воздействии ($p_a = 19$ бар): жирные кривые — давление в пузырьке и окружающей жидкости (а) в момент начала воздействия падающего импульса на поверхность пузырька и в моменты достижения в центре пузырька первого (б) и второго (в) локальных максимумов давления, обусловленных фокусировкой радиально сходящихся волн сжатия; тонкие сплошные и пунктирные линии — предшествующие и последующие моменты; точки — поверхность пузырька, стрелки — направление распространения волн.

моментов экстремального сжатия пузырька t_c (отмечены точками), где масса пара не меняется. Конденсация прекращается здесь из-за того, что температура на поверхности пузырька в результате его сжатия повышается до значений выше критического. Конденсация возникает вновь в начальной фазе расширения, после того как температура на поверхности пузырька в результате расширения опускается ниже критической. Воздействие импульсом интенсифицирует конденсацию (скорость конденсации возрастает). Несмотря на это, при наличии импульсного воздействия масса пара в конце коллапса оказывается больше, чем при его отсутствии, что обусловлено уменьшением продолжительности конденсации из-за возросшей скорости коллапса.

Отметим, что применение модели сплошной среды для описания динамики пара в пузырьке в

рассматриваемых вариантах коллапса является вполне обоснованным. Действительно, согласно рис. 3, масса пара в пузырьке к концу коллапса уменьшается не более, чем в 13.3 раза. Это означает, что в рассматриваемых вариантах с $R_0 = 1.92$ мм пара в пузырьке в конце коллапса оказывается не меньше, чем в начале коллапса пузырька с радиусом $R_0 = 0.8$ мм (в таком пузырьке содержится $\sim 10^{15}$ молекул), т.е. достаточно много.

Рис. 4 характеризует влияние импульсного воздействия на динамику пара в пузырьке и окружающей жидкости. Видно, что по мере распространения фронта импульса к пузырьку давление в жидкости значительно повышается (рис. 4а, сплошные линии). В результате взаимодействия падающего импульса с поверхностью пузырька в пузырьке возникает радиально сходящаяся волна сжатия, а в жидкости радиально расходящаяся волна разрежения (рис. 4а, пунктирная линия). Расходящаяся волна разрежения значительно снижает давление в жидкости в окрестности пузырька. Интенсивность сходящейся волны сжатия в пузырьке (рис. 4б, тонкая сплошная линия) возрастает по мере ее приближения к центру пузырька. В момент фокусировки этой волны (рис. 4б, жирная сплошная линия) давление в центральной области пузырька значительно повышается. В результате фокусировки сходящейся волны в центре пузырька образуется (отраженная) расходящаяся волна, которая устремляется к поверхности пузырька (рис. 4б, пунктирная линия). Интенсивность этой волны по мере расхождения уменьшается. Ее взаимодействие с поверхностью пузырька приводит к образованию новой сходящейся волны сжатия. Процесс схождения и фокусировки этой волны в центре пузырька, а также образование следующей расходящейся волны иллюстрирует рис. 4в. Образование таких волн, их схождение к центру, возникновение в центре расходящейся волн повторяются вплоть до конца коллапса.

Поскольку падающий на границу R_{ex} импульс имеет скачкообразный характер, сходящиеся волны сжатия в пузырьке по существу являются ударными. Для физически адекватного описания схождения ударных волн в малой окрестности центра пузырька необходимо учитывать различные высокотемпературные эффекты (диссоциацию, ионизацию и т.д.). В модели настоящей работы эти эффекты не учитываются, поэтому измельчение сетки приведет к неограниченному росту давления и температуры в центре пузырька, что нефизично. С учетом этого представленные в настоящей работе результаты получены на достаточно мелкой неравномерной сетке с числом ячеек $N_G = 2000$ и $N_L = 16000$. Дальнейшее измельчение сетки не проводилось, поскольку эффект от измельчения проявляется лишь в уточнении ре-

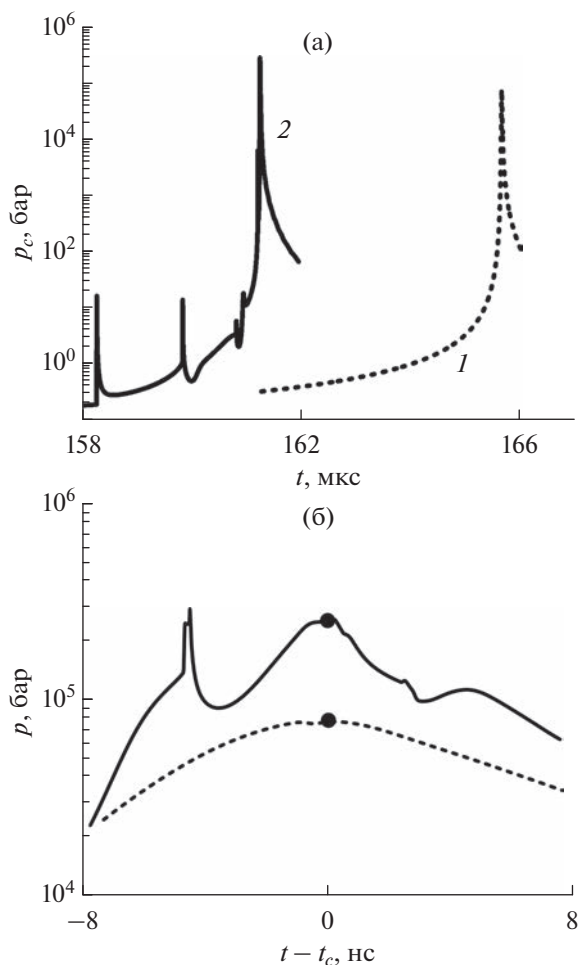


Рис. 5. Коллапс пузырька при наличии (1) и отсутствии (2) импульсного воздействия с амплитудой $p_a = 19$ бар: (а) — изменение давления в центре пузырька в конце коллапса и начале отскока, (б) — более подробно в малой окрестности момента экстремального сжатия пузырька t_c .

зультатов в очень малой окрестности центра пузырька и лишь тогда, когда там фокусируются радиально сходящиеся волны, что для основных результатов настоящей работы несущественно.

Проведено сравнение радиальных профилей давления в паре и жидкости, полученных при наличии импульсного воздействия (рис. 4), с аналогичными профилями (при одинаковых значениях радиуса пузырька), рассчитанными при отсутствии импульсного воздействия. Сравнение показало, что при импульсном воздействии давление в жидкости и его градиент в окрестности поверхности пузырька в момент достижения фронтом падающего импульса поверхности пузырька (рис. 4а) оказываются выше более чем в два раза. При отсутствии импульсного воздействия образования выраженных волн в пузырьке, подобных тем, что наблюдаются при наличии импульсного воздействия (рис. 4б, 4в), не происходит.

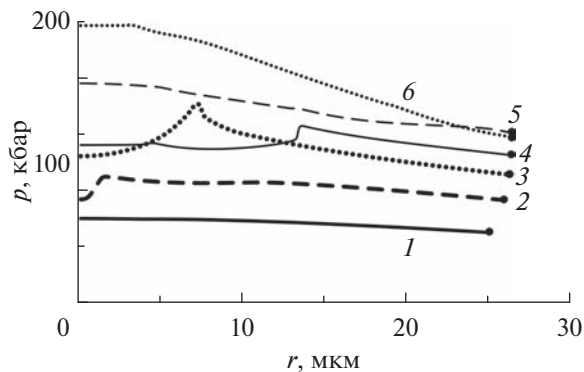


Рис. 6. Профили давления в пузырьке в момент t_c экстремального сжатия пузырька при ряде значений амплитуды импульсного воздействия: 1 — $p_a = 0$ бар, 2 — 6.5, 3 — 11.5, 4 — 14, 5 — 16.5, 6 — 19; точки — поверхность пузырька.

Рис. 5 демонстрирует влияние импульсного воздействия на изменение давления пара в центре пузырька. Видно, что это влияние является существенным. Так, если при отсутствии импульсного воздействия давление в центре пузырька монотонно возрастает при коллапсе и убывает при последующем расширении, то при наличии импульсного воздействия эти изменения происходят немонотонно. В частности, рост давления при коллапсе сопровождается довольно резкими локальными всплесками. Их появление связано с отмеченной выше фокусировкой в центре пузырька радиально сходящихся волн, что иллюстрирует рис. 4. В ходе коллапса пузырька интервалы между всплесками уменьшаются, что обусловлено как увеличением скорости распространения указанных волн, так и уменьшением размеров пузырька.

Рис. 6 характеризует влияние амплитуды импульсного воздействия на радиальные профили давления в пузырьке в момент t_c его экстремального сжатия при амплитуде импульса p_a в рассматриваемом диапазоне 0–19 бар. Видно, что с ростом p_a давление в пузырьке имеет тенденцию к повышению. При этом распределение давления оказывается весьма неоднородным. Это обусловлено наличием в пузырьке радиально сходящихся и расходящихся волн, возникших в результате импульсного воздействия. Рис. 6 также свидетельствует, что с повышением амплитуды импульса p_a радиус пузырька в момент его экстремального сжатия возрастает.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено исследование влияния сферически-симметричного импульсного воздействия (скачкообразного повышения давления на некотором удалении от поверхности коллапсирующего пузырька) на сжатие сферического кавитационного

(парового) пузырька в воде при его коллапсе. Показано, что в результате импульсного воздействия:

- 1) коллапс пузырька ускоряется и завершается раньше;
- 2) степень сжатия пузырька (характеризуемая отношением R_0/R_c) уменьшается;
- 3) коллапс пузырька сопровождается образованием в его полости радиально сходящихся и расходящихся волн;
- 4) при коллапсе пузырька давление в малой окрестности его центра периодически кратковременно очень сильно возрастает в результате фокусировки радиально сходящихся волн сжатия;
- 5) в конце коллапса пара в пузырьке остается больше;
- 6) давление в пузырьке в конце коллапса возрастает.

При повышении амплитуды импульсного воздействия данные особенности имеют тенденцию к усилению.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. В 2-х т. М.: Наука, 1987.
2. Aganin A.A., Mustafin I.N. Outgoing Shock Waves at Collapse of a Cavitation Bubble in Water // Int. J. Multiphase Flow. 2021. V. 144. P. 103792.
3. Tullis J.P. Hydraulics of Pipelines: Pumps, Valves, Cavitation, Transients. John Wiley & Sons, Inc., 1989.
4. Coleman A., Saunders J., Crum L., Dyson M. Acoustic Cavitation Generated by an Ex-tracorporeal Shock-wave Lithotripter // Ultrasound Med. Biol. 1987. V. 13. № 2. P. 69.
5. Song W.D., Hong M.H., Lukyanchuk B., Chong T.C. Laser-Induced Cavitation Bubbles for Cleaning of Solid Surfaces // J. Appl. Phys. 2004. V. 95. № 6. P. 2952.
6. Нигматулин Р.И., Аганин А.А., Ильгамов М.А., Топорков Д.Ю. Зависимость коллапса парового пузырька в горячем тетрадекане от давления жидкости // Теплофизика и аэромеханика. 2019. Т. 26. № 6. С. 931.
7. Аганин А.А., Халитова Т.Ф. Влияние температуры жидкости на сильное сжатие кавитационного пузырька // Уч. зап. Казанск. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. 2019. Т. 161. Кн. 1. С. 53.
8. Аганин А.А., Халитова Т.Ф., Хисматуллина Н.А. Численное моделирование радиально сходящихся ударных волн в полости пузырька // Матем. моделирование. 2014. Т. 26. № 4. С. 3.
9. Аганин А.А., Ильгамов М.А., Топорков Д.Ю. Возможность повышения температуры жидкости в проблеме сверхсжатия пузырька акустическим воздействием // Уч. зап. Казанск. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. 2019. Т. 161. Кн. 4. С. 485.
10. Klaseboer E., Khoo B., Hung K. Dynamics of an Oscillating Bubble near a Floating Structure // J. Fluids Struct. 2005. V. 21. P. 395.
11. Robinson P.B., Blake J.R., Kodama T., Shima A., Tomita Y. Interaction of Cavitation Bubbles with a Free Surface // J. Appl. Phys. 2001. V. 89. № 12. P. 8225.
12. Blake J.R., Robinson P.B., Shima A., Tomita Y. Interaction of Two Cavitation Bubbles with a Rigid Boundary // J. Fluid Mech. 1993. V. 255. P. 707.
13. Xu W., Zhang Y., Luo J., Arong, Zhang Q., Zhai Y. The Impact of Particles on the Collapse Characteristics of Cavitation Bubbles // Ocean Engineering. 2017. V. 131. P. 15.
14. Vogel A., Busch S., Parlitz U. Shock Wave Emission and Cavitation Bubble Generation by Picosecond and Nanosecond Optical Breakdown in Water // J. Acoust. Soc. Am. 1996. V. 100. № 1. P. 148.
15. Wang Y.-C., Brennen C.E. Shock Wave Development in the Collapse of a Cloud of Bubbles // Cavitation and Multiphase Flow. 1994. V. 194. № 15. P. 19.
16. Philipp A., Lauterborn W. Cavitation Erosion by Single Laser-produced Bubbles // J. Fluid Mech. 1998. V. 361. P. 75.
17. Ohl C.-D., Kurz T., Geisler R., Lindau O., Lauterborn W. Bubble Dynamics, Shock Waves and Sonoluminescence // Phil. Trans. R. Soc. Lond. A. 1999. V. 357. P. 269.
18. Bourne N.K., Milne A.M. The Temperature of a Shock-collapsed Cavity // Proc. R. Soc. Lond. A. 2003. V. 459. P. 1851.
19. Johnsen E., Colonius T. Shock-induced Collapse of a Gas Bubble in Shockwave Lithotripsy // J. Acoust. Soc. Am. 2008. V. 124. P. 2011.
20. Cao S., Wang G., Coutier-Delgosha O., Wang K. Shock-induced Bubble Collapse Near Solid Materials: Effect of Acoustic Impedance // J. Fluid Mech. 2021. V. 907. A 17.
21. Aganin I.A., Davletshin A.I. Dynamics of Interacting Bubbles Located in the Center and Vertices of Regular Polyhedra // J. Phys.: Conf. Ser. 2020. V. 1588. 012001.
22. Нигматулин Р.И., Болотнова Р.Х. Широкодиапазонное уравнение состояния воды и пара. Упрощенная форма // ТВТ. 2011. Т. 49. № 2. С. 310.
23. Аганин А.А., Ильгамов М.А., Халитова Т.Ф. Моделирование сильного сжатия газовой полости в жидкости // Матем. моделирование. 2008. Т. 20. № 4. С. 89.
24. 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.
25. Fujikawa S., Akamatsu T. Effects of the Non-equilibrium Condensation of Vapour on the Pressure Wave Produced by the Collapse of a Bubble in a Liquid // J. Fluid Mech. 1980. V. 97. P. 481.
26. Десятов А.В., Ильмов Д.Н., Кубышкин А.П., Черкасов С.Г. Математическое моделирование эволюции одиночного сферического парового пузырька на основе гомобарической модели // ТВТ. 2011. Т. 49. № 3. С. 436.
27. Wu C.C., Roberts P.H. A Model of Sonoluminescence // Proc. R. Soc. Lond. A. 1994. V. 445. P. 323.
28. Nigmatulin R.I., Akhatov I.Sh., Topolnikov A.S., Bolotnova R.Kh., Vakhitova N.K., Lahey Jr., Tale-yarkhan R.P. The Theory of Supercompression of Vapor Bubbles and Nano-Scale Thermonuclear Fusion // Phys. Fluids. 2005. V. 17. P. 107106.
29. Rayleigh L. On the Pressure Developed in a Liquid on a Collapse of a Spherical Cavity // Philos. Mag. 1917. V. 34. № 200. P. 94.

ТРЕХМЕРНЫЕ ВИХРЕВЫЕ ТЕЧЕНИЯ В ЗАМКНУТОМ ОБЪЕМЕ И НЕКОТОРЫЕ “АНОМАЛЬНЫЕ” ЯВЛЕНИЯ В АТМОСФЕРЕ ЗЕМЛИ

© 2023 г. О. А. Синкевич*, Г. О. Зинченко

Национальный исследовательский университет “МЭИ”, Москва, Россия

*E-mail: oleg.sinkevich@ifm.mpei.ac.ru

Поступила в редакцию 31.05.2022 г.

После доработки 26.07.2022 г.

Принята к публикации 13.10.2022 г.

Исследованы возможности образования и характеристики стационарных сосредоточенных вихрей специального типа $\nabla \times \mathbf{u} = k\mathbf{u}$ применительно к атмосфере Земли. Дано обобщение данного типа вихрей, относящихся к классу течений Громеки–Бельтрами, Н.Е. Жуковского и С.Г. Чефранова, на сферическую систему координат. Построено два типа новых решений задачи о сосредоточенном вихре с двумя и тремя компонентами вектора скорости: 1) центры декартовой и сферической системы координат совпадают; 2) сферический вихрь находится над твердой поверхностью. Найденны распределения векторных полей скоростей и давления в сосредоточенном вихре. Данное решение расширяет ранее изученную авторами задачу о сосредоточенном вихре в цилиндрической системе координат. Проведен анализ влияния толщины сферического слоя на изменение характеристик течения. Обсуждается использование полученных характеристик сосредоточенных вихрей для интерпретации ряда наблюдаемых “аномальных” явлений в атмосфере, типа НЛО, шаровых молний, для объяснения которых часто привлекаются механизмы, лежащие за пределами современной физики.

DOI: 10.31857/S0040364423030213

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время накопилось большое количество наблюдений о различного рода аномальных явлениях в атмосфере Земли: шаровые молнии [1, 2], “огненные боксеры”, НЛО [3], строгие геометрические орнаменты на полях и т.п. Проблема НЛО обсуждается на сотне сайтов и содержит более миллиона публикаций, где для объяснения реально наблюдаемых или ошибочно интерпретируемых явлений авторы этих публикаций пытаются привлечь фантастические гипотезы, включая участие инопланетян. Возможно, что данные публикации полезны для публицистических и экономических целей. Однако современное развитие науки и, в частности, методов описания турбулентных течений позволяет, хотя бы качественно, объяснить механизмы возникновения наблюдаемых явлений. Анализ «аномальных», с точки зрения неподготовленного исследователя, явлений требует одновременного учета многих физических факторов: гидродинамики турбулентных течений, атмосферного электричества, влияния космических излучений и возмущений в магнитосфере Земли. Только учет всех факторов даст понять и предсказать возможность появления аномальных явлений, не привлекая потусторонние силы. В этой связи интерес представляют частные случаи вихревых течений, обладающих максимальной спиральностью, в которых направ-

ления векторов завихренности и скорости коллинеарны $\nabla \times \mathbf{u} = k\mathbf{u}$ и которые относятся к классу течений Н.Е. Жуковского [4], Громеки–Бельтрами [5, 6], С.Г. Чефранова [7]. Как будет показано ниже, эти течения допускают локализованные в пространстве вихревые течения, дополняющие торнадо и пылевые вихри.

Существуют два частных случая, когда нелинейная система стационарных уравнений турбулентного течения несжимаемой среды

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0,$$

$$\nabla \left(\frac{p}{\rho_0} + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right) - \mathbf{u} \times \boldsymbol{\Omega} - \nu \Delta \mathbf{u} = 0$$

при $\boldsymbol{\Omega} = \nabla \times \mathbf{u} \neq 0$ распадается на две подсистемы:

$$1) \nu \neq 0, \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \mathbf{u} \times \boldsymbol{\Omega} + \nu \Delta \mathbf{u} = 0, \nabla \left(\frac{p}{\rho_0} + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right) = 0.$$

$$2) \nu = 0, \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \mathbf{u} \times \boldsymbol{\Omega} = 0, \nabla \left(\frac{p}{\rho_0} + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right) = 0.$$

Во втором случае существует нетривиальное решение, обладающее максимальной спиральностью $S = \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{u} = k\mathbf{u}^2$, в котором скорость и давление находятся из уравнений

$$\boldsymbol{\Omega} = k\mathbf{u}, \quad \nabla \left(\frac{p}{\rho_0} + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right) = 0.$$

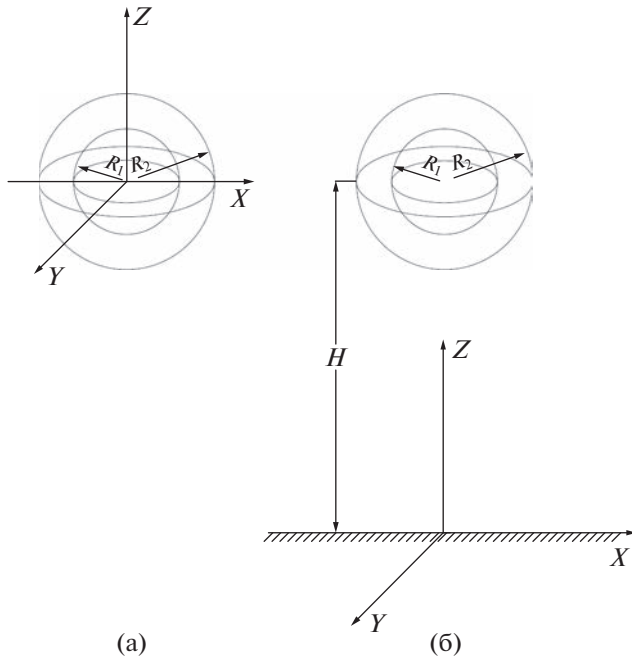


Рис. 1. Сферический слой, в котором центры декартовой и сферической систем координат совпадают (а), (б) — сфера вынесена на расстояние H от центра декартовой системы координат.

Здесь $\mathbf{u}$ — вектор скорости среды; ν — коэффициент турбулентной вязкости; ρ_0 — постоянная плотность среды; k — неизвестный параметр, который находится в процессе решения задачи.

Второй случай допускает аналитическое решение. Ранее в [8] были исследованы вихревые течения данного класса с двумя и тремя компонентами скорости в цилиндрической системе координат. В данной работе построено решение для течения, сосредоточенного в сферическом слое, находящемся на определенной высоте H от поверхности (рис. 1), с двумя и тремя компонентами вектора скорости.

Покажем возможность нахождения поля скоростей аналитически в сферическом слое

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

когда выполняется условие

$$\Omega \equiv \nabla \times \mathbf{u} = k\mathbf{u}, \quad k = \text{const.}$$

Зная поле скоростей, можно найти распределения давлений из уравнения

$$\nabla \left(\frac{p}{\rho_0} + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right) = 0. \quad (2)$$

Рассмотрим более детально методы построения решения задачи (1), (2) в сферической области, когда вихревое течение происходит в сфере, поднятой на высоту H от поверхности земли или

воды (рис. 1), используя следующие связи между декартовыми и сферическими координатами:

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi, \\ y = r \sin \theta \sin \varphi, \\ z = H + r \cos \theta. \end{cases}$$

Учитывая, что система дифференциальных уравнений и, следовательно, ее решение инвариантны относительно смещения координат на постоянную величину, приведем перевод полученного ранее решения в новые результаты.

С учетом условия коллинеарности векторов скорости и завихренности уравнение сохранения импульса Эйлера распадается на систему уравнений для скорости (1) и на уравнение (2) для нахождения распределения давления.

Рассмотрим более детально особенности наблюдаемых вихревых течений.

СТАЦИОНАРНОЕ ТРЕХМЕРНОЕ ТЕЧЕНИЕ ЖИДКОСТИ В СФЕРИЧЕСКОМ СЛОЕ ПРИ НАЛИЧИИ ТРЕХ КОМПОНЕНТ СКОРОСТИ

Когда присутствуют все три проекции скорости, зависящие от трех координат $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = (u_r(\mathbf{r}), u_\theta(\mathbf{r}), u_\varphi(\mathbf{r}))$, $\mathbf{r} = (r, \theta, \varphi)$, то систему уравнений (1) и уравнение неразрывности можно записать следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{1}{r \sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} (u_\varphi \sin \theta) - \frac{\partial u_\theta}{\partial \varphi} \right) = k u_r, \\ \frac{1}{r} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} - \frac{\partial}{\partial r} (r u_\varphi) \right) = k u_\theta, \\ \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} (r u_\theta) - \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right) = k u_\varphi, \\ \frac{1}{r^2} \frac{\partial (r^2 u_r)}{\partial r} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (u_\theta \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} = 0. \end{cases} \quad (3)$$

Считая жидкость несжимаемой $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, сведем уравнение (1) к следующей системе:

$$\begin{cases} \Delta u_r - \frac{2u_r}{r^2} - \frac{2}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial u_\theta \sin \theta}{\partial \theta} - \frac{2}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} = -k^2 u_r, \\ \Delta u_\varphi - \frac{u_\varphi}{r^2 \sin^2 \theta} + \frac{2}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} + \frac{2 \cos \theta}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial u_\theta}{\partial \varphi} = -k^2 u_\varphi, \\ \Delta u_\theta - \frac{u_\theta}{r^2 \sin^2 \theta} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{2 \cos \theta}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} = -k^2 u_\theta, \end{cases} \quad (4)$$

где

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} -$$

оператор Лапласа.

Используя уравнение неразрывности, можно преобразовать первое уравнение системы (4) к виду

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right) + \\ + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 u_r}{\partial \varphi^2} = -k^2 u_r; \quad u_r(R_1, \varphi, \theta) = 0; \quad (5) \\ u_r(R_2, \varphi, \theta) = 0, \quad R_2 > R_1; \\ u_r(r, \varphi, \theta) = u_r(r, \varphi + 2\pi, \theta). \end{aligned}$$

Используя метод разделения переменных

$$u_r = R(r)T(\theta)F(\varphi),$$

получаем систему из трех уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial R}{\partial r} \right) + (r^2 k^2 - \varepsilon^2) R = 0, \\ \frac{\partial^2 F}{\partial \varphi^2} + F \xi^2 = 0, \\ \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + (\varepsilon^2 \sin^2 \theta - \xi^2) T = 0, \end{cases} \quad (6)$$

где k, ε, ξ — неизвестные константы, которые будут найдены в ходе решения.

Замена переменной $R = R^*/r$ в первом уравнении системы (6) приводит к дифференциальному уравнению Бесселя порядка ε , решением которого является линейная комбинация функций Бесселя первого $J_\varepsilon(k_n r)$ и второго рода $Y_\varepsilon(k_n r)$. Из граничных условий (5) находим параметр k (здесь рассмотрены два предельных случая: $\rho = R_1/R_2 \ll 1$; $\rho \approx 1$).

Решением первого уравнения системы (6) является следующая функция:

$$\begin{aligned} R_n = C_n Y_\varepsilon(k_n R_1) \frac{1}{r} \left(\frac{J_\varepsilon(k_n r)}{J_\varepsilon(k_n R_1)} - \frac{Y_\varepsilon(k_n r)}{Y_\varepsilon(k_n R_1)} \right), \quad (7) \\ \rho \ll 1, k_{n,\varepsilon} = \mu_n^{(\varepsilon)}/R_2; \quad \rho \approx 1, k_{n,\pi} = \frac{n\pi}{R_2 - R_1}. \end{aligned}$$

Решение (7) при $\rho \ll 1$ соответствует сфере большого радиуса, когда градиенты скоростей по радиальному направлению малы. Решение (7) при $\rho \approx 1$ соответствует сфере малого радиуса.

Полное решение задачи содержит бесконечный ряд по всем R_n . При $n \neq 1$ возможны перепады скоростей на границах сферы, вплоть до возможной смены направления движения в пределах вихря. В дальнейшем для наглядной физической интерпретации решения принимается $n = 1$.

Решение второго уравнения системы (6) имеет вид суммы тригонометрических функций. Также

используя граничные условия и оставляя только нечетную составляющую, получаем

$$F_l = B_l \sin(\xi_l \varphi), \quad \xi_l = l, \quad l = 1, 2, \dots, \infty \quad (8)$$

и оставим только первый член данного решения ($l = 1$).

Последнее уравнение системы (6) необходимо преобразовать перед решением:

$$\sin^2 \theta \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \sin \theta \cos \theta \frac{\partial T}{\partial \theta} + (\varepsilon^2 \sin^2 \theta - \xi^2) T = 0. \quad (9)$$

Проводя замену переменных

$$\varepsilon^2 = \zeta(\zeta + 1), \quad x = \cos \theta, \quad T = y \sin^\xi \theta,$$

можно получить следующее дифференциальное уравнение:

$$(x^2 - 1) \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + 2(\xi + 1)x \frac{\partial y}{\partial x} + (\xi - \zeta)(\xi + \zeta + 1)y = 0.$$

Решение полученного уравнения можно представить в виде производной порядка ξ общего решения уравнения Лежандра

$$(1 - x^2) \frac{\partial^2 y_\zeta}{\partial x^2} - 2x \frac{\partial y_\zeta}{\partial x} + \zeta(\zeta + 1)y_\zeta = 0$$

по независимой переменной x

$$y = \frac{d^\xi y_\zeta}{dx^\xi} = \frac{dy_\zeta}{dx},$$

где y_ζ — общее решение уравнения Лежандра при любом значении параметра ζ .

Решение данного уравнения хорошо известно. Используя функции Лежандра при следующих параметрах:

$$\begin{aligned} \zeta_m = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4\varepsilon_m^2}}{2} \approx \varepsilon_m - \frac{1}{2} = m, \\ \varepsilon_m = \frac{2m + 1}{2}, \quad m = 1, 2, \dots, \infty, \end{aligned}$$

можно получить достаточно простую функцию для азимутальной зависимости при $\zeta = 1, \varepsilon = \frac{3}{2}$:

$$T = A \sin \theta. \quad (10)$$

Следует помнить, что другие наборы параметров ζ_m, ε_m приводят к другим типам течения.

Совмещая полученные выражения (7), (8), (10), получаем окончательное выражение для радиальной проекции скорости:

$$\begin{aligned} u_r(r, \theta, \varphi) = C Y_{1.5}(k_1 R_1) \frac{\sin \varphi \sin \theta}{r} \times \\ \times \left(\frac{J_{1.5}(k_1 r)}{J_{1.5}(k_1 R_1)} - \frac{Y_{1.5}(k_1 r)}{Y_{1.5}(k_1 R_1)} \right). \end{aligned}$$

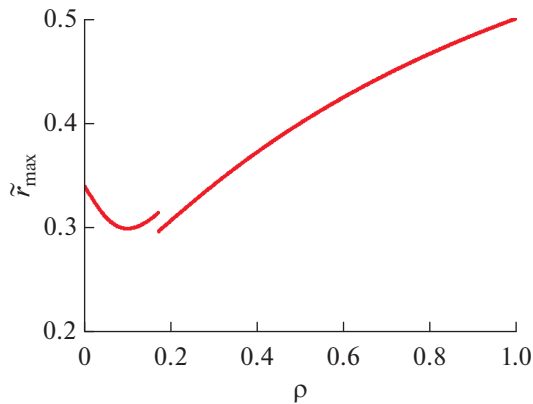


Рис. 2. Расположение точек максимума в зависимости от параметра ρ .

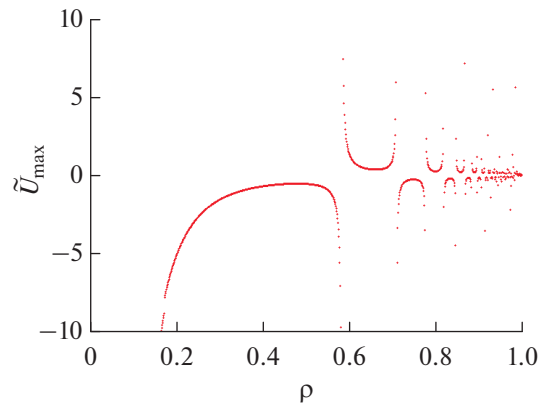


Рис. 3. Изменение максимального значения безразмерной скорости в зависимости от параметра ρ .

Уточненное значение параметра k_n при $\varepsilon = 3/2$ определяется следующим образом [9]:

$$k_n = \frac{\pi n}{3(R_2 - R_1)} \times \left[q_n^{1/3} (1 + \sqrt{1 - q_n^{-2}})^{1/3} + q_n^{-1/3} (1 + \sqrt{1 - q_n^{-2}})^{-1/3} + 1 \right], \quad (11)$$

где

$$q_n = 1 + \frac{27}{2} \frac{1}{\rho} \left(\frac{\rho - 1}{\pi n} \right)^2, \quad \rho = \frac{R_1}{R_2}.$$

Стоит отметить, что минимальное значение $\rho_{\min}$ при $n = 1$, при котором нужно переходить от определения параметра $k_{n,\varepsilon}$ по (7) к k_n по (11), является

$$\rho_{\min, n=1} = 0.172.$$

При увеличении параметра n область выполнения связи (11) растет: $\rho_{\min, n} \sim (n + c)^{-1}$.

Из уравнения неразрывности (3) определяем другие компоненты скорости. Введем дополнительную функцию Ψ так, чтобы уравнение неразрывности всегда тождественно выполнялось:

$$u_r = \frac{2}{\sin \theta} \frac{\partial^2 \Psi \sin \theta}{\partial \phi \partial \theta},$$

$$u_\phi = -\frac{1}{r} \frac{\partial^2 r^2 \Psi \sin \theta}{\partial r \partial \theta},$$

$$u_\theta = -\frac{1}{r} \frac{\partial^2 r^2 \Psi}{\partial r \partial \phi}.$$

Проекции вектора скорости имеют вид

$$u_r(r, \theta, \phi) = C \sin \phi \sin \theta \frac{Z_{1.5}(k_1 r)}{r k_1},$$

$$u_\phi = \frac{C}{2} \sin^2 \theta \cos \phi \left(Z_{0.5}(k_1 r) - \frac{Z_{1.5}(k_1 r)}{2 r k_1} \right), \quad (12)$$

$$u_\theta = -\frac{C}{4} \sin \phi \left(\frac{\theta}{\sin \theta} - \cos \theta \right) \left(Z_{0.5}(k_1 r) - \frac{Z_{1.5}(k_1 r)}{2 r k_1} \right),$$

где функция $Z_\varepsilon(k_1 r)$ определяется следующим образом:

$$Z_\varepsilon(k_1 r) = \frac{J_\varepsilon(k_1 r)}{J_{1.5}(k_1 R_1)} - \frac{Y_\varepsilon(k_1 r)}{Y_{1.5}(k_1 R_1)}.$$

Анализируя радиальную проекцию скорости, можно прийти к выводу, что направление движения, расположение точек максимума и максимальные значения меняются в зависимости от толщины слоя (рис. 2, 3).

На рис. 4 приведено векторное поле скорости в сечении $y = 0$ (рис. 1), или при угле $\phi = \pi/2, 3\pi/2$, при заданном отношении внутреннего и внешнего радиусов $\rho = 0.5$. При данном значении параметра видно, что ближе к внутренней границе течение происходит по часовой стрелке, а у внешней границы — против. Также в правой части сферы ($\phi = \pi/2$) течение направлено в центр сферы. При изменении параметра ρ течение может поменять свое направление на противоположное. Однако если жидкость движется вовнутрь (при $\phi = \pi/2$), то во внутренней части сферы скорость всегда направлена по часовой стрелке, а снаружи — против. И наоборот, если жидкость истекает изнутри, то внутри скорость направлена против часовой стрелки, а снаружи — по часовой. Скорость

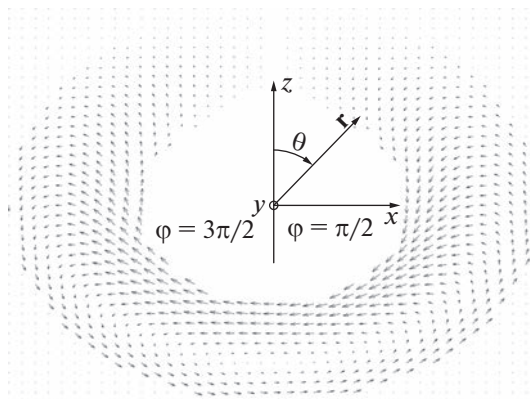


Рис. 4. Векторное поле скорости $\mathbf{u} = u_r \mathbf{e}_r + u_\theta \mathbf{e}_\theta$ ($\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta$ — единичные векторы на соответствующие оси) при $\rho = 0.5$.

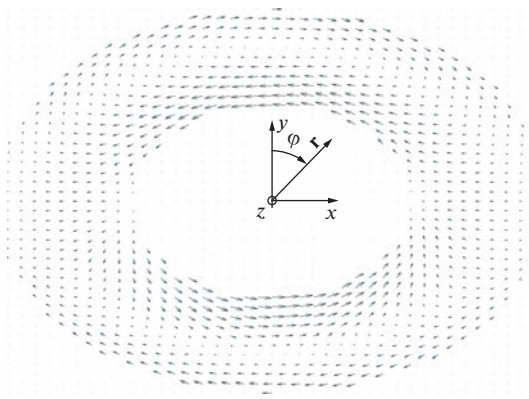


Рис. 5. Векторное поле скорости $\mathbf{u} = u_r \mathbf{e}_r + u_\phi \mathbf{e}_\phi$ при $\rho = 0.5, \theta = \pi/2$.

достигает своего максимума в нижней части сферы ($\theta = \pi$), а ближе к верхней жидкость сильно тормозится.

На рис. 5 приведено векторное поле скорости в сечении $z = 0$ (рис. 1), или при угле $\theta = \pi/2$ и заданном $\rho = 0.5$. Как и на рис. 4, здесь видны многочисленные вихревые структуры, которые описываются схожим образом.

Поле давления. Зная все проекции скорости, можно по (2) определить давление

$$p(\mathbf{r}) = C_p - \rho_0 \frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r})}{2}. \quad (13)$$

Пусть константа C_p определяется заданным внешним давлением p_0 . Также зададим осредненное значение давления на внешней границе сферы:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} p(R_2, \varphi, \theta) \sin \theta d\theta d\varphi = \\ & = p_0 - \frac{\rho_0}{2} \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} (u_\varphi^2 + u_\theta^2) \sin \theta d\theta d\varphi = p_{\text{гр}}. \end{aligned}$$

Из данного выражения можно определить константу для скорости (12). На внешней границе сферического вихря распределение скоростей определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} u_r(r = R_2) &= 0, \\ u_\varphi(r = R_2) &= \frac{C}{2} Z_{0.5}(k_1 R_2) \sin^2 \theta \cos \varphi, \\ u_\theta(r = R_2) &= -\frac{C}{4} Z_{0.5}(k_1 R_2) \sin \varphi \left(\frac{\theta}{\sin \theta} - \cos \theta \right). \end{aligned}$$

Сумма квадратов скоростей — четная функция по θ . После умножения на $\sin \theta$ получается нечет-

ная функция. Следовательно, интеграл по всей сфере равен нулю:

$$\int_{-\pi/2}^{\pi/2} (u_\varphi^2 + u_\theta^2) \sin \theta d\theta = 0.$$

Поэтому определим константу для верхней и нижней полусферы:

$$\begin{aligned} 2 \frac{p_0 - p_{\text{гр,в}}}{\rho_0} &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} (u_\varphi^2 + u_\theta^2) \sin \theta d\theta d\varphi = \\ &= \frac{C^2}{32} Z_{0.5}^2(k_1 R_2) \left[(2Ca - 1)\pi + \frac{134 - 105\zeta_3}{30} \right]. \end{aligned}$$

Откуда для верхней полусферы получаем

$$\begin{aligned} C &= 8 \frac{\left[(2Ca - 1)\pi + \frac{134 - 105\zeta_3}{30} \right]^{-1/2}}{Z_{0.5}(k_1 R_2)} \times \\ &\times \sqrt{\frac{p_0 - p_{\text{гр,в}}}{\rho_0}}, \quad p_0 > p_{\text{гр,в}}. \end{aligned}$$

Для нижней полусферы среднее давление на границе больше внешнего:

$$\begin{aligned} C &= 8 \frac{\left[(2Ca - 1)\pi + \frac{134 - 105\zeta_3}{30} \right]^{-1/2}}{Z_{0.5}(k_1 R_2)} \times \\ &\times \sqrt{\frac{p_{\text{гр,н}} - p_0}{\rho_0}}, \quad p_{\text{гр,н}} > p_0. \end{aligned}$$

Здесь Ca — число Каталана, ζ_3 — дзета-функция Римана.

Учитывая, что в пределах сферы данная константа не может принимать различные значения, получаем связь внешнего давления и осредненного по поверхности сферы:

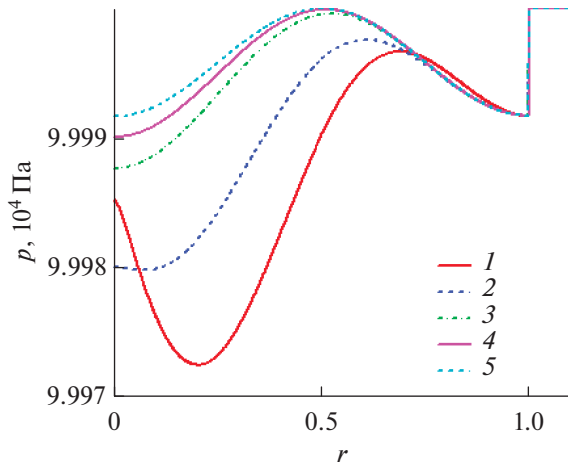


Рис. 6. Распределение давления по радиусу при различных значениях параметра: 1 – $\rho = 0.100$, 2 – 0.294 , 3 – 0.661 , 4 – 0.833 , 5 – 0.992 .

$$p_0 = \frac{p_{\text{гр,в}} + p_{\text{гр,н}}}{2}.$$

Зная константы, можно построить распределение давления по радиусу (рис. 6), а также максимальный перепад давления и разность давления между левой и правой границами сферы (рис. 7).

Переписывая (13) в безразмерном виде с использованием $\Delta \tilde{p}(\mathbf{r}) = \frac{\Delta p(\mathbf{r})}{\rho_c u_{\text{хар}}^2}$, получаем следующую зависимость:

$$\Delta \tilde{p}(\mathbf{r}) = \frac{\tilde{u}^2(\mathbf{r})}{2}. \quad (14)$$

На рис. 8а построено поле давления для сечения $\varphi = \pi/2, 3\pi/2$. Полученное распределение давления хорошо коррелирует с рис. 4. Наибольшие перепады давления находятся ближе к центру сферы при угле $\theta \approx 3\pi/4$.

На рис. 8б построено поле давления для горизонтального сечения $z = 0$ ($\theta = \pi/2$).

СТАЦИОНАРНОЕ ТРЕХМЕРНОЕ ТЕЧЕНИЕ ЖИДКОСТИ В СФЕРИЧЕСКОМ СЛОЕ ПРИ НАЛИЧИИ ДВУХ КОМПОНЕНТ СКОРОСТИ

Существуют и более простые типы течений в сферическом слое, когда присутствуют только угловые проекции скорости, а радиальная компонента отсутствует. Возможность существования такого течения показана на рис. 9.

Для изучения данного типа течения нужно вернуться к системе (3) и упростить ее:

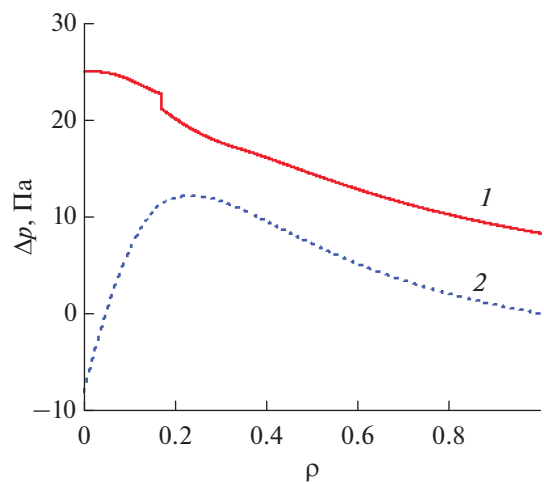


Рис. 7. Максимальный перепад давления (1) и разность между внешним и внутренним давлением (2).

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial \theta}(u_\varphi \sin \theta) = \frac{\partial u_\theta}{\partial \varphi}, \\ -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(ru_\varphi) = ku_\theta, \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(ru_\theta) = ku_\varphi, \\ \frac{\partial}{\partial \theta}(u_\theta \sin \theta) + \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} = 0. \end{cases} \quad (15)$$

Подставляя азимутальную скорость из третьего уравнения во второе, можно получить следующее дифференциальное уравнение:

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}(ru_\theta) = -rk^2 u_\theta.$$

Найденное решение можно подставить обратно и определить азимутальную проекцию скорости. Таким образом, радиальная зависимость для двух проекций скорости выглядит так:

$$\begin{aligned} u_\theta &= \frac{1}{r}(A(\varphi, \theta) \sin kr + B(\varphi, \theta) \cos kr), \\ u_\varphi &= \frac{1}{r}(A(\varphi, \theta) \cos kr - B(\varphi, \theta) \sin kr). \end{aligned} \quad (16)$$

Подставляя данные выражения в оставшиеся уравнения системы (15), можно получить уравнения для переменных A, B :

$$\begin{cases} \frac{\partial A \sin \theta}{\partial \theta} = \frac{\partial B}{\partial \varphi}, \\ \frac{\partial B \sin \theta}{\partial \theta} + \frac{\partial A}{\partial \varphi} = 0. \end{cases}$$

Сделаем следующую замену так, чтобы первое уравнение всегда тождественно выполнялось:

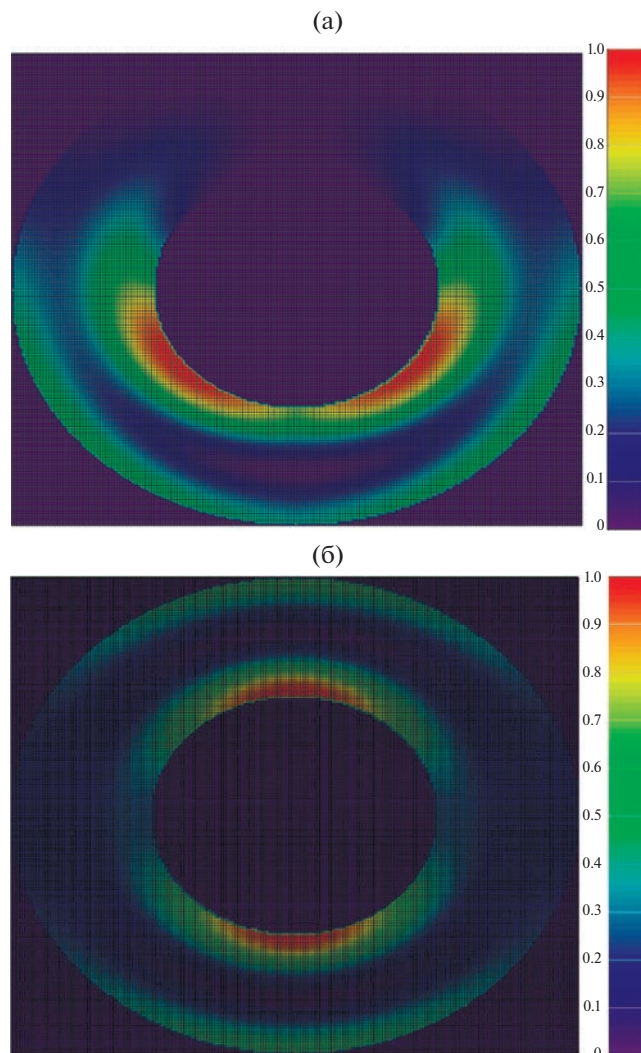


Рис. 8. Поля давления при $\rho = 0.5$, $\varphi = \pi/2$ (а), (б) – $\theta = 0.5$, $\varphi = \pi/2$.

$$B = \frac{\partial \Psi \sin \theta}{\partial \theta}; \quad A = \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi}. \quad (17)$$

Следовательно, получаем уравнение для функции Ψ :

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi \sin \theta}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} = 0,$$

в котором проведем разделение переменных:

$$\Psi = T(\theta) F(\varphi).$$

В результате получаем следующие два уравнения:

$$\begin{cases} \sin^2 \theta \frac{\partial^2 T_1}{\partial \theta^2} + \sin \theta \cos \theta \frac{\partial T_1}{\partial \theta} - n^2 T_1 = 0, & T_1 = T \sin \theta, \\ \frac{\partial^2 F}{\partial \varphi^2} = -Fn^2. \end{cases} \quad (18)$$

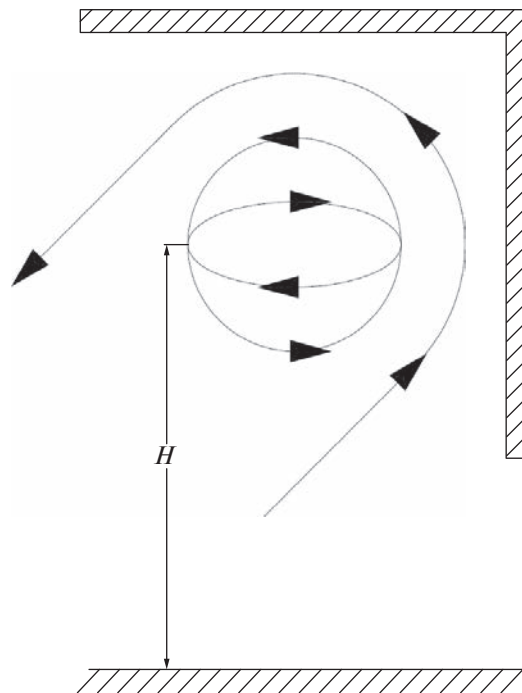


Рис. 9. Пример набегающего потока жидкости на угловую стенку с образованием сферического вихря.

Решением второго уравнения является сумма тригонометрических функций, но, оставляя только нечетную составляющую, получаем

$$F_n = C_{1n} \sin(n\varphi), \quad n = 1, 2, \dots, \infty. \quad (19)$$

Как и ранее, оставим только первый член данного решения ($n = 1$).

Первое уравнение системы является аналогом уравнения (9) при $\varepsilon = 0$. Проводя сходные замены

$$x = \cos \theta; \quad T_1 = y \sin^n \theta, \quad (20)$$

можно получить следующее уравнение:

$$(x^2 - 1) \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + 2(n+1)x \frac{\partial y}{\partial x} + n(n+1)y = 0. \quad (21)$$

Его решением является производная порядка n от общего решения уравнения Лежандра:

$$y = \frac{d^n y_0}{dx^n}, \quad y_0 = C_2 + C_3 \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+x}{1-x} \right).$$

Решение уравнения (21) можно найти, используя связи

$$y = \frac{dy_0}{dx} = C_3 \frac{1}{1-x^2}.$$

Проводя обратные замены (18), (20), получим полярную зависимость

$$T = \frac{C_3}{\sin^2 \theta},$$

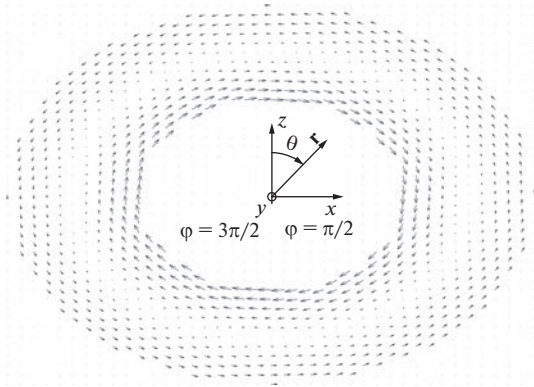


Рис. 10. Векторное поле скорости $\mathbf{u} = u_\theta \mathbf{e}_\theta$ при $\rho = 0.5$.

с помощью которой и с учетом связи (19) можно определить Ψ :

$$\Psi = \frac{C}{\sin^2 \theta} \sin \varphi.$$

Далее можно вернуться к (17) и найти распределение угловых проекций скорости (16):

$$B = -C \frac{\cos \theta}{\sin^2 \theta} \sin \varphi, \quad A = \frac{C}{\sin^2 \theta} \cos \varphi;$$

$$u_\theta = C \frac{1}{\sin^2 \theta} \cos \varphi \frac{\sin kr}{r} - C \frac{\cos \theta}{\sin^2 \theta} \sin \varphi \frac{\cos kr}{r}; \quad (22)$$

$$u_\varphi = C \frac{1}{\sin^2 \theta} \cos \varphi \frac{\cos kr}{r} + C \frac{\cos \theta}{\sin^2 \theta} \sin \varphi \frac{\sin kr}{r}.$$

Необходимо определить только параметр k , который еще неизвестен в (22). Для этого можно воспользоваться различными граничными условиями:

$$\begin{cases} u_\theta(r = R_1) = u_\theta(r = R_2) = 0, \\ \left. \frac{\partial u_\theta}{\partial r} \right|_{r=R_2} = 0, \quad u_\theta(r = R_1) = 0. \end{cases} \quad (23)$$

Из первых граничных условий получается следующее условие:

$$A(\varphi, \theta) \frac{\sin kR_1}{R_1} + B(\varphi, \theta) \frac{\cos kR_1}{R_1} = 0,$$

$$A(\varphi, \theta) \frac{\sin kR_2}{R_2} + B(\varphi, \theta) \frac{\cos kR_2}{R_2} = 0.$$

Существует нетривиальное решение, когда определитель матрицы равен нулю:

$$\sin kR_1 \cos kR_2 - \cos kR_1 \sin kR_2 = 0,$$

или

$$\sin(kR_2 - kR_1) = 0.$$

Отсюда параметр получается следующим:

$$k_n = \frac{\pi n}{R_2 - R_1}. \quad (24)$$

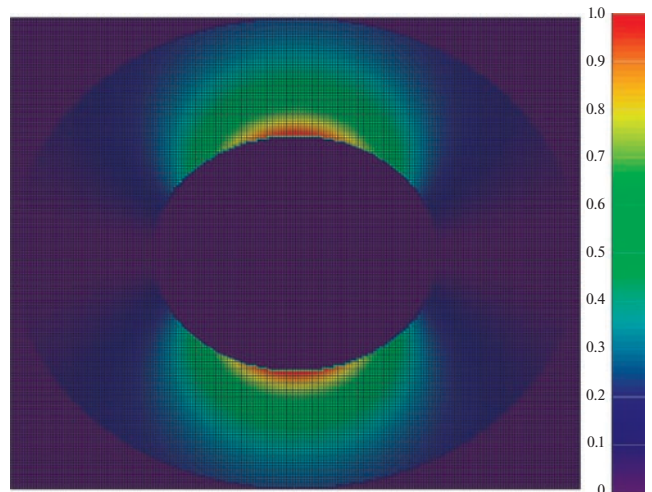


Рис. 11. Поле давления при $\rho = 0.5$, $\varphi = \pi/2$.

Данное значение параметра k соответствует очень тонкому сферическому слою (7) при наличии радиальной проекции скорости:

$$R_2 - R_1 \rightarrow 0 \Rightarrow u_r \rightarrow 0 \Rightarrow k_n \rightarrow \frac{\pi n}{R_2 - R_1}.$$

При другом граничном условии из (23) параметр k определяется следующим трансцендентным уравнением:

$$kR_2 = \tan(kR_2 - kR_1).$$

Векторное поле скорости и поле давления. Используя определения параметра (24), построим векторное поле скорости в заданном сечении. Рис. 4 и 10 схожи, за исключением отсутствия радиальной проекции скорости. Также если на рис. 4 в верхней части сферы течение жидкости практически отсутствует, то на рис. 8б и сверху, и снизу модуль скорости достигает своего максимума.

На рис. 11 давление определялось аналогично (14):

$$\Delta \tilde{p}(\mathbf{r}) = (\tilde{u}_\theta^2 + \tilde{u}_\varphi^2)/2.$$

Максимальные перепады давления находятся в верхней и нижней частях сферы ближе к центру, в правой и левой частях сферы происходит торможение, в отличие от случая на рис. 6.

ВОЗМОЖНОСТИ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ВИХРЕВЫХ ТЕЧЕНИЙ СПЕЦИАЛЬНОГО ТИПА $\nabla \times \mathbf{u} = k\mathbf{u}$ И ИХ РОЛЬ В ОБРАЗОВАНИИ РАЗЛИЧНОГО РОДА ЯВЛЕНИЙ В АТМОСФЕРЕ ЗЕМЛИ

Среди всех возможных нестационарных турбулентных течений несжимаемой среды существуют режимы, при которых коэффициент турбу-

лентной вязкости $\nu(r, t, u)$ не только зависит от осредненных характеристик течения и координат, но сама эта зависимость претерпевает бифуркации, т.е. изменяется в процессе течения:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0, \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \nabla \times \mathbf{u} \times \mathbf{u} &= -\nabla \left(\frac{p}{\rho_0} + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right) + \nabla \nu(r, t, \mathbf{u}) \nabla \mathbf{u}, \quad (25) \\ \frac{\partial \nu}{\partial t} + L(\nabla, r, t, \mathbf{u}, \nu, B) &= 0. \end{aligned}$$

Здесь $L(\nabla, r, \mathbf{u}, \nu)$ — оператор, описывающий в рамках соответствующей модели динамику изменения коэффициента турбулентной вязкости; $B(t, \mathbf{u})$ — бифуркационный параметр.

Можно предположить, что внутри рассматриваемых течений возникает специфическая генерация турбулентности, в результате которой вихревое течение перестраивается таким образом, что выполняются условия

$$\begin{aligned} \nabla \nu(r, t) \nabla \mathbf{u} &\rightarrow 0, \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \rightarrow 0 \text{ при } t \rightarrow \infty, \\ \nabla \times \mathbf{u} \times \mathbf{u} &\rightarrow 0 \text{ при } t \rightarrow \infty \end{aligned}$$

и единственным нетривиальным решением ($\mathbf{u} \neq 0$) является связь $\nabla \times \mathbf{u} = k\mathbf{u}$, в которой параметр k находится из удовлетворения граничным условиям. Такой класс вихревых течений относится к самоорганизующимся режимам и может реализовываться лишь в специальных случаях и состояниях атмосферы. В этом случае система (25) для полей скорости и давления сводится к уравнениям (1), (2) с соответствующими граничными условиями. Неизвестный параметр k является собственным значением данной задачи и находится в процессе ее решения.

Теперь определим, каким образом сосредоточенные вихри рассмотренного типа могут быть использованы для интерпретации ряда “аномальных” явлений, о которых шла речь в начале работы. Для примера на рис. 12 изображен наблюдавшийся в последнее время авиацией США объект [3], который не смогли идентифицировать.

Авторы не утверждают, что все особенности “аномальных” явлений могут быть объяснены на основе сосредоточенных вихрей. Однако ряд наблюдаемых свойств допускает вполне правдоподобную качественную и количественную трактовку в рамках современной физики.

Отметим некоторые из них.

1. Как следует из рис. 5, 6, в сосредоточенном вихре возникают области пониженного давления, где под воздействием электрического поля грозового облака могут возникать электрические разря-



Рис. 12. Один из многочисленных примеров НЛО, о котором сказано: “Правительство США не может объяснить 143 из 144 случаев неопознанных летающих объектов, о которых сообщили военные самолеты” [3].

ды, сопровождающиеся свечением [10]. Используя известную для газового разряда зависимость Пашена, можно показать, что для характерных параметров вихря выполняются условия возникновения разряда. В этих случаях в атмосфере наблюдаются замкнутые движущиеся объекты.

В других условиях возникновению и развитию локализованных электрических разрядов могут способствовать захваченные внутрь вихря атмосферные загрязнения, включая металлические объекты, космические лучи и возмущения в магнитосфере Земли. Интенсивность излучений может возрастать при вспышках на Солнце. В некоторых случаях интенсивности внешних электрических полей недостаточно для зажигания разряда, но ее хватает для возбуждения газов внутри вихря. Этот процесс может сопровождаться импульсом излучения из-за разной оптической толщины замкнутого вихря, распространение излучения иногда может быть локализовано в определенном направлении. Из-за захвата вихрем различного сорта примесей могут возникать свечения различного типа.

Ряд таких визуальных образований наблюдатели могут отнести к шаровым молниям [1, 2], включая шаровые молнии гигантских размеров, о которых сообщали очевидцы.

2. Область сосредоточенного вихря, напоминающая тарелку, может перемещаться под воздействием ветра. В вихрях из-за захвата и зарядки пыли может содержаться пылевая плазма, излучение которой может приводить к образованию светящихся объектов причудливой конфигурации [12]. Понятно, что столкновение летательного аппарата с сосредоточенным вихрем может приводить к повреждению аппарата.

3. Возникновение электромагнитного излучения от электрических разрядов, развивающихся

внутри сосредоточенного вихря, может приводить к нарушению связи. Как показывают полученные выше решения, распределение давления в сосредоточенном вихре, примыкающем к поверхности почвы, может носить периодический характер, оставляя после разрушения вихря концентрические круги на поверхности полей. Перечень различных воздействий и анализ возможностей сосредоточенных вихрей в атмосферах других планет можно продолжить, но это так же, как и количественные оценки, является предметом отдельной работы.

Кроме того, как следует из полученных решений, на границах вихря возникает разрыв угловой скорости. Это приводит к развитию неустойчивости Кельвина—Гельмгольца и разрушению сосредоточенного вихря за характерное время, обратно пропорциональное коэффициенту вязкости в атмосфере.

4. Наличие влаги и электрических полей может приводить к образованию водорода (это явление наблюдалось в ураганах). Кроме того, сосредоточенные вихри могут захватывать в себя различные газы (например, радон), включая горючие. Из-за вращения могут возникать области с повышенной концентрацией определенных элементов. Накопление внутри вихря водорода и других горючих компонентов, поступающих от атмосферных выбросов, при превышении ими некоторого критического значения и при наличии электрического разряда в вихре [11] может способствовать взрывному разрушению вихревого образования. Все это в совокупности может вызывать горение или детонацию внутри вихря. Поэтому разрушение вихря может сопровождаться интенсивными акустическими импульсами.

Более детальный анализ каждого из отмеченных процессов, возникающих внутри сосредоточенного вихря, и получение количественных критериев требуют отдельного исследования. Это особенно касается случаев нахождения в вихре электрических спичек разного знака (пылевой плазмы) [12, 13].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследованы характеристики стационарных сосредоточенных вихрей максимальной спиральности $\nabla \times \mathbf{u} = k\mathbf{u}$ в атмосфере Земли. С использованием системы уравнений (1), (2) построено новое стационарное трехмерное решение задачи для течения, сосредоточенного в сферическом слое, расположенном на высоте H от поверхности.

Изучены режимы с двумя и с тремя компонентами скорости и рассчитаны поля скорости и давления для таких типов течения.

Учитывая возможности образования вихрей во влажной атмосфере, проанализировано влияние толщины слоя на изменение характеристик течения.

Рассмотрены возможности образования стационарных сосредоточенных вихрей при развитии турбулентных течений, когда изменение коэффициента турбулентности приводит к связи $\nabla \times \mathbf{u} = k\mathbf{u}$. Дан пример существования некрупного сферического вихря при набегающем на угловую стенку потоке жидкости.

Обсуждено использование полученных характеристик сосредоточенных вихрей для интерпретации ряда наблюдаемых “аномальных” явлений в атмосфере, типа НЛО, шаровых молний, для объяснения которых часто привлекаются механизмы, лежащие за пределами современной физики.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Синкевич О.А. Долгоживущие плазменные образования и проблемы шаровой молнии. Часть I // ТВТ. 1997. Т. 34. № 4. С. 651.
2. Синкевич О.А. Долгоживущие плазменные образования и проблемы шаровой молнии. Часть II // ТВТ. 1997. Т. 34. № 6. С. 968.
3. <https://www.nbcnews.com/politics/politics-news/ufo-report-government-can-t-explain-143-144-mysterious-flying-n1272390>
4. Жуковский Н.Е. О присоединенных вихрях. Собр. соч. Т. 4. М.—Л., 1949.
5. Громека И.С. Некоторые случаи движения несжимаемой жидкости. Собр. соч. М., 1952. С. 76.
6. Beltrami E. Considerazioni hidrodinamiche // Rend. Inst. Lombardo Acad. Sci. Lett. 1889. V. 22. P. 122.
7. Чефранов С.Г. Генерация спиральности в однородно-винтовых течениях // ЖЭТФ. 2004. Т. 126. Вып. 5(13). С. 1133.
8. Синкевич О.А., Зинченко Г.О., Ивочкин Ю.П. Одноточные стационарные, сосредоточенные вихри специального типа и системы таких вихрей // ТВТ. 2019. Т. 57. № 4. С. 548.
9. Nickalls R.W.D. A New Approach to Solving the Cubic: Cardan's Solution Revealed // Mathematical Gazette. 1993. V. 77. P. 354.
10. Синкевич О.А., Маслов С.А., Гусейн-заде Н.Г. Электрические разряды и их роль в генерации вихрей // Физика плазмы. 2017. Т. 43. № 2. С. 203.
11. Sinkevich O.A. Influence of Electrical Discharges on Combustion (The Generalized Borghi Diagram) // High Temp. 2018. V. 56. № 4. P. 496.
12. Complex and Dusty Plasmas: From Laboratory to Space / Eds. V.E. Fortov, G.E. Morfill. Series in Plasma Physics. Boca Raton, FL: CRC Press, 2010. 418 p.
13. Ting Wang. A Theoretical Note on Aerodynamic Lifting in Dust Devils // Icarus. 2016. № 265. P. 79.

УДК 532.529:534.2

ВОЛНОВАЯ ДИНАМИКА КАПЕЛЬ ПЕРФТОРУГЛЕРОДА В ВЯЗКОУПРУГОЙ ЖИДКОСТИ

© 2023 г. Д. А. Губайдуллин, Ю. В. Федоров*

Институт механики и машиностроения – ОСП ФИЦ КазНЦ РАН, г. Казань, Россия

*E-mail: kopperfildd@ya.ru

Поступила в редакцию 06.06.2022 г.

После доработки 06.07.2022 г.

Принята к публикации 13.10.2022 г.

Разработана математическая модель и представлено численное исследование роста парового пузырька в результате акустического испарения сферической капли перфторуглерода, находящейся в вязкоупругой жидкости. Рассмотрены линейные реологические модели Кельвина–Фойгта, Максвелла, Зенера и Олдройда. Задача сводится к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений для радиуса и температуры пузырька, радиуса капли, нормальных напряжений на границе капли совместно с уравнениями теплопроводности для внутренней и внешней жидкости. Пространственная дискретизация уравнений осуществляется с помощью неявной конечно-разностной схемы. Обыкновенные дифференциальные уравнения решаются методом Рунге–Кутты пятого порядка с адаптивным вычислительным шагом. Для проверки корректности численного счета в частном случае проведено сравнение теоретических результатов с известными экспериментальными данными. Продемонстрировано влияние модуля сдвига, времени релаксации упругой несущей фазы и различия реологических моделей на радиальную динамику пузырька пара внутри капли, находящейся во внешней вязкоупругой жидкости.

DOI: 10.31857/S0040364423030122

ВВЕДЕНИЕ

В последнее время большой интерес представляет изучение эмульсий с фазовыми переходами со следующей особенностью. Под действием ультразвука внутри капель жидкости образуются пузырьки пара. Этот процесс известен как акустическое испарение капель [1]. Использование данных эмульсий имеет огромный потенциал в биомедицине [2, 3], поскольку, в отличие от обычных газовых микропузырьков, капли жидкости могут быть достаточно маленькими и могут спокойно протекать через тонкие капилляры. К примеру, при использовании эхографической визуализации капли жидкости, протекающие через сосудистую систему опухолей, могут испаряться и использоваться в качестве контрастных веществ для получения изображения внутренней структуры опухоли [4]. В качестве капель жидкости обычно используют капли перфторуглеродов, таких как декафторбутан C_4F_{10} , октафторпропан C_3F_8 и додекафторпентан C_5F_{12} [5–7]. Выбор данных веществ связан с тем, что они остаются метастабильными при физиологической температуре и не могут самопроизвольно испаряться. Для их испарения требуется дополнительная (акустическая) энергия.

В работе [8] приведены экспериментальные результаты по испарению капель октафторпропана и декафторбутана разных размеров, находящихся в

воде. В случае полного испарения капли также получены данные по радиальным колебаниям чистого пузырька пара. Показано, что увеличение начального размера капли приводит к более сильному росту пузырька пара, а также к увеличению амплитуды его колебаний. Экспериментальные данные по испарению капли додекафторпентана в воде представлены в [9]. Там же рассмотрена математическая модель пузырька пара с учетом диффузии газа в безграничной жидкости перфторуглерода. Отмечено, что без учета диффузии газа пузырек пара после первого акустического цикла схлопывается. Наличие диффузии газа позволяет пережить паровому пузырьку первый коллапс и продолжить рост, что хорошо подтверждается экспериментальными данными в наблюдаемых временных масштабах. Влияние концентрации газа на динамику акустических волн в смеси жидкости с паровыми пузырьками отмечено в работах [10, 11]. В частности, показано, что для мелкодисперсных систем (радиус пузырьков пара ~ 1 мкм) влияние фазовых переходов уменьшается из-за роста массовой концентрации газа в пузырьках, связанного с действием капиллярных сил на межфазной поверхности. Обобщение математической модели на случай конечного размера капли перфторуглерода проведено в [12–14]. Исследовано влияние акустических параметров, свойств жидкости и размера капли на процесс акустиче-

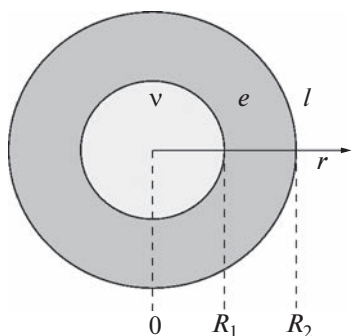


Рис. 1. Схема капли: v – пар, e – жидкая фаза, l – несущая жидкость.

ского испарения. Чтобы предотвратить быстрое растворение капель в несущей жидкости, их обычно покрывают полимерной оболочкой [15].

В [16, 17] разработана математическая модель, описывающая радиальные колебания пузырька пара внутри капли перфторуглерода, покрытой вязкоупругой несжимаемой оболочкой. Вязкоупругость оболочки учитывается по модели Кельвина–Фойгта. Показано, что увеличение размера и модуля сдвига оболочки снижает рост пузырька и замедляет его радиальные колебания. Таким образом, установлено, что механические свойства оболочки играют важную роль в процессе акустического испарения капли и сильно влияют на оптимальные акустические параметры. С другими публикациями, посвященными динамике пузырьков, можно ознакомиться в обзорах [18–20].

В настоящей работе представлена математическая модель и выполнено численное моделирование роста и радиальных колебаний пузырька пара внутри капли перфторуглерода, находящейся во внешней вязкоупругой жидкости. Предлагаемая модель может использоваться как для описания лабораторных экспериментов, где в качестве окружающей жидкости обычно используется вода, так и для описания различных приложений, где в качестве несущей фазы может выступать более сложная жидкость. К примеру, в [21] рассмотрена акустика сложной вязкоупругой смеси полидиметилсилоксана с газовыми пузырьками. Показано существенное влияние упругости несущей фазы на коэффициент затухания и фазовую скорость волны.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Рассматривается капля жидкости с пузырьком пара в центре внутри массива вязкоупругой жидкости (рис. 1).

Уравнения неразрывности и импульса в сферической системе координат при наличии центральной симметрии и в предположении несжимаемости жидких фаз записываются в виде [22]

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 u_v \rho_v) = -\frac{\partial \rho_v}{\partial t}, \quad r < R_1; \quad (1)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 u_k) = 0, \quad r > R_1, \quad k = e, l; \quad (2)$$

$$\rho_k \left(\frac{\partial u_k}{\partial t} + u_k \frac{\partial u_k}{\partial r} \right) = -\frac{\partial p_k}{\partial r} + \frac{\partial \tau_k}{\partial r} + \frac{3\tau_k}{r}, \quad r > R_1, \quad k = e, l. \quad (3)$$

Здесь ρ – плотность, r – радиальная координата, t – время, u – радиальная скорость, p – давление, τ – нормальное напряжение. Решение уравнения (2) записывается следующим образом:

$$u_k = \frac{R_1^2}{r^2} U_k, \quad k = e, l, \quad (4)$$

где U_k – скорость жидкости на границе включения. Записываются граничные условия на границе R_1 с фазовыми переходами и R_2 без фазовых переходов [22]

$$\begin{aligned} p_e(R_1) - p_v(R_1) + \frac{2\sigma_1}{R_1} &= \tau_e(R_1) - \\ &- \tau_v(R_1) + J(u_e(R_1) - u_v(R_1)), \\ J &= \rho_v(\dot{R}_1 - U_v) = \rho_e(\dot{R}_1 - U_e), \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} p_l(R_2) - p_e(R_2) + \frac{2\sigma_2}{R_2} &= \tau_l(R_2) - \tau_e(R_2), \\ u_l(R_2) &= u_e(R_2) = \dot{R}_2. \end{aligned}$$

Здесь σ – коэффициент поверхностного натяжения; U_v – скорость пара; J – поток массы, обусловленный изменением фазы на границе раздела пар–жидкость. Нормальные напряжения для пара и капли жидкости задаются в виде

$$\tau_v = 2\mu_v \frac{\partial u_v}{\partial r} - \frac{2\mu_v}{3r^2} \frac{\partial r^2 u_v}{\partial r}, \quad \tau_e = 2\mu_e \frac{\partial u_e}{\partial r}, \quad (6)$$

где μ – динамическая вязкость. Поскольку вязкость пара меньше, чем вязкость жидкости, поэтому $\tau_v \ll \tau_e$ и, следовательно, в дальнейшем величиной τ_v можно пренебречь.

Реологическая модель, учитывающая вязкоупругость несущей жидкости, записывается в общем виде [23–25] так, что в частных случаях из нее вытекают модели Кельвина–Фойгта ($\lambda_{1l} = \lambda_{2l} = 0$), Максвелла ($G_l = \lambda_{2l} = 0$), Зенера ($\lambda_{2l} = 0$) и трехконстантная модель Олдройда ($G_l = 0$):

$$\lambda_{1l} \dot{\epsilon}_l + \tau_l = 2G_l \epsilon_l + 2\mu_l \dot{\epsilon}_l + 2\mu_l \lambda_{2l} \ddot{\epsilon}_l, \quad (7)$$

где λ_{1l} – время релаксации вязкоупругой жидкости, λ_{2l} – время ретардации, G_l – модуль сдвига, ϵ_l – деформация. По определению

$$\dot{\epsilon}_l = \frac{\partial u_l}{\partial r} \Big|_{R_2} = -\frac{2R_2^2 \dot{R}_2}{r^3},$$

поэтому

$$\varepsilon_l = -\frac{2}{3r^3}(R_2^3 - R_{20}^3), \quad \ddot{\varepsilon}_l = -\frac{4R_2\dot{R}_2^2 + 2R_2^2\ddot{R}_2}{r^3},$$

где R_{20} – начальный радиус капли. Представим решение уравнения (7) в виде

$$\tau_l = -\frac{4\mu_l}{r^3}D_l, \quad (8)$$

тогда можно записать дифференциальное уравнение для определения D_l

$$\lambda_{ll}\dot{D}_l + D_l = \frac{G_l(R_2^3 - R_{20}^3)}{3\mu_l} + R_2^2\dot{R}_2 + \lambda_{2l}(2R_2\dot{R}_2^2 + R_2^2\ddot{R}_2). \quad (9)$$

Уравнение импульса (3) интегрируется от R_l до бесконечности. В этом случае интервал от R_l до R_2 будет соответствовать параметрам капли жидкости, от R_2 до бесконечности – параметрам несущей жидкости. Тогда, приняв во внимание (4)–(8), после математических преобразований выводится уравнение радиальных колебаний рассматриваемого включения

$$\rho_{d1}R_l\dot{U}_e - 0.5\rho_{d2}U_e^2 + 2\rho_{d1}\dot{R}_lU_e = p_v - p_l - \frac{2\sigma_d}{R_l} + \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_e}\right)J^2 - \frac{4\mu_e}{R_l}\left(1 - \frac{R_l}{R_2^3}\right)U_e - \frac{4\mu_l D_l}{R_2^3}, \quad (10)$$

$$\rho_{d1} = \rho_e + (\rho_l - \rho_e)\frac{R_l}{R_2}, \quad \rho_{d2} = \rho_e + (\rho_l - \rho_e)\frac{R_l^4}{R_2^4},$$

$$\sigma_d = \sigma_1 + \sigma_2\frac{R_l}{R_2}, \quad p_l = p_\infty + p_a,$$

$$\dot{R}_l = U_e + \frac{J}{\rho_e}. \quad (11)$$

В уравнении (10) слагаемое p_a определяет внешнее акустическое давление. Если принять $J = 0$, то уравнение (10) совпадает с полученным ранее уравнением в работе [26].

Необходимо отметить, что в [27–30] при исследовании эволюции одиночного сферического парового пузырька в жидком углеводороде установлена важность учета неоднородности плотности и температуры пузырька. В частности, показано, что температура пара в однородном пузырьке ($\partial\rho_v/\partial r = \partial T_v/\partial r = 0$) близка к минимальной температуре пара (около границы) в гомобарическом пузырьке ($\partial\rho_v/\partial r \neq 0$, $\partial T_v/\partial r \neq 0$). Оценки, выполненные в [16], показывают, что для перфторуглеродов длина термодиффузии составляет порядка 10 см для частот возмущений от 1 до 10 МГц. В результате можно принять, что температура внутри пузырька пара равна температуре на его

поверхности. Таким образом, давление и температура внутри пузырька определяются по уравнению Клапейрона–Клаузиуса

$$p_v = p_\infty \exp\left[\frac{l}{B_v}\left(\frac{1}{T_{s0}} - \frac{1}{T_v}\right)\right], \quad (12)$$

где l – удельная теплота парообразования жидкости, T_{s0} – температура на линии насыщения, T_v – температура пара внутри пузырька, B_v – приведенная газовая постоянная.

Далее нужно получить уравнение, описывающее эволюцию температуры T_v . Для этого записываются уравнения сохранения массы (1) и энергии [31] для паровой фазы в сферической системе координат:

$$\rho_v c_v \frac{\partial T_v}{\partial t} = \frac{\partial p_v}{\partial t}, \quad (13)$$

$$\rho_v = p_v/(B_v T_v), \quad (14)$$

где c – удельная теплоемкость. Использованы следующие предположения: пар в пузырьке подчиняется закону идеального газа, плотность пара не постоянна во времени, давление, плотность и температура внутри пузырька однородны ($\partial p_v/\partial r = \partial \rho_v/\partial r = \partial T_v/\partial r = 0$), сохраняется адиабатичность пузырька (тепловой поток q_v пара равен нулю). Следуя работе [32], умножаем уравнение (1) на $c_v T_v$ и складываем с уравнением (13), получая

$$\frac{\partial(\rho_v c_v T_v)}{\partial t} + \frac{c_v \rho_v T_v}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 u_v) - \frac{\partial p_v}{\partial t} = 0. \quad (15)$$

Используя уравнение состояния (14), связь между теплоемкостью идеального газа, газовой постоянной и показателем адиабаты и проинтегрировав уравнение (15), находим

$$u_v = -\frac{r}{3\gamma_v} \frac{\dot{p}_v}{p_v}. \quad (16)$$

Комбинируя полученное выражение (16) с (5), а также с уравнением Клапейрона–Клаузиуса (12), приходим к дифференциальному уравнению относительно температуры T_v

$$\dot{T}_v = \frac{3\gamma_v B_v T_v^2}{l R_l} \left[\left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_e} \right) J - U_e \right]. \quad (17)$$

Неизвестный параметр R_2 определяется по закону сохранения массы капли

$$\rho_e \frac{d}{dt}(R_2^3 - R_l^3) = -3R_l^2 J, \quad \text{или} \quad \dot{R}_2 = \frac{R_l^2}{R_2^2} U_e. \quad (18)$$

Для замыкания системы уравнений (9)–(12), (14), (17), (18) необходимо задать массовый поток J . Поскольку внутри пузырька пара температура од-

нородна и не зависит от радиальной координаты, запишем уравнения теплопроводности для капли:

$$\frac{\partial T_e}{\partial t} + u_e \frac{\partial T_e}{\partial r} = \frac{\alpha_e}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T_e}{\partial r} \right) + \frac{12\mu_e u_e^2}{\rho_e c_e r^2}, \quad (19)$$

$$\alpha_e = \frac{\chi_e}{\rho_e c_e}.$$

Здесь χ — коэффициент теплопроводности, α — коэффициент температуропроводности. Задаются граничные условия

$$\begin{aligned} r = R_1: \quad T_e &= T_v, \quad J = \frac{\chi_e}{l} \frac{\partial T_e}{\partial r}; \\ r = R_2: \quad T_e &= T_\infty. \end{aligned} \quad (20)$$

Как и в работе [8], здесь сделано предположение, что температура окружающей каплю жидкости постоянна. Таким образом, для определения потока массы J потребуется решить уравнение теплопроводности в частных производных (19) с граничными условиями (20). Итак, получена замкнутая система нелинейных дифференциальных уравнений (9)–(12), (14), (17)–(20), определяющая рост и радиальные колебания пузырька пара в капле перфторуглерода внутри массива вязкоупругой жидкости.

НАЧАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ И ЧИСЛЕННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

Если предположить, что пузырек пара в начальный момент времени существует в виде зародыша $R_1(0) = R_{10}$ и покоится, то скорость границы раздела жидкость–пар удовлетворяет условию $\dot{R}_1(0) = 0$. Начальное значение радиуса капли также определено $R_2(0) = R_{20}$. Таким образом, давление в пузырьке в начальный момент времени определяется выражением вида

$$p_v(0) = p_{v0} = p_\infty + \frac{2\sigma_1}{R_{10}} + \frac{2\sigma_2}{R_{20}},$$

а его температура находится по уравнению Клапейрона–Клаузиуса

$$T_v(0) = T_{v0} = \left(\frac{1}{T_{s0}} - \frac{B_v}{l} \ln \frac{p_{v0}}{p_\infty} \right)^{-1}.$$

Для уравнения (9) начальное условие задается в виде $D_l(0) = 0$, а для уравнения теплопроводности (16) в виде $T_e(r, 0) = T_l(r, 0) = T_\infty$. Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений (9)–(11), (17), (18) проводится методом Рунге–Кутты пятого порядка с автоматическим выбором шага. Для устранения вычислительных проблем при решении уравнения теплопроводности (19), связанных с движением стенок пузырька и капли, по аналогии с [16, 31] границы фиксируются с помощью безразмерных перемен-

ных. Для внутренней жидкой фазы вводится переменная $x = (R_2 - r)/(R_2 - R_1)$, в этом случае если $r \in [R_1, R_2]$, то $x \in [0, 1]$. Тогда частные производные записываются как

$$\frac{\partial}{\partial r} = -\frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\dot{R}_2 - \dot{h}x}{h} \frac{\partial}{\partial x}, \quad h = R_2 - R_1,$$

и уравнение теплопроводности (19) принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_e}{\partial t} &= V_{e2} \frac{\partial^2 T_e}{\partial x^2} + V_{e1} \frac{\partial T_e}{\partial x} + V_{e0}, \quad V_{e2} = \frac{\alpha_e}{h^2}, \\ V_{e1} &= -\left[\frac{1}{h} \left(\dot{R}_2 - \dot{h}x - \frac{R_1^2 U_e}{(R_2 - hx)^2} \right) + \frac{2\alpha_e}{h(R_2 - hx)} \right], \quad (21) \\ V_{e0} &= \frac{12\mu_e}{\rho_e c_e} \frac{R_1^4 U_e^2}{(R_2 - hx)^6}. \end{aligned}$$

Для аппроксимации уравнения (21) применяется неявная схема с погрешностями первого порядка по времени и второго порядка по пространству. Пространственная координата x дискретизируется N точками с шагом Δx . Таким образом, частные производные температур могут оцениваться следующими конечно-разностными схемами второго порядка:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_e}{\partial x} &= \frac{T_e|_{i+1} - T_e|_{i-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2), \\ \frac{\partial^2 T_e}{\partial x^2} &= \frac{T_e|_{i+1} - 2T_e|_i + T_e|_{i-1}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2), \\ i &= 2 \dots N-1. \end{aligned}$$

В итоге получается система трехточечных уравнений, которая может быть решена, например, методом прогонки. Когда поле температур на временном шаге найдено, массовый поток J находится по следующей формуле:

$$J = \frac{\chi_e}{l} \frac{3T_v - 4T_e|_2 + T_e|_3}{2\Delta x} + O(\Delta x^2).$$

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Для проверки построенной математической модели и выбранной схемы численной реализации в частном случае на рис. 2 приведено сравнение радиуса пузырька пара в зависимости от времени с имеющимися экспериментальными данными [8], полученными при испарении капли октафторпропана, находящейся в воде. Температура воды $T_\infty = 310$ К, давление $p_\infty = 10^5$ Па. Теплофизические параметры октафторпропана взяты из работ [8, 22]. Внешнее акустическое давление задано в виде

$$p_a = \begin{cases} -P_a \sin(2\pi f_a t), & 0 \leq t \leq N_a/f_a, \\ 0, & t > N_a/f_a, \end{cases}$$

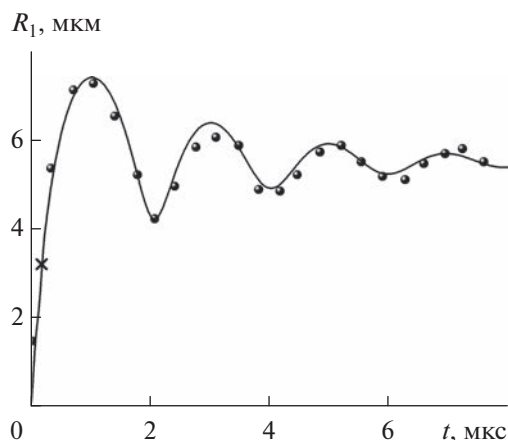


Рис. 2. Сравнение зависимости радиуса пузырька пара от времени (кривая) с экспериментальными данными [8] (маркеры); крестик — момент полного испарения капли.

где $P_a = 0.5 \times 10^6$ Па, $f_a = 8 \times 10^6$ Гц, $N_a = 2$. Начальный радиус пузырька пара $R_{10} = 10^{-7}$ м, а начальный радиус капли $R_{20} = 10^{-6}$ м. Следуя работе [8], вязкость несущей фазы $\mu_l = 0.006$ Па с. В случае, когда капля полностью превращалась в пар (текущий радиус капли совпадал с радиусом пузырька пара), полагалось, что интенсивность массообмена J приравняется к нулю. В этом случае далее совершал радиальные колебания уже чистый пузырек пара. Наблюдается хорошее согласие теории с экспериментом (рис. 2). Таким образом, математическая модель и ее численная реализация способны правильно воспроизводить ключевые физические процессы, лежащие в основе динамики испарения летучих контрастных веществ с фазовыми переходами.

Теперь рассмотрим динамику капли октафторпропана, находящейся в вязкоупругой жидкости. На рис. 3 приведены зависимости радиуса пузырька пара от времени при различных значениях модуля сдвига несущей фазы. Остальные параметры те же, что и на рис. 2. Как и следовало ожидать, увеличение модуля сдвига несущей фазы приводит к ослаблению роста парового пузырька, а также к более быстрому затуханию его радиальных колебаний. Таким образом, достаточно упругая внешняя жидкость сдерживает радиальные движения включения.

На рис. 4 представлены зависимости радиуса пузырька пара от времени при различных временах релаксации несущей фазы. Видно, что увеличение времени релаксации упругой несущей фазы приводит к более слабому затуханию радиальных колебаний пузырька и к его более быстрому росту. Время релаксации — это время, необходимое вязкоупругой среде или материалу для возврата

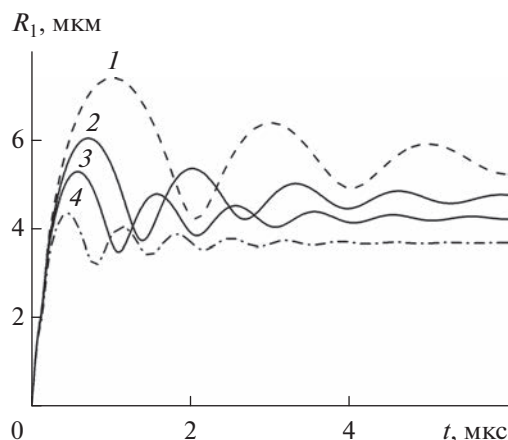


Рис. 3. Зависимости радиуса пузырька пара от времени при $\mu_l = 10^{-3}$ Па с, $\lambda_{2l} = \lambda_{2l} = 0$ и различных модулях сдвига: 1 — $G_l = 0$, 2 — 5×10^4 , 3 — 10^5 , 4 — 2×10^5 Па.

в начальное ненапряженное состояние. Таким образом, малые времена релаксации упругой жидкости подавляют радиальные движения пузырька, поскольку несущая фаза допускает быстрый возврат в начальное ненапряженное состояние.

На рис. 5 приведены зависимости радиуса пузырька пара от времени при испарении капли октафторпропана, находящейся в вязкоупругой жидкости, с учетом различных линейных реологических моделей и при разных временах релаксации несущей жидкости. Так, для модели Кельвина—Фойгта пузырек пара растет меньше из-за упругости несущей жидкости, а его колебания сильно затухают (рис. 5а). Однако для моделей, в кото-

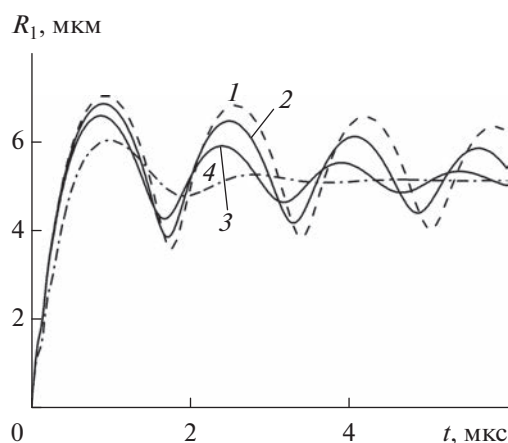


Рис. 4. Зависимости радиуса пузырька пара от времени при $G_l = 3 \times 10^3$ Па, $\lambda_{2l} = 0$, $\mu_l = 10^{-3}$ Па с и различных временах релаксации: 1 — $\lambda_{2l} = 7 \times 10^{-7}$, 2 — 5×10^{-7} , 3 — 3×10^{-7} , 4 — 10^{-9} с.

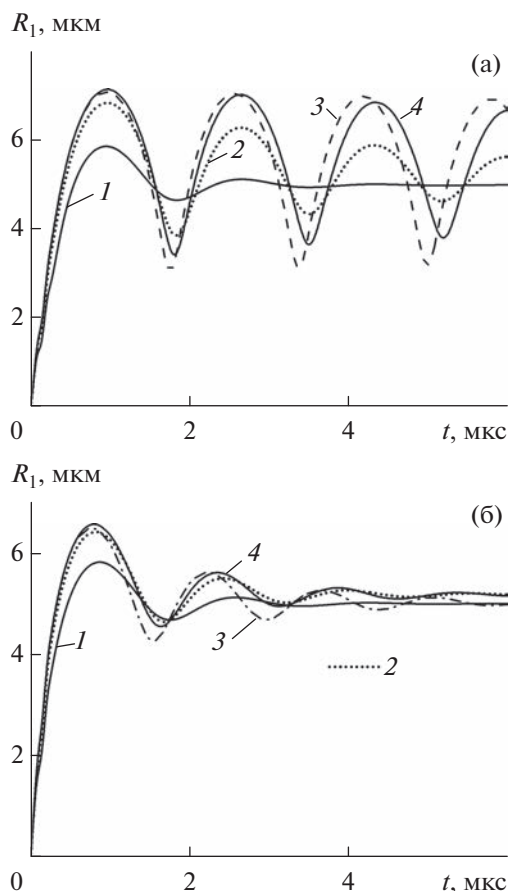


Рис. 5. Зависимости радиуса пузырька пара от времени при $G_l = 10^4$ Па, $\mu_l = 0.015$ Па с, $\lambda_{2l} = \lambda_{1l}/5$ с учетом различных реологических моделей: 1 – модель Кельвина–Фойгта, 2 – Олдройда, 3 – Зенера, 4 – Максвелла; (а) – $\lambda_{1l} = 10^{-6}$ с, (б) – 2×10^{-7} .

рых присутствует время релаксации, рост пузырька и его колебания становятся более интенсивными. При текущем значении времени релаксации в 1 мкс упругость играет лишь небольшую роль в модели Зенера, но частота колебаний увеличивается по сравнению с моделью Максвелла. Время ретардации в модели Олдройда ослабляет рост пузырька пара и усиливает затухание его радиальных колебаний. При меньшем значении времени релаксации λ_{1l} (рис. 5б) амплитуда колебаний пузырька пара существенно уменьшается, а затухание этих колебаний происходит быстрее. Но в начальный промежуток времени все же происходит более быстрый рост пузырька пара. При этом по мере уменьшения λ_{1l} и с течением времени кривая $R_1(t)$ по модели Зенера начинает ближе прилегать к кривой, построенной по модели Кельвина–Фойгта. Соответствующая тенденция наблюдается и для двух кривых (2 и 4) по моделям Максвелла и Олдройда. Все дело в том, что, если

обратиться к формуле (7), то при $\lambda_{1l} \rightarrow 0$ модель Зенера переходит в модель Кельвина–Фойгта. Из физических соображений $\lambda_{2l} < \lambda_{1l}$, поэтому в данном случае и $\lambda_{2l} \rightarrow 0$, тогда модель Олдройда переходит в модель Максвелла. Таким образом, учет релаксации в модели вязкоупругости несущей фазы вызывает на начальном промежутке времени более быстрый рост пузырька пара внутри капли жидкости.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Теоретически исследована динамика роста парового пузырька под действием акустического давления внутри капли перфторуглерода, находящейся во внешней вязкоупругой жидкости. Проведенные расчеты позволяют сделать следующие выводы.

- С увеличением модуля сдвига упругой несущей фазы происходит меньший рост парового пузырька, а его радиальные колебания быстро затухают.

- Увеличение времени релаксации упругой несущей фазы приводит к меньшему затуханию радиальных колебаний пузырька и к его более быстрому росту.

- С использованием модели Кельвина–Фойгта рост пузырька пара уменьшается из-за упругости несущей жидкости, а его колебания сильно затухают. При больших временах релаксации упругость играет лишь небольшую роль в модели Зенера, но частота колебаний увеличивается по сравнению с моделью Максвелла. Время ретардации в модели Олдройда по сравнению с моделью Максвелла снижает рост пузырька пара и усиливает затухание его радиальных колебаний. При малых временах релаксации в рассматриваемых моделях амплитуда колебаний пузырька пара существенно уменьшается, а затухание этих колебаний происходит быстрее.

- Учет релаксации в моделях вязкоупругости несущей фазы вызывает в начальный период времени более быстрый рост пузырька пара внутри капли жидкости.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-71-00025).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kripfgans O.D., Fowlkes J.B., Miller D.L., Eldevik O.P., Carson P.L. Acoustic Droplet Vaporization for Therapeutic and Diagnostic Applications // *Ultrasound Med. Biol.* 2000. V. 26. P. 1177.
2. Sheeran P.S., Dayton P.A. Phase-change Contrast Agents for Imaging and Therapy // *Curr. Pharm. Des.* 2012. V. 18. P. 2152.
3. Kee A.L.J., Teo B.M. Biomedical Applications of Acoustically Responsive Phase Shift Nanodroplets:

- Current Status and Future Directions // *Ultrason. Sonochem.* 2019. V. 56. P. 37.
4. *Rapoport N., Gao Z., Kennedy A.* Multifunctional Nanoparticles for Combining Ultrasonic Tumor Imaging and Targeted Chemotherapy // *J. Natl. Cancer Inst.* 2007. V. 99. № 14. P. 1095.
5. *Sheeran P.S., Wong V.P., Luo S., McFarland R.J., Ross W.D., Feingold S., Matsunaga T.O., Dayton P.A.* Decafluorobutane as a Phase-change Contrast Agent for Low-energy Extravascular Ultrasonic Imaging // *Ultrason. Med. Biol.* 2011. V. 37. P. 1518.
6. *Sheeran P.S., Luo S., Dayton P.A., Matsunaga T.O.* Formulation and Acoustic Studies of a New Phase-shift Agent for Diagnostic and Therapeutic Ultrasound // *Langmuir.* 2011. V. 27. P. 10412.
7. *Sheeran P.S., Luo S., Mullin L.B., Matsunaga T.O., Dayton P.A.* Design of Ultrasonically-activatable Nanoparticles Using Low Boiling Point Perfluorocarbons // *Biomaterials.* 2012. V. 33. P. 3262.
8. *Doinikov A.A., Sheeran P.S., Bouakaz A., Dayton P.A.* Vaporization Dynamics of Volatile Perfluorocarbon Droplets: a Theoretical Model and in Vitro Validation // *Med. Phys.* 2014. V. 41. P. 102901.
9. *Shpak O., Stricker L., Versluis M., Lohse D.* The Role of Gas in Ultrasonically Driven Vapor Bubble Growth // *Phys. Med. Biol.* 2013. V. 58. P. 2523.
10. *Шагапов В.Ш., Галимзянов М.Н., Вдовенко И.И.* Особенности устойчивости и акустических свойств перегретой жидкости с газовыми зародышами при повышении давления // *ТВТ.* 2019. Т. 57. № 5. С. 748.
11. *Шагапов В.Ш., Галимзянов М.Н., Вдовенко И.И.* Особенности отражения прохождения акустических волн на границе «чистой» и пузырьковой жидкостей при прямом их падении // *ТВТ.* 2019. Т. 57. № 2. С. 284.
12. *Cho S., Son G.* A Level Set Method for Bubble Growth in Acoustic Droplet Vaporization // *Int. Commun. Heat Mass Transfer.* 2018. V. 93. P. 83.
13. *Cho S., Son G.* Numerical Study of Droplet Vaporization under Acoustic Pulsing Conditions // *J. Mech. Sci. Technol.* 2019. V. 33. № 4. P. 1673.
14. *Park S., Son G.* Numerical Investigation of Acoustic Vaporization Threshold of Microdroplets // *Ultrason. Sonochem.* 2021. V. 71. P. 105361.
15. *Rapoport N.* Phase-shift, Stimuli-responsive Perfluorocarbon Nanodroplets for Drug Delivery to Cancer // *Wiley Interdiscip. Rev. Nanomed. Nanobiotechnol.* 2012. V. 4. № 5. P. 492.
16. *Guedra M., Coulouvrat F.* A Model for Acoustic Vaporization of Encapsulated Droplets // *J. Acoust. Soc. Amer.* 2015. V. 138. № 6. P. 3656.
17. *Lacour T., Brasier T., Coulouvrat F.* Ultimate Fate of a Dynamical Bubble/Droplet System Following Acoustic Vaporization // *Phys. Fluids.* 2020. V. 32. P. 051702.
18. *Prosperetti A.* Vapor Bubbles // *Annu. Rev. Fluid Mech.* 2017. V. 49. P. 221.
19. *Вараксин А.Ю.* Газодинамика и теплофизика двухфазных потоков: проблемы и достижения // *ТВТ.* 2013. Т. 51. № 3. С. 421.
20. *Вараксин А.Ю.* Двухфазные потоки с твердыми частицами, каплями и пузырями: проблемы и результаты исследований // *ТВТ.* 2020. Т. 58. № 4. С. 646.
21. *Губайдуллин Д.А., Никифоров А.А.* Акустические волны в вязкоупругих пузырьковых средах // *ТВТ.* 2019. Т. 57. № 1. С. 150.
22. *Губайдуллин Д.А., Панин К.А., Федоров Ю.В.* Акустика жидкости с покрытыми оболочкой каплями при наличии фазовых переходов // *Изв. РАН. МЖГ.* 2022. № 4. С. 41.
23. *Warnez M.T., Johnsen E.* Numerical Modeling of Bubble Dynamics in Viscoelastic Media with Relaxation // *Phys. Fluids.* 2015. V. 27. P. 063103.
24. *Zilonova E., Solovchuk M., Sheu T.W.H.* Bubble Dynamics in Viscoelastic Soft Tissue in High-intensity Focal Ultrasound Thermal Therapy // *Ultrason. Sonochem.* 2018. V. 40. P. 900.
25. *Zilonova E., Solovchuk M., Sheu T.W.H.* Dynamics of Bubble-bubble Interactions Experiencing Viscoelastic Drag // *Phys. Rev. E.* 2019. V. 99. P. 023109.
26. *Губайдуллин Д.А., Федоров Ю.В.* Акустические волны в жидкости с газовыми включениями, имеющими жидкую прослойку и вязкоупругую оболочку // *ТВТ.* 2021. Т. 59. № 4. С. 533.
27. *Yang H., Desyatov A.V., Cherkasov S.G., McConnell D.B.* On the Fulfillment of the Energy Conservation Law in Mathematical Models of Evolution of Single Spherical Bubble // *Int. J. Heat Mass Transfer.* 2008. V. 51. P. 3623.
28. *Десятов А.В., Ильмов Д.Н., Кубышкин А.П., Черкасов С.Г.* Математическое моделирование эволюции одиночного сферического парового пузырька на основе гомобарической модели // *ТВТ.* 2011. Т. 49. № 3. С. 436.
29. *Ильмов Д.Н., Черкасов С.Г.* Теплофизические процессы при сжатии парового пузырька в жидком углеводороде на основе гомобарической модели // *ТВТ.* 2012. Т. 50. № 5. С. 676.
30. *Ильмов Д.Н., Филатов Н.И., Черкасов С.Г.* Сжатие паровых включений в жидком водороде // *Тепловые процессы в технике.* 2015. № 8. С. 350.
31. *Hao Y., Prosperetti A.* The Dynamics of Vapor Bubbles in Acoustic Pressure Fields // *Phys. Fluids.* 1999. V. 11. P. 2008.
32. *Десятов А.В., Ильмов Д.Н., Черкасов С.Г.* Математическое моделирование эволюции одиночного сферического парового пузырька при его сжатии внешним давлением // *ТВТ.* 2008. Т. 46. № 1. С. 92.

УДК 519.63

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УДАРНОЙ ВОЛНЫ СО СЛОЕМ ПЕНЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДВУХЖИДКОСТНОГО ПОДХОДА

© 2023 г. П. А. Чупров^{1, 2, *}, П. С. Уткин¹, С. В. Фортова², А. Д. Киверин¹¹Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия²Институт автоматизации проектирования РАН, Москва, Россия

*E-mail: petchu@mail.ru

Поступила в редакцию 23.09.2022 г.

После доработки 23.09.2022 г.

Принята к публикации 06.12.2022 г.

Работа посвящена изучению применимости двухжидкостной модели Баера–Нунциато к задаче взаимодействия ударной волны со слоем пены. Сформулирована определяющая система уравнений. Предложен и детально описан вычислительный алгоритм на основе схемы Хартена–Лакса–Ван Лира с разрешением контактного разрыва, включающий стадии релаксации скоростей и давлений фаз. С использованием предложенной вычислительной технологии рассмотрена задача распространения слабого возмущения в двухфазной среде. Получена скорость распространения, близкая к оценке по формуле Вуда. Также рассмотрена задача о взаимодействии ударной волны со слоем пены у непроницаемой стенки. Постановка соответствует натурным экспериментам. Описана нестационарная волновая динамика, реализующаяся в данной задаче в рамках предложенной модели. Получено хорошее качественное и количественное соответствие между результатами расчета и экспериментальными данными.

DOI: 10.31857/S0040364423030067

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время пены получили широкое распространение в различных отраслях. В частности, пены рассматриваются как экраны для подавления взрывных нагрузок при развитии взрывов [1, 2]. Вместе с тем в недавних работах [3, 4] продемонстрировано, что пена сама может выступать в качестве горючего материала при содержании в ней химически активных компонент. Так, например, при приготовлении пены на основе эмульсии углеводорода в воде и кислорода, используемого в качестве вспенивающего газа, при локальном подводе энергии в пене формируется волна горения, распространяющаяся с относительно высокой скоростью по сравнению с нормальной скоростью горения в предварительно перемешанной смеси углеводорода с кислородом [3]. При замене кислорода горючей газовой смесью (например, водород-кислородной) волна горения в пене способна ускоряться и даже переходить в детонацию [4]. Таким образом, полученные в [3, 4] результаты указывают на возможные пути эффективного сжигания водонасыщенных углеводородов [5], что актуально, в частности, для устранения разливов нефти на поверхности водоемов или утилизации сырой нефти на объектах добычи. При этом развитие процессов горения в

горючих пенах имеет сугубо нестационарный характер, и распространение пламени сопровождается генерацией и распространением в пене акустических и ударных волн (УВ) [6]. Здесь важно отметить, что экспериментальная диагностика нестационарных динамических процессов в пенах затруднена ввиду непрозрачности двухфазной среды, и мощным инструментом анализа протекающих в пенах динамических процессов является математическое моделирование.

На основе газодинамики двухфазных течений разработано множество математических моделей для численного анализа динамических процессов в пенах [7–9]. При этом опыт использования таких моделей показывает, что, по крайней мере, на качественном уровне даже столь сложные процессы, как распространение пламени в пене, воспроизводятся в вычислительном эксперименте [10, 11]. Стоит, однако, отметить, что количественное согласие расчета с экспериментальными данными достигается не всегда [3] и требуются дополнительные доработки моделей с учетом физических факторов, определяющих динамику многофазной среды. В частности, одним из факторов, определяющих динамику пены, является уплотнение структуры пены, в ходе которого жидкость перемещается, а газ сжимается. В недавней работе [12] для слоя плотноупакованных частиц пред-

ложена модель типа Баера–Нунциато (БН) [13], учитывающая эффект уплотнения структуры. Предполагается, что использование такой модели должно повысить точность расчетов динамических процессов в пенах.

Целью настоящей работы являются создание вычислительной технологии на основе модели БН и численного метода Хартена–Лакса–Ван Лира с разрешением контактного разрыва (ХЛЛК) для моделирования ударно-волновых процессов в пенных средах с учетом эффекта уплотнения структуры пены и последующая ее верификация на основе сравнения с экспериментальными данными.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Математическая модель основывается на системе уравнений [13, 14] для описания течений двухфазных сжимаемых сред

$$\mathbf{u}_t + \mathbf{f}_x(\mathbf{u}) = \mathbf{h}(\mathbf{u})\bar{\alpha}_x + \mathbf{p}, \quad (1)$$

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \bar{\alpha} \\ \bar{\alpha}\bar{\rho} \\ \bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{v} \\ \bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{E} \\ \alpha\rho \\ \alpha\rho v \\ \alpha\rho E \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} 0 \\ \bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{v} \\ \bar{\alpha}(\bar{\rho}\bar{v}^2 + \bar{p}) \\ \bar{\alpha}\bar{v}(\bar{\rho}\bar{E} + \bar{p}) \\ \alpha\rho v \\ \alpha(\rho v^2 + p) \\ \alpha v(\rho E + p) \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{h} = \begin{bmatrix} -\bar{v} \\ 0 \\ \bar{p} \\ \bar{p}\bar{v} \\ 0 \\ -\bar{p} \\ -\bar{p}\bar{v} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{p} = \begin{bmatrix} \mu(\bar{p} - p) \\ 0 \\ -\lambda(\bar{v} - v) \\ \mu\bar{p}(p - \bar{p}) - \lambda\bar{v}(\bar{v} - v) \\ 0 \\ \lambda(\bar{v} - v) \\ -\mu\bar{p}(p - \bar{p}) + \lambda\bar{v}(\bar{v} - v) \end{bmatrix}, \quad (2)$$

$$\bar{\alpha} + \alpha = 1,$$

$$\bar{E} = \frac{\bar{v}^2}{2} + \bar{e}(\bar{\rho}, \bar{p}) = \frac{\bar{v}^2}{2} + \frac{\bar{p} + \bar{\gamma}\bar{P}_0}{\bar{\rho}(\bar{\gamma} - 1)}, \quad (3)$$

$$E = \frac{v^2}{2} + e(\rho, p) = \frac{v^2}{2} + \frac{p}{\rho(\gamma - 1)}.$$

Здесь $\mathbf{u}$ – вектор консервативных переменных; $\mathbf{f}$ – вектор дифференциального потока; $\mathbf{h}(\mathbf{u})\bar{\alpha}_x$ – дифференциальный источниковый член; $\mathbf{p}$ – алгебраический источниковый член, связанный с релаксацией давлений и скоростей фаз. При записи системы уравнений использованы стандартные обозначения: t – время, x – пространственная координата, α – объемная доля, ρ – истинная плотность, v – скорость, p – давление, E – удельная полная энергия, e – удельная внутренняя энергия. Таким образом, пена считается гетерогенной

средой, состоящей из двух несмешивающихся фаз: газовой и жидкой. Параметры с верхней чертой относятся к жидкой фазе, без черты – к газовой. Скорость и давление с верхней тильдой соответствуют параметрам на межфазной границе и предполагаются равными

$$\tilde{p} = \alpha p + \bar{\alpha}\bar{p}, \quad \tilde{v} = \frac{\alpha\rho v + \bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{v}}{\alpha\rho + \bar{\alpha}\bar{\rho}}. \quad (4)$$

Отметим, что выбор соотношений для $\tilde{p}$ и $\tilde{v}$ является не единственно возможным. Это связано с необходимостью осреднения характеристик, вообще говоря, многомерного движения границ раздела фаз в объеме двухфазной среды. В качестве уравнения состояния (УРС) для газовой фазы используется УРС идеального газа с показателем адиабаты γ . Для воды применяется двучленное УРС с параметрами $\bar{\gamma}$ и $\bar{P}_0$.

Параметры μ и λ отвечают за релаксацию давлений и скоростей фаз соответственно. В рамках данной работы предполагается так называемая жесткая, или мгновенная, релаксация давлений и скоростей фаз на межфазных границах при условиях

$$p = \bar{p}, \quad (5)$$

$$v = \bar{v}. \quad (6)$$

Конкретный вид компонентов вектора $\mathbf{p}$ имеет смысл для конечных значений коэффициентов μ и λ , а условия (5), (6) как предельный переход при $\mu \rightarrow +\infty$ и $\lambda \rightarrow +\infty$ обосновываются в работах [13, 14]. С вычислительной точки зрения условия (5), (6) реализуются в рамках процедур релаксации скоростей и давлений (см. следующий раздел).

Описанная модель (1)–(6) использовалась ранее в [15, 16] для численного исследования процесса высокоскоростного соударения металлических пластин. По-видимому, впервые модель БН, сходная с описанной выше, была применена для описания ударно-волновых процессов в пенных средах в [17]. Одно из основных отличий модели [17] от описанной модели заключается в виде релаксационных членов. В частности, в правой части первого уравнения системы (1) в [17] используется член вида

$$\mathbf{p}_1 = \mu(\bar{p} - p - \beta), \quad (7)$$

где β – напряжения, связанные с контактными силами, которые возникают в двухфазной среде при силовом воздействии на нее. Конкретный вид члена β должен определяться реологией двухфазной среды. Так, в [12] при рассмотрении задачи падения УВ на плотный слой частиц член β соответствовал так называемым межгранулярным напряжениям, которые возникают, когда гранулы порошковой среды уплотняются до объемной доли, близкой к плотной упаковке. При этом дальнейшее увеличение объемной доли частиц в соответствии с физикой процесса не должно происходить за

счет резкого увеличения межгранулярных напряжений из-за того, что частицы двухфазной среды должны находиться в плотном контакте друг с другом. Этот эффект достигается за счет выбора β как пороговой функции от объемной доли частиц $\bar{\alpha}$: ноль до определенной величины объемной доли частиц и некоторая функция $\bar{\alpha}$ после. В [17] для исследования полиуретановых пен в качестве β использовалось значение, которое рассчитывалось на основе работы [18], в которой проводилось теоретическое рассмотрение одиночной ячейки пены.

Таким образом, принципиально в модель вида (1) возможно включить механизм учета отклика “каркаса” двухфазной среды при ее уплотнении, т.е. β . В зависимости от рассматриваемой среды β может быть сложно устроенной функцией локальных объемных долей и плотностей фаз, а также определяться набором калибровочных параметров. В настоящей работе подобная возможность не реализована, поскольку рассматривались случаи с не очень высоким объемным содержанием жидкости.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ

Вычислительный алгоритм основан на методе расщепления по физическим процессам:

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = L_{rp} L_{rv} L_h \mathbf{U}_j^n.$$

Здесь $\mathbf{U}$ — рассчитываемая сеточная функция, j — пространственный индекс, n — временной индекс, L_h — аппроксимация гиперболического

оператора, L_{rv} — оператор релаксации скоростей фаз, L_{rp} — оператор релаксации давлений фаз.

Гиперболический шаг. Действие гиперболического оператора L_h основано на варианте схемы ХЛЛК [19], которая ранее применялась для моделирования распространения УВ над плотным слоем частиц [20]. Построим отдельно аппроксимацию первого уравнения системы (1)

$$\bar{\alpha}_t + \tilde{v} \bar{\alpha}_x = 0 \quad (8)$$

и аппроксимацию оставшейся части системы:

$$\mathbf{U}_t + \mathbf{F}_x(\mathbf{u}) = \mathbf{H}(\mathbf{u}) \bar{\alpha}_x,$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \bar{\alpha} \bar{p} \\ \bar{\alpha} \bar{p} \bar{v} \\ \bar{\alpha} \bar{p} \bar{E} \\ \alpha \rho \\ \alpha \rho v \\ \alpha \rho E \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \bar{\alpha} \bar{p} \bar{v} \\ \bar{\alpha} (\bar{p} \bar{v}^2 + \bar{p}) \\ \bar{\alpha} \bar{v} (\bar{p} \bar{E} + \bar{p}) \\ \alpha \rho v \\ \alpha (\rho v^2 + p) \\ \alpha v (\rho E + p) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H} = \begin{bmatrix} 0 \\ \tilde{p} \\ \tilde{p} \tilde{v} \\ 0 \\ -\tilde{p} \\ -\tilde{p} \tilde{v} \end{bmatrix}. \quad (9)$$

Конечно-объемная аппроксимация (9) выглядит следующим образом:

$$\mathbf{U}_{hi}^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t^n}{\Delta x} \left[\mathbf{F}_{i+1/2}(\mathbf{U}_i^n, \mathbf{U}_{i+1}^n) - \mathbf{F}_{i-1/2}(\mathbf{U}_{i-1}^n, \mathbf{U}_i^n) \right] + \mathbf{H}(\mathbf{U}_i^n) \Delta(\bar{\alpha})_x. \quad (10)$$

Численный поток $\mathbf{F}_{i+1/2}(\mathbf{U}_i^n, \mathbf{U}_{i+1}^n)$ рассчитывается с помощью схемы ХЛЛК:

$$\mathbf{F}_{i+1/2} = \begin{bmatrix} \Phi_{i+1/2}^n \\ \bar{\Phi}_{i+1/2}^n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{U}_i^n = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_i^n \\ \bar{\mathbf{W}}_i^n \end{bmatrix},$$

$$\Phi_{i+1/2}^n = \begin{cases} \Phi_i^n, & \text{если } S_{i+1/2}^- \geq 0, \\ \Phi_i^n + S_{i+1/2}^-(\mathbf{Q}_*^* - \mathbf{W}_i^n), & \text{если } S_{i+1/2}^- < 0 \text{ и } S_{i+1/2}^* \geq 0, \\ \Phi_{i+1}^n + S_{i+1/2}^+(\mathbf{Q}_*^* - \mathbf{W}_{i+1}^n), & \text{если } S_{i+1/2}^* < 0 \text{ и } S_{i+1/2}^+ \geq 0, \\ \Phi_{i+1}^n, & \text{если } S_{i+1/2}^+ \leq 0, \end{cases}$$

$$S_{i+1/2}^+ = \max(v_i^n + c_i^n, v_{i+1}^n + c_{i+1}^n), \quad S_{i+1/2}^- = \min(v_i^n - c_i^n, v_{i+1}^n - c_{i+1}^n),$$

$$S_{i+1/2}^* = \frac{p_{i+1}^n - p_i^n + \rho_i^n v_i^n (S_{i+1/2}^- - v_i^n) - \rho_{i+1}^n v_{i+1}^n (S_{i+1/2}^+ - v_{i+1}^n)}{\rho_i^n (S_{i+1/2}^- - v_i^n) - \rho_{i+1}^n (S_{i+1/2}^+ - v_{i+1}^n)},$$

$$\mathbf{Q}_*^* = \begin{bmatrix} C^- & C^- S_{i+1/2}^* & C^- \left[\frac{p_i^n}{\rho_i^n} + (S_{i+1/2}^* - v_i^n) \left(S_{i+1/2}^* + \frac{p_i^n}{\rho_i^n (S_{i+1/2}^- - v_i^n)} \right) \right] \end{bmatrix}^T,$$

$$C^- = \frac{\alpha_i^n \rho_i^n (S_{i+1/2}^- - v_i^n)}{S_{i+1/2}^- - S_{i+1/2}^*},$$

$$\mathbf{Q}_*^+ = \left[C^+ \quad C^+ S_{i+1/2}^* \quad C^+ \left[\frac{p_{i+1}^n}{\rho_{i+1}^n} + (S_{i+1/2}^* - v_{i+1}^n) \left(S_{i+1/2}^* + \frac{p_{i+1}^n}{\rho_{i+1}^n (S_{i+1/2}^* - v_{i+1}^n)} \right) \right] \right]^T,$$

$$C^+ = \frac{\alpha_{i+1}^n \rho_{i+1}^n (S_{i+1/2}^* - v_{i+1}^n)}{S_{i+1/2}^+ - S_{i+1/2}^*}.$$

Здесь c — скорость звука. Численные потоки для подсистемы жидкой фазы получаются непосредственно из приведенных формул путем замены параметров без черты сверху на параметры с чертой.

Аппроксимация $\Delta(\bar{\alpha})_x$ в (10) выполняется следующим образом:

$$\Delta(\bar{\alpha})_x = \frac{1}{\Delta x} (\delta_{i+1/2} - \delta_{i-1/2}),$$

$$\delta_{i+1/2} = \begin{cases} \bar{\alpha}_i^n, & \text{если } \bar{S}_{i+1/2}^* \geq 0, \\ \bar{\alpha}_{i+1}^n, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Наконец, разностная аппроксимация (8) выглядит следующим образом:

$$\bar{\alpha}_{h,i}^{n+1} = \bar{\alpha}_i^n - \frac{\Delta t^n}{\Delta x} [\bar{S}_{i+1/2}^* \delta_{i+1/2} - \bar{S}_{i-1/2}^* \delta_{i-1/2}].$$

В условиях задачи с движущимися явными межфазными границами после расчета гиперболического шага в ячейке может возникнуть случай отсутствия жидкой фазы. Если после гиперболического этапа возникает одна из двух ситуаций:

$$\bar{\alpha}_{h,i}^{n+1} < \varepsilon \quad \text{или} \quad \bar{p}_{h,i}^{n+1} < 0,$$

то для повышения устойчивости решения применяется поправка

$$\bar{v}_{h,i}^{n+1} = 0, \quad \bar{p}_{h,i}^{n+1} = p_{h,i}^{n+1}.$$

Значение малого параметра ε в рассмотренных задачах взято равным 10^{-6} .

Для повышения порядка точности численного метода на гиперболическом шаге использовалось восполнение сеточных функций — компонент векторов консервативных переменных в расчетных ячейках с использованием ограничителя minmod.

Релаксация скоростей фаз. На этапе релаксации скоростей в каждой расчетной ячейке формально решается следующая система обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} d\bar{\alpha}/dt = 0, \\ d(\bar{\alpha}\bar{p})/dt = 0, \\ d(\bar{\alpha}\bar{p}\bar{v})/dt = -\lambda(\bar{v} - v), \\ d(\bar{\alpha}\bar{p}\bar{E})/dt = -\lambda\tilde{v}(\bar{v} - v), \\ d(\alpha\rho)/dt = 0, \\ d(\alpha\rho v)/dt = \lambda(\bar{v} - v), \\ d(\alpha\rho E)/dt = \lambda\tilde{v}(\bar{v} - v). \end{cases} \quad (11)$$

Предполагается, что для достижения условия равновесия (6) релаксационный коэффициент λ стремится к бесконечности. Данное предположение приводит к следующей равновесной скорости фаз в каждой расчетной ячейке [14]:

$$v_{rv,i}^{n+1} = \frac{\alpha_{h,i}^{n+1} \rho_{h,i}^{n+1} v_{h,i}^{n+1} + \bar{\alpha}_{h,i}^{n+1} \bar{\rho}_{h,i}^{n+1} \bar{v}_{h,i}^{n+1}}{\alpha_{h,i}^{n+1} \rho_{h,i}^{n+1} + \bar{\alpha}_{h,i}^{n+1} \bar{\rho}_{h,i}^{n+1}}.$$

После определения новой скорости требуется провести корректировку внутренней энергии для каждой фазы:

$$e_{rv,i}^{n+1} = e_{h,i}^{n+1} + \frac{1}{2} (v_{rv,i}^{n+1} - v_{h,i}^{n+1})^2,$$

$$\bar{e}_{rv,i}^{n+1} = \bar{e}_{h,i}^{n+1} + \frac{1}{2} (v_{rv,i}^{n+1} - \bar{v}_{h,i}^{n+1})^2.$$

Поскольку, как видно из первого, второго и пятого уравнений системы (11), истинная плотность каждой из фаз, как и их объемные доли, на этапе релаксации скоростей не меняются, корректировка внутренней энергии приводит к корректировке давлений фаз до значений $p_{rv,i}^{n+1}$ и $\bar{p}_{rv,i}^{n+1}$:

$$p_{rv,i}^{n+1} = p_{h,i}^{n+1} + \frac{\rho_{h,i}^{n+1} (\gamma - 1)}{2} (v_{rv,i}^{n+1} - v_{h,i}^{n+1})^2,$$

$$\bar{p}_{rv,i}^{n+1} = \bar{p}_{h,i}^{n+1} - \bar{\gamma} \bar{p}_0 + \frac{\bar{\rho}_{h,i}^{n+1} (\bar{\gamma} - 1)}{2} (v_{rv,i}^{n+1} - \bar{v}_{h,i}^{n+1})^2.$$

Релаксация давлений фаз. На этапе релаксации давлений в каждой расчетной ячейке формально решается следующая система обыкновенных дифференциальных уравнений [14]:

$$\begin{cases} d\bar{\alpha}/dt = \mu(\bar{p} - p), \\ d(\bar{\alpha}\bar{\rho})/dt = 0, \\ d(\bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{v})/dt = 0, \\ d(\bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{E})/dt = \mu\tilde{p}(p - \bar{p}), \\ d(\alpha\rho)/dt = 0, \\ d(\alpha\rho v)/dt = 0, \\ d(\alpha\rho E)/dt = -\mu\tilde{p}(p - \bar{p}). \end{cases} \quad (12)$$

Процедура релаксации давлений следует той же идее, что и процедура релаксации скоростей. При стремлении параметра релаксации μ в системе уравнений (12) к бесконечности давления фаз после процедуры релаксации должны выравниваться и стать равными p_i^{n+1} . В качестве следствия уравнений системы (12) можно выписать следующие уравнения для внутренней энергии каждой из фаз:

$$\frac{de}{dt} = -\tilde{p} \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\rho} \right), \quad \frac{d\bar{e}}{dt} = -\tilde{p} \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\bar{\rho}} \right). \quad (13)$$

Разностная аппроксимация уравнений (13) по формуле трапеций приводит к

$$\begin{aligned} e_i^{n+1} - e_{rv,i}^{n+1} &= -\frac{1}{2} (p_i^{n+1} + \tilde{p}_{rv,i}^{n+1}) \left(\frac{1}{\rho_i^{n+1}} - \frac{1}{\rho_{h,i}^{n+1}} \right), \\ \bar{e}_i^{n+1} - \bar{e}_{rv,i}^{n+1} &= -\frac{1}{2} (p_i^{n+1} + \tilde{p}_{rv,i}^{n+1}) \left(\frac{1}{\bar{\rho}_i^{n+1}} - \frac{1}{\bar{\rho}_{h,i}^{n+1}} \right). \end{aligned} \quad (14)$$

Используя УРС для каждой из фаз, условие (2) и формулы (14), получаем следующую систему нелинейных алгебраических уравнений для поиска неизвестных величин p_i^{n+1} , ρ_i^{n+1} и $\bar{p}_i^{n+1}$:

$$\begin{cases} \frac{p_i^{n+1}}{\rho_i^{n+1}(\gamma-1)} - \frac{p_{rv,i}^{n+1}}{\rho_{h,i}^{n+1}(\gamma-1)} = \\ = -\frac{1}{2} (p_i^{n+1} + \tilde{p}_{rv,i}^{n+1}) \left(\frac{1}{\rho_i^{n+1}} - \frac{1}{\rho_{h,i}^{n+1}} \right), \\ \frac{p_i^{n+1} + \bar{\gamma}\bar{P}_0}{\bar{\rho}_i^{n+1}(\bar{\gamma}-1)} - \frac{\bar{p}_{rv,i}^{n+1} + \bar{\gamma}\bar{P}_0}{\bar{\rho}_{h,i}^{n+1}(\bar{\gamma}-1)} = \\ = -\frac{1}{2} (p_i^{n+1} + \tilde{p}_{rv,i}^{n+1}) \left(\frac{1}{\bar{\rho}_i^{n+1}} - \frac{1}{\bar{\rho}_{h,i}^{n+1}} \right), \\ \frac{\alpha_{h,i}^{n+1} \rho_{h,i}^{n+1}}{\rho_i^{n+1}} + \frac{\bar{\alpha}_{h,i}^{n+1} \bar{\rho}_{h,i}^{n+1}}{\bar{\rho}_i^{n+1}} = 1. \end{cases} \quad (15)$$

В [21] показано, что система уравнений (15) сводится к квадратному уравнению относительно, например, ρ_i^{n+1} , приводятся решения этого уравнения, а также обсуждаются критерии отбора физически корректного решения.

ПОСТАНОВКИ ЗАДАЧ И РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Определение скорости звука в двухфазной среде.

Рассмотрим сначала для целей верификации предложенной вычислительной технологии задачу об определении скорости звука в двухфазной среде. Пусть слабая УВ с числом Маха 1.1 падает из воздуха на границу раздела воздух–пена. Пена находится при нормальных условиях: $\rho_0 = 1.2 \text{ кг/м}^3$, $\bar{\rho}_0 = 10^3 \text{ кг/м}^3$, $p_0 = \bar{p}_0 = 10^5 \text{ Па}$. Координата границы раздела в начальный момент времени $x_0 = 2.5 \text{ мм}$. Начальная объемная доля воды в пене $\bar{\alpha}_0 = 0.1$. Скорость газа за падающей волной – 55 м/с, давление – 1.26 атм. Газ считается идеальным: $\gamma = 1.4$. Жидкость описывается двучленным уравнением состояния (3) с параметрами $\bar{\gamma} = 1.5$, $\bar{P}_0 = 10^9 \text{ Па}$.

Рис. 1 иллюстрирует рассчитанные распределения объемной доли жидкости и давления в три последовательные момента времени после начала взаимодействия УВ с пеной. Профили давления – плавные кривые, которые спадают от значения давления за волной, отраженной от границы пены, до начального давления в пене. Профили объемной доли жидкости демонстрируют нестационарность, по меньшей мере на начальной стадии процесса взаимодействия УВ с пеной. С течением времени происходит уплотнение структуры пены, объемная доля жидкости за фронтом распространяющейся звуковой волны непрерывно возрастает. Обратим внимание, если бы в модели присутствовал адекватный рассматриваемой за-

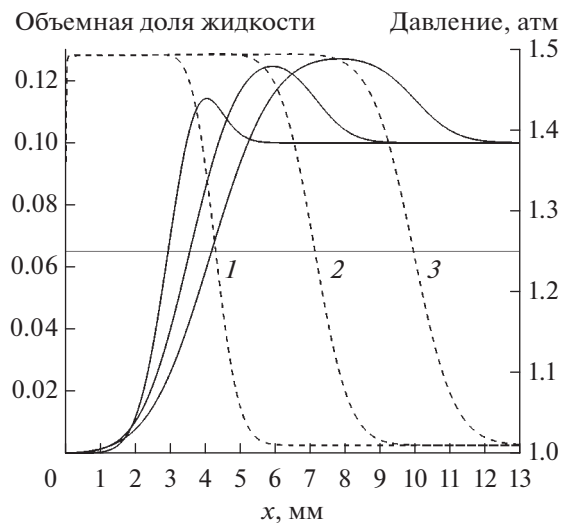


Рис. 1. Пространственные распределения объемной доли жидкости (сплошные линии) и давления (штриховые линии) в задаче об определении скорости звука в пене в моменты времени 40 (1), 100 (2) и 160 мкс (3).

даче член β (см. раздел Математическая модель), эффекта постоянного роста объемной доли удалось бы избежать за счет обратной реакции двухфазной среды на ее уплотнение. Тем не менее эффект нестационарного увеличения объемной доли практически не сказывается на динамике распространения звуковой волны в терминах давления.

В отличие от задачи о взаимодействии УВ со слоем пены у непроницаемой стенки, решение задачи об определении скорости звука в пене осуществлялось по схеме ХЛЛ [14], а не по схеме ХЛЛК. Данный факт хорошо заметен на профилях объемной доли на рис. 1. В силу значительной схемной вязкости метода ХЛЛ граница воздух–пена претерпевает численное “размазывание”, из-за которого объемная доля воды левее точки с координатой $x_0 = 2.5$ мм (где пены в принципе быть не должно) также значительна.

Скорость звука в пене оценивалась по кривым давления, представленным на рис. 1. В моменты времени 40, 100, 160 мкс определялись координаты точек P_1 , P_2 и P_3 внутри профиля, приблизительно соответствующих середине размазанного (как численно, так и физически) фронта (выбрано значение 1.25 атм – прямая на рис. 1). Скорость распространения возмущения в пене получилась равной (в м/с):

$$c_{\text{calc}} = \frac{x_{P_2} - x_{P_1}}{60 \text{ мкс}} \approx \frac{x_{P_3} - x_{P_2}}{60 \text{ мкс}} \approx 47.$$

Для теоретической оценки равновесной скорости звука в пене используется формула Вуда [22]

$$\frac{1}{c_{\text{th}}^2 ([1 - \bar{\alpha}_0] \rho_0 + \bar{\alpha}_0 \bar{\rho}_0)} = \frac{1 - \bar{\alpha}_0}{\rho_0 c_0^2} + \frac{\bar{\alpha}_0}{\bar{\rho}_0 \bar{c}_0^2}, \quad (16)$$

$$c_0 = \sqrt{\gamma \frac{p_0}{\rho_0}} \approx 341, \quad \bar{c}_0 = \sqrt{\gamma \frac{\bar{p}_0 + \bar{P}_0}{\bar{\rho}_0}} \approx 1221.$$

Теоретическая оценка скорости звука по формуле (16) дает значение

$$c_{\text{th}} \approx 39.$$

Можно ожидать улучшения соответствия между расчетом и теорией при уменьшении интенсивности падающей УВ, т.е. при дальнейшем ее приближении к звуку, и при использовании численного метода более высокого порядка точности для уменьшения численного размазывания профиля давления.

Взаимодействие ударной волны со слоем у непроницаемой стенки. Рассмотрим теперь задачу о взаимодействии УВ со слоем пены, расположенным у нижнего торца вертикальной ударной трубы. Постановка задачи соответствует экспериментам [23], которые также рассматривались в расчетной работе [7]. Длина камеры низкого давления ударной трубы составляет 1.44 м, длина камеры высокого давления – 0.8 м. Толщина слоя



Рис. 2. Схематичная постановка задачи о взаимодействии УВ со слоем пены у стенки.

пены – 0.19 м. Датчики давления А, В, С располагаются на расстояниях 1.87, 2.10, 2.24 м соответственно от верхнего торца камеры высокого давления, который принимается за начало координат. На рис. 2 схематично проиллюстрирована постановка рассматриваемой задачи.

В начальный момент времени давление в камере низкого давления равно 0.1 МПа, в камере высокого давления – 0.48 МПа. Показатель адиабаты воздуха принимался равным 1.4. Начальная объемная доля воды в области, заполненной пеной, равна 0.03. Расчетная сетка равномерная с шагом 1 мм. В расчете не учитывается действие силы тяжести. Это вносит определенную погрешность в результаты моделирования по сравнению с экспериментальными данными, поскольку в эксперименте начальное распределение объемной доли в пене из-за действия силы тяжести было неоднородным. Данный эффект учитывался в расчетах [7].

Поясним механику процесса взаимодействия УВ со слоем пены у стенки в рамках используемой математической модели. Для этого проведем совместный анализ кривых давления с датчиков А, В, С (рис. 3) и пространственных распределений объемной доли воды и давления в несколько последовательных моментов времени (рис. 4). Распределения давления и объемной доли строятся в фиксированной области в окрестности нижнего торца канала. Первый скачок давления A_1A_2 на датчике А (рис. 3а) связан с приходом падающей УВ, которая на рис. 4а также обозначена как A_1A_2 . Второй скачок давления A_3A_4 соответству-

ет приходу на датчик давления A волны, отраженной от границы раздела воздух–пена (рис. 4б). При этом внутри пены идет волна сжатия B_1B_2 с более плавным профилем по сравнению с отраженной волной в газе. Фактически поведение этой волны изучалось выше для случая более слабой падающей волны. На распределении объемной доли воды видны одновременно движение границы пенного слоя вправо и локальное уплотнение пены, повышение объемной доли воды. На датчике давления B , который расположен внутри пены, волне сжатия соответствует участок B_1B_2 . Далее волна сжатия движется по направлению к стенке (рис. 4в). Пик давления C_1C_2 на датчике давления C – результат отражения волны сжатия от стенки (рис. 4в). Величина пика определяется не только интенсивностью падающей на пену волны, но и эффектом уплотнения пены. К моменту отражения волны сжатия от стенки пена значительно прижимается к стенке, у стенки наблюдается локальный максимум объемной доли воды (рис. 4г). Участки A_5A_6 (рис. 3а) и B_3B_4 (рис. 3б) с датчиков давления A и B обусловлены обратным прохождением волны сжатия, отраженной от стенки трубы.

Наконец, остается проанализировать колебательный характер кривых давления на датчиках на поздних временах. Колебания особенно заметны на датчиках B и C , см. участки B_4B_5 и C_3C_4 . Данный вопрос применительно к задаче о взаимодействии УВ со слоем частиц подробно рассматривался в [12]. Корректное качественное и количественное воспроизведение данного эффекта требует использования более сложной модели пенной среды (7) с точки зрения релаксации давлений фаз.

Рис. 3 содержит также экспериментальные данные. Исходные данные в [23], скорее всего, подвергались обработке, поскольку кривые давления содержат характерный высокочастотный шум, но его амплитуда очень низкая. Кроме того, экспериментальные кривые не синхронизованы по времени с моментом образования исходной УВ, поэтому также потребовалось вручную синхронизировать расчетные и экспериментальные данные по моменту прихода УВ на датчик A . Дополнительную погрешность внесла бы оцифровка экспериментальных данных. Принимая во внимание, что данная работа уже была проделана в [7], в качестве экспериментальных данных использовались соответствующие кривые из [7]. Это же упростит в дальнейшем проведение прямого сопоставления полученных расчетных данных с расчетными данными по модели [7]. Подобное направление исследований представляется важным, поскольку позволяет выявить существенные особенности того или иного подхода к описанию столь сложной задачи, как распространение удар-

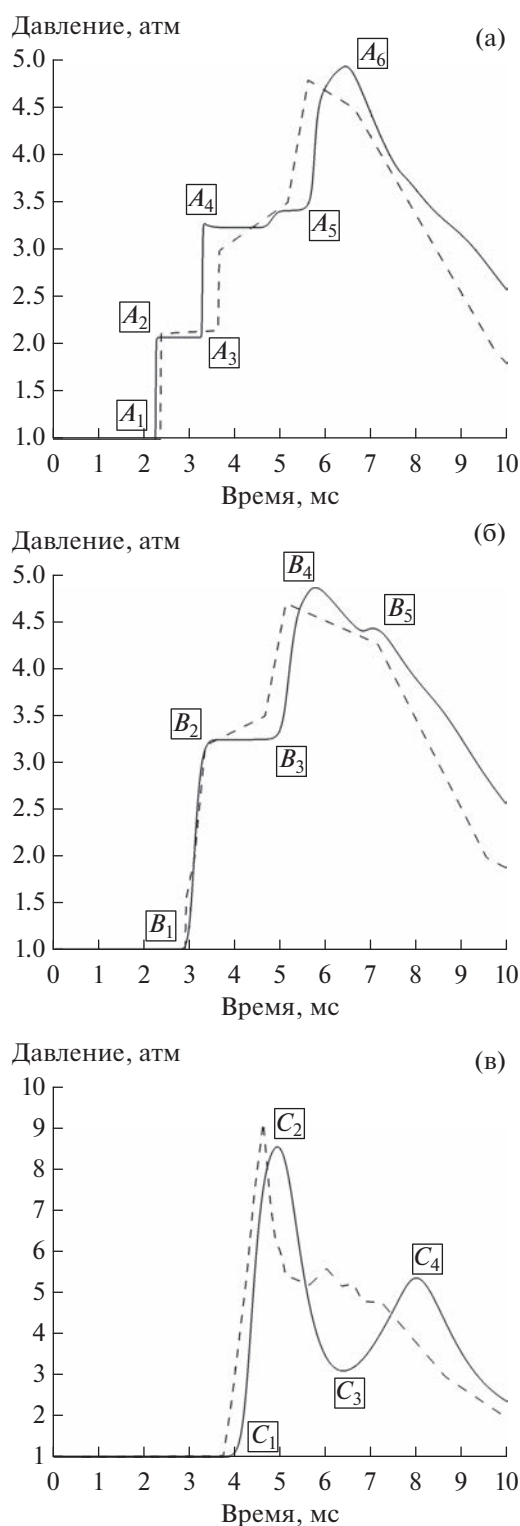


Рис. 3. Кривые давления, зарегистрированные датчиками A (а), B (б), C (в) в задаче о взаимодействии УВ со слоем пены у торца ударной трубы; сплошные линии – результаты расчета данной работы, штриховые – экспериментальные данные [23].

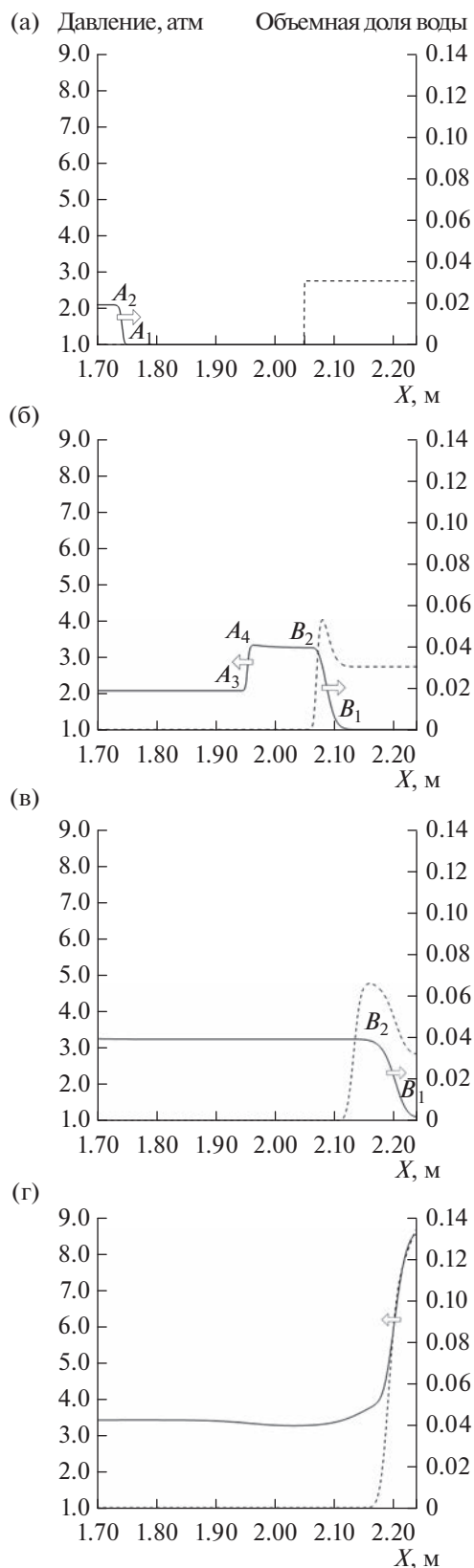


Рис. 4. Рассчитанные пространственные распределения давления (сплошные линии) и объемной доли воды (пунктирные линии) в последовательные моменты времени: (а) – 2 мс, (б) – 3, (в) – 4, (г) – 5; стрелки – направления движения волн.

но-волновых процессов в двухфазных средах. Так, в [12] расчет по модели БН задачи о взаимодействии УВ со слоем частиц у стенки сравнивался с данными, которые были получены в [24] по модели Р.И. Нигматулина [25].

Сравнивая полученные в данной работе результаты и экспериментальные данные, можно отметить, что амплитуды и скорости волн, которые описаны выше, воспроизводятся корректно. Наибольшая разница наблюдается на участке A_4A_5 на датчике A и, соответственно, на участке B_2B_3 на датчике B . Представляется, что данные отличия связаны с тем, что в рассматриваемой постановке не учитывается стратификация пены по высоте слоя из-за действия силы тяжести. Учет данного эффекта также является предметом дальнейшей работы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе предложена газодинамическая модель процесса взаимодействия ударной волны с пеной с учетом уплотнения структуры пены согласно определяющей системе уравнений Баера–Нунциато. Вычислительный алгоритм основан на варианте схемы Хартена–Лакса–Ван Лира с разрешением контактного разрыва, которая ранее применялась для моделирования распространения ударной волны над плотным слоем частиц. С одной стороны, может показаться, что модель Баера–Нунциато является избыточной для рассматриваемой задачи, поскольку в модели учитывается сжимаемость обеих фаз: и газа, и воды. Вода же в рассматриваемом диапазоне давлений является фактически несжимаемой. С другой стороны, система уравнений Баера–Нунциато за счет этого является гиперболической. Это позволяет без дополнительных регулирующих коррекций на этапе вычислительного алгоритма, свойственных многим негиперболическим двухфазным моделям, описывать широкий спектр режимов течения, включая задачи с явными межфазными границами. Иллюстрацией данного утверждения является выполненное в статье решение задачи об определении скорости звука в двухфазной среде. При отсутствии каких-либо подгоночных коэффициентов или констант в подмоделях межфазного взаимодействия, основываясь только на уравнении состояния каждой из фаз, автоматически получается корректная скорость распространения слабых возмущений в двухфазной среде. Это также достигается за счет релаксационных механизмов для скоростей и давлений фаз, которые можно рассматривать как своего рода регулирующие процедуры с точки зрения вычислительного алгоритма, но при этом они имеют понятный физический смысл и являются универсальными для моделей типа Баера–Нунциато.

Компьютерная реализация предложенной математической модели апробирована на расчете динамических процессов в слое пены конечной толщины при воздействии ударной волны, падающей на поверхность пены из окружающего воздуха. Полученные численные результаты указывают, с одной стороны, на работоспособность предложенной модели, а с другой, на важную роль эффекта уплотнения пены при динамическом воздействии и необходимость его учета при математическом моделировании и описании нестационарных процессов, включая горение пены.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Британ А.Б., Зиновик И.Н., Левин В.А. Разрушение пены ударными волнами // ФГВ. 1992. № 5. С. 108.
2. Sembian S., Liverts M., Apazidis N. Attenuation of Strong External Blast by Foam Barriers // Phys. Fluids. 2016. V. 28. № 9. 096105.
3. Kichatov B., Korshunov A., Kiverin A., Son E. Foamed Emulsion – Fuel on the Base of Water-saturated Oils // Fuel. 2017. V. 203. P. 261.
4. Kichatov B., Korshunov A., Gubernov V., Kiverin A., Yakovenko I. Combustion of Heptane-in-Water Emulsion Foamed with Hydrogen–Oxygen Mixture // Fuel Proc. Technol. 2020. V. 198. 106230.
5. Kichatov B., Korshunov A., Kiverin A., Medvetskaya N. Combustion of Foamed Emulsion Prepared via Bubbling of Oxygen–Nitrogen Gaseous Mixture through the Oil-in-Water Emulsion // Fuel Proc. Technol. 2019. V. 186. P. 25.
6. Яковенко И.С., Киверин А.Д. Развитие нестационарных процессов горения во вспененных эмульсиях // ТВТ. 2022. Т. 60. № 6. С. 928.
7. Суров В.С. Об отражении воздушной ударной волны от слоя пены // ТВТ. 2000. Т. 38. № 1. С. 101.
8. Губайдуллин Д.А., Зарипов Р.Р. Влияние фазовых переходов на распространение акустических волн в многофракционных газозвесах с полидисперсными включениями // ТВТ. 2021. Т. 59. № 1. С. 133.
9. Губайдуллин Д.А., Федоров Ю.В. Акустические волны в жидкости с газовыми включениями, имеющими жидкую прослойку и вязкоупругую оболочку // ТВТ. 2021. Т. 59. № 4. С. 533.
10. Kiverin A., Yakovenko I., Kichatov B., Korshunov A. Ignition and Non-stationary Combustion of the Foamed Heptane-in-Water Emulsion: Experimental and Numerical Analysis // Fuel. 2022. V. 320. 123824.
11. Kiverin A., Yakovenko I. Numerical Modeling of Combustion and Detonation in Aqueous Foams // Energies. 2021. V. 14. № 19. 6233.
12. Poroshyna Y.E., Utkin P.S. Numerical Simulation of a Normally Incident Shock Wave – Dense Particles Layer Interaction Using the Godunov Solver for the Baer–Nunziato Equations // Int. J. Multiphase Flow. 2021. V. 142. 103718.
13. Baer M.R., Nunziato J.W. A Two-phase Mixture Theory for the Deflagration-to-detonation Transition in Reactive Granular Materials // Int. J. Multiphase Flow. 1986. V. 12. № 6. P. 861.
14. Saurel R., Abrall R. A Multiphase Godunov Method for Compressible Multifluid and Multiphase Flows // J. Comput. Phys. 1999. V. 150. P. 425.
15. Уткин П.С., Фортова С.В. Математическое моделирование высокоскоростного взаимодействия металлических пластин в рамках двухжидкостного эйлера-ва подхода // ЖВМиМФ. 2018. Т. 58. № 8. С. 90.
16. Chuprov P., Utkin P., Fortova S. Numerical Simulation of a High-Speed Impact of Metal Plates Using a Three-Fluid Model // Metals. 2021. V. 11. № 8. 1233.
17. Baer M.R. A Numerical Study of Shock Wave Reflections on Low Density Foam // Shock Waves. 1992. V. 2. P. 121.
18. Warren W.E., Kraynik A.M. The Nonlinear Elastic Behavior of Open-cell Foams // J. Appl. Mech. 1991. V. 58. P. 376.
19. Toro E.F., Spruce M., Speares W. Restoration of the Contact Surface in the HLL-Riemann Solver // Shock Waves. 1994. V. 4. P. 25.
20. Чупров П.А., Порошина Я.Э., Уткин П.С. Численное моделирование прохождения ударной волны над плотным слоем частиц в рамках уравнений Баера–Нунциато // Горение и взрыв. 2022. Т. 15. № 2. С. 67.
21. Уткин П.С. Математическое моделирование взаимодействия ударной волны с плотной засыпкой частиц в рамках двухжидкостного подхода // Хим. физика. 2017. Т. 36. № 11. С. 61.
22. Wood A. A Textbook of Sound. London: G. Bell, 1941.
23. Британ А.Б., Зиновик И.Н., Левин В.А., Митичкин С.Ю., Тестов В.Г., Хайбо Ху. Особенности распространения газодинамических возмущений при взаимодействии ударных волн с двухфазными средами пенистой структуры // ЖТФ. 1995. Т. 65. № 7. С. 19.
24. Кутушев А.Г., Рудаков Д.А. Численное исследование воздействия ударной волны на преграду, экранную средой пористой порошкообразной среды // ПМТФ. 1993. № 5. С. 25.
25. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. Ч. 1. М.: Наука, 1987.

УДК 621.039.6.536.24

ФОРМИРОВАНИЕ ВХОДНОГО ПРОФИЛЯ ТЕЧЕНИЯ ДЛЯ ПАССИВНОГО УПРАВЛЕНИЯ МАГНИТОГИДРОДИНАМИЧЕСКИМ ПОТОКОМ ЖИДКОГО МЕТАЛЛА В КАНАЛЕ

© 2023 г. И. А. Беляев^{1, 2, *}, Д. Ю. Черныш^{1, 2}, Н. А. Лучинкин^{1, 2},
Д. С. Краснов³, Ю. Б. Колесников³, Я. И. Листратов²

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия

²НИИУ МЭИ, Москва, Россия

³Технический университет Ильменау, Ильменау, Германия

*E-mail: bia@ihed.ras.ru

Поступила в редакцию 28.01.2022 г.

После доработки 06.12.2022 г.

Принята к публикации 06.12.2022 г.

В работе описана экспериментальная попытка повлиять на поток жидкого металла с помощью сравнительно небольшого возмущения на входе в длинный канал. Цель состоит в том, чтобы сформировать устойчивую в условиях сильных магнитных полей и высоких тепловых нагрузок структуру потока, увеличить теплоотдачу и добиться более предсказуемых параметров течения. Показано, что препятствие на входе в виде стержня, расположенного поперек потока и продольно к наложенному магнитному полю, может привести к образованию возмущений в виде упорядоченных вихрей, которые существуют вдоль потока на длинах, достигающих нескольких десятков калибров канала. Эксперименты подтверждают, что генерируемые таким образом вихри существенно изменяют структуру изотермического МГД-потока. В случае смешанной конвекции такие вихри подавляют развитие крупномасштабных термогравитационных пульсаций потока и улучшают теплообмен при определенных режимах течения.

DOI: 10.31857/S0040364423030031

ВВЕДЕНИЕ

Область применения жидких металлов в технике обычно связана со значительными тепловыми нагрузками. В этом случае термогравитационная конвекция может оказывать существенное влияние на течение. Данному обстоятельству долгое время не уделялось достаточного внимания из-за относительно высоких коэффициентов теплоотдачи жидкого металла и, как следствие, отсутствия интереса к изучению детальной структуры потока, например, для дополнительной интенсификации тепло- и массообмена.

Гидродинамика течений в МГД-каналах при умеренных магнитных полях достаточно хорошо изучена [1]. Добавление сильного нагрева к проблеме может спровоцировать развитие крупномасштабных колебаний потока, поведение которых трудно предсказать [2]. Известно, что различные соотношения параметров исследуемого течения, таких как скорость течения, величина магнитного поля, степень нагрева, форма канала, неоднородность обогрева, могут сильно влиять на течение [3]. На современном уровне техники все еще трудно получить точные параметры течения без полномасштабного исследования изучаемой

конфигурации с использованием прямого численного моделирования или индивидуальных экспериментов, отражающих как геометрию проточной части, так и режимные параметры. Низкочастотные колебания потока являются серьезной проблемой для любого устройства. Проблема становится еще более актуальной для теплообменных систем, в которых локальные перегревы и термические напряжения могут значительно снизить надежность конструкций.

Возможным решением данной проблемы является управление потоком [4]. Известно, что воздействие на МГД-поток может значительно (в 4–6 раз, по данным [5]) повысить коэффициент теплоотдачи.

Численное моделирование нестационарных МГД-течений с вихреобразующими объектами (завихрителями) осложняется необходимостью разрешения тонких гартмановских слоев в сочетании с высокими требованиями к разрешению внутреннего тела и самого течения. Это ограничение в контексте вихреобразования преодолено в работе [6], где показано, что квазидвумерные решения могут адекватно воспроизводить параметры трехмерного течения. Дальнейшие чис-

ленные исследования показали, что вихреобразование в канальных МГД-течениях может быть очень эффективным средством управления потоком. В частности, для потока жидкого металла при обтекании круглого стержня в прямоугольном канале в условиях воздействия сильного поперечного магнитного поля показано численно (с использованием квазидвумерной модели), что ниже по потоку дополнительное перемешивание, вызванное следом за обтекаемым стержнем, в некоторых случаях увеличивало теплоотдачу более чем в два раза [7]. Установлено, что переход от стационарных режимов течения к нестационарным зависит от числа Гартмана и коэффициента перекрытия — соотношения доли канала, перекрытой телом обтекания, к проточной доле.

Также показано [8], что величина локального числа Нуссельта увеличивается пропорционально числу Рейнольдса и коэффициенту перекрытия. В то же время максимальное изменение интенсивности теплоотдачи не зависит от числа Рейнольдса при малых коэффициентах перекрытия. В [9] найдена регрессионная зависимость для описания распада устойчивых вихрей за вихреобразующим объектом (круглым стержнем) в прямоугольном канале. В модели предполагалось, что скорость распада зависит от степени перекрытия, величины наложенного магнитного поля и числа Рейнольдса.

Численные исследования также выявили режимы, при которых вторичные вихри, генерируемые слоями Шерклифа (пограничные слои вдоль стенок канала, параллельных направлению линий индукции магнитного поля) и разделенные на боковых стенках, взаимодействуют с отрывными вихрями дорожки Кармана [10].

В работе [11] оценена тепловая эффективность вихреобразования в МГД-канале с интенсификацией потока за счет введения одиночного стержня. С практической, инженерной точки зрения подтверждено увеличение эффективности теплообмена примерно на 30% по сравнению с конфигурацией со стандартным каналом (без установленного внутри тела обтекания).

Недавние исследования влияния формы вихреобразующих объектов (завихрителей) показывают, что при соответствующих взаимодействующих факторах треугольный объект работает лучше, чем стержни круглого или квадратного поперечного сечения [12].

Однако существует недостаток информации о фактических характеристиках завихрителей в экспериментальных условиях, приближенных к условиям работы проектируемых реакторов типа ТОКАМАК.

Особый интерес представляет возможная способность генерируемых вихрей подавлять или из-

менять естественно возникающие магнитоконвективные пульсации [2].

Крупномасштабные упорядоченные вихри могут развиваться и стабильно существовать в потоке жидких металлов не только в условиях, близких к системам охлаждения ТОКАМАКа, но и в отсутствие сильного внешнего магнитного поля (как, например, в проектах реакторов на быстрых нейтронах, жидкометаллических батареях, электролитических ваннах, кристаллизаторах) при некоторых соотношениях критериев Рейнольдса и Грасгофа. Четкое понимание закономерностей МГД-конвекции может обеспечить новые подходы к управлению и диагностике таких систем.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И УСЛОВИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА

Исследуется опускное течение жидкого металла в прямоугольном канале. В качестве исследуемой конфигурации использовался канал с внутренними размерами 56×16 мм², что является развитием предыдущих исследований [3], которые были продолжением работы с аналогичной геометрией (размер канала — 56×17 мм²) [13]. Выбор круглого полого стержня с внешним диаметром 8 мм в качестве внутреннего тела обтекания, способствующего вихреобразованию, обоснован желанием изучить геометрически простую форму, а также учетом результатов ранее выполненного предварительного исследования влияния вихреобразующих объектов различной формы [14].

Экспериментальная установка. Исследования проводились на экспериментальной установке HELMEF [15], состоящей из электромагнита и нескольких циркуляционных контуров замкнутого типа. Установка предназначена для получения экспериментальных данных при изучении процессов гидродинамики и теплообмена электропроводящих жидкостей при их протекании в магнитном поле или без его воздействия. Для проведения экспериментов в контуре РК-3 HELMEF могут быть установлены различные экспериментальные испытательные секции (рабочие участки). Экспериментальные рабочие участки имитируют элементы теплообменных систем реальных энергетических объектов. С помощью различных типов насосов, встраиваемых в циркуляционный контур установки, можно организовывать подъемные и опускные течения жидкости через экспериментальные рабочие участки. Электромагнит ДЭМ-1 с охлаждаемыми медными обмотками создает магнитное поле с почти однородной основной (поперечной) составляющей в зазоре длиной около 1 м и шириной 80 мм между полюсами магнита (рис. 1). Максимальное значение индукции магнитного поля составляет 1.8 Тл (при данной ширине зазора между обкладками). Электромагнит ДЭМ-1 является поворотным, что дает воз-

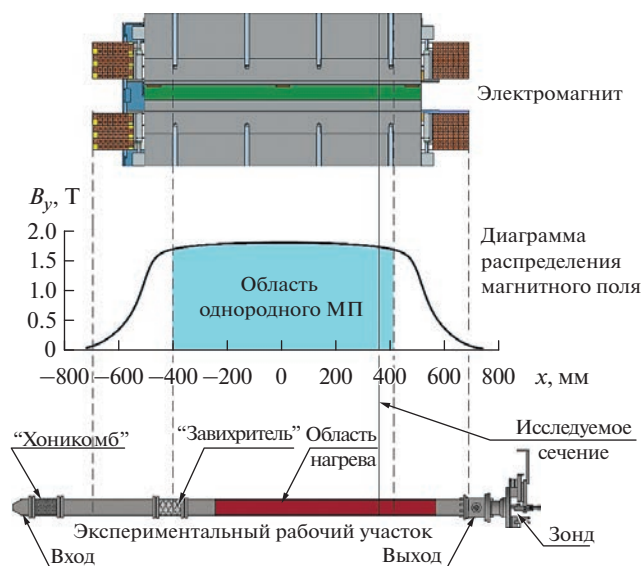


Рис. 1. Исследуемая конфигурация.

возможность его использования для экспериментов, в которых экспериментальный рабочий участок расположен вертикально, горизонтально или под углом. В качестве теплоносителя в контуре РК-3 установки используется ртуть. Ртуть находится в жидком состоянии при температуре окружающей среды, обладает низкой теплопроводностью и теплоемкостью (по сравнению с другими жидкометаллическими теплоносителями), что делает ее удобной модельной жидкостью, поскольку высокая точность полученных экспериментальных данных может быть достигнута на малогабаритных экспериментальных установках.

В настоящих исследованиях для организации циркуляции жидкости в контуре используется герметичный центробежный насос. Ртуть перекачивается насосом из резервуара для хранения в камеру успокоителя, где колебания давления от насоса подавляются газовой подушкой, расположенной над поверхностью жидкости. Затем жидкость проте-

кает через рабочий участок, размещенный в зазоре электромагнита. После выхода из рабочего участка жидкость проходит через два теплообменника типа “труба в трубе”, которые необходимы для восстановления рабочей температуры жидкости после ее нагрева в рабочем участке. Для контроля расхода жидкости используется электромагнитный расходомер (дополнительно расход контролируется в рабочем участке по тепловому балансу). Амплитуда колебаний давления на входе в испытательную секцию контролируется датчиком давления и визуально в газовой полости успокоителя. Платиновые термометры сопротивления (RTD100) используются для контроля температуры жидкости во входной камере рабочего участка и на выходе из камеры смешения рабочего участка.

Экспериментальный рабочий участок. Схематичное изображение экспериментального рабочего участка, используемого в настоящей работе, приведено на рис. 2а. Его основными элементами являются входная камера, сотовый успокоитель (“хоникомб”), секция с установленным внутри завихрителем, основная секция рабочего участка с накладными пластинчатыми нагревателями и датчиками системы диагностики, выходная камера смешения и погружной измерительный зонд. Основная секция рабочего участка из нержавеющей стали имеет прямоугольное поперечное сечение с внутренними размерами $16 \times 56 \text{ мм}^2$ и стенками толщиной 2 мм (рис. 2а). Из-за плохого контакта ртути с нержавеющей сталью экспериментальный рабочий участок можно считать полностью электрически изолированным от потока, что подтверждено в оценках гидравлического сопротивления, выполненных в [13].

Нагрев рабочего участка реализуется посредством двух независимо управляемых накладных нихромовых нагревателей (рис. 2а). При сборке экспериментального рабочего участка с внешней стороны между стенкой участка и каждым накладным нагревателем наносилась специальная теплопроводящая паста для обеспечения низкого контактного сопротивления, после чего секция рабоче-

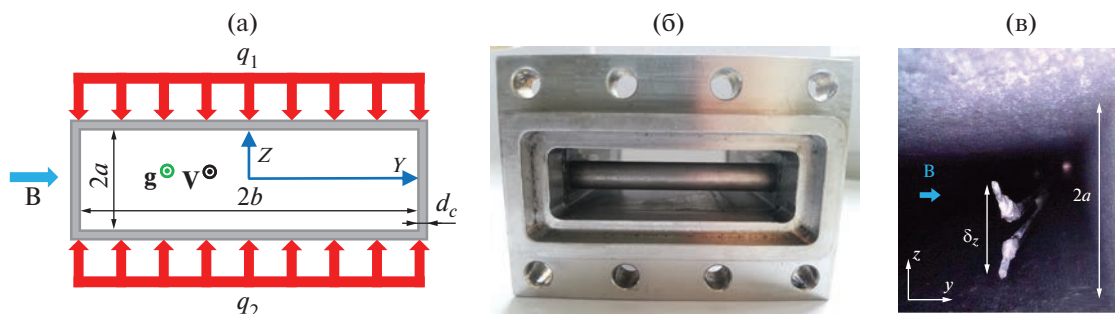


Рис. 2. Исследуемая конфигурация — (а); (б) — секция экспериментального рабочего участка с вихребразующим объектом (полый стержень диаметром 8 мм); (в) — расположение измерительного датчика зонда в канале.

Физические характеристики и безразмерные параметры эксперимента

Параметр	Соотношения	РК-3
Внутренние размеры канала	$2a \times 2b$, мм ²	16 × 56
Характерный размер	$D = 4a$, мм	32
Плотность теплового потока	$q = q_1 = q_2$, кВт/м	0–40
Магнитная индукция	B , Тл	0–1.7
Длина однородного МП	L_B , м	≈0.9
Число Рейнольдса	$Re = U_0 D / \nu$	$< 90 \times 10^3$
Число Пекле	$Pe = U_0 D / \chi$	<1800
Число Гартмана	$Ha = BD\sqrt{\sigma/\rho\nu}$	<1500
Число Грасгофа	$Gr = g\beta q D^4 / \lambda \nu^2$	$< 6.8 \times 10^8$
Число Прандтля	$Pr = \nu / \chi$	0.0244 при 30°C [17]
Относительная электропроводность стенки	$C = \sigma_c d_c / \sigma a$	<0.03

го участка с нагревателями плотно фиксировалась лентой из стеклоткани. Далее поверх каждой из сторон рабочего участка, на которых установлены нагреватели, укладывались два полуцилиндрических фторопластовых прижима для обеспечения наилучшего прилегания нагревателей к стенкам рабочего участка. Термодатчики и датчики теплового потока на основе термопар смонтированы между нагревателями и фторопластовыми прижимами для надежного контроля теплопотерь и температуры нагревателей.

Сотовый успокоитель смонтирован на входной части рабочего участка, расположенной вне зоны влияния магнитного поля. Успокоитель собран из 105 трубок из нержавеющей стали с толщиной стенки 0.5 мм, внутренним диаметром 2 мм и длиной 80 мм. После секции с успокоителем расположена секция с вихреобразующим объектом — полым стержнем внешним диаметром $d = 8$ мм (рис. 2б), ось стержня направлена вдоль длинной стороны поперечного сечения канала и перпендикулярна направлению течения в канале. Коэффициент перекрытия потока $\alpha = d/(2a) = 0.5$ характеризует затеснение протока установленным в сечении стержнем. Расстояние от оси вихреобразующего объекта до сечения, в котором осуществляются измерения, составляет $99a \approx 790$ мм.

Так как основой рабочего участка является металлический профиль прямоугольного сечения, из-за особенностей технологии изготовления профиля на его внутренней поверхности вдоль одной из широких сторон имеется продольный сварной шов. Чтобы исключить гидродинамические помехи, влияющие на поток жидкости, внутренняя сторона профиля со сварным швом при изготов-

лении рабочего участка притиралась до состояния плоской поверхности.

В таблице приведены основные параметры эксперимента. Значения теплофизических свойств ртути: кинематический коэффициент вязкости ν , коэффициенты электропроводности σ и теплопроводности λ , коэффициент температуропроводности χ , а также коэффициент термического расширения β взяты из [16] при среднемассовой температуре (примерно 30°C). В таблице также даны средняя скорость потока U_0 , толщина d_c и электропроводность σ_c стенки.

Отметим, что при определении чисел Грасгофа и Нуссельта и других безразмерных параметров, связанных с нагревом, используется средний тепловой поток в виде $q = q_1 = q_2$. Характерный линейный размер выбран равным двойной ширине канала ($4a$). Этот выбор, очевидно, не уникален и сделан для обеспечения согласованности с экспериментальной работой [18].

Методика измерений. В экспериментах использовались погружные зонды двух типов. Первый — это зонд с одной хромель-алюмелевой термопарой (размер спая — 250 мкм). Зонд второго типа представляет собой составной измерительный датчик, который состоит из двух хромель-алюмелевых термопар, расположенных в плоскости, перпендикулярной линиям индукции магнитного поля (рис. 2в). Расстояние между термопарами составляет $\delta_z = 3.4$ мм. Данный зонд имеет двойное назначение, поскольку он в качестве термопарного зонда может измерять температуру в двух точках поперечного сечения в неизотермическом потоке, а в качестве двухэлектродного потенциального датчика позволяет измерять продоль-

ную составляющую скорости в изотермическом потоке. Измерения скорости потенциальным методом в случае неизоотермического течения не проводились, так как калибровка датчика в этом случае осложняется необходимостью учета термоэлектрического эффекта при измерениях потенциала электродов. Профили скорости в поперечном сечении (рис. 3–6) определены с помощью зонда второго типа. Часть данных по теплообмену (рис. 7–9) получена с помощью зонда первого типа. Результаты, представленные на рис. 10, получены с использованием зондов обоих типов.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Изотермический поток. Сначала исследовались влияние вихреобразующего объекта на изотермический поток и способность сохранять генерируемые вихревые структуры на большом расстоянии вдоль потока.

Обнаружено, что возмущения потока, образованные стержнем диаметром $d = a = 8$ мм, установленным в канал, распространяются по длине канала, устойчиво существуют и регистрируются в измеряемом сечении ($x = 99a$) вдали от первоначального воздействия на поток (рис. 3а). При этом спектральный анализ показывает, что основная частота наблюдаемых пульсаций практически линейно увеличивается с расходом (рис. 3б).

На рис. 4 показаны профили осредненной по времени продольной компоненты скорости и интенсивность пульсаций скорости, измеренные в сечении канала. Показано изменение профиля скорости с увеличением числа Рейнольдса от заполненного квазитурбулентного к квазиламинарному параболическому с выраженным максимумом в центре сечения канала и минимумом вблизи широких стенок канала. При низких числах Рейнольдса профили интенсивности пульсаций скорости однородны; с увеличением Re наблюдаются максимумы вблизи широких стенок и минимум в центре исследуемого поперечного сечения. Следует отметить, что отсутствие данных на графиках для областей, расположенных вблизи стенок (координаты приблизительно $z = -8$ мм и $z = +8$ мм) связано с конструктивными особенностями датчика. Наблюдаемое состояние потока демонстрирует сходство с двумерным потоком Пуазейля, изученным в [19].

Профили скорости (рис. 4а), приведенные для различных значений Re , в экспериментах с невозмущенным потоком ясно демонстрируют двумерность потоков при $Ha = 1300$. В этом случае максимальная и осредненная скорости практически совпадают. В то же время турбулизация имеет довольно низкий уровень, около 1.5–2% (рис. 4б).

Установка стержня в канале существенно изменяет распределение осредненных скоростей

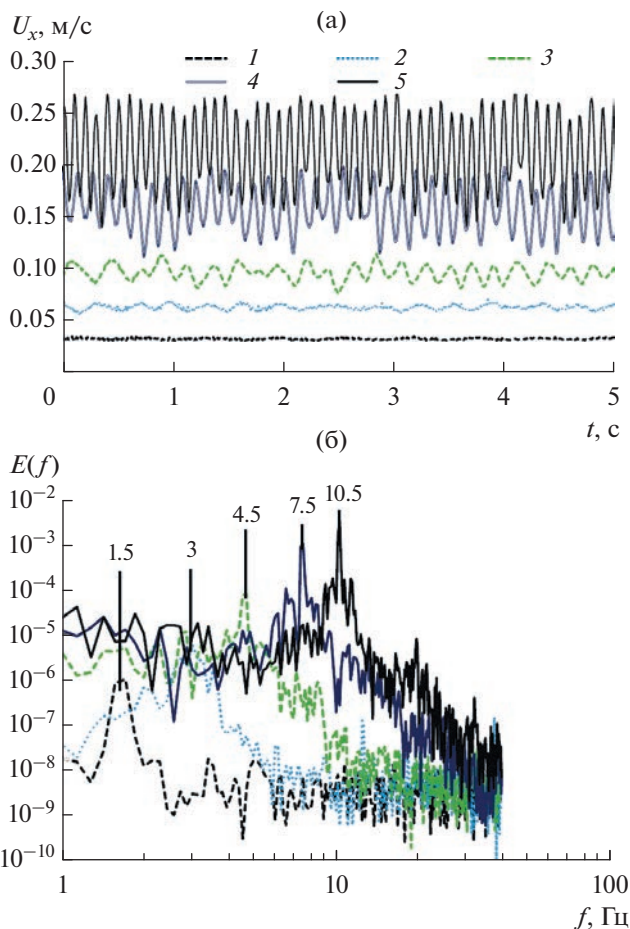


Рис. 3. Осциллограммы измерения локальной скорости (а) и их спектры плотности энергии (б) в точке $z = 0$, $y = 5$ мм при $Ha = 1300$ и различных числах Рейнольдса: 1 – 9×10^3 , 2 – 18×10^3 , 3 – 27×10^3 , 4 – 45×10^3 , 5 – 63×10^3 .

(рис. 4в). При росте Re в сильном магнитном поле ($Ha = 1300$) профили скорости не только не сглаживаются, но и значительно растягиваются в направлении потока. Исключением является профиль скорости для $Re = 9 \times 10^3$, в котором генерация вихрей подавляется магнитным полем. Механизм растяжения профилей скорости при $Re > 9 \times 10^3$ связан с двумерностью основного потока и генерацией вихревых возмущений непосредственно за цилиндром, которые двумеризуются полем и доходят до сечения, в котором проводятся измерения ($x = 99a$), с сохранением высокого уровня интенсивности, обусловленного их двумерностью. Возникающие возмущения частично передают свою энергию средней скорости, что приводит к растяжению профиля скорости, как это наблюдается в экспериментах с плоской струей в сильном поперечном магнитном по-

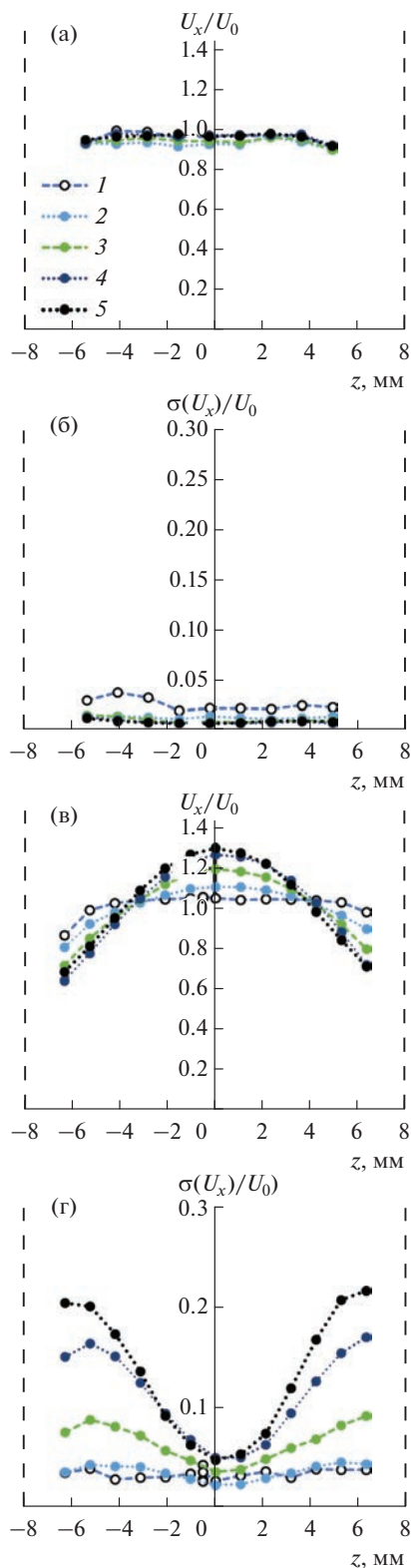


Рис. 4. Профили осредненной по времени скорости (а), (в) и интенсивности пульсаций скорости (б), (г) в $y = 0$ и на расстоянии $x = 99a$ от секции с вихреобразующим объектом при $Na = 1300$: (а), (б) – эксперименты без завихрителя; (в), (г) – с завихрителем; 1 – 9×10^3 , 2 – 18×10^3 , 3 – 27×10^3 , 4 – 45×10^3 , 5 – 63×10^3 .

ле [20], когда генерация интенсивных двумерных возмущений (до 50%) в начальных поперечных сечениях также имела место. При достаточно сильном воздействующем магнитном поле чем выше Re , тем сильнее выражен этот эффект. Данные по измерениям интенсивности пульсаций скорости на рис. 4г подтверждают увеличение интенсивности возникающих возмущений с ростом Re .

Из-за больших потерь на трение (эффекта Гартмана) в присоединенных вихрях за стержнем при $Na = 1300$ значения $Re = 9 \times 10^3$ недостаточно для отрыва вихрей и образования вихревой дорожки [5]. Затесненный поток и присоединенные вихри, вытянутые вдоль потока за стержнем, вероятно, образуют две плоские струи, которые сливаются в одну на некотором расстоянии от входа (см. визуализацию течения в Приложении). Будучи нестабильной, эта струя генерирует возмущения, которые для данного Re почти подавляются магнитным полем на половине расстояния до измеряемого поперечного сечения. Поэтому осциллограмма сигнала, показанная на рис. 3 для $Re = 9 \times 10^3$, демонстрирует слабый квазипериодический сигнал. Экстраполяция результатов [5] по числу Na показывает, что в рассматриваемом случае Re имеет значение, при котором не происходит отрыва присоединенных вихрей. Затеснение потока при $\alpha = 0.5$, по-видимому, также ограничивает рост амплитуды колебаний присоединенных вихрей, предшествующий их отрыву. Низкая частота в спектральном распределении энергии при $Re = 9 \times 10^3$ (энергия на четыре порядка меньше энергии на характеристической частоте при $Re = 63 \times 10^3$) связана с упомянутой нестабильностью струи (рис. 3). С ростом Re гартмановское трение больше не обеспечивает достаточных темпов диссипации энергии. В результате описанный дисбаланс приводит к отрыву вихрей и образованию вихревой дорожки, о чем ясно свидетельствует периодический характер осциллограмм, представленных на рис. 3 для $Re > 9 \times 10^3$.

Генерируемые вихри имеют ярко выраженную основную частоту (рис. 3), линейно зависящую от расхода. Для характеристики наблюдаемой частоты можно использовать число Струхала, определяемое следующим образом:

$$Sh = \frac{fd}{U_0}.$$

Число Струхала наблюдаемых пульсаций сохраняется в широком диапазоне чисел Рейнольдса (рис. 5). Значения достаточно хорошо согласуются с результатами [8], где численное моделирование выполнено для $Re \sim 8000$, $Na \sim 400$ (Re и Na пере-

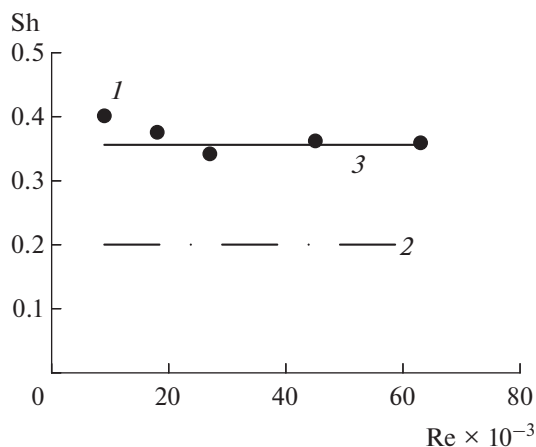


Рис. 5. Зависимость числа Струхала от числа Рейнольдса: 1 – пульсации скорости в эксперименте, 2 – дорожка Кармана, 3 – $Sh = 0.356$ [8].

считаны с использованием определений из этой статьи) для коэффициента перекрытия $\alpha = 0.4$.

Превышение измеренного значения $Sh = 0.356$ при $\alpha = 0.5$ (рис. 5) выше значения $Sh = 0.21$ в отсутствие обтекания стержня [21], что свидетельствует о задержке отрыва, вызванной увеличением Re_{crit} , по-видимому, приводит к увеличению частоты вихревых возмущений.

В распределениях $\sigma(U_x)/U_0$ при $N < 10$ наблюдается низкий уровень интенсивности пульсаций вихрей, генерируемых стержнем (рис. 6). При числе Стюарта $St = 10$ интенсивности пульсаций имеют одинаковую величину, около 4%, в широком диапазоне значений Re . При дальнейшем увеличении St происходит резкое увеличение интенсивности турбулентных пульсаций, что связано с активной двумеризацией полем вихрей, генерируемых стержнем, и, следовательно, их сохранением на больших расстояниях вниз по потоку [22], до измеряемого сечения $x = 99a$. Чем больше значение Re , тем больше энергии запасается в двумерных возмущениях и тем выше их интенсивность (см. рис. 4г). После достижения максимальных значений наблюдается заметное уменьшение интенсивности пульсаций скорости, что связано с дальнейшим уменьшением толщин слоев Гартмана в вихрях на стенках, перпендикулярных магнитному полю (пропорционально Ha^{-1}), и, следовательно, увеличением потерь энергии при возмущениях из-за трения Гартмана.

Магнитно-конвективный поток. Как отмечено во Введении, смешанная конвекция жидкого металла под воздействием сильного магнитного поля сталкивается с магнито-конвективными пульсациями (МКП) потока, вызванными эффектами плавучести. Для исследования возможности воздействия завихрителя на МКП выбран вертикаль-

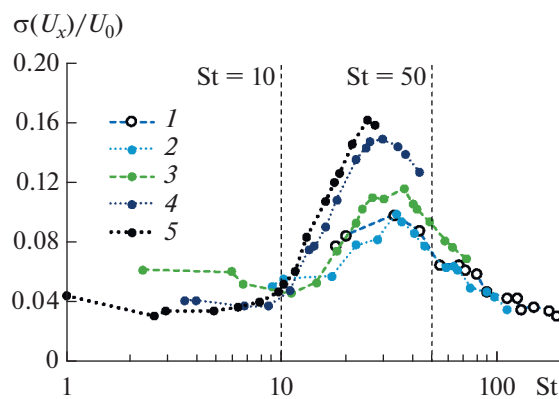


Рис. 6. Интенсивность пульсаций скорости в точке $z = 5$ мм, $y = 0$ мм при различных числах Рейнольдса: 1 – 9×10^3 , 2 – 18×10^3 , 3 – 27×10^3 , 4 – 45×10^3 , 5 – 63×10^3 .

ный канал с опускающим течением в конфигурации с симметричным нагревом канала с обеих широких сторон и с адиабатичными узкими сторонами.

Температурные пульсации дают информацию о структуре потока, поскольку колебания скорости приводят к изменениям температуры. Таким образом, анализ интенсивностей температурных пульсаций позволяет изучать и гидродинамику. Далее анализируются безразмерные интенсивности пульсаций температуры, рассчитанные по формуле

$$\sigma^* = \sigma\lambda/(qD).$$

Также анализируются безразмерные коэффициенты теплоотдачи, определяемые как:

$$Nu = \frac{qD}{(T_w - T_b)\lambda},$$

$$T_b = T_{in} + (T_{out} - T_{in})k,$$

где k – отношение расстояния от начала зоны нагрева до исследуемого участка (700 мм) к общей длине зоны нагрева (800 мм).

Для сопоставления характеристик теплообмена использованы значения числа Нуссельта для случая отсутствия влияния магнитного поля и термогравитации, рассчитанные по формулам работы [23], в которой рассматривалось течение жидкого металла в бесконечном плоском канале. В частности, использованы зависимости для ламинарного и турбулентного течений соответственно $Nu_L = 8.24$, $Nu_T = 10 + 0.025Re^{0.8}$ для двухстороннего нагрева.

В экспериментах с нагревом измененный с помощью завихрителя поток сохранял специфическую динамику жидкости и наблюдались значительные изменения в теплоотдаче. Следует отметить, что в экспериментах удалось реализовать величины тепловой нагрузки в два раза выше, чем

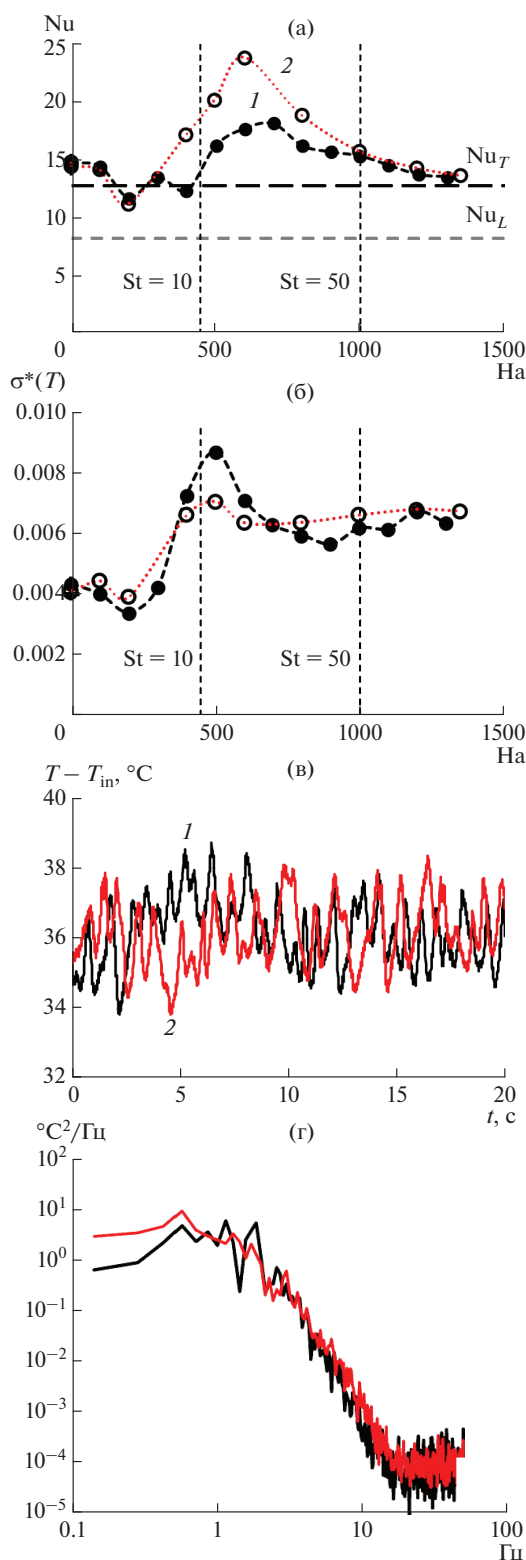


Рис. 7. Зависимости числа Нуссельта (а), (б) безразмерной интенсивности температурных пульсаций от числа Гартмана, а также (в) температурные осциллограммы на стенке ($z = 8$ мм, $y = 0$) при $Ha = 1000$ и их спектры (г) при $Re = 20 \times 10^3$, $Gr = 7 \times 10^8$, $x/a = 80$: 1 – без завихрителя, 2 – с завихрителем.

ранее изученные в [3], где обнаружено, что квазигармонические пульсации потока естественным образом развиваются при увеличении магнитного поля в случае невозмущенного течения в канале.

При относительно низких числах Рейнольдса (рис. 7) воздействие завихрителя выражено слабо. Теплоотдача и интенсивность температурных пульсаций изменились незначительно. Основная тенденция – наблюдается частичное подавление МКП. Спектры температурных пульсаций показывают, что основной процесс естественных пульсаций потока не изменяется под воздействием завихрителя. Нет устойчивых признаков образования уединенных частот, соответствующих изо-термическому случаю при $Ha = 1000$.

С увеличением расхода (рис. 8) эффект вихреобразования начального потока увеличивается. Генерируемые теперь вихри не только подавляют развитие крупномасштабных колебаний температуры, но и приводят к увеличению теплоотдачи, восстанавливая ее до значений, близких к турбулентным. Магнито-конвективные колебания и генерируемые вихри имеют частоты, различающиеся на порядок. Более высокая частота генерируемых вихрей связана с меньшими размерами каждого вихря и, следовательно, меньшей амплитудой, что является положительным изменением с инженерной точки зрения.

Дальнейшее увеличение расхода (рис. 9) приводит к полному доминированию генерируемых вихрей. МКП в этом случае не возникают (поскольку длины канала и скорости нагрева недостаточно для их порождения), а при невозмущенном течении колебания температуры почти полностью подавляются при $Ha = 750$. Возмущенное течение в этих условиях демонстрирует иное поведение: пульсации потока образуют пик в спектрах, в то же время их влияние приводит к увеличению теплоотдачи. Число Нуссельта увеличивается почти в два раза в области влияния сильных магнитных полей.

Данные по всем исследованным режимам течения систематизированы в виде распределений Nu/Nu_T и σ^* по критерию Стюарта и представлены на рис. 10. Число Нуссельта уменьшается вплоть до $St \sim 2$, достигая минимума $\sim 0.6Nu_T$ (рис. 10а). Далее по мере увеличения магнитного поля характеристики теплообмена меняются в зависимости от наличия завихрителя. Без влияния завихрителя числа Нуссельта либо сохраняются примерно на том же уровне с небольшим увеличением (связанным с дальнейшим уплотнением поля скорости под влиянием магнитного поля), либо значительно возрастают с развитием МКП ($Re \times 10^3$).

Наличие завихрителя при всех $St > 2$ приводит к интенсификации теплообмена. При этом повышение наблюдалось даже при низких числах Рейнольдса ($Re \times 10^3$), когда возникают сильные МКП.

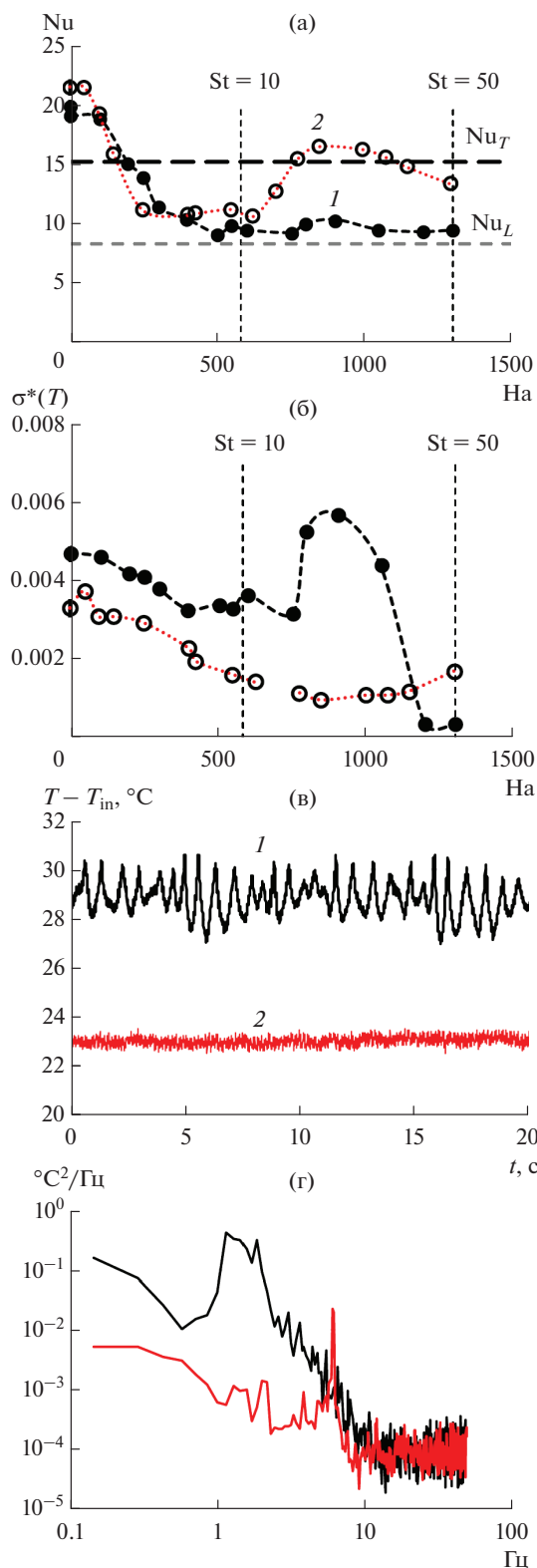


Рис. 8. Зависимости числа Нуссельта (а), (б) безразмерной интенсивности температурных пульсаций от числа Гартмана, а также (в) температурные осциллограммы при $Ha = 1000$ и их спектры (г) при $Re = 34 \times 10^3$, $Gr = 7 \times 10^8$, $x/a = 80$: 1 – без завихрителя, 2 – с завихрителем.

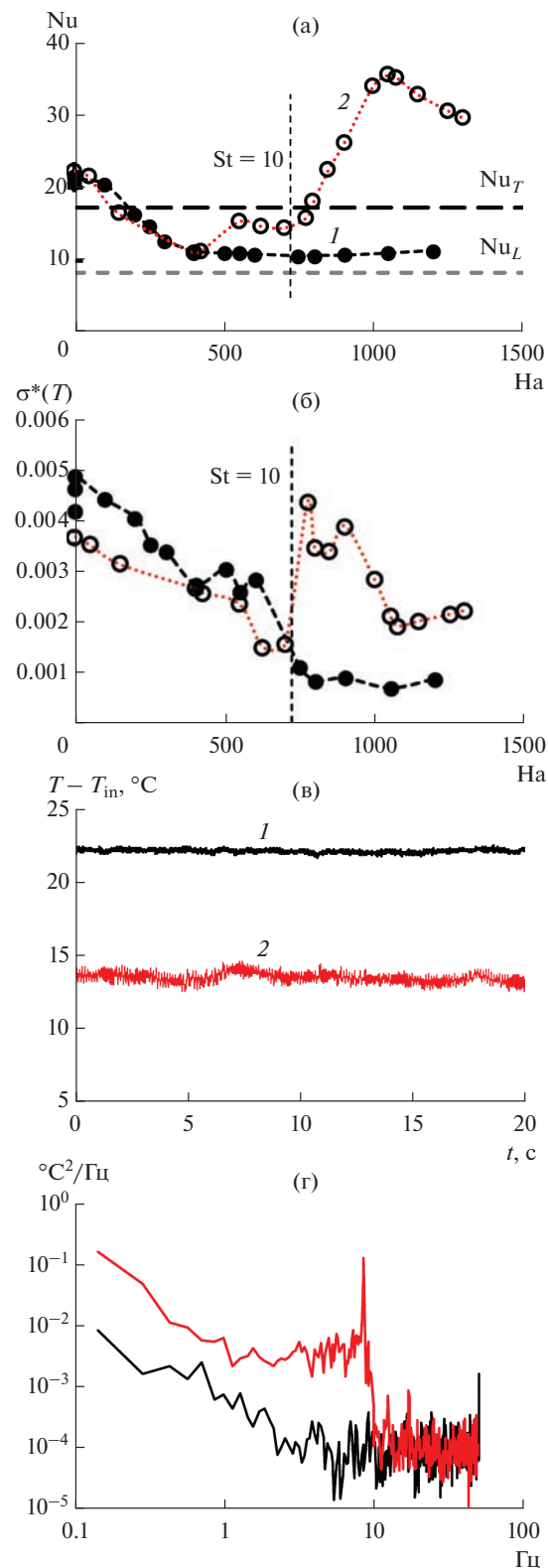


Рис. 9. Зависимости числа Нуссельта (а), (б) безразмерной интенсивности температурных пульсаций от числа Гартмана, а также (в) температурные осциллограммы при $Ha = 1000$ и их спектры (г) при $Re = 52 \times 10^3$, $Gr = 7 \times 10^8$, $x/a = 80$: 1 – без завихрителя, 2 – с завихрителем.

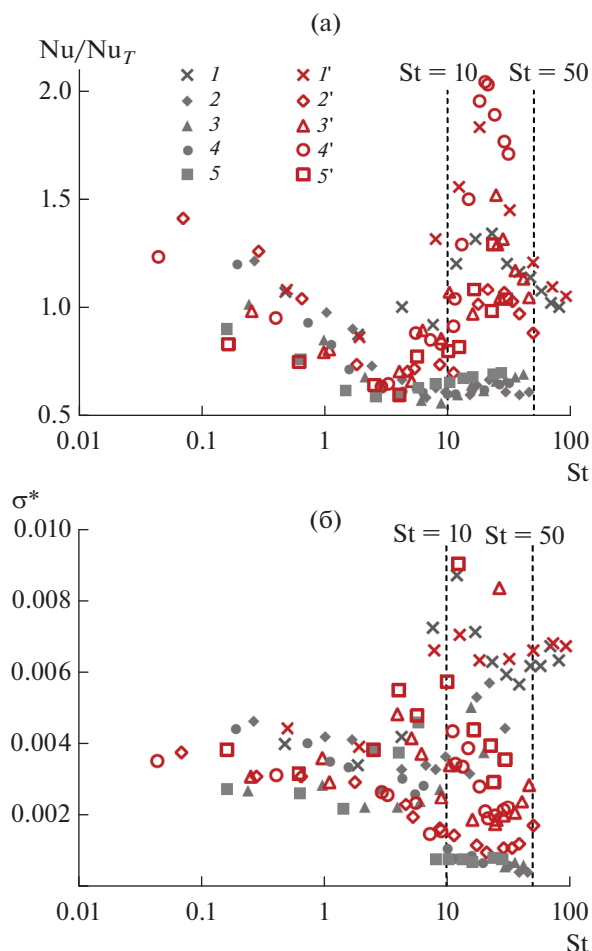


Рис. 10. Изменения относительной теплоотдачи (Nu/Nu_T) (а) и безразмерной интенсивности температурных пульсаций (б) в зависимости от числа Стюарта (St) при различных числах Рейнольдса: 1, 1' – 20×10^3 , 2, 2' – 34×10^3 , 3, 3' – 40×10^3 , 4, 4' – 52×10^3 , 5, 5' – 60×10^3 ; штрих – данные, полученные с завихрителем.

Увеличение теплоотдачи происходит в диапазоне $2 < St < 100$ с ярко выраженным пиком при St , что представляется оптимальным для вихреобразования в наблюдаемой конфигурации как в случае естественно развивающихся структур, так и в случае специально генерируемых.

Данные об интенсивности температурных пульсаций (рис. 10б) не имеют такой однозначной интерпретации по числу Стюарта St в отношении как влияния завихрителей, так и возникновения МКП при малых числах Рейнольдса. Как правило, при $Re > 40 \times 10^3$ (число Ричардсона $Ri < 0.4$) наличие завихрителей приводит к увеличению интенсивности пульсаций, так как исходный поток стабилизируется магнитным полем. В то время как при $Re < 40 \times 10^3$ ($Ri > 0.4$) завихрителем

несколько уменьшаются пульсации, заменяя первоначально развивающиеся МКП специально сгенерированными вихрями меньшего размера.

ОБСУЖДЕНИЕ

Закрутка потока при помощи продольных к магниту стержней продемонстрировала положительное влияние на теплообмен в экспериментально изученных режимах течения. Даже если генерируемые вихри подавлялись еще до исследуемого поперечного сечения, влияние завихрителя привело к уменьшению генерации естественно возникающих МКП.

Вихреобразующие объекты являются мощным инструментом для управления МКП, независимым от конфигурации канала и направления силы тяжести. Конечно, описанное относится только к случаю магнитного поля, силовые линии которого направлены поперечно по отношению к основному потоку и направлены в поперечном сечении прямоугольного канала вдоль его широкой стороны. Известно, что односторонний нагрев приводит к гораздо более интенсивным пульсациям в потоке. Следовательно, влияние асимметрии нагрева должно быть изучено дополнительно, чтобы доказать способность развившихся вихрей прерывать естественное формирование МКП.

Проведенные эксперименты показали оптимальные характеристики генерации вихрей с точки зрения параметра Стюарта по отношению к конкретной рассматриваемой конфигурации вихреобразующего объекта. Другие конфигурации вихреобразователей – различные формы, геометрические размеры и количество основных элементов, ориентация и положение по отношению к основным параметрам – должны быть проверены экспериментально. В первую очередь это касается препятствий призматической формы, поскольку в численных исследованиях они отмечаются как наиболее эффективные [12].

Согласно работе [7], интенсификация теплообмена на расстоянии $25a$ может составлять до 50%. Согласно [8], падение давления из-за влияния вихреобразующих объектов может увеличиваться вдвое. В настоящих экспериментах измерения перепада давления не осуществлялось. Прямое количественное сравнение с [8] выполнить невозможно, поскольку не соотносятся режимные параметры исследований.

Измерение падения давления в системе с установленными вихреобразующими объектами является важной задачей, не изученной в данной работе. Внезапные сужения и расширения потоков, которые неизбежно присутствуют в системах с установленными в потоке объектами, существенно влияют на потери давления. Перепад давления является ключевой проблемой при использовании жидких металлов в термоядерных установках

[24]. Таким образом, преждевременно делать окончательный вывод относительно эффективности применения завихрителей для интенсификации МГД-потока.

Одним из ключевых результатов выполненной работы является обнаруженная возможность пассивного управления характеристиками потока на больших расстояниях от источника начального возмущения. В качестве дополнительного материала представлены данные предварительного численного моделирования, выполненного в двумерной постановке способом, описанным в [3]. Геометрия вихреобразующего объекта не моделировалась, и для достижения сходства в таком случае входной поток задается как потоки через два зазора, образованные пространствами между вихреобразующим объектом и стенками канала, геометрически аналогичные экспериментально изученному вихреобразующему объекту. Численные результаты приведены в Приложении. Численное моделирование независимо подтверждает способность исследуемой вихреобразующей системы генерировать “долгоживущие” возмущения. Ключевые особенности потока, обнаруженные в изотермическом эксперименте, такие как осредненная по времени кривизна профиля скорости, хорошо соответствуют экспериментальным результатам.

Полученный результат важен как с практической, так и с научной точек зрения. Возможность пассивного воздействия на МГД-поток на существенных длинах канала непосредственно связана с практическими задачами, направленными на увеличение или подавление переноса массы и тепла, что считается важным в промышленных системах. Конкретные параметры квазидвумерного изотермического течения интересны для фундаментальных вопросов исследования квазидвумерной МГД-турбулентности, ограниченной стенками. Экспериментальные данные могут быть полезны для построения корректных моделей турбулентности, тем самым упрощая численный анализ в случае сложной геометрии течения, что опять же актуально для промышленного применения.

В качестве возможных перспектив развития будущих исследований необходимо упомянуть несколько важных моментов. Прежде всего, исследования нужно продолжать с привлечением основного внимания к механизмам теплопередачи, взаимодействующим (или подверженным влиянию) с крупными квазидвумерными структурами из-за использования вихреобразующих объектов (завихрителей). На этом этапе возможно исследование завихрителей различных размеров в части их влияния на формирование специфических режимов течения, анизотропию потока и колебания температуры. Также обнаруженные явления необходимо дополнительно исследовать с помощью численного моделирования, выполняе-

мого с более высоким разрешением, охватывая более широкий диапазон режимов течения. Это позволило бы оценить параметры потока и свойства сильно анизотропных состояний МГД-течения в случае чисел Гартмана порядка 5000, ожидаемых в проектируемых проточных частях систем охлаждения термоядерных установок с жидкометаллическим теплоносителем. Наконец, экспериментальные исследования рекомендуется выполнять с применением улучшенных зондовых методик, способных обеспечить гораздо более высокое пространственное разрешение, что особенно важно при измерениях в пристеночной области потока. Таким образом, как экспериментальные, так и численные результаты могут быть сопоставлены по всему поперечному сечению канала, и это также может служить дополнительной взаимной проверкой обоих подходов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспериментальные исследования показали, что с помощью геометрически простых устройств, встраиваемых на входе в исследуемый канал, возможно эффективное управление МГД-потоком жидкого металла. Применение таких устройств в практике модельных экспериментов не вызывает трудностей, связанных с конструктивной частью, что выглядит оптимистично для их применения в реальных установках. Формированием входного потока можно генерировать устойчивые возмущения с помощью стержня, ось которого направлена вдоль линий индукции магнитного поля. Показано, что оптимум генерации возмущений, определяемый интенсивностью пульсаций скорости, регулируется числом Стюарта. Установлено, что оптимальным является диапазон чисел Стюарта от 20 до 40, определяемых с использованием двойной ширины канала в качестве характерного размера. В наблюдаемых режимах потока генерируемые вихри существовали на длине до 25 калибров канала, будучи наиболее сильными при более высоких скоростях потока.

Порожденные двумерные вихри существенно меняют структуру потока. Наблюдаемое течение в канале с вихреобразователем приводит к развитию профиля скорости, теоретически предсказанного Хименесом в 1990 г. [19] для двумерной турбулентности.

В случае смешанной конвекции генерируемые вихревые структуры могут эффективно изменять естественно возникающие магнито-конвективные пульсации потока, уменьшая амплитуду колебаний температуры или полностью подавляя низкочастотные самопроизвольные срывы. Экспериментально подтверждено, что специально генерируемые двумерные возмущения способны су-

щественно усиливать теплоотдачу. При определенных соотношениях режимных параметров теплоотдача оказывается вдвое более эффективной по сравнению с чисто турбулентным случаем, что представляет интерес для практического применения даже вне контекста подавления естественных колебаний потока при высокой тепловой нагрузке и сильном влиянии магнитного поля.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Достоверность экспериментальных данных подтверждается результатами предварительного расчета методом прямого численного моделирования профилей скоростей при различных Re (рис. 11, 12). Эквивалентные числа Рейнольдса, получен-

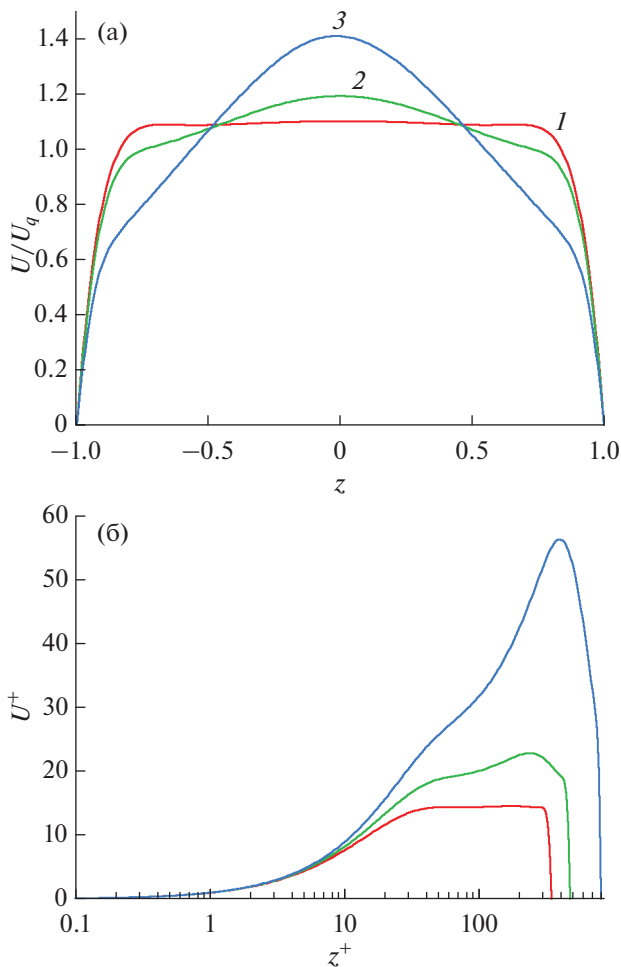


Рис. 11. Результаты расчета профилей скорости $U(z)$ при $Na = 1300$ и $Re = 9 \times 10^3$ (1), 18×10^3 (2), 63×10^3 (3), представленные для $y = 0$ и $x = 99a$ (как в эксперименте) и осредненные на 20 конвективных единицах времени для полностью развитого течения; профили скорости $U(z)$ и их модификация из-за воздействия поперечного магнитного поля B_y , отнесенные к среднерасходной (а) и динамической скоростям (б).

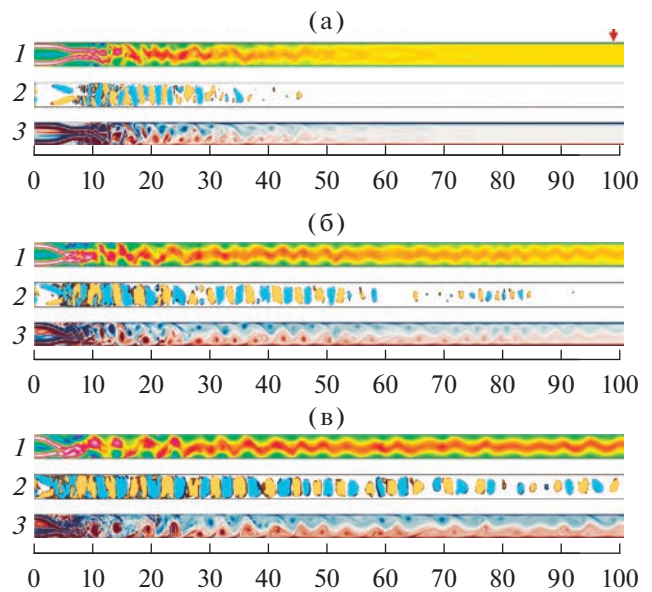


Рис. 12. Результаты расчета при $Na = 1300$ и $Re = 9 \times 10^3$ (а), 18×10^3 (б), 63×10^3 (в) в канале длиной $L_x = 32\pi$; изолинии профиля скорости потока u_x (1), изоповерхности продольной скорости $u_z = \pm 0.1$ (2), поперечная составляющая завихренности ω_y (3); красная метка — исследуемое сечение $x = 99a$; масштаб вдоль оси x увеличен в 2 раза.

ные в расчете и пересчитанные по погранслою $Re_\tau = u_\tau a / \nu$ имеют значения 170 ($Re = 9 \times 10^3$), 235 ($Re = 18 \times 10^3$) и 400 ($Re = 63 \times 10^3$) для случая на рис. 11. На рис. 12 представлена картина мгновенных полностью развитых состояний потока после 100 конвективных единиц времени развития в плоскости (x, z) центрального сечения $y = 0$. Постоянное магнитное поле B_y , ортогонально плоскости рисунка.

Сравнивая рис. 4, 11а, можно отметить, что численные значения соответствующих профилей, полученные экспериментально и при численном моделировании, отличаются не более чем на 4–5%. Этот факт дает почву для более глубокого изучения данного типа течения, включая процессы переноса, с использованием численного моделирования. Это позволяет изучать, например, характеристики и структуру потока непосредственно вблизи стенки, что безусловно показательно в контексте влияния на процессы переноса и крайне сложно организовать в эксперименте.

Авторы выражают благодарность за неоценимую помощь в организации работы профессору В.Г. Свиридову (1946–2019).

Работа выполнена при поддержке гранта 20-69-46067 Российского научного фонда, постановка экспериментальной программы поддержки-

валась в 2018–2020 гг. в рамках российско-германского сотрудничества по грантам РФФИ НННОа 18-508-12005 и DFG KR. 4445/2-1.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Krasnov D., Zikanov O., Schumacher J., Boeck T.* Magnetohydrodynamic Turbulence in a Channel with Spanwise Magnetic Field // *Phys. Fluids*. 2008. V. 20. № 9. 095105.
2. *Zikanov O., Belyaev I., Listratov Y., Frick P., Razuvanov N., Sviridov V.* Mixed Convection in Pipe and Duct Flows With Strong Magnetic Fields // *Appl. Mech. Rev.* 2021. V. 73. № 1. 010801.
3. *Belyaev I., Krasnov D., Kolesnikov Y., Biryukov D., Chernysh D., Zikanov O., Listratov Y.* Effects of Symmetry on Magnetohydrodynamic Mixed Convection Flow in a Vertical Duct // *Phys. Fluids*. 2020. V. 32. № 9. 094106.
4. *Gad-el Hak M.* Flow Control: Passive, Active, and Reactive Flow Management. Cambridge: University Press, 2007.
5. *Andreev O., Kolesnikov Y.* Experimental Flow Around a Conducting Cylinder in an Axial Homogeneous Magnetic Field // *Magnetohydrodynamics*. 2007. V. 34. P. 286.
6. *Mück B., Günther C., Müller U., Bühler L.* Three-dimensional MHD Flows in Rectangular Ducts with Internal Obstacles // *J. Fluid Mech.* 2000. V. 418. P. 265.
7. *Hussam W.K., Thompson M.C., Sheard G.J.* Dynamics and Heat Transfer in a Quasi-two-dimensional MHD Flow Past a Circular Cylinder in a Duct at High Hartmann Number // *Int. J. Heat Mass Transfer*. 2011. V. 54. № 5–6. P. 1091.
8. *Hussam W.K., Sheard G.J.* Heat Transfer in a High Hartmann Number MHD Duct Flow with a Circular Cylinder Placed near the Heated Side-wall // *Int. J. Heat Mass Transfer*. 2013. V. 67. P. 944.
9. *Hamid A.H., Hussam W.K., Pothérat A., Sheard G.J.* Spatial Evolution of a Quasi-two-dimensional Kármán Vortex Street Subjected to a Strong Uniform Magnetic Field // *Phys. Fluids*. 2015. V. 27. № 5. 053602.
10. *Farahi Shahri M., Hossein Nezhad A.* Quasi-two-dimensional Case Studies of MHD Flow and Heat Transfer Behind a Square Cylinder in a Duct // *Int. J. Appl. Electromagnetics Mechanics*. 2015. V. 49. № 1. P. 123.
11. *Cassells O.G., Hussam W.K., Sheard G.J.* Heat Transfer Enhancement Using Rectangular Vortex Promoters in Confined Quasi-two-dimensional Magnetohydrodynamic Flows // *Int. J. Heat Mass Transfer*. 2016. V. 93. P. 186.
12. *Hussam W.K., Hamid A.H., Ng Z.Y., Sheard G.J.* Effect of Vortex Promoter Shape on Heat Transfer in MHD Duct Flow with Axial Magnetic Field // *Int. J. Thermal Sci.* 2018. V. 134. P. 453.
13. *Kirillov I., Obukhov D., Genin L., Sviridov V., Razuvanov N., Batenin V., Belyaev I., Poddubnyi I., Pyatnitskaya N.Y.* Buoyancy Effects in Vertical Rectangular Duct with Coplanar Magnetic Field and Single Sided Heat Load // *Fusion Engineering and Design*. 2016. V. 104. P. 1.
14. *Chernysh D.Y., Krasnov D., Kolesnikov Y.B., Belyaev I.* Swirling to Improve Heat Transfer in the MHD Flow of Liquid Metal in a Duct // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2021. V. 2088. 012007.
15. *Беляев И.А., Свиридов В.Г., Батенин В.М., Бирюков Д.А., Никитина И.С., Манча С.П., Пятницкая Н.Ю., Разуванов Н.Г., Свиридов Е.В.* Экспериментальный стенд для исследований теплообмена перспективных теплоносителей ядерной энергетики // *Теплоэнергетика*. 2017. Т. 64. № 11. С. 66.
16. *Bobkov V., Fokin L., Petrov E., Popov V., Rumiantsev V., Savvatimsky A.* Thermophysical Properties of Materials for Nuclear Engineering: A Tutorial and Collection of Data. Vienna: IAEA, 2008.
17. *Теплофизические свойства материалов ядерной техники* / Под ред. П.Л. Кириллова. 2-е изд., испр. и доп. М.: ИздАТ, 2007. 194 с.
18. *Razuvanov N., Frick P., Belyaev I., Sviridov V.* Experimental Study of Liquid Metal Heat Transfer in a Vertical Duct Affected by Coplanar Magnetic Field: Downward Flow // *Int. J. Heat Mass Transfer*. 2019. V. 143. P. 118529.
19. *Jiménez J.* Transition to Turbulence in Two-dimensional Poiseuille Flow // *J. Fluid Mech.* 1990. V. 218. P. 265.
20. *Votsish A., Kolesnikov Y.* Anomalous Transfer of Energy in a Shear MHD Flow with Two-dimensional Turbulence // *Magnitnaia Gidrodinamika*. 1976. V. 12. № 4. P. 47.
21. *Roshko A.* On the Development of Turbulent Wakes from Vortex Streets. Report 1191. California: Caltech, 1952. 25 p.
22. *Kolesnikov Y., Tsinober A.* Two-dimensional Turbulent Flow Behind a Circular Cylinder // *Magnetohydrodynamics*. 1972. V. 8. № 3. P. 300.
23. *Генин Л.Г., Свиридов В.Г.* Гидродинамика и теплообмен МГД-течений в каналах. М.: Изд-во “МЭИ”, 2001. 199 с.
24. *Smolentsev S.* Physical Background, Computations, and Practical Issues of the Magnetohydrodynamic Pressure Drop in a Fusion Liquid Metal Blanket // *Fluids*. 2021. V. 6. № 3. P. 110.

УДК 536.24, 662.997

ИЗГОТОВЛЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК НОВОЙ КОНСТРУКЦИИ ПАССИВНОГО СОЛНЕЧНОГО ВОДОНАГРЕВАТЕЛЯ ТЕРМОСИФОННОГО ТИПА

© 2023 г. М. U. Farooq¹, *, М. I. Hussain², М. Y. Naz³, **, М. M. Makhlouf⁴, ***,
S. Shukrullah³, A. Ghaffar³, K. Ibrahim⁵, N. M. AbdEl-Salam⁶

¹State Key Laboratory of Chemical Engineering,
East China University of Science and Technology, China

²Institute of Powder Metallurgy and Advanced Ceramics, School of Material Science
and Engineering, University of Science and Technology Beijing, China

³Department of Physics, University of Agriculture, Pakistan

⁴Department of Sciences and Technology, Ranyah University College, Taif University, Saudi Arabia

⁵College of Engineering, Muzahimiyah Branch, King Saud University, Saudi Arabia

⁶Arriyadh Community College, King Saud University, Saudi Arabia

*E-mail: ufbajwa@yahoo.com

**E-mail: yasin306@uaf.edu.pk

***E-mail: m.makhlouf@tu.edu.sa

Поступила в редакцию 05.01.2017 г.

После доработки 02.06.2021 г.

Принята к публикации 02.06.2021 г.

В работе исследуется пример пассивной системы солнечного отопления, в которой нагревается вода для бытовых нужд с помощью прямой солнечной энергии. Разработана пассивная термосифонная система отопления, изготовлена и испытана для исследования тепловых характеристик в полувлажном и четырехсезонном климате (район Фейсалабад, Пакистан). В основу конструкции системы отопления положены двухступенчатый накопитель и термосифон с естественной циркуляцией воды. Возможность повышения тепловых характеристик термосифонных систем исследовалась с использованием полукруглого стального коллектора (покрытого медным водонесущим змеевиком), двухступенчатого накопителя воды и боковых зеркальных отражателей. Эксперименты проводились с апреля по июль 2014 г., когда температура окружающей среды составляла примерно от 30 до 45°C. В течение указанного времени температура холодной воды оставалась в пределах от 18 до 25°C. Максимальная температура воды при работе системы в режиме перемежающегося потока оставалась в пределах 48–88°C. В режиме непрерывного потока температура горячей воды держалась между 46 и 78°C. Представленная система позволяет получить воду с температурой как 45–50°C, которая считается пригодной для бытового использования, так и выше.

DOI: 10.31857/S0040364423030079

ВВЕДЕНИЕ

Существование жизни на Земле полностью зависит от воды и энергии. За последние несколько десятилетий резко возрос спрос на возобновляемые источники энергии [1]. Солнечная энергия является экологически чистым источником возобновляемой энергии, которая продвигается как наиболее перспективная альтернатива традиционным источникам энергии [1–3]. Преобразование солнечного излучения в тепло является простейшим и естественным применением солнечной энергии. Проектирование и разработка первого солнечного водонагревателя для максимального использования тепловой энергии солнечного излучения стали большим прорывом, который по-

мог сохранить баланс между спросом на энергию и предложением [4, 5].

До сих пор нагрев воды с использованием дешевой солнечной энергии оставался предметом исследований. Для небольших семей солнечные водонагреватели разработаны как закрытые и открытые системы отопления и подразделяются на две группы по типу конвекции: естественной и принудительной [6, 7]. Термосифонные системы имеют много преимуществ перед системами с принудительной циркуляцией благодаря высокой надежности, длительному сроку службы, самоходной подаче воды и др. [8–10]. Хотя в литературе описано много попыток разработки модели термосифонных солнечных водонагревателей [11], в боль-

шинстве из них не удалось достичь высокой эффективности нагрева.

Концентрирующий солнечный коллектор на основе линейной линзы Френеля разработан для повышения эффективности солнечных коллекторов по сравнению с обычно используемыми трубчатыми коллекторами [12]. Для проведения анализа в [13] представлены численные и экспериментальные модели коллекторов солнечных тарелок. Результаты показывают, что эффективность теплопередачи тепловых коллекторов хорошо согласуется с экспериментальными данными. Зеркально-симметричная плоскость коллектора вводилась под нужным углом на нижний отражатель для тестирования и проверки ограничений модели в стационарных и квазидинамических условиях [14].

Данные результаты показывают, что эффективность тепловых коллекторов в оптимальном положении как неотъемлемых элементов современных зданий можно повысить за счет использования отражателей солнечного излучения, особенно в декабре и июне [2], что, как ожидается, сократит период демонтажа. В соответствии с данной концепцией также исследованы конфигурация резервуара для хранения горячей воды и влияние объема на эффективность [15]. Несомненно, эти результаты позволяют предположить, что производительность и эффективность солнечного водонагревателя можно повысить за счет увеличения площади резервуара для хранения горячей воды. Однако, несмотря на все эти многообещающие достижения, потребность в разработке эффективных моделей отопления все еще существует. Разные исследователи выявили нестыкующиеся результаты, что связано главным образом с изменением местности и местных атмосферных условий.

Ключевыми параметрами солнечных водонагревателей являются изоляция накопителя и производительность коллектора. Высокоэффективный коллектор и хорошо изолированное хранилище являются признаками прибыльности систем солнечного отопления в течение всего года, особенно в странах с прохладными днями и обильным солнечным светом. Пакистан — одна из тех стран, где большую часть дней в году есть много солнечного света. В районе Фейсалабад в Пакистане полусухой четырехсезонный климат с температурами от очень низких до высоких и почти 320 солнечных дней в году. Жители Фейсалабада используют плоские солнечные коллекторы, обычно изготовленные из металлических листов с высокой теплопроводностью, помещенные в изолированный короб. Для максимального поглощения лучистой энергии поглощающая поверхность покрывается черным (химически обработанным) хромом для повышения производительности коллектора [16, 17]. Однако такие модели не работают в самые малосолнечные дни зимнего сезона,

когда люди остро нуждаются в горячей воде. Низкая производительность таких моделей коллекторов объясняется геометрическим несовершенством солнечных водонагревательных систем.

СИСТЕМЫ ТЕРМОСИФОНОВ

По конструкции солнечные водонагреватели подразделяются на активные и пассивные. В неактивных системах для циркуляции воды необходим электрический насос, клапаны и контроллеры, тогда как в пассивных системах не требуется внешней откачки для циркуляции воды. Обычно системы прямого нагрева сложны, дороги, чувствительны к условиям замерзания и могут нагревать воду только до умеренных температур в диапазоне от 50 до 60°C [18, 19]. Тем не менее для преодоления проблем с замерзанием можно внести лишь несколько изменений в конструкцию. В пассивных системах солнечного отопления передача тепла происходит за счет конвекции. Циркуляция воды осуществляется посредством естественного процесса, а не принудительной циркуляции. Такие системы дешевы, просты в использовании и гибки по сравнению с активными системами.

Пассивные системы подразделяются на интегрированные коллекторно-аккумулирующие и термосифонные системы. В интегрированных коллекторно-аккумулирующих обогревателях бак для хранения воды работает так же, как солнечный коллектор. Однако такие обогреватели склонны к тепловым потерям. Эти потери велики в ночное время. Термосифонные системы, как правило, являются более надежными из пассивных систем отопления из-за простоты установки, низких затрат на техническое обслуживание и длительного срока службы [19]. Для анализа характеристик термосифонных солнечных водонагревательных систем уже проведено множество экспериментальных и аналитических исследований на различных пассивных системах [5, 17–19]. В данной работе представлен пример термосифонной системы отопления, основанной на двухступенчатом хранении и естественной термосифонной циркуляции воды. Изготовлена пассивная термосифонная система отопления, и протестированы ее тепловые характеристики при различных методах солнечной теплопередачи. Цель работы состояла в том, чтобы повысить эффективность нагрева термосифонной системы за счет использования круглого коллектора, двойных резервуаров для хранения и отражателей боковых зеркал.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДИКА

Изменение положения солнечного коллектора таким образом, чтобы он следовал за траекторией движения Солнца, называется “слежением” за Солнцем. Проектирование и эконо-

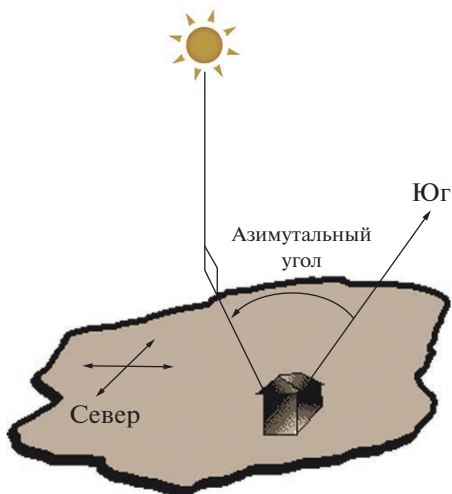


Рис. 1. Схема азимутального угла Солнца.

мическая оценка систем солнечного отопления во многом основаны на интенсивности солнечного излучения в любом месте. Прямая солнечная радиация и ориентация коллекторов рассчитываются по положению Солнца. Информацию о положении Солнца как функции времени, широты и угла наклона можно получить, исходя из основ солнечной геометрии, как показано на рис. 1.

Угол наклона постоянно меняется при вращении Земли вокруг Солнца и из-за наклона Земли вокруг своей оси вращения. Если бы Земля не имела наклона своей оси вращения, угол наклона был бы равен 0° . Однако Земля наклоняется на 23.45° , и соответствующее изменение угла наклона формулируется как [20]

$$\delta = 23.45^\circ \sin \left[(d - 80) \frac{360}{365} \right],$$

где δ — угол наклона, d — день года с 1 января ($d = 1$). Угол наклона равен 0° в дни равноденствия, положительный летом в северном полушарии и отрицательный зимой в северном полушарии. Азимутальный угол поверхности, который представляет собой горизонтальный угол между солнечными лучами и стенкой, можно использовать для расчета азимутального угла Солнца. Угловое расстояние между югом и проекцией луча зрения на Солнце на Земле называется азимутальным углом Солнца, который получается с помощью следующего уравнения:

$$\sin \Psi = \frac{\cos \delta \sin \tau}{\cos \beta},$$

где Ψ — азимутальный угол Солнца, τ — часовой угол, β — высота Солнца. Азимутальный угол поверхности равен нулю, если коллектор обращен на юг. В этом случае интенсивность Солнца на поверхности коллектора рассчитывается как [20, 21]:

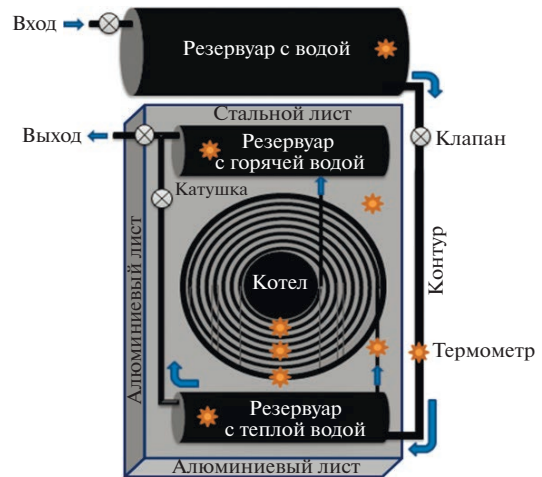


Рис. 2. Подобная схема пассивного термосифона с двухступенчатым хранением воды.

$$I = a e^{-b/\sin \beta} \cos \theta,$$

где a , b — параметры, зависящие от месяца [20, 22]. Интенсивность солнечной радиации зависит от времени суток, дня года, широты в пункте наблюдения и чистоты атмосферы. Земля совершает один полный оборот на 360° за 24 ч. За 1 ч она перемещается на $360^\circ/24 = 15^\circ$. Чтобы отражатели находились на одной линии с солнечными лучами, направление отражателя необходимо менять в зависимости от географического положения и времени года. Земля также влияет на угол благодаря своему суточному вращению на востоке по азимуту примерно 90° , тогда как в полдень она расположена по азимуту почти на 0° .

ИЗГОТОВЛЕНИЕ СИСТЕМЫ ТЕРМОСИФОНА

Пассивная термосифонная система отопления спроектирована и изготовлена с использованием доступных неспециальных материалов. Подробные характеристики конструкции системы приведены в табл. 1. Круглый котел помещен в герметичную коробку и покрыт спиральными полукруглыми медными трубками, соединенными поперек резервуаров с водой таким образом, чтобы образовать термосифонную систему, как показано на рис. 2. Внешняя коробка изготовлена из листа оргалита толщиной 2.5 см. Прямоугольный ящик имеет длину 2 м, ширину 1 м и высоту 0.5 м. Общий объем деревянного ящика составлял около 25 м^3 . Суммарная емкость цилиндрических баков в боксе составляла около 56.52 л, тогда как емкость внешнего бака около 729 л.

Зеркальные отражатели использовались на задней стороне верхних и нижних резервуаров для хранения внутри короба, чтобы фокусировать

Таблица 1. Материалы, используемые для изготовления пассивного термосифона

Деталь	Количество	Характеристики		
		длина, см	ширина, см	толщина, см
Лист стали	1	150	120	26 размеров
Лист стекла	1	150	120	0.5
Трубка медная	5	150	1.27 (диаметр)	—
Доска	2	150	120	—
Стекловолокно	4 кг	—	—	—
Железная подставка	1	—	—	—
Наклонная железная подставка	1	—	—	—
Резервуары для воды	3	—	—	—
Цифровой таймер	1	—	—	—
Ручной клапан	2	—	—	—
Сопло для пара	1	—	—	—
Односторонний клапан	1	—	—	—
Болты и гайки	50	—	—	—
Термометр	9	—	—	—
Силиконовый клей	2	—	—	—
Лист пеноизоляции	1	150	120	2.5
Круглый железный котел	1	—	30 (диаметр)	0.3
Черная краска	1/2 л	—	—	—
Гибкая трубка	1.25	150	—	1.27 (диаметр)
Резиновая трубка	1.25	300	—	1.27 (диаметр)
Ниппель для бочки	4	—	—	1.27 (диаметр)
Зеркала	4	—	—	—

солнечные лучи на резервуарах для воды. В основании короба использовался стальной отражатель для отражения солнечных лучей. В качестве поглотителя тепла использовался круглый стальной котел диаметром 30 см. Верхняя шероховатая поверхность котла окрашена в черный цвет, чтобы максимизировать поглощение излучения, а боковые стороны котла отполированы серебряным буфером для высокого отражения излучения. Медная труба длиной 150 см и внутренним диаметром 1.27 см использовалась для формирования спирального полукруглого кольца над железным котлом. Такое расположение помогло обеспечить максимальное воздействие солнечной радиации на воду, содержащуюся в трубах. Верхняя сторона спиральной медной трубы соединена с верхним резервуаром для хранения, а нижняя сторона — с нижним резервуаром для хранения в коробе. Медная труба и аккумулятор соединены внутри, образуя термосифон. Медная труба и аккумулятор также окрашены в черный цвет для максимального поглощения тепла.

Девять термометров использовались в разных местах для мониторинга пространственных температур, а именно температуры окружающей сре-

ды, основания, внутреннего пространства, верхнего резервуара, нижнего резервуара, полукруглого резервуара, температуры воды на входе в медную трубу и на выходе. Стеклопанель толщиной 5 мм помещена на деревянную раму и герметично закрыта, чтобы сделать систему водо- и пыленепроницаемой. Весь аппарат установлен на передвижной стальной тележке. Работоспособность установки протестирована в различных климатических условиях с апреля по июль на физическом факультете Сельскохозяйственного университета Фейсалабада, Пакистан.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В данной работе протестирована новая конфигурация пассивного солнечного водонагревателя с группой термосифонных эффектов, также известных как гравитационные тепловые трубы. Термосифон относится к методу пассивного теплообмена за счет естественной конвекции, при котором жидкость циркулирует в замкнутой сети без использования обычных насосов. Медные трубы для циркуляции воды выбирались для применения в реальных условиях. Естественный процесс цирку-

ляции воды использован для обеспечения низкой стоимости строительства солнечного водонагревателя. Работа обогревателя основана на принципе излучения черного тела и парниковом эффекте. Солнечные лучи попадают в круглый котел через воздухонепроницаемое стеклянное полотно, накрытое деревянным ящиком. Емкость, окрашенная в темный цвет, поглощает излучение, повышая температуру воды в подающем трубопроводе. Энергия прямого излучения Солнца использовалась для нагрева воды для бытовых нужд. Менее плотная горячая вода по спиральному медному трубопроводу перемещается вверх в верхний накопительный бак внутри короба. Соответствующие параметры процесса изучались в апреле, мае, июне и июле 2014 г. в различных погодных условиях Фейсалабада. Контроль за работой подогревателя осуществлялся каждый день с 8:00 до 18:00.

Представленная конструкция является примером термосифонной системы отопления, основанной на двухступенчатом хранении и естественной термосифонной циркуляции воды. Давление воды во внешнем резервуаре при полной емкости рассчитывалось как

$$P_T = \rho g W H_T, \quad (1)$$

где P_T — давление в резервуаре для холодной воды, g — ускорение свободного падения (м/с^2), ρ — плотность холодной воды (кг/м^3), W — вес, H_T — высота резервуара для воды из земли. Уравнение (1) показывает, что давление воды увеличивается линейно с высотой резервуара для воды. Это увеличение давления внутри бака вызывает увеличение расхода воды через плоский коллектор. Оно предопределяет улучшение производительности системы за счет более быстрой передачи тепла от коллектора к воде, тем самым минимизируя конвекцию и другие потери от коллектора.

Анализ напряжений резервуара для воды приведен в табл. 2. Коэффициент объемного расширения воды определялся при различных температурах. Цилиндрические резервуары для воды, изготовленные из мягкой стали, подвергались внутреннему давлению воды при разных температурах. Замечено, что коэффициент объемного расширения линейно увеличивается с ростом температуры воды. Давление обычно считается равномерно распределенным по внутренней поверхности резервуара. Если толщина стенки равна или меньше $1/20$ внутреннего диаметра, сосуд называется тонкостенным. В противном случае он считается толстостенным. В данной работе резервуары для воды изготовлены из мягкой стали с пределом текучести 176 МПа. Высота бака с холодной водой от земли составляла 0.9 м, высота бака с горячей водой — 0.2 м, толщина стенок бака — 0.5 мм, т.е. для тонкостенного цилиндра толщина стенки связана с диаметром следующим неравенством $t \leq (1/20)D_T$. Это соотношение справедливо как для резервуара с холод-

Таблица 2. Коэффициент объемного расширения воды при различных температурах

Температура, °C	$\gamma, 10^{-4} \text{ K}^{-1}$
5–10	0.53
10–20	1.5
20–40	3.02
40–60	4.58
60–80	5.87

ной водой, так и для резервуара с горячей водой. Следовательно, из-за давления воды на стенке цилиндрического резервуара возникает разрушающее напряжение, также известное как касательное или окружное напряжение. Тангенциальное напряжение для резервуара с холодной водой можно определить по соотношению

$$2\sigma_t H_T t - P_T D_T H_T, \quad \sigma_t = P_T D_T / 2t,$$

где σ_t — касательное напряжение для резервуара с холодной водой, t — толщина, D_T — диаметр. То же соотношение применимо и для касательного напряжения σ'_t в баке горячей воды. В данной конструкции нагревателя P_T , P'_T , σ_t , σ'_t равны примерно 8820 Н/м², 1910.6, 7.9 МПа и 3.8 соответственно. Поскольку резервуары для воды закрыты, учитывалось также продольное напряжение σ_l , обусловленное давлением воды на торцах резервуаров. В предположении равномерного распределения напряжений $\sigma_l = 9$ МПа.

С учетом рассмотренных выше параметров и типичных метеорологических данных города Фейсалабад исследованы характеристики нагрева воды данной конструкции. Среднемесячный поток солнечной радиации в зависимости от времени рассчитан на основе данных, предоставленных отделением сельскохозяйственной метеорологии кафедры физиологии сельскохозяйственных культур Фейсалабадского сельскохозяйственного университета (рис. 3). Эти данные показывают, что поток солнечной радиации был на пике с 12:00 до 13:00 почти каждый день в году. Ранним утром солнечный поток был почти нулевым до 6 ч утра, после этого он начал линейно увеличиваться со временем до 13:00, а затем уменьшался со временем и достигал нуля в 20:00. Эти данные показывают, что Солнце светит над городом Фейсалабад 14 ± 1 ч/день. Это делает данный город лучшим местом для установки солнечных батарей в течение всего года.

Эффективность солнечного коллектора описывает взаимосвязь между полезным приростом тепла и поступлением солнечной энергии. Полукруглый змеевик из медной трубы использовался для подачи воды и покрытия котла для теплооб-

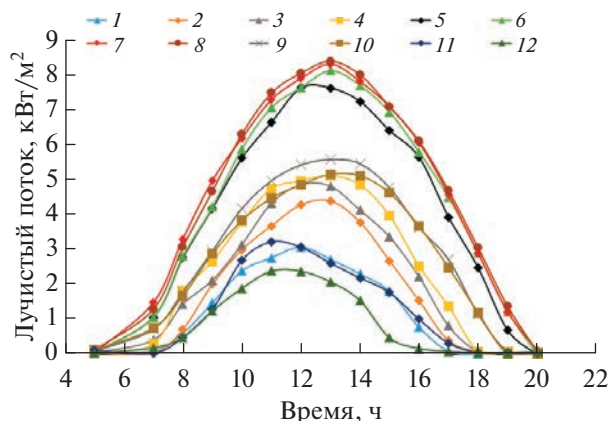


Рис. 3. Излучение Солнца во времени в городе Фейсалабад: 1–12 – январь–декабрь.

мена. Между баком и змеевиком происходил обмен тепла, в результате чего горячая вода поднималась в верхний резервуар внутри короба. Температура воды повышалась за счет тепловой энергии, поглощенной котлом. Необходимые параметры регистрировались через каждые 30 мин с помощью ртутных термометров. Температура в резервуаре для хранения воды зависела от потока нагретой воды из водонагревателя, вызванного плавучестью. При очень низких скоростях потока, вызванных плавучестью, вдоль резервуара вниз распространялся фронт нагретой воды. Скорость прогрессирования показала зависимость от силы термосифонного эффекта [21–23].

Эффективность данной конструкции солнечного водонагревателя проверялась путем отбора 1500 мл воды каждые 30 мин в дневное время, с 8:00 до 18:00. При работе в прерывистом режиме общий объем воды, отобранной за 10 ч, составил 30 л. Температура холодной воды сохранялась в пределах от 18 до 28°C в течение заявленного времени. На рис. 4 максимальная температура воды сохранялась в пределах от 48 до 88°C при температуре окружающей среды от 32 до 44°C [15–17, 23]. Сравнение температуры окружающей среды и температуры воды, нагретой солнечной энергией, по времени приведено на рис. 5. КПД солнечного водонагревателя с принудительной циркуляцией обычно остается в диапазоне от 50 до 60%, однако солнечный водонагреватель с естественной циркуляцией показывает меньший КПД, примерно в диапазоне от 34 до 38%. Вода при температуре от 45 до 50°C считается пригодной для бытового использования. Представленная конструкция легко достигает температур, даже превышающих те, которые считаются пригодными для бытового использования (рис. 4).

Также измерялась температура воды в непрерывном проточном режиме работы термосифонной системы, как показано на рис. 6. Расход воды

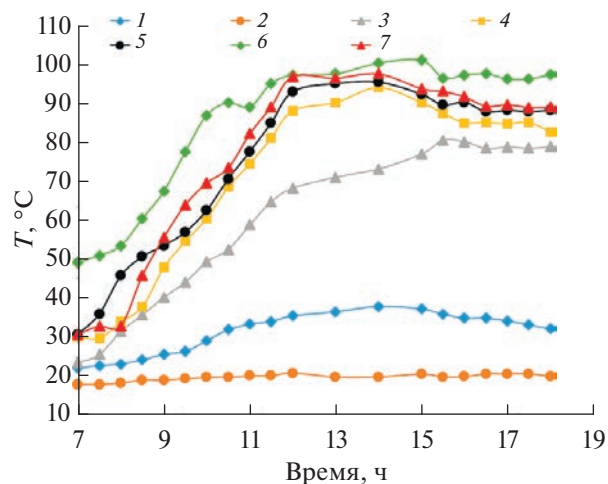


Рис. 4. Изменение температуры во времени в разных точках солнечного водонагревателя при прерывистом потоке воды: 1 – окружающая температура, 2 – холодная вода, 3 – горячая вода, 4 – нижний резервуар, 5 – верхний резервуар, 6 – котел, 7 – основание.

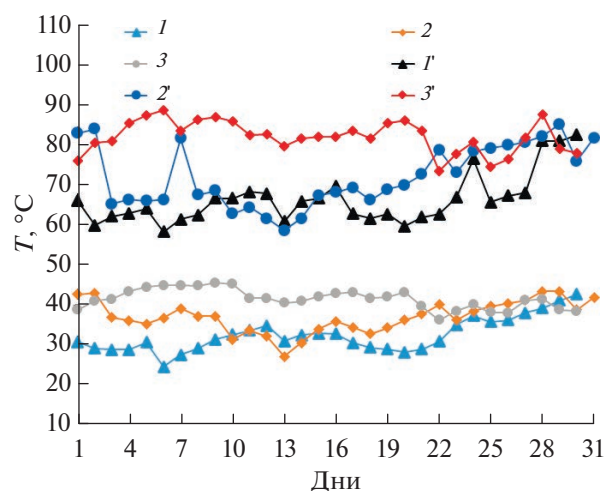


Рис. 5. Сравнение температур окружающей среды (1–3) и горячей воды (1'–3') во времени: 1, 1' – в апреле; 2, 2' – мае; 3, 3' – июне.

зафиксирован на уровне 10 л/ч. Максимальная температура 78°C достигалась, когда температура окружающей среды находилась в диапазоне от 36 до 43°C. Высокая тепловая мощность нагревателя объясняется шероховатостью и темнотой поверхности котла. Медные трубки, покрывающие котел, также способствовали максимальному преобразованию энергии в процессе нагрева [24, 25]. Большая часть лучистой энергии, падающей на котел, поглощалась его поверхностью. Отраженная часть лучистой энергии улавливалась медью, несущей воду. Герметичный короб со стеклянной крышкой также минимизировал потери тепла и излучения из деревянного короба.

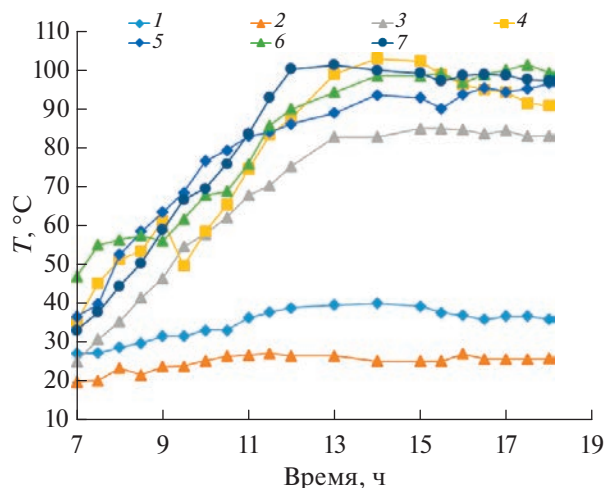


Рис. 6. Изменение температуры воды со временем в разных точках водонагревателя при непрерывном течении: 1 — окружающая температура, 2 — холодная вода, 3 — горячая вода, 4 — нижний резервуар, 5 — верхний резервуар, 6 — котел, 7 — основание.

Рабочие характеристики термосифонных солнечных водонагревателей также могут оказывать существенное влияние на эффективность системы, поскольку производительность системы зависит от расхода из коллектора, температуры пластины абсорбера и повышения температуры воды от входа до выхода [24, 25]. Солнечная система нагрева воды на основе листов и труб является более распространенным и подходящим методом нагрева воды для бытового использования [26].

Исследовалась эффективность двухпроходного листового и трубчатого солнечного водонагревателя с ребрами, прикрепленными с различным шагом. Кроме того, настоящие экспериментальные результаты определяют влияние количества воздухопроводов исходя из общего массового расхода. Проанализированные расчеты показали, что более высокая эффективность коллектора возможна за счет оптимизации конструкции и эксплуатационных параметров системы. В данной работе внесены значительные улучшения в конструкцию коллектора для повышения его производительности, а также увеличения энергопотребления.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изложены результаты проектирования, изготовления и исследования характеристик пассивного солнечного водонагревателя термосифонного типа. Механизм нагрева основан на двухступенчатом хранении и естественной термосифонной циркуляции воды. Эффективность теплового нагрева системы улучшена за счет использования коллектора с шероховатой внешней поверхностью, полукруглой медной крышки змеевика, двухступенчатого накопителя воды и боковых зеркал. Эк-

перименты проводились с апреля по июль 2014 г., когда температура окружающей среды составляла от 32 до 44°C. За заявленное время температура холодной воды сохранялась в пределах от 18 до 28°C. Максимальная температура воды, поддерживаемая системой в прерывистом режиме работы, оставалась в пределах от 48 до 88°C.

В режиме непрерывного потока температура горячей воды достигала от 46 до 78°C. Вода, хранящаяся при температуре от 45 до 50°C, считается пригодной для бытового использования. Однако исследование показало, что представленная конструкция может легко достигать температур, даже превышающих приемлемые для бытового использования воды. Высокая эффективность представленной конструкции нагревателя объясняется шероховатой и темной поверхностью котла и полукруглой формой змеевика. Медный змеевик также обеспечил максимальное преобразование энергии в процессе нагрева. Большая часть лучистой энергии, падающей на котел, поглощалась его окрашенной в черный цвет поверхностью. Отраженная часть лучистой энергии улавливалась медью, несущей воду. Герметичный короб со стеклянной крышкой также помог минимизировать потери тепла и излучения.

Авторы выражают искреннюю признательность за финансовую поддержку Таифскому исследовательскому университету, номер проекта TURSP-2020/165 (Таифский университет, Таиф, Саудовская Аравия).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ziapour B.M., Aghamiri A. Simulation of an Enhanced Integrated. Collector—Storage Solar Water Heater // *Energy Conv. Manag.* 2014. V. 78. P. 193.
2. Kostić L.T., Pavlović Z.T. Optimal Position of Flat Plate Reflectors of Solar Thermal Collector // *Energy Build.* 2012. V. 45. P. 161.
3. Taheri Y., Ziapour B.M., Alimardani K. Study of an Efficient Compact Solar Water Heater // *Energy Conv. Manag.* 2013. V. 70. P. 187.
4. Ong K.S. A Finite-difference Method to Evaluate the Thermal Performance of a Solar Water Heater // *Solar Energy.* 1974. V. 16. P. 137.
5. Kumaresan G., Sridhar R., Velraj R. Performance Studies of a Solar Parabolic Trough Collector with a Thermal Energy Storage System // *Energy.* 2012. V. 47. № 1. P. 395.
6. Hobson P.A., Norton B. Verified Accurate Performance Simulation Model of Direct Thermosyphon Solar Energy Water Heaters // *Solar Energy Eng.* 1988. V. 110. № 4. P. 282.
7. Huang B.J., Hsieh C.T. A Simulation Method for Solar Thermosyphon Collector // *Solar Energy.* 1985. V. 35. № 1. P. 31.
8. Kalogirou S. Thermal Performance, Economic, and Environmental Life Cycle Analysis of Thermosyphon Solar Water Heaters // *Solar Energy.* 2009. V. 83. № 1. P. 39.

9. Norton B., Edmonds J.E.J., Kovelos E. Dynamic Simulation of Indirect Thermosiphon Solar Energy Heaters // *Renew. Energy*. 1992. V. 3. P. 283.
10. Prapas D.E., Psimmenos S., Sotiropoulos B.A. On the Beneficial Interconnection of the Thermosiphon DHW Solar Systems // *Appl. Energy*. 1994. V. 49. P. 47.
11. Kalogirou S.A., Panteliou S. Thermosiphon Solar Domestic Water Heating Systems: Long-term Performance Prediction Using Artificial Neural Networks // *Solar Energy*. 2000. V. 69. № 2. P. 163.
12. Zhai H., Dai Y.J., Wu J.Y., Wang R.Z., Zhang L.Y. Experimental Investigation and Analysis on a Concentrating Solar Collector Using Linear Fresnel Lens // *Energy Conv. Manag.* 2010. V. 51. № 1. P. 48.
13. Tao Y.B., He Y.L., Cui F.Q., Lin C.H. Numerical Study on Coupling Phase Change Heat Transfer Performance of Solar Dish Collector // *Solar Energy*. 2013. V. 90. P. 84.
14. Tanaka H. // *Energy Reports*. 2015. V. 1. P. 80.
15. Hasan A. Thermosiphon Solar Water Heaters: Effect of Storage Tank Volume and Configuration on Efficiency // *Energy Conv. Manag.* 1997. V. 38. № 9. P. 847.
16. Tang R., Cheng Y., Wu M., Li Z., Yu Y. Experimental and Modeling Studies on Thermosiphon Domestic Solar Water Heaters With Flat-plate Collectors at Clear Nights // *Energy Conv. Manag.* 2010. V. 51. № 12. P. 2548.
17. Sakhrieh A., Al-Ghandoor A. Experimental Investigation of the Performance of Five Types of Solar Collectors // *Energy Conv. Manag.* 2013. V. 65. P. 715.
18. Kumar R., Rosen M.A. Thermal Performance of Integrated Collector Storage Solar Water Heater with Corrugated Absorber Surface // *Appl. Therm. Eng.* 2010. V. 30. № 13. P. 1764.
19. Kalogirou S.A. Solar Thermal Collectors and Applications // *Progress Energy Comb. Sci.* 2004. V. 30. № 3. P. 231.
20. Saleh M.A., Kaseb S., El-Refaie M.F. Glass–Azimuth Modification to Reform Direct Solar Heat Gain // *Building and Environment*. 2004. V. 39. № 6. P. 653.
21. Budihardjo I., Morrison G.L. Performance of Water-in-glass Evacuated Tube Solar Water Heaters // *Solar Energy*. 2009. V. 83. № 1. P. 49.
22. Morrison G.L., Budihardjo I., Behnia M. Water-in-glass Evacuated Tube Solar Water Heaters // *Solar Energy*. 2004. V. 76. № 3. P. 135.
23. Huang J., Pu S., Gao W., Que Y. Experimental Investigation on Thermal Performance of Thermosiphon Flat-plate Solar Water Heater With a Mantle Heat Exchanger // *Energy*. 2010. V. 35. № 9. P. 3563.
24. Jaisankar S., Radhakrishnan T.K., Sheeba K.N. Experimental Studies on Heat Transfer and Friction Factor Characteristics of Forced Circulation Solar Water Heater System Fitted with Helical Twisted Tapes // *Solar Energy*. 2009. V. 83. № 11. P. 1943.
25. Jaisankar S., Radhakrishnan T.K., Sheeba K.N., Suresh S. Experimental Investigation of Heat Transfer and Friction Factor Characteristics of Thermosiphon Solar Water Heater System Fitted With Spacer at the Trailing Edge of Left–Right Twisted Tapes // *Energy Conv. Manag.* 2009. V. 50. № 10. P. 2638.
26. Ho C.D., Chen T.C. Collector Efficiency Improvement of Recyclic Double-pass Sheet-and-tube Solar Water Heaters with Internal Fins Attached // *Renew. Energy*. 2008. V. 33. № 4. P. 655.

УДК 536.71

УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ САПФИРА, КРЕМНЕЗЕМА, ПЕРИКЛАЗА И РУТИЛА

© 2023 г. И. В. Ломоносов*

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Россия

*E-mail: ivl143@icp.ac.ru

Поступило в редакцию 14.12.2022 г.

После доработки 11.05.2023 г.

Принято к публикации 11.05.2023 г.

Разработаны уравнения состояния сапфира, кремнезема, периклаза и рутила, применимые в широкой области давлений и плотностей. Приводятся результаты сопоставления с имеющимися данными, полученными при высоких давлениях в ударно-волновых экспериментах для кристаллических и пористых образцов.

DOI: 10.31857/S004036442303016X

ВВЕДЕНИЕ

Сапфир Al_2O_3 , кремнезем SiO_2 , периклаз MgO и рутил TiO_2 относятся к основным пороодообразующим оксидам. Эти материалы входят в состав веществ, слагающих мантию и кору Земли, планет и различных объектов Солнечной системы. Исследования фундаментальных вопросов образования и эволюции планет, комет и астероидов требуют знания уравнений состояния (УРС) вещества при высоких давлениях [1–4]. Несомненно, сюда также следует отнести проблемы астероидной опасности и проведения прогностического моделирования соударений с Землей и другими космическими объектами. Сапфир и кварц, кроме того, широко применяются в практике ударно-волновых исследований как эталонные материалы для области высоких давлений [5–7].

Целью данной работы является построение УРС сапфира, кремнезема, периклаза и рутила для широкой области давлений и плотностей и описания, прежде всего, имеющихся ударно-волновых данных.

МОДЕЛЬ УРС

В настоящее время существует ряд эффективных подходов к построению УРС веществ для области высоких давлений [1, 2, 7]. Исходя из требований эффективного включения УРС в программы численного моделирования, небольшого числа коэффициентов и качества описания результатов ударно-волновых измерений, выбрана упрощенная модель [8], ранее апробированная для металлов, сплавов, горных пород и полимерных материалов.

В модели выполнено обобщение хорошо известного калорического УРС Ми–Грюнайзена на

случай произвольных энергий и пониженных плотностей в виде

$$p(V, E) = p_c(V) + \frac{\Gamma(V, E)}{V} [E - E_c(V)], \quad (1)$$

$$\Gamma(V, E) = \gamma_i + \frac{\gamma_c(V) - \gamma_i}{1 + \sigma_c^{-2/3} (E - E_c(V))/E_a}. \quad (2)$$

Здесь давление p является функцией удельного объема V и удельной внутренней энергии E ; индекс c относится к упругой компоненте; $p_c(V) = -dE_c(V)/dV$, $\Gamma(V, E)$ — зависящий от удельного объема и внутренней энергии коэффициент Грюнайзена; $\gamma_c(V)$ соответствует случаю малых тепловых энергий (температур), значение γ_i характеризует состояние разогретого конденсированного вещества; $\sigma_c = V_{0c}/V$, V_{0c} — удельный объем при $p_c = 0$. Энергия ангармонизма E_a определяет тепловую энергию перехода от одного предельного случая к другому и находится из данных динамических экспериментов при высоких давлениях. Вид формулы (2) основан на упрощении аналогичной зависимости квазигармонической модели [9].

Объемная зависимость коэффициента Грюнайзена описывается зависимостью [8]

$$\gamma_c(V) = \frac{2}{3} + \left(\gamma_0 - \frac{2}{3} \right) \frac{1 + \sigma_m^2}{\sigma^2 + \sigma_m^2}, \quad (3)$$

где $\sigma = V_0/V$, V_0 и γ_0 — удельный объем и коэффициент Грюнайзена при нормальных условиях, σ_m — подгоночная константа с типичными значениями для различных веществ в пределах 0.5–0.9 [8]. Такая форма записи $\gamma_c(V)$ удовлетворяет асимптотике $\gamma = 2/3$ в пределах сильного сжатия и малой

плотности, а также учитывает на основе данных по ударному сжатию пористых образцов характерные особенности поведения этого параметра.

Вклад упругой компоненты в области сжатий $\sigma_c \geq 1$ задается в виде ряда по степеням обратного межатомного расстояния $r_c^{-1} \sim \sigma_c^{1/3}$ [7]:

$$E_c(V) = 3V_{0c} \sum_{i=1,5} \frac{a_i}{i} (\sigma_c^{i/3} - 1), \quad (4)$$

что автоматически обеспечивает выполнение условия нормировки $E_c(V_{0c}) = 0$. Требование выполнения при $\sigma_c = 1$ условий для упругих давления, объемного модуля сжатия и его производной по давлению $P_c(V_{0c}) = 0$, $B_c = -V dp_c/dV = B_{0c}$ определяет ход “холодной” кривой при умеренных сжатиях и для выбранной формы записи (4) дает следующие уравнения:

$$\sum_{i=1,5} a_i = 0, \quad \sum_{i=1,5} a_i i/3 = B_{0c}, \quad \sum_{i=1,5} a_i (i/3)^2 = B'_{0c}. \quad (5)$$

Значения B_{0c} и B'_{0c} должны совместно с тепловыми членами обеспечить табличные значения изоэнтропического модуля объемного сжатия и его производной по давлению при нормальных условиях, что достигается соответствующей процедурой пересчета. Требование минимума среднеквадратичного отклонения давления от N расчетных значений P_c^{TFC} , полученных по модели Томаса–Ферми с поправками [10], в интервале $\sigma_c = 25\text{--}500$, добавленное к (5), приводит к задаче Лагранжа поиска минимума функционала от $x = \{a_i, \lambda, \mu, \nu\}$

$$\mathfrak{R}(x) = \sum_{n=1,N} \left[1 - \frac{P_c(a_i, \sigma_n)}{P_c^{TFC}(\sigma_n)} \right]^2 + \lambda \sum_{i=1,5} a_i + \mu \left(\sum_{i=1,5} a_i i/3 - B_{0c} \right) + \nu \left(\sum_{i=1,5} a_i (i/3)^2 - B'_{0c} \right). \quad (6)$$

Дифференцирование (8) по a_i, λ, μ, ν дает систему восьми линейных уравнений относительно восьми неизвестных, решение которой определяет искомые коэффициенты a_i .

В области разрежений ($\sigma_c < 1$) упругая компонента также задается в виде [7]

$$E_c(V) = \frac{B_{0c} V_{0c}}{m-n} \left(\frac{\sigma_c^m}{m} - \frac{\sigma_c^n}{n} \right) + E_{\text{sub}}, \quad (7)$$

где $E_{\text{sub}} = E_c(V \rightarrow \infty)$ – энергия сублимации.

Формулы (1)–(7) определяют термодинамические соотношения модели, процедура построения УРС описана в обзоре [8] и приведенных в нем ссылках.

УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ОКСИДОВ

Фазовая диаграмма кремнезема SiO_2 представлена несколькими кристаллическими модификациями [11], из которых наиболее важной для области высоких давлений является фаза стишовита, образующаяся при давлении ударного сжатия выше 40 ГПа [12].

УРС данной фазы высокого давления кремнезема построено с учетом имеющихся для стишовита результатов статических [13] измерений и данных по сжатию до экстремальных давлений 2.7 ТПа в ударных волнах, индуцированных лазером [14, 15]. Основной массив ударно-волновых данных получен при исследовании исходных образцов кристаллического, плавленого и пористого кварца и кварцита. В серии работ отечественных исследователей [16–18] с применением взрывных генераторов высоких давлений изучена ударная адиабата кварца и кварцита до 650 ГПа, а в условиях сильных подземных взрывов до 2 ТПа [19]. Подробные прецизионные данные в области давлений от 90 ГПа до 1.6 ТПа получены на Z-машине [7, 20, 21]. Расширение исследованной области фазовой диаграммы в сторону пониженных относительно основной ударной адиабаты плотностей реализовано с помощью метода ударного сжатия пористого вещества. Данные работы выполнены отечественными исследователями для пористых образцов кварца [22, 23] и аэрогеля [24, 25]. Сопоставление рассчитанных с помощью разработанного УРС стишовита ударных адиабат различной начальной плотности с комплексом ударно-волновых данных показано на рис. 1 и демонстрирует

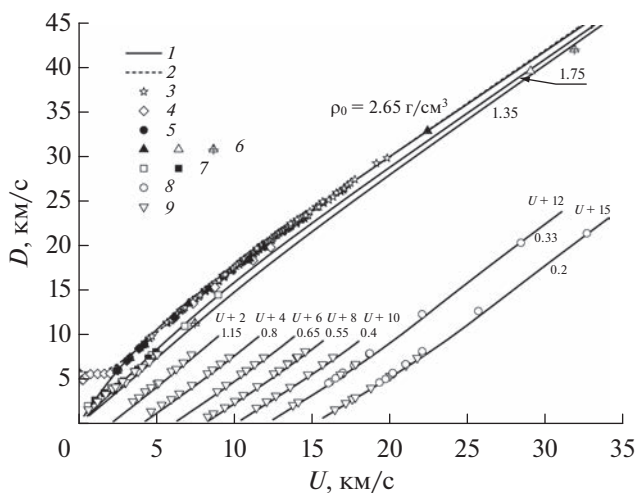


Рис. 1. Ударные адиабаты кристаллического, плавленого и пористого кварца и кварцита в переменных волновая–массовая скорость: числа у кривых – начальная плотность и смещение по оси абсцисс; результаты расчетов: 1 – данная работа, 2 – метод квантовой молекулярной динамики [21]; экспериментальные данные: 3 – [7, 20, 21], 4 – [18], 5 – [17], 6 – [19], 7 – [22], 8 – [24], 9 – [23].

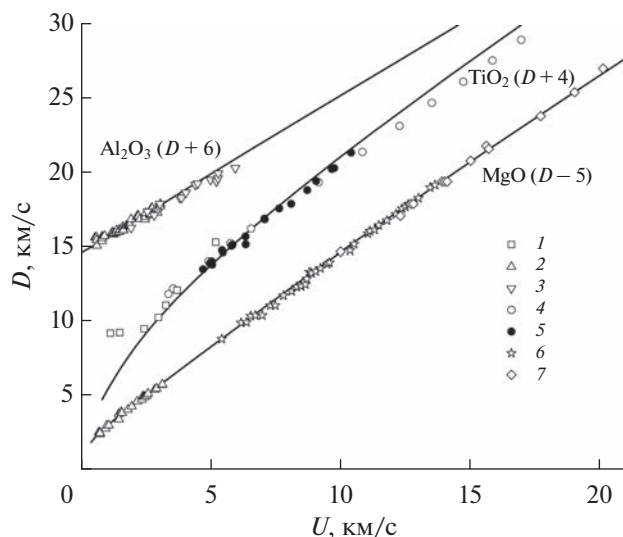


Рис. 2. Ударные адиабаты сапфира, рутила и периклаза в переменных волновая–массовая скорость: сплошные линии – расчетные ударные адиабаты, данная работа; 1 – экспериментальные данные [34], 2 – [29], 3 – [30], 5 – [33], 6 – [35], 7 – [36]; 4 – результаты расчета по методу квантовой молекулярной динамики [33].

высокую точность описания. Расчетные значения скорости звука в ударно-сжатом кварце хорошо согласуются с экспериментальными данными работ [26, 27]. Аналогичный результат получен при сравнении с данными по двукратному ударному сжатию и изоэнтропическому расширению кварцита [28].

Результаты построения УРС сапфира, рутила и периклаза показаны на рис. 2. Расчетная ударная адиабат сапфира хорошо согласуется с данными [29, 30], полученными для давлений до 340 ГПа. Рутил является структурным аналогом стишовита и при сжатии показывает аналогичное поведение [31], для него построено УРС фазы высокого давления с применением апробированной процедуры [32]. Данные по ударному сжатию рутила опубликованы для высоких давлений (до 860 ГПа), полученных на Z-машине и в лазерно-индуцированных ударных волнах [33]. Экспериментальные результаты по ударному сжатию кристаллического рутила [31, 33] хорошо описываются с помощью разработанного УРС, равно как и данные работ [19, 34], в которых исследованы ударные адиабаты пористого рутила. Ударное сжатие периклаза подробно исследовано с помощью традиционных метательных систем до давлений 120 ГПа [29], Z-машины до 1.1 ТПа [35] и в лазерных ударных волнах до 2.3 ТПа [36]. Сопоставление расчетной ударной адиабаты периклаза с перечисленными данными на рис. 2 показывает их согласие. Расчетная скорость звука на ударной адиабате периклаза также описывает данные экспериментов [36] в пределах их погрешности.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработаны аналитические УРС сапфира, кремнезема, периклаза и рутила в калорической форме для широкой области давлений и плотностей. Выполнено сопоставление с наиболее важными данными экспериментов по ударному сжатию кристаллических и пористых образцов, изоэнтропическому расширению и измерениям скорости звука в ударно-сжатом веществе. Получено хорошее согласие расчетных зависимостей и данных экспериментов, что позволяет эффективно использовать полученные УРС при проведении численного моделирования высокоэнергетических процессов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (соглашение № 21-72-20023).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966, 688 с.
2. Фортон В.Е. Уравнения состояния вещества от идеального газа до кварк-глюонной плазмы. М.: Физматлит, 2012. 492 с.
3. Фортон В.Е. Физика высоких плотностей энергии. М.: Физматлит, 2013. 505 с.
4. Фортон В.Е. Мощные ударные волны на земле и в космосе. М.: Физматлит, 2018. 416 с.
5. Николаев Д.Н., Кулиш М.И., Дудин С.В. и др. Ударная сжимаемость монокристаллического кремния в диапазоне давления 280–510 ГПа // ТВТ. 2021. Т. 59. № 6. С. 860.
6. Минцев В.Б. Динамические методы в физике неидеальной плазмы. Начало // ТВТ. 2021. Т. 59. № 6. С. 885.
7. Knudson M.D., Desjarlais M.P. Adiabatic Release Measurements in α -Quartz between 300 and 1200 GPa: Characterization of α -Quartz as a Shock Standard in the Multimegabar Regime // Phys. Rev. B. 2013. V. 88. P. 184107.
8. Ломоносов И.В., Фортон В.Е. Широкодиапазонные полумпирические уравнения состояния вещества для численного моделирования высокоэнергетических процессов // ТВТ. 2017. Т. 55. № 4. С. 596.
9. Корнер С.Б., Фунтиков А.И., Урлин В.Д., Колесникова А.Н. Динамическое сжатие пористых металлов и уравнение состояния с переменной теплоемкостью при высоких температурах // ЖЭТФ. 1962. Т. 42. С. 686.
10. Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В. Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии: Препринт № 35. М.: ИПМ АН СССР, 1975.
11. Mineral Physics & Crystallography: A Handbook of Physical Constants / Ed. T.J. Ahrens. V. 2. Washington, DC: AGU, 1995. 354 p.
12. Wackerle J. Shock-wave Compression of Quartz // J. Appl. Phys. 1962. V. 33. № 3. P. 922.
13. Panero W.R., Benedetti L.R., Jeanloz R. Equation of State of Stishovite and Interpretation of SiO_2 Shock

- Compression Data // J. Geophys. Res.: Solid Earth. 2003. V. 108. № B1. P. ECV 5-1.
14. Millot M., Dubrovinskaia N., Černok A. et al. Shock Compression of Stishovite and Melting of Silica at Planetary Interior Conditions // Science. 2015. V. 347. № 6220. P. 418.
 15. Schoelmerich M.O., Tschentscher T., Bhat S. et al. Evidence of Shock-compressed Stishovite above 300 GPa // Sci. Rep. 2020. V. 10. № 1. P. 1.
 16. Ададунов Г.А., Дремин А.Н., Першин С.В. и др. Ударное сжатие кварца // ПМТФ. 1962. № 4. С. 91.
 17. Альтишлер Л.В., Трунин Р.Ф., Симаков Г.В. Ударное сжатие периклаза и кварца и состав нижней мантии Земли // Изв. АН СССР. Физика Земли. 1965. № 10. С. 1.
 18. Трунин Р.Ф., Симаков Г.В., Подурец М.А. и др. Динамическая сжимаемость кварца и кварцита при высоких давлениях // Изв. АН СССР. Физика Земли. 1971. № 1. С. 13.
 19. Трунин Р.Ф. Ударная сжимаемость конденсированных веществ в мощных ударных волнах подземных ядерных взрывов // УФН. 1994. Т. 164. № 11. С. 1215.
 20. Knudson M.D., Desjarlais M.P. Shock Compression of Quartz to 1.6 TPa: Redefining a Pressure Standard // Phys. Rev. Lett. 2009. V. 103. № 22. P. 225501.
 21. Desjarlais M.P., Knudson M.D., Cochrane K.R. Extension of the Hugoniot and Analytical Release Model of α -Quartz to 0.2–3 TPa // J. Appl. Phys. 2017. V. 122. № 3. P. 035903.
 22. Трунин Р.Ф., Симаков Г.В., Подурец М.А. Сжатие пористого кварца сильными ударными волнами // Изв. АН СССР. Физика Земли. 1971. № 2. С. 33.
 23. Симаков Г.В., Трунин Р.Ф. Сжатие сверхпористого кремнезема в ударных волнах // Изв. АН СССР. Физика Земли. 1990. № 11. С. 72.
 24. Vildanov V.G., Gorshkov M.M., Slobodenyukov V.M., Rushkovan E.H. Shock Compression of Low Initial Density Quartz at Pressures up to 100 GPa // Shock Compression of Condensed Matter – 1995 (AIP Conf. Proc. 370) / Eds. Schmidt S.C., Tao W.C. AIP, 1996. V. 370. P. 121.
 25. Грязнов В.К., Николаев Д.Н., Терновой В.Я. и др. Генерация неидеальной плазмы путем ударноволнового сжатия высокопористого SiO_2 -аэрогеля // Хим. физика. 1998. Т. 17. № 2. С. 33.
 26. Павловский М.Н. Измерение скорости звука в ударно-сжатых кварците, доломите, ангидрите, хлористом натрия, парафине, плексигласе, полиэтилене и фторопласте-4 // ПМТФ. 1976. № 5. С. 136.
 27. McCoy C.A., Gregor M.C., Polsin D.N. et al. Measurements of the Sound Velocity of Shock-Compressed Liquid Silica to 1100 GPa // J. Appl. Phys. 2016. V. 120. № 23. P. 235901.
 28. Подурец М.А., Симаков Г.В., Трунин Р.Ф. О фазовом равновесии в ударно-сжатом кварце и о характере кинетики фазового перехода // Изв. АН СССР. Физика Земли. 1976. № 7. С. 3.
 29. LASL Shock Hugoniot Data / Ed. by Marsh S.P. Berkeley: Univ. of California Press, 1980.
 30. Erskine D. High Pressure Hugoniot of Sapphire // High-Pressure Science and Technology-1993 (AIP Conf. Proc. 309) / Eds. Schmidt S.C., Shaner J.W., Samara G.A., Ross M. AIP, 1994. V. 309. P. 141.
 31. Альтишлер Л.В., Подурец М.А., Симаков Г.В., Трунин Р.Ф. Высокоплотные формы флюорита и рутила // ФТТ. 1973. Т. 10. № 5. С. 1436.
 32. McQueen R.G., Marsh S.P., Fritz J.N. Hugoniot Equation of State of Twelve Rocks // J. Geophys. Res. 1967. V. 72. № 20. P. 4999.
 33. Duwal S., McCoy C.A., Weck P.F. et al. High-Precision Equation of State Data for TiO_2 : A Structural Analog of SiO_2 // Phys. Rev. B. 2020. V. 102. № 2. P. 024105.
 34. Трунин Р.Ф., Симаков Г.В., Подурец М.А. Ударное сжатие пористого рутила // Изв. АН СССР. Физика Земли. 1974. № 12. С. 13.
 35. Root S., Shulenburger L., Lemke R.W. et al. Shock Response and Phase Transitions of MgO at Planetary Impact Conditions // Phys. Rev. Lett. 2015. V. 115. № 19. P. 198501.
 36. McCoy C.A., Marshall M.C., Polsin D.N. et al. Hugoniot, Sound Velocity, and Shock Temperature of MgO to 2300 GPa // Phys. Rev. B. 2019. V. 100. № 1. P. 014106.

УДК 536.7

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ АЛЮМИНИЯ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

© 2023 г. К. В. Хищенко^{1, 2, 3, 4, *}¹Объединенный институт высоких температур РАН, г. Москва, Россия²Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный, Россия³Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Россия⁴Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, г. Черноголовка, Россия

*E-mail: konst@ihed.ras.ru

Поступило в редакцию 31.12.2022 г.

После доработки 05.05.2023 г.

Принято к публикации 11.05.2023 г.

Работа посвящена описанию термодинамических свойств алюминия в широкой области высокоэнергетических состояний. Предложена форма функциональной связи давления, удельного объема и удельной внутренней энергии конденсированной фазы металла. Представлено сравнение расчетных адиабат ударного сжатия алюминия с имеющимися данными ударно-волновых экспериментов. Построенное уравнение состояния может быть использовано для моделирования процессов интенсивного импульсного воздействия на металл.

DOI: 10.31857/S0040364423030134

ВВЕДЕНИЕ

Модели термодинамики материалов в широком диапазоне изменения плотностей и давлений представляют интерес для анализа физических процессов при высокой концентрации энергии [1–3]. Примерами таких процессов являются высокоскоростное соударение тел [4–10], взаимодействие короткого импульса лазерного излучения с твердой мишенью [11–17], электрический взрыв проводника под действием мощного импульса тока [18–24]. В частности, для решения задач численного моделирования динамики возникающих при этом течений необходимо знать взаимосвязь термодинамических характеристик среды во всей области реализуемых состояний [25–31].

В настоящей работе развита модель уравнения состояния конденсированного вещества в форме функции давления от удельного объема и удельной внутренней энергии. Представлены результаты расчетов термодинамических характеристик ударно-сжатого алюминия в сопоставлении с имеющимися данными экспериментов при высоких плотностях энергии.

МОДЕЛЬ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ

Уравнение состояния задается в виде функциональной взаимосвязи давления P , удельного объема $V = \rho^{-1}$ (ρ – плотность) и удельной внутренней энергии E [32, 33]:

$$P(V, E) = P_c(V) + \frac{\Gamma(V, E)}{V} [E - E_c(V)], \quad (1)$$

где E_c , $P_c = -dE_c/dV$ – составляющие внутренней энергии и давления при $T = 0$; коэффициент Γ определяет отношение теплового вклада в давление к тепловому вкладу в плотность энергии.

Зависимость внутренней энергии от объема на «холодной» кривой (изотерма $T = 0$) задается в виде [34, 35]

$$E_c(V) = \frac{V_{0c} B_{0c}}{m - n} \left(\frac{\zeta^m}{m} - \frac{\zeta^n}{n} \right) + E_s, \quad (2)$$

где $\zeta = V_{0c}/V$; V_{0c} – удельный объем при $P = 0$ и $T = 0$; B_{0c} – модуль объемного сжатия при $T = 0$ ($B_c = -V dP_c/dV$) и $\zeta = 1$; m, n – параметры;

$$E_s = \frac{V_{0c} B_{0c}}{mn}. \quad (3)$$

Зависимость коэффициента Γ от объема и внутренней энергии определяется в форме [36]

$$\Gamma(V, E) = \gamma_i + \frac{\gamma_c(V) - \gamma_i}{1 + \sigma^{-2/3} [E - E_c(V)]/E_a}. \quad (4)$$

Здесь $\sigma = V_0/V$ – степень сжатия; V_0 – удельный объем при нормальных условиях ($P = P_0$, $E = E_0$); γ_c – коэффициент Грюнайзена $\gamma = V(\partial P/\partial E)_V$ при $T = 0$; γ_i , E_a – параметры. Функция коэффициента γ_c от объема задается согласно выражению [37, 38]

$$\gamma_c(V) = 2/3 + (\gamma_{0c} - 2/3) \frac{\delta_n + \ln^2 \sigma_m}{\delta_n + \ln^2 (\sigma/\sigma_m)}, \quad (5)$$

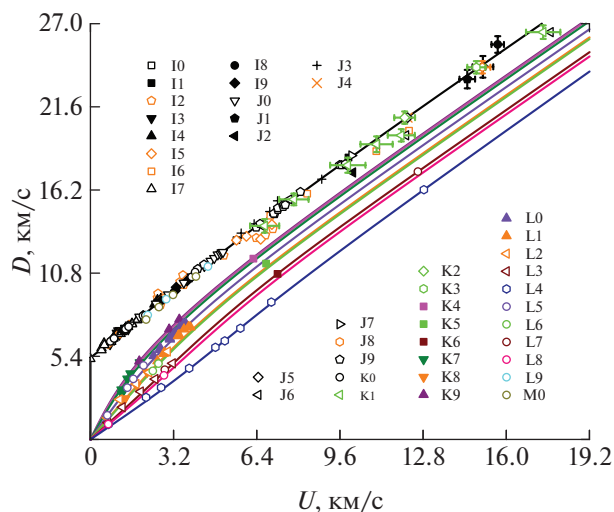


Рис. 1. Волновая скорость D как функция массовой скорости U на ударных адиабатах образцов алюминия с различной начальной плотностью ρ_{00} : линии – результаты расчета по уравнению состояния (1)–(6) при $\rho_{00} = 2.71, 1.92, 1.89, 1.816, 1.585, 1.35, 1.3, 0.909, 0.77$ и 0.34 г/см^3 (начиная с верхней кривой); маркеры – экспериментальные данные для сплошных (10 – [39], 11 – [40], 12 – [41], 13 – [42], 14 – [43], 15 – [44], 16 – [45], 17 – [46], 18 – [47], 19 – [48], J0 – [49], J1 – [50], J2 – [51], J3 – [52], J4 – [53], J5 – [54], J6 – [55] в интерпретации [56], J7 – [56], J8 – [57], J9 – [58], K0 – [59], K1 – [55] в интерпретации [60], K2 – [53, 54] в интерпретации [60], K3 – [57] в интерпретации [60]) и пористых образцов (K4–K6 – [40]; K7, K8 – [42]; K9, L0, L1 – [43]; L2, L3 – [61]; L4 – [62]; L5–L8 – [59]; L9, M0 – [63]).

в котором

$$\gamma_{0c} = \gamma_i + (\gamma_0 - \gamma_i) \left[1 + \frac{E_0 - E_c(V_0)}{E_a} \right]^2, \quad (6)$$

γ_0 – коэффициент Грюнайзена при нормальных условиях; σ_m, δ_n – параметры.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АЛЮМИНИЯ

Результаты расчета ударных адиабат сплошных и пористых образцов алюминия по полученному уравнению состояния (1)–(6) показаны на рис. 1–3 в сопоставлении с экспериментальными данными [39–63].

Следует отметить хорошее согласие расчетной адиабаты для сплошных образцов данного металла с результатами экспериментов [39, 41–44, 46, 48, 49, 58, 59] в области давлений до 0.2 ТПа. При более высоких давлениях имеющиеся экспериментальные данные [40, 41, 44, 45, 47, 50–58] характеризуются значительным разбросом. Одной из причин такой ситуации является использование в разных работах различных представлений об ударных адиабатах эталонных веществ. Пример интерпретации данных для алюминия из разных экспериментов с учетом единой модели урав-

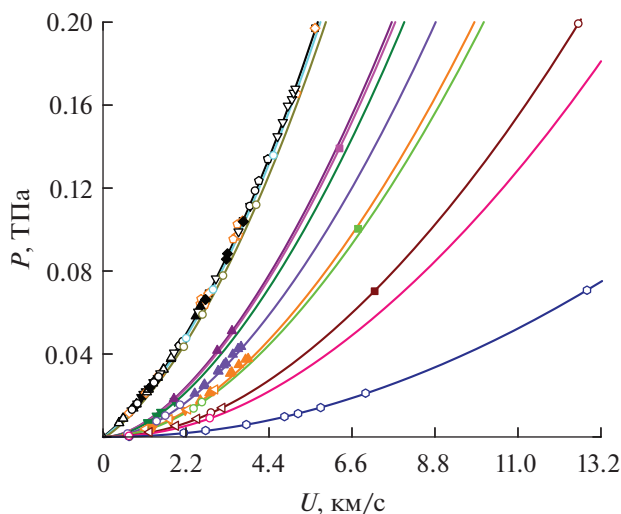


Рис. 2. Давление как функция массовой скорости на ударных адиабатах сплошных и пористых образцов алюминия: линии – результаты расчета для образцов с $\rho_{00} = 2.71, 2.676, 2.607, 1.92, 1.89, 1.816, 1.585, 1.35, 1.3, 0.909, 0.77$ и 0.34 г/см^3 (сверху вниз); остальные обозначения такие же, как на рис. 1.

нения состояния эталона (железа в случае [53–55, 57]) представлен в работе [60]. Расчетная ударная адиабата для сплошных образцов алюминия неплохо согласуется с результатами интерпретации [60], как и с данными абсолютных измерений [47, 50, 58], в рассмотренном диапазоне давлений до 1 ТПа.

Расчетные ударные адиабаты для пористых образцов исследуемого металла также в основном хорошо согласуются с имеющимися данными экспериментов [40, 42, 43, 59, 61–63] при высоких давлениях.

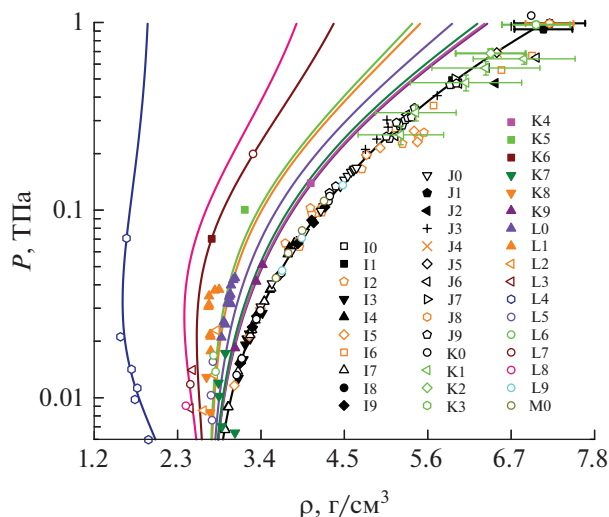


Рис. 3. Давление как функция плотности на ударных адиабатах сплошных и пористых образцов алюминия: линии – результаты расчета по представленному уравнению состояния для $\rho_{00} = 2.71, 1.92, 1.89, 1.816, 1.585, 1.35, 1.3, 0.909, 0.77$ и 0.34 г/см^3 (справа налево); остальные обозначения такие же, как на рис. 1.

Параметры уравнения состояния алюминия по модели (1)–(6) выбраны следующие: $V_0 = 0.369$, $V_{0c} = 0.3644 \text{ см}^3/\text{г}$, $B_{0c} = 78.3804 \text{ ГПа}$, $m = 1.33$, $n = 1.1$, $\sigma_m = 0.72$, $\delta_n = 0.7$, $\gamma_{0c} = 1.59$, $\gamma_i = 0.42$, $E_a = 24 \text{ кДж/г}$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленное уравнение состояния позволяет обобщить имеющиеся данные ударно-волновых экспериментов для алюминия в широкой области давлений, удельных объемов и удельных внутренних энергий. Данное уравнение состояния может быть использовано при численном моделировании физических процессов в веществе при интенсивных импульсных воздействиях.

Работа выполнена по программе Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
2. Бушман А.В., Фортков В.Е. Модели уравнения состояния вещества // УФН. 1983. Т. 140. № 2. С. 177.
3. Бушман А.В., Канель Г.И., Ни А.Л., Фортков В.Е. Теплофизика и динамика интенсивных импульсных воздействий. Черноглазков: ОИХФ АН СССР, 1988.
4. Агурейкин В.А., Анисимов С.И., Бушман А.В., Канель Г.И., Карягин В.П., Константинов А.Б., Крюков Б.П. и др. Теплофизические и газодинамические проблемы противометеоритной защиты космического аппарата "Бера" // ТВТ. 1984. Т. 22. № 5. С. 964.
5. Kanel G.I., Fortov V.E., Khishchenko K.V., Utkin A.V., Razorenov S.V., Lomonosov I.V., Mehlhorn T. et al. Thin Foil Acceleration Method for Measuring the Unloading Isentropes of Shock-compressed Matter // AIP Conf. Proc. 2000. V. 505. P. 1179.
6. Кинеловский С.А., Маевский К.К. Модель поведения алюминия и смесей на его основе при ударно-волновом воздействии // ТВТ. 2014. Т. 52. № 6. С. 843.
7. Popova T.V., Mayer A.E., Khishchenko K.V. Evolution of Shock Compression Pulses in Polymethylmethacrylate and Aluminum // J. Appl. Phys. 2018. V. 123. № 23. P. 235902.
8. Александров В.В., Браницкий А.В., Грабовский Е.В., Лаухин Я.Н., Олейник Г.М., Ткаченко С.И., Фролов И.Н., Хищенко К.В. Исследование удара дюралюминиевого фляера по вольфрамовой мишени на установке Ангара-5-1 // Физика плазмы. 2019. Т. 45. № 5. С. 406.
9. Khishchenko K.V., Mayer A.E. High- and Low-entropy Layers in Solids Behind Shock and Ramp Compression Waves // Int. J. Mech. Sci. 2021. V. 189. P. 105971.
10. Николаев Д.Н., Кулиш М.И., Дудин С.В., Минцев В.Б., Ломоносов И.В., Фортков В.Е. Ударная сжимаемость монокристаллического кремния в диапазоне давлений 280–510 ГПа // ТВТ. 2021. Т. 59. № 6. С. 860.
11. Андреев Н.Е., Вейсман М.Е., Костин В.В., Фортков В.Е. Формирование ударной волны под действием ультракоротких лазерных импульсов // ТВТ. 1996. Т. 34. № 3. С. 379.
12. Povarnitsyn M.E., Itina T.E., Khishchenko K.V., Levashov P.R. Simulation of Double-pulse Laser Ablation // AIP Conf. Proc. 2010. V. 1278. P. 635.
13. Абросимов С.А., Бажулин А.П., Воронов В.В., Красюк И.К., Пашигин П.П., Семенов А.Ю., Стучебрюхов И.А., Хищенко К.В., Черномырдин В.И. Исследование механических свойств алюминия, сплава АМг6М и полиметилметакрилата при высоких скоростях деформирования под действием лазерного излучения пикосекундной длительности // ДАН. 2012. Т. 442. № 6. С. 752.
14. Иногамов Н.А., Петров Ю.В., Хохлов В.А., Жаховский В.В. Лазерная абляция: физические представления и приложения (обзор) // ТВТ. 2020. Т. 58. № 4. С. 689.
15. Струлёва Е.В., Комаров П.С., Ашитков С.И. Поведение тантала вблизи критической точки при фемтосекундном лазерном нагреве // ТВТ. 2021. Т. 59. № 1. С. 148.
16. Semenov A. Yu., Stuchebryukhov I.A., Khishchenko K.V. Modeling of Shock-wave Processes in Aluminum under the Action of a Short Laser Pulse // Math. Montis. 2021. V. 50. P. 108.
17. Ашитков С.И., Иногамов Н.А., Комаров П.С., Петров Ю.В., Ромашевский С.А., Ситников Д.С., Струлёва Е.В., Хохлов В.А. Сверхбыстрый перенос энергии в металлах в сильно неравновесном состоянии, индуцируемом фемтосекундными лазерными импульсами субгераваттной интенсивности // ТВТ. 2022. Т. 60. № 2. С. 218.
18. Ткаченко С.И., Хищенко К.В., Воробьев В.С., Левашов П.Р., Ломоносов И.В., Фортков В.Е. Метастабильные состояния жидкого металла при электрическом взрыве // ТВТ. 2001. Т. 39. № 5. С. 728.
19. Tkachenko S.I., Levashov P.R., Khishchenko K.V. Analysis of Electrical Conductivity Measurements in Strongly Coupled Tungsten and Aluminum Plasmas // Czech. J. Phys. 2006. V. 56. Suppl. 2. P. B419.
20. Oreshkin V.I., Baksh R.B., Ratakhin N.A., Labetsky A. Yu., Rouskikh A.G., Shishlov A.V., Levashov P.R. et al. Effect of the Thermal Instabilities on Electrical Explosion of Thin Metal Wires // AIP Conf. Proc. 2006. V. 849. P. 262.
21. Barengolts S.A., Uimanov I.V., Oreshkin V.I., Khishchenko K.V., Oreshkin E.V. Plasma–Liquid Interaction During a Pulsed Vacuum Breakdown // J. Appl. Phys. 2021. V. 129. P. 133301.
22. Савватимский А.И. Теплоемкость и электросопротивление металлов Та и W от точки плавления до 7000 К при импульсном нагреве током // ТВТ. 2021. Т. 59. № 5. С. 686.
23. Barengolts S.A., Uimanov I.V., Oreshkin V.I., Khishchenko K.V., Oreshkin E.V. Effect of the Temperature of an Electrode Microprotrusion on the Microcrater Formation on the Electrode Surface upon Pulsed and Radiofrequency Vacuum Breakdowns // Vacuum. 2022. V. 204. P. 111364.
24. Савватимский А.И., Онуфриев С.В., Седегов А.С., Юдин С.Н., Московских Д.О. Теплофизические свойства высокоэнтропийного карбида (HfTaTiNbZr)C при температурах от 2500 до 5500 К // ТВТ. 2022. Т. 60. № 5. С. 672.
25. Бельхеева Р.К. Уравнение состояния для сильнопористого вещества // ТВТ. 2015. Т. 53. № 3. С. 367.
26. Ломоносов И.В., Форткова С.В. Широкодиапазонные полумпирические уравнения состояния вещества для численного моделирования высокоэнергетических процессов // ТВТ. 2017. Т. 55. № 4. С. 596.
27. Гилев С.Д. Малопараметрическое уравнение состояния алюминия // ТВТ. 2020. Т. 58. № 2. С. 179.
28. Бельхеева Р.К. Модель коэффициента Грюнайзена для широкого диапазона плотностей на примере меди // ТВТ. 2021. Т. 59. № 4. С. 514.

29. *Маевский К.К.* Численное моделирование термодинамических параметров углерода // ТВТ. 2021. Т. 59. № 5. С. 701.
30. *Анфельбаум Е.М., Воробьев В.С.* Универсальное уравнение состояния для критической и сверхкритических областей // ТВТ. 2021. Т. 59. № 6. С. 852.
31. *Маевский К.К.* Численное моделирование термодинамических параметров германия // ТВТ. 2022. Т. 60. № 6. С. 837.
32. *Бушман А.В., Ефремов В.П., Ломоносов И.В., Уткин А.В., Фортков В.Е.* Ударная сжимаемость и уравнение состояния углепластика при высоких плотностях энергии // ТВТ. 1990. Т. 28. № 6. С. 1232.
33. *Бушман А.В., Жерноклетов М.В., Ломоносов И.В., Сутулов Ю.Н., Фортков В.Е., Хищенко К.В.* Ударная сжимаемость и уравнение состояния полиимида // Письма в ЖЭТФ. 1993. Т. 58. № 8. С. 640.
34. *Бушман А.В., Ломоносов И.В., Фортков В.Е., Хищенко К.В.* Уравнения состояния полимерных материалов при высоких давлениях // Хим. физика. 1994. Т. 13. № 1. С. 64.
35. *Бушман А.В., Ломоносов И.В., Фортков В.Е., Хищенко К.В.* Уравнения состояния насыщенных органических соединений при высоких давлениях // Хим. физика. 1994. Т. 13. № 5. С. 97.
36. *Хищенко К.В., Жерноклетов М.В., Ломоносов И.В., Сутулов Ю.Н.* Динамическая сжимаемость, адиабаты разгрузки и уравнение состояния стибена при высоких плотностях энергии // ЖТФ. 2005. Т. 75. № 2. С. 57.
37. *Khishchenko K.V.* Equation of State for Bismuth at High Energy Densities // Energies. 2022. V. 15. № 19. P. 7067.
38. *Khishchenko K.V.* Equation of State of Hafnium at High Pressures in Shock Waves // Phys. Wave Phenom. 2023. V. 31. № 2. P. 123.
39. *Альтишулер Л.В., Кормер С.Б., Баканова А.А., Трунин Р.Ф.* Уравнения состояния алюминия, меди и свинца для области высоких давлений // ЖЭТФ. 1960. Т. 38. № 3. С. 790.
40. *Кормер С.Б., Фунтиков А.И., Урлин В.Д., Колесникова А.Н.* Динамическое сжатие пористых металлов и уравнение состояния с переменной теплоемкостью при высоких температурах // ЖЭТФ. 1962. Т. 42. № 3. С. 686.
41. *Skidmore I.C., Morris E.* Experimental Equation-of-state Data for Uranium and Its Interpretation in the Critical Region // Thermodynamics of Nuclear Materials. Vienna: IAEA, 1962. P. 173.
42. *Morgan D.T., Rockowitz M., Atkinson A.L.* Measurement of the Grueneisen Parameter and the Internal Energy Dependence of the Solid Equation of State for Aluminum and Teflon. Tech. Rep. AFWL-TR-65-117. Kirtland Air Force Base, NM: Air Force Weapons Laboratory, 1965.
43. *Anderson G.D., Doran D.G., Fahrenbruch A.L.* Equation of State of Solids: Aluminum and Teflon. Tech. Rep. AFWL-TR-65-147. Kirtland Air Force Base, NM: Air Force Weapons Laboratory, 1965.
44. *Альтишулер Л.В., Чекин Б.С.* Метрология высоких импульсных давлений // Докл. I Всес. симп. по импульсным давлениям. М.: ВНИИФТРИ, 1974. Т. 1. С. 5.
45. *Альтишулер Л.В., Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В., Чекин Б.С.* Ударные адиабаты при сверхвысоких давлениях // ЖЭТФ. 1977. Т. 72. № 1. С. 317.
46. *LASL Shock Hugoniot Data* / Ed. Marsh S.P. Berkeley: Univ. of California Press, 1980.
47. *Волков Л.П., Волошин Н.П., Владимиров А.С., Ногин В.Н., Симоненко В.А.* Ударная сжимаемость алюминия при давлении 10 Мбар // Письма в ЖЭТФ. 1980. Т. 31. № 11. С. 623.
48. *Альтишулер Л.В., Баканова А.А., Дудолов И.П., Дынин Е.А., Трунин Р.Ф., Чекин Б.С.* Ударные адиабаты металлов. Новые данные, статистический анализ и общие закономерности // ПМТФ. 1981. № 2. С. 3.
49. *Mitchell A.C., Nellis W.J.* Shock Compression of Aluminum, Copper, and Tantalum // J. Appl. Phys. 1981. V. 52. № 5. P. 3363.
50. *Симоненко В.А., Волошин Н.П., Владимиров А.С., Нагибин А.П., Ногин В.Н., Попов В.А., Сальников В.А., Шойдин Ю.А.* Абсолютные измерения ударной сжимаемости алюминия при давлениях $p \geq 1$ ТПа // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. № 4. С. 1452.
51. *Трунин Р.Ф.* Сжимаемость различных веществ при высоких давлениях ударных волн. Обзор // Изв. АН СССР. Сер. Физика Земли. 1986. № 2. С. 26.
52. *Глушак Б.Л., Жарков А.П., Жерноклетов М.В., Терновой В.Я., Филимонов А.С., Фортков В.Е.* Экспериментальное изучение плотной плазмы металлов при высоких концентрациях энергии // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. № 4. С. 1301.
53. *Трунин Р.Ф., Панов Н.В., Медведев А.Б.* Ударная сжимаемость железа, алюминия и тантала при терапаскальных давлениях // Хим. физика. 1995. Т. 14. № 2–3. С. 97.
54. *Трунин Р.Ф., Панов Н.В., Медведев А.Б.* Ударная сжимаемость железа, алюминия и тантала при терапаскальных давлениях, полученных в лабораторных условиях // ТВТ. 1995. Т. 33. № 2. С. 329.
55. *Аврорин Е.Н., Водолага Б.К., Волошин Н.П., Коваленко Г.В., Куропатенко В.Ф., Симоненко В.А., Черноволук Б.Т.* Экспериментальное изучение оболочечных эффектов на ударных адиабатах конденсированных веществ // ЖЭТФ. 1987. Т. 93. № 2. С. 613.
56. *Трунин Р.Ф., Подурец М.А., Симаков Г.В., Попов Л.В., Севастьянов А.Г.* Новые данные по сжимаемости алюминия, плексигласа и кварца, полученные в условиях сильной ударной волны подземного ядерного взрыва // ЖЭТФ. 1995. Т. 108. № 3. С. 581.
57. *Трунин Р.Ф., Панов Н.В., Медведев А.Б.* Сжимаемость железа, алюминия, молибдена, титана и тантала при давлениях ударных волн 1–2.5 ТПа // Письма в ЖЭТФ. 1995. Т. 62. № 7. С. 572.
58. *Knudson M.D., Lemke R.W., Hayes D.B., Hall C.A., Deeney C., Asay J.R.* Near-absolute Hugoniot Measurements in Aluminum to 500 GPa Using a Magnetically Accelerated Flyer Plate Technique // J. Appl. Phys. 2003. V. 94. № 7. P. 4420.
59. *Трунин Р.Ф., Гударенко Л.Ф., Жерноклетов М.В., Симаков Г.В.* Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ. Саратов: РФЯЦ–ВНИИЭФ, 2006.
60. *Orlov N.Yu., Kadatskiy M.A., Denisov O.B., Khishchenko K.V.* Application of Quantum-statistical Methods to Studies of Thermodynamic and Radiative Processes in Hot Dense Plasmas // Matter Radiat. Extremes. 2019. V. 4. № 5. P. 054403.
61. *Баканова А.А., Дудолов И.П., Сутулов Ю.Н.* Ударная сжимаемость пористых вольфрама, молибдена, меди и алюминия в области низких давлений // ПМТФ. 1974. № 2. С. 117.
62. *Трунин Р.Ф., Симаков Г.В., Панов Н.В.* Ударное сжатие пористого алюминия и никеля при мегабарных давлениях // ТВТ. 2001. Т. 39. № 3. С. 430.
63. *Song P., Cai L., Wang Q., Zhou X., Li X., Zhang Y., Yuan S., Weng J., Li J.* Sound Velocity, Temperature, Melting along the Hugoniot and Equation of State for Two Porosity Aluminums // J. Appl. Phys. 2011. V. 110. P. 103522.