



МЕХАНИКА И НАНОМЕХАНИКА СТРУКТУРНО-СЛОЖНЫХ И ГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕД. УСПЕХИ, ПРОБЛЕМЫ, ПЕРСПЕКТИВЫ

**СБОРНИК ТРУДОВ
ВСЕРОССИЙСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ**

Под редакцией проф. Ю.Г. Яновского

МОСКВА, 2015 год

Российская академия наук
Отделение энергетики, машиностроения, механики и процессов управления
РАН

Научный совет РАН по механике конструкций из композиционных
материалов

ФГБУН Институт прикладной механики РАН
ФГБУН Объединенный институт высоких температур РАН
ФГБУ Московский авиационный институт (Национальный
исследовательский университет)

МЕХАНИКА И НАНОМЕХАНИКА СТРУКТУРНО-СЛОЖНЫХ И ГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕД. УСПЕХИ, ПРОБЛЕМЫ, ПЕРСПЕКТИВЫ

**СБОРНИК ТРУДОВ
ВСЕРОССИЙСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ**

(23 декабря 2014 года – 31 января 2015 года, г. Москва)

МОСКВА

«Механика и наномеханика структурно-сложных и гетерогенных сред. Успехи, проблемы, перспективы».

Москва, 23 декабря 2014г. – 31 января 2015г. – М.: ИПРИМ РАН, 2015. – 294 с.

В Сборник трудов конференции включены работы участников конференции, доложенные на секциях: «Аэро-, гидромеханика и реология структурно - сложных сред», «Вычислительные методы механики наноструктурированных и гетерогенных сред», «Проблемы горения и детонации сложных сред», «Проблемы прочности наноструктурированных композитов, адаптивных материалов и конструкций».

Составители сборника:

Карнет Ю.Н., Левин Ю.К., Семенов Н.А., Паршина М.С.

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Аэро-, гидромеханика и реология структурно - сложных сред</i>	7
Реология сланцев: трехмасштабная модель транспорта газовой фазы в пористой среде Саваторова В.Л., Талонов А.В., Власов А.Н.....	8
Причины фазового перехода кальцит-аргонит кристаллов накипи CaCO_3 в омагниченном водном потоке Левин Ю.К.....	17
Численное моделирование взаимодействия подводной ударной волны с препятствием в присутствии пузырькового экрана Суров В.С., Березанский И.В., Степаненко Е.Н.....	25
Обтекание мягкой цилиндрической оболочки сверхзвуковым потоком газа Хахимов А.Г.....	33
Исследование элетрореологических свойств суспензий полиимидов с жестко сопряженными молекулярными цепями Семенов Н.А., Келбышева Е.С., Никитин С.М., Юмашев О.Б.....	36
О способе моделирования гистерезиса энергорассеяния в устройствах с управляемыми жидкими средами в качестве рабочего тела Данилин А.Н., Карнет Ю.Н., Галимов Р.А.....	41
Движение жидкости в трещиноватых пористых средах Касумова Г.И., Джаббарова А.И., Мамедов М.М., Джаббаров И.И., Сафарли И.С.....	48
 <i>Вычислительные методы механики наноструктурированных и гетерогенных сред</i>	53
Определение резонансных кривых графенового резонатора Беринский Е.И., Индейцев Д.А., Морозов Н.Ф., Скубов Д.Ю., Штукин Л.В.....	54
Сравнение численных и аналитических подходов к определению упругих модулей алмаза Беринский И.Е., Кривцов А.М., Лобода О.С., Цаплин В.А.....	60
Эффект дальнего действия как универсальное свойство твердых тел Гергега А.Н., Костюк А.И., Столевич И.А.....	71
Математические методы оптимального проектирования композиционных конструкций с требуемым комплексом свойств при волновых воздействиях Гусев Е.Л.....	77
Получение точных стационарных решений неоднородного уравнения Бюргера Кудрявцев А.Г., Сапожников О.А.....	87
Оценка достоверности численного моделирования нестационарных упругих волн напряжений в областях сложной формы Мусаев В.К.....	94
Расчетно-экспериментальное определение тензора Грюнайзена для углеродного материала с 4D-структурой Острик А.В., Антипов Е.А., Кульков А.А.....	104

Особенности процесса горячего изостатического прессования тел больших геометрических размеров в условиях неоднородного нестационарного температурного поля Хомяков Е.И., Бочков А.В., Головешкин В.А., Зазовский Л.М., Козырев Ю.М., Пономарев А.В.....	110
<i>Проблемы горения и детонации сложных сред</i>	118
Взаимодействие пламён предварительно перемешанных газов в статических условиях в цилиндрическом реакторе Набоко И.М., Рубцов Н.М., Сеплярский Б.С., Черныш В.И., Цветков Г.И.....	119
Исследование развития газовых струй при акустическом воздействии Кривокорытов М.С., Голуб В.В.....	127
Форкамерное инициирование детонации в узких каналах Головастов С.В., Бивол Г.Ю., Голуб В.В.....	135
Формирование пересжатой волны детонации в потоке метано-кислородных смесей в канале переменного сечения Бивол Г.Ю., Головастов С.В., Голуб В.В.....	145
Исследование горения и ингибирования больших сферических объемов водородно-воздушных смесей при интенсивном инициировании Петухов В.А., Азатян В.В., Бублик Н.П., Гусев П.А., Солнцев О.И.....	155
Роль химически нейтральных микрочастиц в развитии горения газовзвесей: от подавления детонации до имплантации примеси в подложку Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Смыгалина А.Е., Яковенко И.С.....	161
Экспериментальное исследование генерации свободных огненных вихрей Вараксин А.Ю., Протасов М.В., Ромаш М.Э., Щеголев Н.Л.....	172
К вопросу о взаимодействии электрических полей с углеводородами Мурамович В.Г.....	178
Исследование электрофизических характеристик импульсного разряда и работы устройства поджига и стабилизации горения «пористого» керосина Великодный В.Ю., Дыренков А.В., Левин Ю.К., Садовин М.А., Попов В.В...	190
Влияние наноразмерных присадок на характеристики поджига и горения композитного топлива Великодный В.Ю., Дыренков А.В., Левин Ю.К., Попов В.В., Яновский Ю.Г.	200
<i>Проблемы прочности гетерогенных материалов, наноструктурированных композитов, адаптивных материалов и конструкций</i>	209
Численный анализ нелинейного деформирования и прогрессирующего разрушения слоистых композитных оболочек вращения при неосесимметричных импульсных воздействиях Абросимов Н.А., Елесин А.В.....	210
Оценка механических свойств гиперупругих композитов с малыми добавками дисперсных наполнителей Власов А.Н., Волков-Богородский Д.Б., Яновский Ю.Г., Корнев Ю.В., Карнет Ю.Н.....	219

Определение температурных профилей в композитных преградах при поверхностном поглощении энергии	
Квитов С.В., Николаев Д.Н., Острик А.В., Терновой В.Я.....	226
Определение эффективного момента инерции поперечного сечения стержня из наноструктурного титанового сплава ВТ6	
Хахимов А.Г.....	239
Определение формы недеформированной рессоры	
Федоров В.В., Хахимов А.Г.....	242
Расчет нестационарных термоупругих напряжений при воздействии локального высококонцентрированного источника тепла	
Веремейчик А.И., Гарбачевский В.В., Сазонов М.И., Хвисевич В.М., Цыганов Д.Л.....	245
Изменения механических характеристик пленок и мембран в жидкой среде	
Якупов С.Н., Валиев Х.Х., Харисламова Л.У.....	253
Повышение эффективности клеевой композиции для авиационных конструкций на основе полимерных композиционных материалов путем ее модификации наноматериалами на основе углерода	
Корнев Ю.В., Вермель В.Д., Титов С.А., Никитина Е.А., Бойко О.В., Чиркунова С.В.....	258
Особенности процесса горячего изостатического прессования тел больших геометрических размеров в условиях неоднородного нестационарного температурного поля	
Хомяков Е.И., Бочков А.В., Головешкин В.А., Зазовский Л.М., Козырев Ю.М., Пономарев А.В.....	268
Влияние нанонаполнителей - фуллеренов на свойства термоэластопластов и каучуков	
Валиев Х.Х., Кузина С.Е., Люсова Л.Р., Снегирева Н.С.....	276
Уточнение модели снижения накипи при магнитной обработке воды	
Кошоридзе С.И., Левин Ю.К.....	288

Аэро-, гидромеханика и реология структурно-сложных сред

РЕОЛОГИЯ СЛАНЦЕВ: ТРЕХМАСШТАБНАЯ МОДЕЛЬ ТРАНСПОРТА ГАЗОВОЙ ФАЗЫ В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ

Саваторова В.Л.¹, Талонов А.В.¹, Власов А.Н.²

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», г.Москва, Россия

²ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г.Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

В данной работе исследуется массоперенос газовой фазы в пористой среде, рассматриваемой как гетерогенный материал периодической структуры с тремя характерными пространственными масштабами (нанопористый органический материал (кероген), неорганическая пористая матрица (сланцы), система вторичных трещин в сланцах). Задача рассматривается в трёхмерной постановке, где все характерные величины являются функциями координат и времени. Предполагается, что газ в свободном состоянии содержится в трещинах и порах неорганического материала. Основными механизмами переноса для него являются фильтрация и молекулярная диффузия. Адсорбированный газ содержится в нанопорах керогена, и основным механизмом массопереноса для него является поверхностная диффузия. При решении задачи используется метод асимптотического усреднения, возможность применения которого обеспечивается выполнением условия пространственного разделения масштабов. В результате выводятся усреднённые уравнения, позволяющие определять распределение концентрации, а значит и давления, и скорости газовой фазы. Коэффициенты усреднённых уравнений находятся в ходе решения задач на характерных ячейках периодичности и последующего усреднения этих решений по объёму ячеек.

Ключевые слова: массоперенос газовой фазы, пористые среды, многомасштабное усреднение, сланцевый газ, адсорбция, фильтрация, диффузия.

ВВЕДЕНИЕ

Недавние исследования показали, что в таких материалах как сланцевые породы, основная часть природного газа сосредоточена в нанопорах органического вещества, керогена, в адсорбированном состоянии [1-4]. При этом объём керогена составляет лишь малую часть от объёма пористой неорганической матрицы, которая в свою очередь может быть рассечена сетью трещин и разломов. Из этого следует, что богатые природным газом сланцевые породы имеют многомасштабную структуру как показано на рис.1.

В этой работе проводится асимптотическое усреднение уравнений описывающих массоперенос газовой фазы в предположении, что пространственные неоднородности среды можно считать периодическими.

В дальнейшем будем рассматривать относительно узкие области в окрестности гидроразрывов. Каждую из этих областей можно рассматривать как сеть вторичных трещин в пористой среде, состоящей из микропористой неорганической матрицы с нанопористыми органическими включениями.

Выделим в среде область Ω . Будем предполагать, что сеть трещин обладает периодичностью с характерной ячейкой периодичности Y . Пусть Y_f и Y_m обозначают части Y занятые трещинами и неорганическим веществом соответственно. Тогда ∂Y_m будет границей раздела между ними.

Точно так же внутри Y_m мы будем рассматривать периодическую структуру из более мелких периодических ячеек Q , каждая из которых содержит блок керогена Q_k , окруженный неорганической матрицей Q_i . Границу раздела между неорганическим веществом и керогеном будем обозначать как ∂Q_k (рис.2).

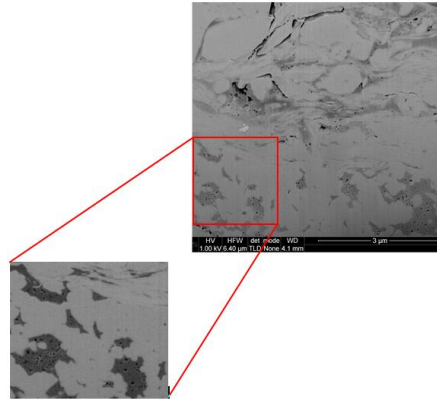


Рис. 1. Двумерное FIB/SEM изображение образца сланцевой породы [4]. Черным показаны поры, темно серым - нанопористый кероген, светло-серым - неорганическая матрица с микропорами. Нижнее изображение показывает соотношение пространственных масштабов керогена и неорганической матрицы.

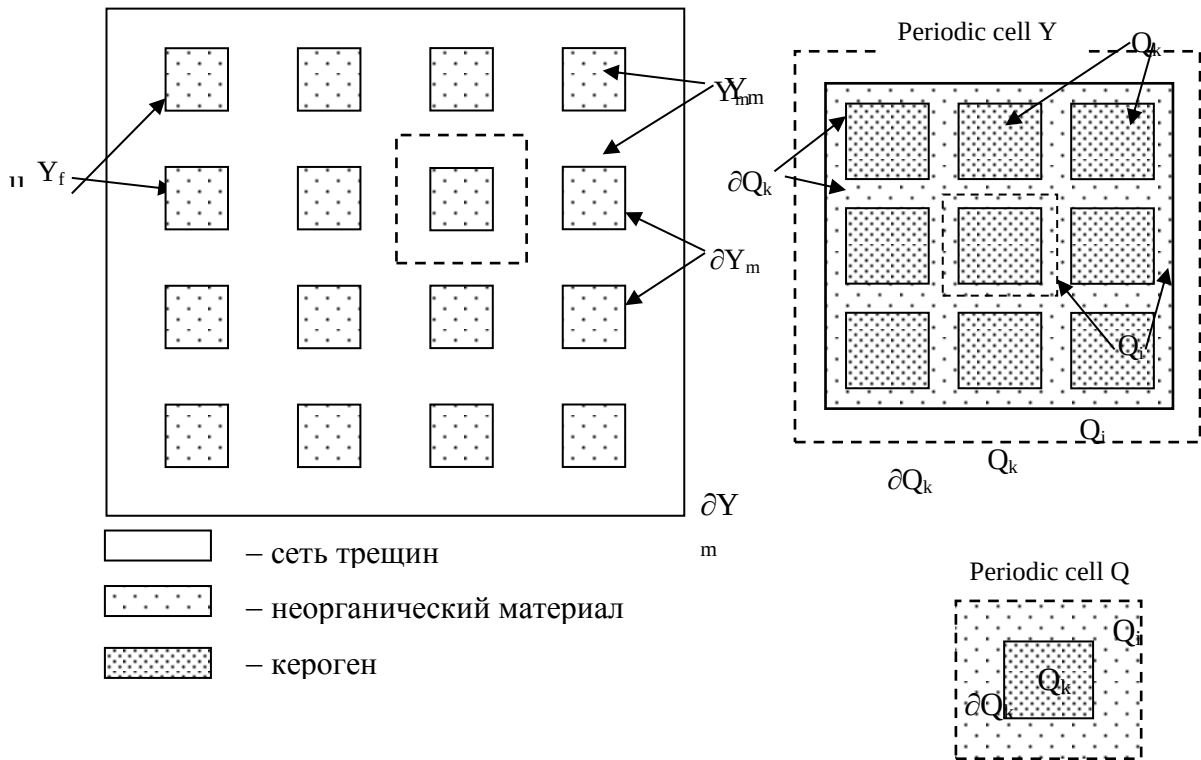


Рис. 2. Трёхмасштабная модель пористой среды.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ УРАВНЕНИЯ

Будем полагать, что свободный газ содержится в трещинах и порах неорганического материала, и основными механизмами для его переноса являются фильтрация и молекулярная диффузия. Адсорбированный газ содержится в нанопорах керогена, и основным механизмом для его переноса является поверхностная диффузия. Таким образом, баланс массы для такой системы можно описать следующим образом: в керогене

$$\phi_k \frac{\partial C_k}{\partial t} + (1 - \phi_k) \frac{\partial C_\mu}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\phi_k D_{ij}^k \frac{\partial C_k}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left((1 - \phi_k) D_{ij}^s \frac{\partial C_\mu}{\partial x_j} \right), \quad (1)$$

в неорганическом материале

$$\phi_i \frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\phi_i D_{ij}^i \frac{\partial C_i}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\phi_i v_i C_i), \quad (2)$$

в трещинах

$$\phi_f \frac{\partial C_f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\phi_f K_{ij}^L \frac{\partial C_f}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\phi_f v_i^f C_f), \quad (3)$$

где t - время; v - скорость переноса газа в неорганическом материале; v^f - скорость переноса газа в трещинах; ϕ_k - пористость керогена; ϕ_i - пористость неорганического материала; ϕ_f - пористость системы вторичных трещин в сланцах; K^L - коэффициент дисперсии трещин; C_i , C_k и C_f - количество свободного газа, измеряемое в молях на единицу объема пор, в неорганическом материале, керогене и трещинах, соответственно; C_μ - количество адсорбированного газа, измеряемое в молях, отнесенных к единице объема керогена; D^k , D^s , D^i - тензор диффузии свободного газа в керогене, тензор поверхностной диффузии адсорбированного газа в керогене и тензор диффузии газа в неорганическом материале, соответственно.

Определяющие уравнения (1)-(3) можно рассматривать как обобщения уравнений, описывающих транспорт газа в работе [1]. Далее, введём ещё два определяющих соотношения: уравнение состояния (предполагаем, что газ можно считать идеальным)

$$pV = \nu RT; \Rightarrow p = \frac{\nu}{V} RT = C RT, \quad (4)$$

и закон Дарси

$$v = -\frac{K}{\mu} \nabla p_i = -\frac{K}{\mu} RT \nabla C_i. \quad (5)$$

$$v^f = -\frac{K^f}{\mu} \nabla p_f = -\frac{K^f}{\mu} RT \nabla C_f.$$

Здесь ν - количество молей газа при температуре T и давлении p , R - газовая постоянная. K и K^f обозначают проницаемость неорганического материала и сети трещин соответственно, μ - вязкость. Для удобства предположим, что гравитационные эффекты незначительны, или же направление потока выбрано так, что они не проявляются.

И, наконец, еще одно уравнение требуется для количества газа, адсорбированного в керогене. Мы будем пользоваться уравнением

$$\frac{\partial C_\mu}{\partial t} = k_{des} [K(C_{\mu s} - C_\mu)C_k - C_\mu] \quad (6)$$

выведенным в [5]. Здесь $C_{\mu s}$ - максимум адсорбции монослоя газа, $K = k_{ads}/k_{des}$, k_{ads} и k_{des} - коэффициенты скорости адсорбции и десорбции соответственно. В стационарном состоянии $\partial C_\mu / \partial t = 0$, и уравнение (6) принимает вид изотермы Ленгмюра [6]

$$C_\mu = \frac{KC_{\mu s}C_k}{1 + KC_k} = F(C_k). \quad (7)$$

Предполагая, что функция F гладкая $\left(\frac{\partial C_\mu}{\partial t} = \frac{\partial F}{\partial C_k} \frac{\partial C_k}{\partial t}; \frac{\partial C_\mu}{\partial x_j} = \frac{\partial F}{\partial C_k} \frac{\partial C_k}{\partial x_j} \right)$, и принимая

во внимание (4) и (5), можно переписать уравнения (1)-(3) в виде

$$\left(\phi_k + (1 - \phi_k) \frac{\partial F}{\partial C_k} \right) \frac{\partial C_k}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left(\phi_k D_{ij}^k + (1 - \phi_k) D_{ij}^s \frac{\partial F}{\partial C_k} \right) \frac{\partial C_k}{\partial x_j} \right), \quad (8)$$

$$\phi_i \frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\phi_i D_{ij}^i + \phi_i \frac{K_{ij}}{\mu} RTC_i \right) \frac{\partial C_i}{\partial x_j} \right), \quad (9)$$

$$\phi_f \frac{\partial C_f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\phi_f K_{ij}^L + \phi_f \frac{K_{ij}^f}{\mu} RTC_f \right) \frac{\partial C_f}{\partial x_j} \right), \quad (10)$$

На поверхностях раздела между неорганическим материалом и керогеном, а также между неорганическим материалом и трещинами потребуем выполнения следующих условий

$$C_k = \psi_{km} C_i, \quad x \in \bigcup_k \partial Q_k, \quad t > 0, \quad (11)$$

$$C_i = \psi_{mf} C_f, \quad x \in \bigcup_m \partial Y_m, \quad t > 0, \quad (12)$$

Здесь ψ_{km} , ψ_{mf} являются функциями коэффициента формы и диффузионного переноса (газ проникает из керогена в неорганическую матрицу и из неорганической матрицы в трещины вследствие разницы концентраций).

Мы также потребуем выполнения условия непрерывности потока на границе раздела между керогеном и неорганической матрицей, а также между неорганической матрицей и системой трещин

$$\left[\left(\phi_i D_{ij}^i + \phi_i \frac{K_{ij}}{\mu} RTC_i \right) \frac{\partial C_i}{\partial x_j} \right] \cdot n_{Q_k} = \left[\left(\phi_k D_{ij}^k + (1 - \phi_k) D_{ij}^s \frac{\partial F}{\partial C_k} \right) \frac{\partial C_k}{\partial x_j} \right] \cdot n_{Q_k}, \quad t > 0 \quad (13)$$

$$\left[\left(\phi_i D_{ij}^i + \phi_i \frac{K_{ij}}{\mu} RTC_i \right) \frac{\partial C_i}{\partial x_j} \right] \cdot n_{Y_m} = \left[\left(\phi_f K_{ij}^L + \phi_f \frac{K_{ij}^f}{\mu} RTC_f \right) \frac{\partial C_f}{\partial x_j} \right] \cdot n_{Y_m}, \quad t > 0 \quad (14)$$

где n_{Q_k} и n_{Y_m} - внешние нормали к поверхностям раздела.

Чтобы замкнуть решаемую задачу её следует дополнить начальными условиями

$$C_k(x, 0) = C_{init}(x), \quad (15)$$

$$C_i(x, 0) = C_{init}(x), \quad (16)$$

$$C_f(x, 0) = C_{init}(x), \quad (17)$$

и внешними граничными условиями.

К примеру, можно предположить отсутствие потока через часть $\partial\Omega_1$ внешней границы и выполнение условий Дирихле на другой ее части ($\partial\Omega = \partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_2 \cup \partial\Omega_3$)

$$\left[\left(\phi_i D_{ij}^i + \phi_i \frac{K_{ij}}{\mu} RTC_i \right) \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] \cdot n = 0, \quad x \in \partial\Omega_1, \quad t > 0 \quad (18)$$

$$C|_{\partial\Omega_2} = C_1; \quad C|_{\partial\Omega_3} = C_2.$$

2. ПРОЦЕДУРА УСРЕДНЕНИЯ

Применим процедуру усреднения [7-9] к среде, в которой можно выделить три характерных пространственных масштаба: характерный масштаб нанопоровых включений керогена, характерный масштаб микропористой неорганической матрицы и характерный масштаб сети вторичных трещин. В целях последующего усреднения будем масштабировать периодическую структуру, используя малые параметры ε_1 и ε_2 ($0 < \varepsilon_1 < 1$, $0 < \varepsilon_2 < 1$). Обозначение $\Omega_f^{\varepsilon_1}$ используется для совокупности трещин $\varepsilon_1 Y_f$, $\Omega_m^{\varepsilon_1}$ - несвязное объединение блоков неорганического материала $\varepsilon_1 Y_m$, $\partial\Omega_m^{\varepsilon_1}$ - совокупность границ раздела $\partial(\varepsilon_1 Y_m)$. Таким образом, $\Omega = \Omega_f^{\varepsilon_1} \cup \Omega_m^{\varepsilon_1} \cup \partial\Omega_m^{\varepsilon_1}$. Аналогично можно записать $\Omega_m^{\varepsilon_1} = \Omega_i^{\varepsilon_2} \cup \Omega_k^{\varepsilon_2} \cup \partial\Omega_k^{\varepsilon_2}$, где $\Omega_i^{\varepsilon_2}$ - совокупность объемов

неорганического материала $\varepsilon_2 Q_i$, $\Omega_k^{\varepsilon_2}$ - совокупность включений керогена $\varepsilon_2 Q_k$, $\partial\Omega_k^{\varepsilon}$ - совокупность границ раздела $\partial(\varepsilon_2 Q_k)$. Процесс массопереноса газа будем рассматривать на временном интервале $t \in [0, T]$.

Для определения положения любой точки в пространстве введем следующие переменные: макроскопическая координата $x \in \Omega$, координата ξ_1 ($\xi_1 \in Y_{m,f}$), задающая положение точки в ячейке периодичности $\varepsilon_1 Y$, и координата ξ_2 ($\xi_2 \in Q_{i,k}$), задающая положение в ячейке периодичности $\varepsilon_2 Q$. В общем случае все величины теперь будут функциями координат x , ξ_1 и ξ_2 и времени t . В ячейке Y периодичность будет по локальной переменной ξ_1 , в ячейке Q : по локальной переменной ξ_2 .

Координаты x , ξ_1 и ξ_2 связаны соотношением

$$\xi_1 = \frac{x}{\varepsilon_1}, \quad \xi_2 = \frac{\xi_1}{\varepsilon_2} = \frac{x}{\varepsilon_1 \varepsilon_2} \quad (19)$$

Таким образом, уравнения (8)-(17) могут быть записаны в масштабированном виде в керогене

$$\left(\phi_k + (1 - \phi_k) \frac{\partial F}{\partial C_k} \right) \nabla_t C_k = \varepsilon_1^2 \varepsilon_2^2 \nabla_x \left(\left(\phi_k D^k + (1 - \phi_k) D^s \frac{\partial F}{\partial C_k} \right) \nabla_x C_k \right), x \in \Omega_k^{\varepsilon_1 \varepsilon_2}, t > 0 \quad (20)$$

$$C_k = \psi_{km} C_i, \quad x \in \partial\Omega_k^{\varepsilon_1 \varepsilon_2}, t > 0 \quad (21)$$

$$C_k = C_{init}, \quad x \in \Omega_k^{\varepsilon_1 \varepsilon_2}, t = 0 \quad (22)$$

в неорганическом материале

$$\phi_i \nabla_t C_i = \varepsilon_1^2 \nabla_x \left(\left(\phi_i D^i + \phi_i \frac{K}{\mu} RTC_i \right) \nabla_x C_i \right), x \in \Omega_i^{\varepsilon_1 \varepsilon_2}, t > 0 \quad (23)$$

$$C_i = C_{init}, \quad x \in \Omega_i^{\varepsilon_1 \varepsilon_2}, t = 0 \quad (24)$$

$$C_i = \psi_{mf} C_f, \quad x \in \partial\Omega_m^{\varepsilon_1}, t > 0$$

$$\varepsilon_1^2 \left[\left(\phi_i D^i + \phi_i \frac{K}{\mu} RTC_i \right) \nabla_x C_i \right] \cdot n_{Q_k} = \varepsilon_1^2 \varepsilon_2^2 \left[\left(\phi_k D^k + (1 - \phi_k) D^s \frac{\partial F}{\partial C_k} \right) \nabla_x C_k \right] \cdot n_{Q_k}, \quad (25)$$

$$x \in \partial\Omega_k^{\varepsilon_1 \varepsilon_2}, t > 0$$

в трещинах

$$\phi_f \nabla_t C_f = \nabla_x \left(\left(\phi_f K^L + \phi_f \frac{K^f}{\mu} RTC_f \right) \nabla_x C_f \right), x \in \Omega_f^{\varepsilon_1}, t > 0 \quad (26)$$

$$C_f = C_{init}, \quad x \in \Omega_f^{\varepsilon_1}, t = 0 \quad (27)$$

$$\left[\left(\phi_f K^L + \phi_f \frac{K^f}{\mu} RTC_f \right) \nabla_x C_f \right] \cdot n_{Y_m} = \varepsilon_1^2 \left[\left(\phi_i D^i + \phi_i \frac{K}{\mu} RTC_i \right) \nabla_x C_i \right] \cdot n_{Y_m}, \quad (28)$$

$$x \in \partial\Omega_m^{\varepsilon_1}, t > 0$$

2.1. Усреднение по ячейке периодичности Q

Решение задачи (20)-(25) будем искать в виде разложений в ряд по малому параметру ε_2 , т.к. усреднение проводится на масштабном уровне ячейки Q (уравнения могут также содержать и члены с малым параметром ε_1)

$$C_k = C_k^{(0)}(x, \xi_1, \xi_2, t) + \varepsilon_2 C_k^{(1)}(x, \xi_1, \xi_2, t) + \varepsilon_2^2 C_k^{(2)}(x, \xi_1, \xi_2, t) + \dots, \quad (29)$$

$$x \in \Omega, \quad \xi_1 \in Y_m, \quad \xi_2 \in Q_k, \quad t > 0,$$

$$C_i = C_i^{(0)}(x, \xi_1, \xi_2, t) + \varepsilon_2 C_i^{(1)}(x, \xi_1, \xi_2, t) + \varepsilon_2^2 C_i^{(2)}(x, \xi_1, \xi_2, t) + \dots, \quad (30)$$

$$x \in \Omega, \quad \xi_1 \in Y_i, \quad \xi_2 \in Q_i, t > 0.$$

Мы предполагаем, что функции $C_k^{(l)}, (l = 0, 1, \dots)$ Y -периодичны по переменной ξ_1 ($\xi_1 \in Y_m$) и Q -периодичны по переменной ξ_2 ($\xi_2 \in Q_k$). Функции $C_i^{(l)}, (l = 0, 1, \dots)$ будем считать Y -периодичными по ξ_1 ($\xi_1 \in Y_m$) и Q -периодичными по переменной ξ_2 ($\xi_2 \in Q_i$).

Подставив разложения (29)-(30) в соотношения (20)-(25), учитывая разложение $\nabla_x = \nabla_x + \frac{1}{\varepsilon_1} \nabla_{\xi_1} + \frac{1}{\varepsilon_1 \varepsilon_2} \nabla_{\xi_2}$, и приравняв коэффициенты при одинаковых степенях малого параметра ε_2 , мы получим рекуррентную цепочку уравнений.

Так, приравнявая коэффициенты при ε_2^0 , из уравнений (20)-(22) получим

$$\left(\phi_k + (1 - \phi_k) \frac{\partial F}{\partial C_k} \right) \nabla_t C_k^{(0)} = \nabla_{\xi_2} \left(\left(\phi_k D^k + (1 - \phi_k) D^s \frac{\partial F}{\partial C_k} \right) \nabla_{\xi_2} C_k^{(0)} \right) \quad (31)$$

$$x \in \Omega, \quad \xi_1 \in Y_m, \xi_2 \in Q_k, \quad t > 0$$

$$C_k^{(0)} = C_{init}, \quad x \in \Omega, \quad \xi_1 \in Y_m, \xi_2 \in Q_k, \quad t = 0 \quad (32)$$

$$C_k^{(0)} = \psi_{km} C_i^{(0)}, \quad x \in \Omega, \quad \xi_1 \in Y_m, \xi_2 \in \partial Q_k, \quad t > 0 \quad (33)$$

Подстановка разложений (29)-(30) в соотношения (23)-(25) после приравнивания коэффициентов при одинаковых степенях малого параметра ε_2 и последующего усреднения по ячейке периодичности Q , даёт независимость $C_i^{(0)}$ от переменной ξ_2

$$C_i^{(0)} = C_i^{(0)}(x, \xi_1, t) \quad (34)$$

Здесь усреднение по переменной ξ_2 определяется, как среднее значение на ячейке периодичности Q

$$\langle f \rangle_{\xi_2} = \frac{1}{|Q|} \int_Q f d\xi_2, \quad (35)$$

где $|Q|$ обозначает объём ячейки периодичности Q .

Будем искать $C_i^{(1)}$ в виде

$$C_i^{(1)}(x, \xi_1, \xi_2, t) = N_j(x, \xi_1, \xi_2, C_i^{(0)}) \left(\frac{\partial C_i^{(0)}(x, \xi_1, t)}{\partial \xi_{1j}} + \varepsilon_1 \frac{\partial C_i^{(0)}(x, \xi_1, t)}{\partial x_j} \right), \quad (36)$$

где $N_j(x, \xi_1, \xi_2, C_i^{(0)})$ являются ξ_2 -периодическими функциями, для которых $\langle N_j(x, \xi_1, \xi_2, C_i^{(0)}) \rangle_{\xi_2} = 0$ ($j = 1, 2, 3$). С учётом (34), (36) из уравнений (23)-(25) получим усреднённое уравнение для $C_i^{(0)}$

$$\langle \phi_i \rangle_{\xi_2} \frac{\partial C_i^{(0)}}{\partial t} = \varepsilon_1^2 \nabla \left(K^{eff} \nabla C_i^{(0)} \right) + q_k, \quad x \in \Omega, \quad \xi_1 \in Y_m, \quad t > 0 \quad (37)$$

с начальным условием

$$C_i^{(0)} = C_{init}, \quad x \in \Omega, \quad \xi_1 \in Y_m, \quad t = 0 \quad (38)$$

и условием на границе раздела

$$C_i^{(0)} = \psi_{mf} C_f, \quad x \in \Omega, \quad \xi_1 \in \partial Y_m, \quad t > 0 \quad (39)$$

В усреднённом уравнении (37) коэффициент $\langle \phi_i \rangle_{\xi_2}$ - эффективная пористость, определяемая согласно соотношению (35).

Эффективная проницаемость K^{eff} , также входящая в качестве коэффициента в усреднённое уравнение (37), определяется согласно соотношению

$$K^{eff} = \frac{1}{|Q|} \int_{Q_i} \left(\phi_i D^i + \phi_i \frac{K}{\mu} RTC_i^{(0)} \right) (\nabla_{\xi_2} N + I) d\xi_2, \quad (40)$$

и является усреднённым решением задачи на ячейке периодичности

$$\nabla_{\xi_2} \left(\left(\phi_i D^i + \phi_i \frac{K}{\mu} RTC_i^{(0)} \right) (\nabla_{\xi_2} N + I) \right) = 0 \quad (41)$$

$$\left[\left(\phi_i D^i + \phi_i \frac{K}{\mu} RTC_i^{(0)} \right) (\nabla_{\xi_2} N + I) \right] \cdot n_{Q_k} = 0 \quad (42)$$

Здесь и далее I означает единичную матрицу.

Последний член в правой части усредненного уравнения (37) имеет вид

$$q_k = -\frac{1}{|Q|} \int_{Q_k} \left(\phi_k + (1 - \phi_k) \frac{\partial F}{\partial C_k} \right) \nabla_i C_k^{(0)} d\xi_2, \quad (43)$$

и играет роль источника, описывая поступление десорбированного газа из нанопор керогена в неорганическую матрицу.

2.2. Усреднение по ячейке периодичности Y

Решения задачи (26)-(28) будем искать в виде разложений в ряд по малому параметру ε_1

$$C_f = C_f^{(0)}(x, \xi_1, t) + \varepsilon_1 C_f^{(1)}(x, \xi_1, t) + \varepsilon_1^2 C_f^{(2)}(x, \xi_1, t) + \dots, \quad (44)$$

$$x \in \Omega, \quad \xi_1 \in Y_f, \quad t > 0,$$

$$C = C^{(0)} = C^{(0)}(x, \xi_1, t) + \varepsilon_1 C^{(1)}(x, \xi_1, t) + \varepsilon_1^2 C^{(2)}(x, \xi_1, t) + \dots, \quad (45)$$

$$x \in \Omega, \quad \xi_1 \in Y_m, \quad t > 0.$$

Здесь введено переобозначение, а именно, $C_i^{(0)}$ есть C ($C_i^{(0)} = C$).

Далее предполагаем, что функции $C_f^{(l)}$ и $C^{(l)}$ ($l = 0, 1, \dots$) Y -периодичны по переменной ξ_1 и определены на Y_f и Y_m соответственно. Мы будем подставлять разложения (44)-(45) в уравнения (26)-(28), начальное и граничное условия, и приравнивать члены при одинаковых степенях малого параметра ε_1 . Полученную рекуррентную систему уравнений усредним по переменной ξ_1 на ячейке периодичности Y в соответствии с правилом определения среднего значения

$$\langle f \rangle_{\xi_1} = \frac{1}{|Y|} \int_Y f d\xi_1, \quad (46)$$

где $|Y|$ обозначает объем периодической ячейки Y .

В результате получим независимость $C_f^{(0)}$ от переменной ξ_1

$$C_f^{(0)} = C_f^{(0)}(x, t). \quad (47)$$

Будем искать $C_f^{(1)}$ в виде

$$C_f^{(1)}(x, \xi_1, t) = P_j(x, \xi_1, C^{(0)}) \frac{\partial C_f^{(0)}(x, t)}{\partial x_j}, \quad (48)$$

где $P_j(x, \xi_1, C_i^{(0)})$ являются ξ_1 - периодическими функциями, для которых $\langle P_j(x, \xi_1, C_i^{(0)}) \rangle_{\xi_1} = 0$ ($j = 1, 2, 3$). С учётом (47)-(48) из уравнений (26)-(28) получим усредненное уравнение для $C_f^{(0)}$

$$\phi_i^{eff} \frac{\partial C_f^{(0)}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{Y_{ij}}^{eff} \frac{\partial C_f^{(0)}}{\partial x_j} \right) + q_1 + q_2, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad x \in \Omega, \quad t > 0 \quad (49)$$

с начальным условием

$$C_f^{(0)}(x, 0) = C_{init}, \quad (50)$$

и граничными условиями

$$\left[\left(\phi_f K_{ij}^L + \phi_f \frac{K_{ij}^f}{\mu} RTC_f^{(0)} \right) \frac{\partial C_f^{(0)}}{\partial x_j} \right] \cdot n_{\Omega_1} = 0, \quad x \in \partial\Omega_1, \quad t > 0 \quad (51)$$

$$C_f^{(0)}|_{\partial\Omega_2} = C_1; \quad C_f^{(0)}|_{\partial\Omega_3} = C_2.$$

В усреднённом уравнении (49) коэффициент ϕ_i^{eff} определяется в соответствии с зависимостью (46), т.е. $\phi_i^{eff} = \langle \phi_i \rangle_{\xi_1}$.

Коэффициент K_Y^{eff} определяется согласно соотношению

$$K_Y^{eff} = \frac{1}{|Y|} \int_{Y_f} \left(\phi_f K^L + \phi_f \frac{K^f}{\mu} RTC_f^{(0)} \right) (\nabla_{\xi_1} P + I) d\xi_1, \quad (52)$$

и является усреднённым решением следующей задачи на ячейке периодичности

$$\nabla_{\xi_1} \left(\left(\phi_f K^L + \phi_f \frac{K^f}{\mu} RTC_f^{(0)} \right) (\nabla_{\xi_1} P + I) \right) = 0 \quad (53)$$

$$\left[\left(\phi_f K^L + \phi_f \frac{K^f}{\mu} RTC_f^{(0)} \right) (\nabla_{\xi_1} P + I) \right] \cdot n_{Y_m} = 0 \quad (54)$$

Последние два члена в правой части усредненного уравнения (49) имеют вид

$$q_1 = -\frac{1}{|Y|} \int_{Y_m} \langle \phi_i \rangle_{\xi_2} \nabla_t C^{(0)} d\xi_1, \quad (55)$$

$$q_2 = -\frac{1}{|Y||Q|} \int_{Y_m} \left(\int_{Q_k} \left(\phi_k + (1 - \phi_k) \frac{\partial F}{\partial C_k} \right) \nabla_t C_k^{(0)} d\xi_2 \right) d\xi_1 \quad (56)$$

и играют роль источников, описывая поступление газа из неорганической матрицы и керогеновых включений в сеть вторичных трещин.

Таким образом, в результате процедуры асимптотического усреднения была получена усреднённая макроскопическая задача (49)-(56), решением которой является распределение концентрации, а, следовательно, также давления и скорости газа в пространстве с течением времени. Усредненные коэффициенты в уравнении (49) находятся: для ϕ_i^{eff} согласно определению среднего значения по переменной ξ_1 , а для коэффициента K_Y^{eff} по зависимости (52). Концентрация $C^{(0)} = C_i^{(0)}$, входящая в соотношение (55) является решением задачи (40)-(43) с условиями (38)-(39) на предыдущем масштабном уровне. Концентрация $C_k^{(0)}$, входящая в соотношение (56) является решением задачи (31)-(33).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлена математическая модель массопереноса газовой фазы в сланцевых породах с учётом взаимодействия процессов, происходящих на масштабах трещин, микропор неорганической матрицы и нанопор керогеновых включений. Модель может найти своё применение в дальнейшем изучении процессов переноса вещества в средах с иерархической структурой неоднородностей, в частности при прогнозировании добычи газа из сланцевых пород. Получена система дифференциальных уравнений, описывающих процессы переноса газа в многомасштабной пористой среде. Макроскопические уравнения для трёхмасштабной модели получены посредством двух

последовательно реализуемых стадий усреднения. При этом первая стадия усреднения на уровне наименьшего характерного масштаба (ячейки периодичности Q) даёт усреднённое описание на следующем масштабном уровне. Последующее усреднение (по ячейке периодичности Y) приводит к усреднённому макроскопическому описанию. Коэффициенты в усреднённых уравнениях определяются из решений соответствующих задач на ячейке. Члены, выступающие в роли источников в усреднённых уравнениях, описывают обмен веществом между включениями керогена, неорганической матрицей и системой вторичных трещин.

ЛИТЕРАТУРА

1. Akkutlu I.Y., Fathi E. Multi-scale Gas Transport in Shales with Local Kerogen Heterogeneities // SPE Journal. - 2012.-V.17(4). - P.1002-1011.
2. Fathi E., and Akkutlu I.Y. Matrix Heterogeneity Effects on Gas Transport and Adsorption in Coalbed and Shale Gas Reservoir // Journal of Transport in Porous Media. - 2012. - V.80(2). - P. 281-304.
3. Fathi E., and Akkutlu I.Y. Mass Transport of Adsorbed-phase in Stochastic Porous Medium with Fluctuating Porosity Field and Nonlinear Gas Adsorption Kinetics // Journal of Transport in Porous Media. -2012. - V. 91(1). - P.5-33.
4. Ambrose R.J., Hartman R.C., Diaz-Campos M., Akkutlu I.Y., and Sondergeld C.H. Shale Gas in-place Calculations Part I - New Pore-scale Considerations // SPE Journal. - 2012. - V.17(1). - P.219-229.
5. Do D.D., Wang K. A new model for the description of adsorption kinetics in heterogeneous activated carbon // Carbon. -1998. - V.36(10). - P.1539-1554.
6. Langmuir I. The evaporation, condensation and reflection of molecules and the mechanism of adsorption // Physical Review. - 1916. - V. 8(2). - P.149-176.
7. Бахвалов Н. С., Панасенко Г. П. Осреднение процессов в периодических средах. - М.: Наука, 1984, -352 с.
8. Douglas J., Arbogast T. Dual porosity models for flow in naturally fractured reservoirs/ In "Dynamic of Fluids in Hierarchical Porous Formations." - Academic Press, London. - Cushman J.Y., ed. - 1990. - P.177-221.
9. Skjetne E., Auriaugh J.L. Homogenization of Wall-Slip Gas Flow through Porous Media // Transport in Porous Media. - 1999. -V. 36. - P. 293-306.

ПРИЧИНЫ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА КАЛЬЦИТ-АРГОНИТ КРИСТАЛЛОВ НАКИПИ CaCO_3 В ОМАГНИЧЕННОМ ВОДНОМ ПОТОКЕ

Левин Ю.К.

ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г.Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

Как известно, для борьбы с накипеобразованием используют обработку водного потока магнитным полем, что просто реализуется и экономично в эксплуатации.

В данной работе популярно поясняется один из эффектов, отмечаемых при омагничивании водного потока - преимущественный состав взвеси в виде кристаллов CaCO_3 (арагонит). Согласно ранее предложенной модели магнитное поле ускоряет коагуляцию критических зародышей в пересыщенном водном потоке. При этом возникает гомогенная генерация новых зародышей для поддержания их равновесной концентрации. Полиморфизм карбоната кальция CaCO_3 допускает формирование кристаллов в 3 различных фазах - ватерит, арагонит и кальцит. Показано, что у элементарной ячейки кристалла энергия образования возрастает, а вероятность формирования понижается в ряду ватерит, арагонит и кальцит. Однако вследствие метастабильности ватерита преобладающей взвесью в растворе оказываются кристаллы арагонита, который имеет большую плотность и меньшую поверхность кристаллической ячейки, чем кальцит. Этим дополняется предложенная ранее модель и объясняются ранее непонятные экспериментальные результаты.

1. ИСХОДНАЯ СИТУАЦИЯ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Как известно, образование накипи является серьезной проблемой теплоэнергетики, поскольку каждый миллиметр осадка на стенке нагревательного котла приводит к потере мощности нагрева на 5-10%. В общемировых масштабах годовой ущерб составляет многие миллиарды долларов.

В 1936 году бельгийский инженер Т.И.С. Вермейрен обнаружил, что при нагревании воды, пересекающей силовые линии магнитного поля, на теплообменной поверхности не образуется накипь. Первый в мире патент на аппарат магнитной обработки воды был выдан ему 01.10.1946 г.

С тех пор началось активное применение магнитных полей для обработки жидкостей не только в теплоэнергетике, но и в самых различных областях. Однако долгое время наука не могла понять причины проявления всех этих эффектов, поскольку вода не обладает магнитными свойствами.

В ряде работ [1-5] рассмотрен вопрос о моделировании механизма магнитной обработки с целью снижения накипи. Построена математическая модель процесса кристаллизации солей накипи на стенки канала и взвесь. При этом были уточнены известные результаты расчета характеристик коллоидных наносистем при воздействии магнитного поля. Учтено, что процесс осаждения молекул солей накипи на стенку теплообменника протекает по другим законам, чем их выпадение на частицах взвеси в объеме водного потока - интенсивность процесса массопереноса из раствора на взвесь на четыре порядка больше, чем на стенку, что является важным фактором снижения накипи.

Также учтен размерный эффект, характерный для поведения нанообъектов. Существо указанного эффекта состоит в уменьшении коэффициента поверхностного натяжения на границе твердой и жидкой фаз. Это приводит к увеличению концентрации критических зародышей по экспоненциальному закону и также принимает участие в формировании противонакипного эффекта. Из сравнения результатов расчета с экспериментом оценена величина параметра Толмена, характеризующего толщину переходного слоя для зародышей CaCO_3 в воде, что представляет самостоятельный

научный интерес. Однако одна из важных особенностей поведения омагниченного потока не затрагивалась в работах. Как известно, накипь на стенке теплообменника обычно имеет плотную с большим трудом удаляемую структуру с кристаллографической решеткой кальцита. После омагничивания водного потока образуемая в водном объеме накипь отличается рыхлой поликристаллической структурой, определяемой как поликристаллы арагонита. Теоретические работы не могли дать убедительного пояснения экспериментальных данных.

Вместе с тем, информация, необходимая для разгадки этой тайны, широко известна и легко будет показать, что при ее учете наблюдаемый феномен теоретически почти прозрачен.

2. СУЩЕСТВУЮЩИЕ МОДЕЛИ ЯВЛЕНИЯ

2.1. Формирование отложений на стенке канала

Сначала обратимся к мнению различных авторов о причинах наблюдаемого эффекта. Относительно осаждения модификации кальцита на стенках в работах [6,7] справедливо отмечено следующее. Образование накипи на поверхности теплообменной аппаратуры по своей физико-химической природе является процессом кристаллизации на гетерогенной поверхности. Движущая сила и первопричина процесса - пересыщение, то есть превышение фактической концентрации кристаллизующейся соли над ее растворимостью в данных термодинамических условиях. Процесс кристаллизации состоит из стадии зародышеобразования и стадии роста кристаллов, которые характеризуются своей кинетикой. Кинетика кристаллизации зависит от величины кристаллографического несоответствия кристаллизующейся соли и поверхности. Для прохождения процесса кристаллизации параметры кристаллических решеток материалов поверхности и кристаллизующегося вещества не должны отличаться более чем на 20% (пороговое значение кристаллографического несоответствия - 0,20). Чем меньше кристаллографическое несоответствие, тем с большей интенсивностью поверхность инициирует образование зародышей кристаллизующегося вещества, тем меньше пересыщение, при котором это происходит. Карбонат кальция - главный виновник появления накипи - может кристаллизоваться в двух модификациях: кальцита и арагонита.

Поскольку в воде всегда содержится растворенный кислород и углекислый газ, то при контакте со стальной поверхностью теплообмена образуются оксид железа и карбонат железа (сидерит). Кристаллографическое несоответствие кристаллов оксида железа/кальцит и сидерита/кальцит составляет 0,027 и 0,054. Кристаллографическое несоответствие арагонита составляет 0,191.

Поскольку арагонит имеет кристаллографическое несоответствие к сидериту в 3,5 раза выше, чем у кальцита, то именно последняя кристаллическая структура и будет с большей вероятностью кристаллизоваться на стальной поверхности теплообменника. Кроме того, у арагонита более низкая адгезия со сталью и ниже когезия между кристаллами. То есть, арагонит, даже после кристаллизации на стальной поверхности, будет уноситься потоком жидкости в виде отдельных кристаллов. Поэтому в обычных условиях основной структурой, кристаллизующейся на поверхности теплообменной температуры, является кальцит, о чем справедливо сказано в работе [7].

2.2. Формирование кристаллов взвеси

Там же отмечено, что причиной появления взвеси кристаллов карбоната кальция в форме арагонита является пересечение жидкостью магнитных силовых линий, вызывающее гидромагнитный резонанс в гидромагнитной системе. Этим автор [7] и поясняет отсутствие накипи на поверхности теплообменной аппаратуры.

С обоснованием последнего заключения позволим себе не согласиться, поскольку «магнитогидродинамический резонанс в потоке воды» не получил какого-либо научного обоснования, не раскрыта его физическая сущность. В нашей модели [1-5] снижение

накипи на стенке объясняется тем, что большая поверхность множества взвешенных кристаллических зародышей, появляющихся в результате гомогенной генерации, просто «отсасывает» на себя поток кристаллизующихся солей, сокращая тем самым поток накипи на стенки трубы. Можно предложить простую аналогию. Если включить пылесос в центре запыленного объема комнаты, то у всех пылинок появится составляющая вектора скорости к центру - в сторону от стенок, что и снизит их запыленность.

В другой работе [8] предложена гипотеза о том, что энергетический уровень кристаллографической структуры арагонита выше, чем у кальцита на 28 eV. В содержащем ионы турбулентном потоке должны, по мнению авторов [8], генерироваться вторичные магнитные поля с индукцией 45 Тл, достаточные для компенсации указанного выше энергетического несоответствия и фазового перехода кальцита в арагонит. С этим мнением также трудно согласиться, поскольку возможность генерации столь сильных магнитных полей в слабо проводящей жидкости не получила научного обоснования.

В работах ряда других авторов [9-11] приведены результаты экспериментов, подтверждающих преимущественное содержание кристаллов арагонита в омагниченной воде.

3. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФАЗ CaCO_3

Вопрос, касающийся совместного существования различных кристаллографических фаз CaCO_3 (кальцит, арагонит, ватерит) и их взаимного перехода одна в другую, тесно связан с кристаллографическими характеристиками указанных минералов и лежит в сфере интересов кристаллохимии. Это специальный раздел кристаллографии, занимающийся изучением структуры и свойств кристаллической решетки, являющейся важной особенностью кристаллов. Она определяет все свойства веществ, которые выделяют их в обособленный класс объектов. Одно из основных понятий кристаллохимии - это элементарная ячейка, представляющая собой наименьший по объему параллелепипед, внутри и в узлах которого располагаются атомы или молекулы, и повторение которого в пространстве позволяет восстановить структуру кристаллической решетки. Элементарная ячейка описывает минимальный блок химической структуры кристаллической решетки.

Интересующие нас две полиморфные модификации карбоната кальция CaCO_3 - кальцит, арагонит и ватерит, описываются одной химической формулой CaCO_3 , но отличаются пространственным расположением атомов.

Арагонит имеет кристаллическую решетку ромбической сингонии, более плотно упакованную, чем гексагональная - у кальцита и ватерита. Соответственно, он более плотный (2,9-3,0 г/см³) по сравнению с кальцитом (2,6-2,8 г/см³) и ватеритом (2,54 г/см³). Последний образует тонкие нитевидные кристаллы (диаметр менее 01 мм), объединенные в сферические агрегаты и переходит постепенно в другие формы - кальцит и арагонит. Практикам он интересен тем, что его скорое преобразование в другие стабильные формы карбоната кальция под воздействием воды помогает сделать цемент прочным и водостойким. Теоретиками его атомная структура до сих пор неизвестна (по мнению профессора П.Гиберта, 26.04.2013). В частности, было установлено, что ватерит - это не единая структура и что он состоит из двух различных кристаллических структур, которые сосуществуют в псевдоединном кристалле, второй из которых встречается лишь в наномасштабе.

Некоторые термодинамические и кристаллографические параметры арагонита кальцита и ватерита сведены в таблице 1 [12]. По этим данным элементарная ячейка кальцита и ватерита имеет вид вертикальной призмы (в основании ромб с углом $\pi/3$ при вершине), а арагонита - подобна прямоугольному параллелепипеду. Вид этих кристаллических ячеек приведен на рис.1, 2 и 3.

Таблица 1

Модификация CaCO_3	Плотность г/см^3	Энергия Гиббса кДж/моль	Молекулярный объем $\text{см}^3/\text{моль}$	Размеры сторон ячейки, Å			Объем ячейки, Å ³	Площади поверхности элемент. ячеек Å ²	Число формуль- ных единиц Z
Calcit	2.71	92.9	36.9	4.99	4.99	17.06	371	383.8	6
Aragonit	2.95	88.7	33.9	4.95	4.95	7.96	195	255.6 Å ²	4
Vaterit	2.54			4.13	4.13	8.49	145	169.9	6

На рис.1 видно, что ячейка арагонита содержит 4 молекулы CaCO_3 , каждая из которых составлена атомом кальция и планарной группой атомов CO_3 . Это соответствует значению формульного числа $Z=4$. Иллюстрация, найденная для кальцита, менее удачна, поскольку содержит больше молекул, чем одна элементарная ячейка кальцита с $Z=6$. Аналогична ей и структура ватерита, также имеющая вид вертикальной призмы с ромбическим основанием и значением числа $Z=6$. Изображение ячейки ватерита более схематично, по видимому, в связи с меньшей изученностью минерала.

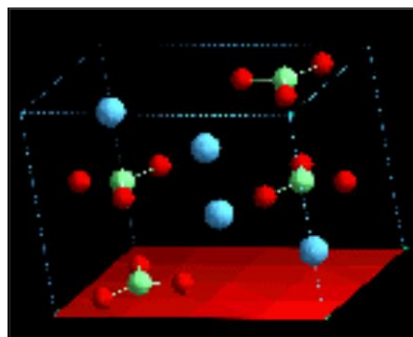


Рис.1. Строение элементарной кристаллической ячейки арагонита.

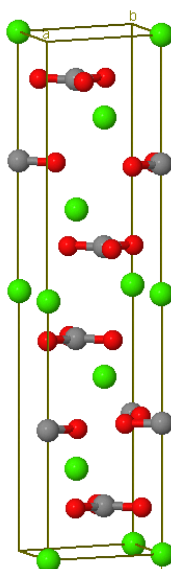


Рис.2. Структура кристаллической ячейки кальцита.

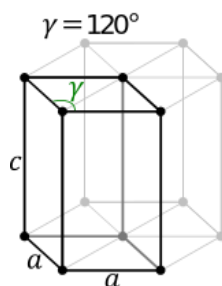


Рис.3. Структура кристаллической ячейки ватрита.

Следует отметить, что стандартные теплоты образования кальцита и арагонита, как видно из таблицы 1, почти одинаковы и не дают реального преимущества при формировании того или иного морфологического варианта. Это опровергается известными данными и объясняется тем, что указанные характеристики выведены для бесконечного объема среды, т.е. без учета границ кристалла. А как известно, при изучении наноразмерных объектов существенную роль начинает играть фактор поверхности. Вместе с тем, соотношение энергий Гиббса и молекулярных объемов кальцита и арагонита указывает на большую вероятность гомогенной генерации последнего. С учетом изложенного для получения конкретных оценок целесообразно рассмотреть на наномасштабном уровне влияние морфологических особенностей фаз на их склонность к гомогенной генерации в водной среде.

4. МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ФАЗ CaCO_3

Выше указывалось, что модель механизма магнитной обработки содержит этап гомогенной генерации зародыша. Как известно, при этом с наибольшей вероятностью формируется объем твердой фазы, каким является элементарная ячейка, с минимальной затратой энергии. Именно она задает стартовое направление последующего роста всех элементов кристалла вплоть до формирования из него (за счет гетерогенной кристаллизации) стабильного критического зародыша с вероятностью, определяемой стандартным образом, например в работах [2,3]. Критический зародыш принято называть стабильным, поскольку вероятности сорбции на него молекул и их десорбции одинаковы. Поэтому в растворе при стабильных термодинамических условиях устанавливается равновесная концентрация таких частиц [13]. Вероятность P гомогенной генерации зародыша определяется с учетом работы образования зародыша (энергии Гиббса ΔG)

$$P \sim \exp\left(\frac{-\Delta G}{k_B T}\right) \quad (1)$$

$$\text{где } \Delta G = \frac{\sum_{i=1}^6 S_i \sigma_{m.ж.}}{3}, \quad (2)$$

$S_i, \text{ м}^2$ - площадь i -й грани кристалла, $\sigma_{m.ж.}, \text{ Дж/м}^2$ - удельная поверхностная энергия границы раздела твердой и жидкой фаз.

Отношение вероятностей зарождения морфологических вариаций - кальцита P_{cal} арагонита P_{ar} и ватерита P_{vat} определяется выражениями

$$\frac{P_{ar}}{P_{cal}} = \exp\left(\frac{\sum_{i=1}^6 S_{cali}}{\sum_{i=1}^6 S_{ari}}\right) \quad (3)$$

$$\frac{P_{vat}}{P_{cal}} = \exp \left(\frac{\sum_{i=1}^6 S_{cali}}{\sum_{i=1}^6 S_{ari}} \right) \quad (4)$$

Площади поверхности элементарных ячеек кальцита, арагонита и ватерита, соответственно, $\sum_{i=1}^6 S_{cali}$, $\sum_{i=1}^6 S_{ari}$ и $\sum_{i=1}^6 S_{vati}$, рассчитанные как сумма боковых сторон и удвоенного основания соответствующих призм, также приведены в таблице

Отсюда с учетом (1-4) получим

$$P_{cal}:P_{vat}:P_{ar} = 1 : 9.58 : 4.48. \quad (5)$$

Таким образом, зарождение минимального зародыша в форме кальцита наименее вероятно. Наибольшую вероятность зародышеобразования, по нашей оценке (5), имеет ватерит. Это согласуется с его известной весьма низкой растворимостью $C_{vat}=0,0011$ г/л, существенно меньшей, чем у кальцита $C_{cal}=0,014$ г/л и арагонита $C_{ar}=0,015$ г/л. Склонность ватерита к гомогенной генерации, выражаемая соотношением (5), подтверждена экспериментом [14,15], где при активировании процесса кристаллизации ультразвуковым полем получена практически чистая фаза ватерита. Авторы работы [16] также отмечали, что «образующийся на первоначальном этапе карбонат кальция представлял собой ватерит, метастабильная полиморфная модификация карбоната кальция) с небольшой примесью кальцита». На мысль о метастабильности ватерита наводит его сравнительно большое формульное число $Z=6$ и наименьшая среди всех модификаций $CaCO_3$ плотность. Естественно предположить, что кристаллизуясь, ватерит будет переходить в фазу арагонита, в силу отмеченной выше метастабильности и наших оценок (5). Эти предположения подтверждены в работе [17], где выпариванием в различных условиях пересыщенных водных растворов получали осадок с содержанием 72-54% арагонита, 16-21% кальцита и 12-25% ватерита. Таким образом, генерацию, в основном, арагонита в объеме пересыщенного раствора при его омагничивании в теплоэнергетических установках можно объяснить соотношением физических и кристаллографических характеристик полиморфных модификаций $CaCO_3$.

Изменение характера накипи на стенках, где после омагничивания потока обнаруживаются отложения арагонита, можно на качественном уровне объяснить следующим образом (метастабильную фазу - ватерит не рассматриваем). Напомним, что из-за отсутствия коагуляции в объеме неомагниченного потока взвеси не было, массоперенос $CaCO_3$ на стенку осуществлялся из пересыщенного раствора и контролировался законом кристаллографического несоответствия, в соответствии с которым преимущественно осаждался кальцит. После омагничивания, с одной стороны, отложение кальцита на стенки уменьшается (массоперенос переключился на взвесь), а с другой - увеличивается концентрация в объеме воды зародышей арагонита (гомогенная генерация для восстановления равновесной концентрации). Поэтому арагонит в ходе турбулентной диффузии может создавать отложения на стенке трубы.

5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

При оценке достоверности полученных выводов надо помнить, что любые модели, в том числе и рассмотренная, не могут точно воспроизводить рассматриваемые эффекты и приводить к точным количественным соотношениям. Элементарная ячейка, содержащая всего несколько молекул, не является твердым кристаллом. Закономерности (1), (2) выведены для сферических твердых поверхностей. Вместе с тем, учитывая данные надежных кристаллографических измерений, таких как число формульных единиц Z , объем элементарных кристаллических ячеек, плотность кальцита, арагонита и ватерита, можно с полной очевидностью прийти к следующим выводам. Для появления, в конечном

итоге, макрокристалла той или иной морфологии сначала должно сформироваться некое стартовое уплотненное образование («облако») молекул с промежуточной длиной расстояний между ними - короче, чем в жидкости, но длиннее связей в кристалле, близкое к расплаву. Приходя к состоянию с минимальной потенциальной энергией, это облако будет сжиматься, переходя в твердую фазу, когда все атомы займут свои локальные положения в сформированном таким образом кристалле. Это напоминает процесс затвердевания расплава. Арагонит имеет более плотную и компактную материальную структуру по сравнению с другими полиморфными конкурентами. У него поверхность ячейки меньше, чем у кальцита. Поэтому затраты энергии тепловой флуктуации на формирование арагонита меньше, чем кальцита. Правда, поверхность ячейки у него больше, чем у ватерита, однако этот недостаток покрывается большей плотностью арагонита, компактностью упаковки в реальном кристалле по сравнению с ватеритом. Значит, по соображениям экономии затрат на свое формирование арагонит превосходит конкурентов и процесс его формирования более вероятен, что и обеспечивает его реализацию в натуральных экспериментах. Таким образом, не претендуя на точные количественные оценки, можно уверенно сказать, что общие принципы, которыми руководствуется Природа в реальном мире, один из важнейших - экономия энергии, дает основания считать обоснованными выше полученные выводы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе рассмотрена модель снижения накипи после магнитной обработки пересыщенного растворами солей CaCO_3 водного потока. Ранее многими авторами проблема трактовалась путем сопоставления свойств двух кристаллографических фаз CaCO_3 - кальцита и арагонита. Однако проведенный анализ показал, что к рассмотрению должна быть привлечена и третья из полиморфных модификаций - ватерит, который формируется на начальном этапе гомогенной кристаллизации из пересыщенного раствора после его магнитной обработки.

Напомним, что согласно ранее предложенной модели, магнитное поле ускоряет коагуляцию критических зародышей в пересыщенном водном потоке. При этом возникает гомогенная генерация новых зародышей для поддержания их равновесной концентрации. Полиморфизм карбоната кальция CaCO_3 допускает формирование кристаллов в 3 различных фазах - ватерит, арагонит и кальцит. Показано, что у элементарной ячейки кристалла энергия образования возрастает, а вероятность формирования понижается в ряду ватерит, арагонит и кальцит. Однако вследствие метастабильности ватерита, связанной, возможно, с его аномально низкой плотностью (на 13.6% меньше, чем у арагонита) преобладающей взвесью в растворе оказываются кристаллы арагонита, который имеет большую плотность и меньшую на 33% поверхность кристаллической ячейки, чем кальцит. Этим дополняется предложенная ранее модель. Эти результаты являются теоретическим обоснованием экспериментов [6-7,9-11], где и было обнаружено преимущественное содержание кристаллов арагонита в омагниченном водном потоке.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кошоридзе С.И., Левин Ю.К. // Теплоэнергетика. 2011. №7. С.13-16.
2. Кошоридзе С.И., Левин Ю.К. Модель процесса осаждения накипи в теплоэнергетических установках с магнитной обработкой воды. / Механика композиционных материалов и конструкций. Сб. трудов IV-го Всероссийского симпозиума в 2-х томах. Том 1. Москва, 4-6 декабря 2012г. - М.:ИПРИМ РАН, 2012, с.174-181.
3. Кошоридзе С.И., Левин Ю.К. // Теплоэнергетика. 2013. №3. С.74-77.

4. *Кошоридзе С.И., Левин Ю.К.* / Материалы X международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2014) 25-31 мая 2014 г. Алушта. М.: Изд-во МАИ, 2014. С.557-559.
5. *Кошоридзе С.И., Левин Ю.К.* // Фундаментальные исследования, №9, 2014 с.2433-2439.
6. *Класен В.И.* Омагничивание водных систем. М.: Химия, 1982г.111с.
7. *Присяжнюк В. А.* Физико-химические основы предотвращения кристаллизации солей на теплообменных поверхностях // Сантехника, Отопление, Кондиционирование (С.О.К). 2003. №10. С.26-30.
8. *A.C.Cefalas, S.Kobe, G.Drazic et.al.* // Nanocrystallization of CaCo₃ at solid/liquid interfaces. - Applied Surface Science, 2008, p
9. *C. Gabrielli, R. Jaouhari, G. Maurin and M. Keddam.* //Magnetic water treatment for scale prevention. - Wat.Res. Vol.35, №13, 2001, pp.3249-3259.
10. *L.C.Lipus, D.Dobersek.* Influence of magnetic field on the aragonite precipitation// Chem. Eng. Sci. 62 (2007) pp.2089-2095.
11. *S.Kobe, G.Drazic, P.J. McGuiness, J.Strazisar* // The Influence of magnetic field on the cristallization form of calcium carbonate and testing of magnetic water treatment device.- Journal of Magnetism and Magnetic materials 236 (2001) pp.71-76.
12. Сайт интернет <https://ru.wikipedia.org/wiki>
13. *Лифшиц Е.М., Питаевский Л.* Физическая кинетика (Ландау Л.Д, Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Том 10)М.: Изд. «Наука». 1979.528с.
14. *Знаменская И.В.* Новые возможности управления агломерацией наночастиц и их использование при решении некоторых радиохимических задач / Автореф. дисс. на соискание ученой степени кандидата химических наук М., МГУ им. М.В.Ломоносова, 2006.
15. *Бердоносков С.С., Знаменская И.В., Мелихов И.В.* // Механизм перехода ватерита в кальцит в ультразвуковом поле//Неорганические материалы, 2005. т.41. №12. стр. 1483 1487.
16. <http://www.chemport.ru/rss.xml>
17. *Маланова Н.В., Косинцев В.И., Сечин А.И. и др.* Исследование физико-химических свойств осадков солей временной жесткости современными методами анализа // Фундаментальные исследования, сер. Хим. Науки, №6, 2013, с.323.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОДВОДНОЙ УДАРНОЙ ВОЛНЫ С ПРЕПЯТСТВИЕМ В ПРИСУТСТВИИ ПУЗЫРЬКОВОГО ЭКРАНА

Суров В.С., Березанский И.В., Степаненко Е.Н.

*Южно-Уральский государственный университет
(Национальный исследовательский университет), г. Челябинск, Россия*

РЕЗЮМЕ

Описан модифицированный метод Годунова, предназначенный для интегрирования гиперболических уравнений обобщенно-равновесной модели в дивергентной форме, с использованием которого исследована задача взаимодействия подводной ударной волны с препятствием при наличии пузырькового экрана.

Ключевые слова: односкоростная многокомпонентная смесь, гиперболические системы уравнений, метод Годунова, линейризованный риманов решатель, математическое моделирование.

ВВЕДЕНИЕ

Известны возможности пузырьковых экранов, используемые, например, для защиты от взрывных нагрузок [1]-[4]. В упомянутых работах при анализе применялись в основном изотермические модели газожидкостной среды [5]-[7], причем рассматривались одномерные задачи.

В данной работе используется гиперболическая обобщенно-равновесная (ОР) модель [8], в уравнения которых введены силы межфракционного взаимодействия. Применение ОР модели позволяет снять противоречия, присущие ранним моделям. В частности, при использовании изотермической модели в задаче о движении ударной волны (УВ) по газожидкостной смеси в предположении несжимаемости жидкой фракции за ее фронтом происходит полное схлопывание газовых пузырьков вне зависимости от силы УВ и доли газа в невозмущенной смеси, что противоречит физике явления. Кроме того, в рамках изотермической модели невозможно объяснить явление сонолюминисценции [9].

Для адиабатического варианта ОР модели дифференциальные уравнения n -компонентной смеси с первыми m сжимаемыми фракциями имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) &= 0, \quad \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\varepsilon + \frac{1}{2} \mathbf{u}^2 \right) \right] + \operatorname{div} \left\{ \left[\rho \left(\varepsilon + \frac{1}{2} \mathbf{u}^2 \right) + p \right] \mathbf{u} \right\} &= 0, \\ \frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_k \mathbf{u}) &= 0, \quad \frac{\partial \rho_k \mathbf{u}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_k \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla (\alpha_k p) = \mathbf{f}_k, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho_k \left(\varepsilon_k + \frac{1}{2} \mathbf{u}^2 \right) \right] + \operatorname{div} \left\{ \left[\rho_k \left(\varepsilon_k + \frac{1}{2} \mathbf{u}^2 \right) + \alpha_k p \right] \mathbf{u} \right\} &= \mathbf{f}_k \cdot \mathbf{u} \quad k = 1, \dots, m-1, \\ \frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + \operatorname{div}(\alpha_l \mathbf{u}) &= 0 \quad l = m+1, \dots, n, \end{aligned} \quad (1)$$

где $\mathbf{f}_k$ - плотность результирующей силы, действующей на k -ю составляющую смеси со стороны остальных фракций; p - давление; $\mathbf{u}$ - вектор скорости; α_k - объемная доля k -й фракции; ε - удельная внутренняя энергия; ρ_k^0 - истинная (физическая) плотность; $\rho_k = \alpha_k \rho_k^0$ - приведенная плотность; $\rho = \sum_{i=1}^n \alpha_i \rho_i^0$ - плотность смеси.

После исключения из (1) плотностей сил межфракционного взаимодействия и ряда других преобразований [10], система (1) может быть преобразована к виду

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \rho + \rho \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0, \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \nabla p = 0, \\ \frac{\partial p}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) p + \rho c^2 \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0, \quad \frac{\partial \rho_k^0}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \rho_k^0 + \rho_k^0 G_k \operatorname{div} \mathbf{u} = 0, \\ \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \alpha_k + \alpha_k (1 - G_k) \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0, \quad k = 1, \dots, m-1; \\ \frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \alpha_l + \alpha_l \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0, \quad l = m+1, \dots, n, \end{aligned} \quad (2)$$

где

$$\begin{aligned} G_k &= \frac{1}{\rho_k^0} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \rho_k^0} \right)^{-1} \left(\frac{p}{\rho_k^0} - \rho c^2 \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial p} \right), \\ c^2 &= \frac{\frac{p}{\rho} - \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} - \sum_{k=1}^{m-1} \left\{ \frac{p}{\rho_k^0} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho_k^0} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \rho_k^0} \right)^{-1} + \alpha_k \frac{\partial \varepsilon}{\partial \alpha_k} \left[1 - p \left((\rho_k^0)^2 \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \rho_k^0} \right)^{-1} \right] \right\} - \sum_{l=m+1}^n \alpha_l \frac{\partial \varepsilon}{\partial \alpha_l}}{\rho \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial p} + \sum_{k=1}^{m-1} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial p} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \rho_k^0} \right)^{-1} \left(\frac{\alpha_k}{\rho_k^0} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \alpha_k} - \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho_k^0} \right) \right]} \end{aligned} \quad (3)$$

Система в недивергентной форме (2) полезна при исследовании характеристических свойств уравнений модели [10], при построении автомодельных решений [11], римановых решателей [12]-[13].

В частном случае смесей, индивидуальные свойства компонентов которых описываются с использованием уравнений состояния вида

$$\varepsilon_k = \varepsilon_k(p, \rho_k^0) = \frac{p - c_{*k}^2 (\rho_k^0 - \rho_{*k})}{\rho_k^0 (\gamma_k - 1)} = \frac{b_k + p B_k}{\rho_k^0} - d_k, \quad (4)$$

где $B_k = 1/(\gamma_k - 1)$, $d_k = c_{*k}^2 B_k$, $b_k = d_k \rho_{*k}$ (γ_k , ρ_{*k} , c_{*k} - константы, индивидуализирующие k -ю фракцию), выражение для удельной внутренней энергии смеси $\varepsilon = \frac{1}{\rho} \sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k^0 \varepsilon_k$ переписывается как

$$\varepsilon = \frac{1}{\rho} \left[b_m + p B_m + \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k (b_{km} - d_{km} \rho_k^0 + p B_{km}) + \sum_{l=m+1}^n \alpha_l \rho_l^0 \varepsilon_l \right] - d_m,$$

где $B_{km} = B_k - B_m$, $b_{km} = b_k - b_m$, $d_{km} = d_k - d_m$. При этом выражение для скорости звука принимает вид

$$c^2 = \frac{b_m + p \left[1 + B_m - \sum_{k=1}^{m-1} \frac{\alpha_k (b_{km} + p B_{km})}{b_k + p B_k} \right]}{\rho \left[B_m + \sum_{k=1}^{m-1} \frac{\alpha_k (b_m B_k - b_k B_m)}{b_k + p B_k} \right]} \quad (5)$$

Для газожидкостной смеси скорость звука из выражения (5) близка к рассчитанной по аппроксимирующей экспериментальные данные формуле Вуда [14]

$$\frac{1}{\rho c^2} = \sum_{k=1}^n \frac{\alpha_k}{\rho_k^0 c_k^2}, \quad (6)$$

что видно из рис. 1, где представлены зависимости $c(\alpha_g)$, вычисленные с учетом сжимаемости жидкой фракции при нормальных начальных условиях. Константы уравнения состояния (4) выбирались равными: для воды $\gamma_{liq} = 5.59$, $c_{*liq} = 1500$ м/с, $\rho_{*liq} = 1000$

кг/м³; для воздуха $\gamma_g = 1.4$, $c_{*g} = 0$, $\rho_{*g} = 1.19$ кг/м³. Из рис.1 видно, что наличие в жидкости даже небольшого количества газовых включений приводит к значительному падению скорости распространения возмущений в смеси.

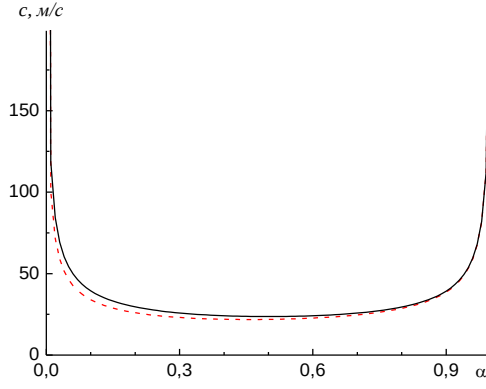


Рис.1. Зависимости $c(\alpha_g)$ для водно-воздушной смеси, рассчитанные по формулам (5) и (6) (штриховая и сплошная кривые).

1. МЕТОДИКА ЧИСЛЕННОГО СЧЕТА

При интегрировании уравнений модели использовалась система в дивергентной форме (1), поскольку на ее основе можно построить консервативные конечноразностные схемы, которые дают возможность более точно отслеживать поведение ударных скачков.

Система (1) в декартовой координатной системе для задач с двумя пространственными переменными имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} &= 0, \quad \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2 + p)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho uv)}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial (\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v^2 + p)}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\varepsilon + \frac{u^2 + v^2}{2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho \left(\varepsilon + \frac{u^2 + v^2}{2} + \frac{p}{\rho} \right) u \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\rho \left(\varepsilon + \frac{u^2 + v^2}{2} + \frac{p}{\rho} \right) v \right] &= 0, \\ \frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho_k u}{\partial x} + \frac{\partial \rho_k v}{\partial y} &= 0, \quad \frac{\partial \rho_k u}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_k u^2 + p)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho_k uv)}{\partial y} = f_{kx}, \\ \frac{\partial \rho_k v}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_k vu)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho_k v^2 + p)}{\partial y} &= f_{ky}, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho_k \left(\varepsilon_k + \frac{u^2 + v^2}{2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho_k \left(\varepsilon_k + \frac{u^2 + v^2}{2} + \frac{p}{\rho_k^0} \right) u \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\rho_k \left(\varepsilon_k + \frac{u^2 + v^2}{2} + \frac{p}{\rho_k^0} \right) v \right] &= f_{kx} u + f_{ky} v, \\ \frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_l u}{\partial x} + \frac{\partial \alpha_l v}{\partial y} &= 0 \end{aligned} \quad (7)$$

Применяя известную процедуру Годунова при переходе от дифференциальных соотношений (7) к конечноразностным [15], получим следующие выражения для (i, j) ячейки, связывающие искомые параметры на новом временном слое $t + \Delta t$ (с индексами вверх) с соответствующими значениями на предыдущем слое t (с индексами вниз)

$$(\rho)^{ij} = (\rho)_{ij} + \left[(RU)_{i-1/2j} - (RU)_{i+1/2j} \right] \frac{\Delta t}{\Delta x} + \left[(RV)_{ij-1/2} - (RV)_{ij+1/2} \right] \frac{\Delta t}{\Delta y}, \quad (8)$$

$$(\rho u)^{ij} = (\rho u)_{ij} + \left[(P + RU^2)_{i-1/2j} - (P + RU^2)_{i+1/2j} \right] \frac{\Delta t}{\Delta x} + \left[(RUV)_{i-1/2j} - (RUV)_{i+1/2j} \right] \frac{\Delta t}{\Delta y}, \quad (9)$$

$$(\rho v)^{ij} = (\rho v)_{ij} + \left[(RVU)_{i-1/2j} - (RVU)_{i+1/2j} \right] \frac{\Delta t}{\Delta x} + \left[(RV^2 + P)_{i-1/2j} - (RV^2 + P)_{i+1/2j} \right] \frac{\Delta t}{\Delta y}, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \left[\rho \left(\varepsilon + \frac{u^2 + v^2}{2} \right) \right]^{ij} &= \left[\rho \left(\varepsilon + \frac{u^2 + v^2}{2} \right) \right]_{ij} + \\ &+ \left\{ \left[R \left(E + \frac{U^2 + V^2}{2} + \frac{P}{R} \right) U \right]_{i-1/2j} - \left[R \left(E + \frac{U^2 + V^2}{2} + \frac{P}{R} \right) U \right]_{i+1/2j} \right\} \frac{\Delta t}{\Delta x} + \\ &+ \left\{ \left[R \left(E + \frac{U^2 + V^2}{2} + \frac{P}{R} \right) V \right]_{ij-1/2} - \left[R \left(E + \frac{U^2 + V^2}{2} + \frac{P}{R} \right) V \right]_{ij+1/2} \right\} \frac{\Delta t}{\Delta y}, \end{aligned} \quad (11)$$

$$(\rho_k)^{ij} = (\rho_k)_{ij} + \left[(R_k U)_{i-1/2j} - (R_k U)_{i+1/2j} \right] \frac{\Delta t}{\Delta x} + \left[(R_k V)_{ij-1/2} - (R_k V)_{ij+1/2} \right] \frac{\Delta t}{\Delta y}, \quad (12)$$

$$\begin{aligned} (\rho_k u)^{ij} &= (\rho_k u)_{ij} + \left[(P + R_k U^2)_{i-1/2j} - (P + R_k U^2)_{i+1/2j} \right] \frac{\Delta t}{\Delta x} + \\ &+ \left[(R_k UV)_{i-1/2j} - (R_k UV)_{i+1/2j} \right] \frac{\Delta t}{\Delta y} + (f_{kx})_{ij} \Delta t, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} (\rho_k v)^{ij} &= (\rho_k v)_{ij} + \left[(R_k VU)_{i-1/2j} - (R_k VU)_{i+1/2j} \right] \frac{\Delta t}{\Delta x} + \\ &+ \left[(P + R_k V^2)_{i-1/2j} - (P + R_k V^2)_{i+1/2j} \right] \frac{\Delta t}{\Delta y} + (f_{ky})_{ij} \Delta t, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \left[\rho_k \left(\varepsilon_k + \frac{u^2 + v^2}{2} \right) \right]^{ij} &= \left[\rho_k \left(\varepsilon_k + \frac{u^2 + v^2}{2} \right) \right]_{ij} + \\ &+ \left\{ \left[R_k \left(E_k + \frac{U^2 + V^2}{2} + \frac{P}{R_k^0} \right) U \right]_{i-1/2j} - \left[R_k \left(E_k + \frac{U^2 + V^2}{2} + \frac{P}{R_k^0} \right) U \right]_{i+1/2j} \right\} \frac{\Delta t}{\Delta x} + \\ &+ \left\{ \left[R_k \left(E_k + \frac{U^2 + V^2}{2} + \frac{P}{R_k^0} \right) V \right]_{ij-1/2} - \left[R_k \left(E_k + \frac{U^2 + V^2}{2} + \frac{P}{R_k^0} \right) V \right]_{ij+1/2} \right\} \frac{\Delta t}{\Delta y} + \\ &+ (f_{kx} u + f_{ky} v)_{ij} \Delta t, \end{aligned} \quad (15)$$

$$(\alpha_l)^{ij} = (\alpha_l)_{ij} + \left[(A_l U)_{i-1/2j} - (A_l U)_{i+1/2j} \right] \frac{\Delta t}{\Delta x} + \left[(A_l V)_{ij-1/2} - (A_l V)_{ij+1/2} \right] \frac{\Delta t}{\Delta y}. \quad (16)$$

Используемые в (7)-(15) обозначения соответствуют принятым в [15]: центры конечноразностных ячеек имеют целые индексы, их грани - полуцелые. «Большие» величины, которые входят в выражения (8)-(16) (P - давление; U и V - компоненты скорости, R - плотность смеси; R_k^0 , R_k , A_k и E_k - истинная, приведенная плотность, объемная доля и удельная внутренняя энергия i-й сжимаемой составляющей смеси; A_l - объемная доля l-й несжимаемой фракции), относящиеся к граням смежных ячеек, определяются из решения соответствующих задач Римана, один из способов расчета которых приведен ниже.

Порядок применения соотношений (8)-(16) следующий: из выражений (8)-(10) и (16) определяем $(\rho)^{ij}$, $(u)^{ij}$, $(v)^{ij}$ и $(\alpha_l)^{ij}$; из (12)-(14) вычисляем $(\rho_k)^{ij}$, $(f_{kx})_{ij}$ и $(f_{ky})_{ij}$; из (11) и (15), учитывая соотношение $(\alpha_k)^{ij} = (\rho_k)^{ij} / (\rho_k^0)^{ij}$, рассчитываем $(p)^{ij}$ и $(\rho_k^0)^{ij}$, что завершает вычислительный цикл.

2. РИМАНОВЫ РЕШАТЕЛИ ДЛЯ БИНАРНОЙ СМЕСИ

Для вычисления потоков массы, импульса и энергии перетекающие через грани смежных ячеек решаются одномерные задачи распада произвольного разрыва, параметры которых соответствуют значениям в этих смежных ячейках. Точный решатель задачи Римана рассмотрен в работе [12], приближенный, основанный на характеристических соотношениях, представлен в [13]. Здесь же опишем линеаризованный риманов решатель [16] для бинарной смеси из сжимаемых фракций. Для этого систему (2) с одной пространственной переменной перепишем в векторном виде как

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + A \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = 0,$$

где

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ p \\ \alpha_1 \\ \rho_1^0 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} u & -\rho & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u & -\rho^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & -\rho c^2 & u & 0 & 0 \\ 0 & -\rho_1^0 G_1 & 0 & u & 0 \\ 0 & \alpha_1(G_1 - 1) & 0 & 0 & u \end{pmatrix}.$$

Формула для линеаризованного риманова решателя, по которой вычисляются параметры смеси на общей границе между (i, j) и $(i+1, j)$ ячейками по известным значениям U_{ij} и U_{i+1j} , имеет вид

$$U_{i+1/2j} = \frac{1}{2}(U_{ij} + U_{i+1j}) - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^5 a_k \text{sign}(\lambda_k) X_k, \quad (17)$$

где

$$U_{ij} = (\rho, u, p, \alpha_1, \rho_1^0)'_{ij}, \quad U_{i+1j} = (\rho, u, p, \alpha_1, \rho_1^0)'_{i+1j}.$$

Штрихом отмечен оператор транспонирования.

Правые собственные векторы $X_1, \dots, X_5$ матрицы A , соответствующие собственным значениям $\lambda_1 = u - c$, $\lambda_2 = u$, $\lambda_3 = u$, $\lambda_4 = u$, $\lambda_5 = u + c$, имеют вид

$$X_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} c^{-2} \\ -(\rho c)^{-1} \\ 1 \\ h_1(\rho c^2)^{-1} \\ g_1(\rho c^2)^{-1} \end{pmatrix}, \quad X_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -g_1 \end{pmatrix}, \quad X_3 = \begin{pmatrix} -c^{-2} \\ 0 \\ 0 \\ -h_1(\rho c^2)^{-1} \\ g_1(1 - (\rho c^2)^{-1}) \end{pmatrix}, \quad X_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ h_1 \\ g_1 \end{pmatrix},$$

$$X_5 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} c^{-2} \\ (\rho c)^{-1} \\ 1 \\ h_1(\rho c^2)^{-1} \\ g_1(\rho c^2)^{-1} \end{pmatrix}.$$

Здесь $g_1 = \alpha_1(1 - G_1)$, $h_1 = \rho_1^0 G_1$.

Значения констант a_k в выражении (17) определялись из системы линейных уравнений

$$\sum_{k=1}^5 a_k X_k = \Delta U,$$

где $\Delta U = U_{i+1,j} - U_{i,j}$.

«Большие» величины на общей грани между ячейками (i, j) и (i+1, j) рассчитываются из соотношений

$$(R, U, P, A_k, R_k^0, A_l)_{i+1/2,j} = \begin{cases} (\rho, u, p, \alpha_k, \rho_k^0, \alpha_l)_{i,j}, & \text{если } (u-c)_{i+1/2,j} > 0, \\ (\rho, u, p, \alpha_k, \rho_k^0, \alpha_l)_{i+1,j}, & \text{если } (u+c)_{i+1/2,j} < 0, \\ (\rho, u, p, \alpha_k, \rho_k^0, \alpha_l)_{i+1/2,j}, & \text{если } (u-c)_{i+1/2,j} \leq 0, (u+c)_{i+1/2,j} \geq 0. \end{cases}$$

На остальных гранях рассматриваемой ячейки потоковые величины $(R, U, P, A_k, R_k^0, A_l)_{i-1/2,j}$, $(R, U, P, A_k, R_k^0, A_l)_{i,j+1/2}$ определяются по аналогичным формулам.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

С использованием описанного численного метода изучено влияние пузырькового экрана на характер взаимодействия подводной УВ с препятствием в виде прямоугольной ступеньки. Расчетная область представлена на рис.2. Верхняя, левая и правая границы расчетной области считались свободными, нижняя - представляет собой абсолютно жесткую неподвижную стенку.

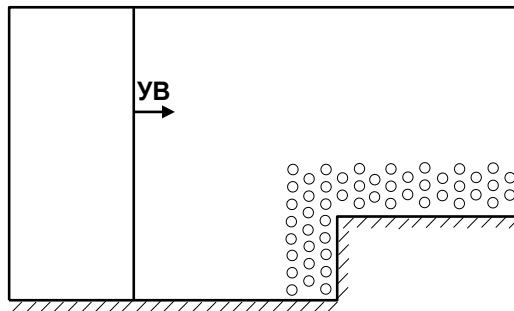


Рис.2. Расчетная область для задачи о взаимодействии подводной ударной волны с пузырьковым экраном.

Параметры за фронтом УВ при известном значении давления ударно сжатой воды p_s и данных о состоянии жидкости в невозмущенном состоянии ($c_0 = 1000$ кг/м³, $u_0 = v_0 = 0$, $p_0 = 0.1$ МПа) определялись из соотношений Ренкина - Гюгоньо, которые для жидкости с уравнением состояния (3) дают выражения

$$u_s = u_0 + \sqrt{\frac{2B_{liq}}{\rho_0(p_0 + p_s + 2(b_{liq} + p_s B_{liq}))}}, \quad \rho_s = \rho_0 \frac{p_0 + p_s + 2(b_{liq} + p_s B_{liq})}{p_0 + p_s + 2(b_{liq} + p_0 B_{liq})}.$$

Объемная доля газа в газожидкостном экране $\alpha_g = 0.05$, его размеры: $h_x = 0.5h$, $h_y = 0.25h$, где h - высота ступеньки.

На рис.3, а - б представлены распределения давления для варианта взаимодействия УВ со ступенькой при отсутствии экрана, полученные к моментам времени 5.6 и 0.9 мкс. Из этого рисунка видно, что после прохождения УВ препятствия перед ним формируется область повышенного давления (рис.3,а), которая в дальнейшем трансформируется в отошедшую от ступеньки УВ (рис.3,б).

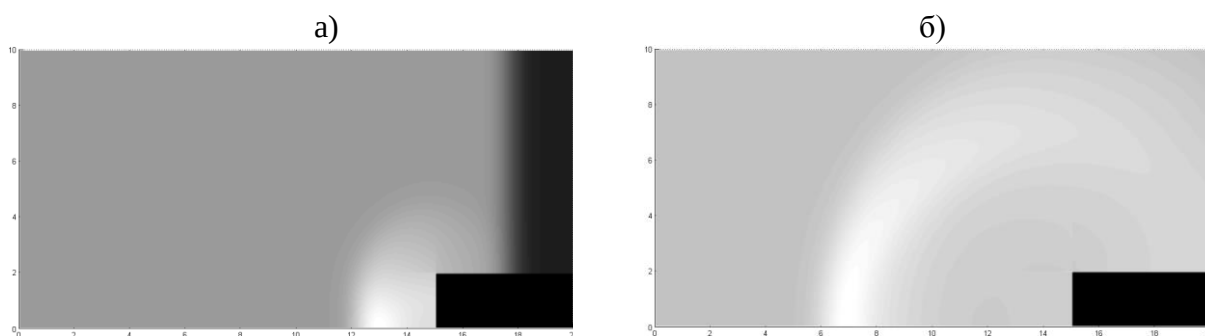


Рис.3. Распределение давления к моментам времени $t = 5.6$ (а) и 9.0 (б) мкс для варианта взаимодействия УВ с препятствием без экрана.

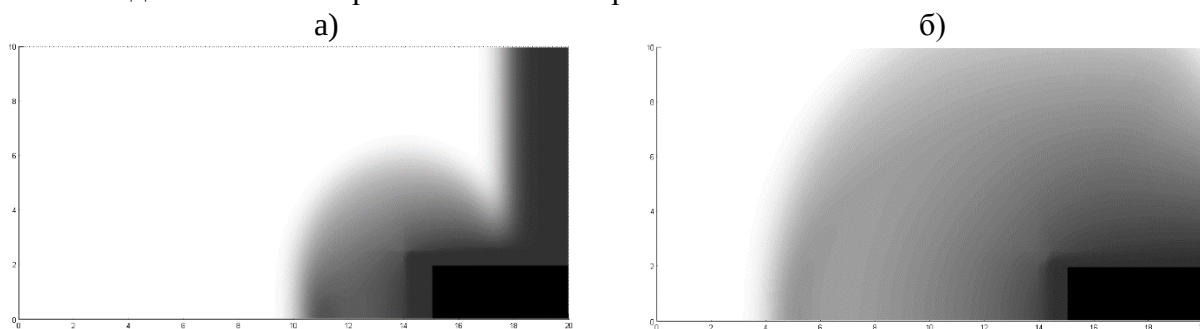


Рис.4. Распределение давления к моментам времени $t = 5.6$ (а) и 9.0 (б) мкс для варианта взаимодействия УВ с препятствием при наличии пузырькового экрана.

Наличие пузырькового экрана у препятствия качественно меняет характер взаимодействия, что видно из рис.4,а-б, где приведены аналогичные распределения давления, также полученные к моментам времени 5.6 и 0.9 мкс. Перед препятствием не образуется область повышенного давления, как в расчете взаимодействия при отсутствии экрана, а напротив, - наблюдается снижение давления. Связано это с тем, что при падении УВ на пузырьковый экран вглубь него распространяется УВ, а от экрана - волна разрежения.

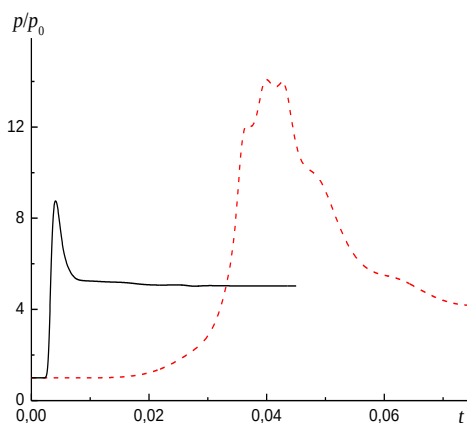


Рис.5. Зависимости давления у основания ступеньки от времени для вариантов: без экрана - сплошная кривая; при наличии экрана - штриховая.

Поскольку скорость УВ, движущейся по экрану мала (см. рис.1), она достигает поверхности преграды с большой задержкой, что видно из рис.5, где приведены зависимости $p(t)/p_0$ у основания ступеньки для вариантов расчетов как с экраном, так и без него. После отражения от преграды УВ возвращается на поверхность

пузырькового экрана и отражается от него, поскольку плотность среды в экране меньше, чем в жидкости без пузырьков. В жидкость вне экрана распространяется волна разгрузки. В дальнейшем описанный процесс переотражения УВ повторяется (см. рис.5). Отметим также, что уровень давления у основания ступеньки при наличии экрана оказывается больше, чем без него, что ранее также фиксировалось в одномерных расчетах [7].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Описан модифицированный метод Годунова с линеаризованным римановым решателем для уравнений ОР модели односкоростной смеси, записанных в дивергентной форме, с использованием которого исследована задача взаимодействия подводной ударной волны с препятствием при наличии пузырькового экрана. Показано качественное различие режимов течения в присутствии вблизи препятствия пузырькового экрана и без него.

ЛИТЕРАТУРА

1. Тимофеев Е.И., Гельфанд Б.Е., Гумеров А.Г. Влияние пузырькового экрана на ударно-волновое возмущение в жидкости / Физика горения и взрыва. 1985. Т.21, №3. С. 98-102.
2. Цейтлин Я.И., Гильманов Р.А., Нилов В.Г. О локализации действия гидроударной волны взрыва пузырьковой завесой / Взрывное дело. № 82/39. Москва: Недра. 1980. С. 264-272.
3. Гельфанд Б.Е., Губин С.А., Тимофеев Е.И. Взаимодействие ударных волн с защитными экранами в жидкости и двухфазной среде / Журнал прикладной механики и технической физики. 1982. №1. С. 118-123.
4. Суров В.С. Взаимодействие ударной волны с пузырьковым экраном / Журнал технической физики. 1999. Т.69, №1. С. 42-48.
5. Паркин Б.Р., Гилмор Ф.Р., Броуд Г.А. Ударные волны в воде с пузырьками воздуха / В кн.: Подводные и подземные взрывы. Москва: Мир. 1974. С. 152-258.
6. Крайко А.Н., Нигматулин Р.И., Старков В.К., Стернин Л.Е. / Механика многофазных сред. Итоги науки и техники. Сер. Гидромеханика. Т.6. Москва: ВИНТИ. 1972. С. 93-174.
7. Суров В.С. К расчету ударно-волновых процессов в пузырьковых жидкостях / Журнал технической физики. 1998. Т.68, №11. С. 12-19.
8. Суров В.С. Течение Буземана для односкоростной модели гетерогенной среды / Инженерно-физический журнал. 2007. Т.80, №4. С. 45-51.
9. Суров В.С. Ударная адиабата односкоростной гетерогенной среды / Инженерно-физический журнал. 2006. Т.79, №5. С. 46-52.
10. Суров В.С. Об уравнениях односкоростной гетерогенной среды / Инженерно-физический журнал. 2009. Т.82, №1. С. 75-84.
11. Суров В.С. О некоторых автомодельных задачах течения односкоростной гетерогенной среды / Инженерно-физический журнал. 2007. Т.80, №6. С. 164-172.
12. Суров В.С. Задача Римана для односкоростной модели многокомпонентной смеси / Теплофизика высоких температур. 2009. Т.47, №2. С. 283-291.
13. Суров В.С. Об одном способе приближенного решения задачи Римана для односкоростной многокомпонентной смеси / Инженерно-физический журнал. 2010. Т.83, №2. С. 351-356.
14. Уоллис Г. Одномерные двухфазные течения / Москва: Мир. 1972.
15. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.Н., Прокопов Г.П. Численное решение многомерных задач газовой динамики / Москва: Наука. 1976.

16. *Toro E.F.* Riemann solvers with evolved initial condition / Int. Journal for Numerical Methods in Fluids. 2006. Vol.52. Pp. 433-453.

ОБТЕКАНИЕ МЯГКОЙ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ОБОЛОЧКИ СВЕРХЗВУКОВЫМ ПОТОКОМ ГАЗА

Хакимов А.Г.

*ФГБУН Институт механики им. Р.Р. Мавлютова Уфимского научного центра РАН,
г.Уфа, Россия*

РЕЗЮМЕ

Получено, что отношение коэффициента сопротивления мягкой оболочки к коэффициенту сопротивления соответствующего изопериметрического круглого цилиндра и лобовое сопротивление мягкой оболочки к лобовому сопротивлению круглого цилиндра с ростом скоростного напора уменьшается, причем последнее уменьшается сильнее.

Ключевые слова: обтекание; сверхзвуковой поток; мягкая цилиндрическая оболочка.

ВВЕДЕНИЕ

Объектом исследования является поперечное стационарное обтекание мягкой цилиндрической оболочки сверхзвуковым потоком газа. Давление на поверхности оболочки определяется по теории Ньютона. Цель работы - определение лобового сопротивления и коэффициента лобового сопротивления мягкой оболочки.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается поперечное стационарное обтекание мягкой цилиндрической оболочки сверхзвуковым потоком газа. Требуется определить форму поперечного сечения оболочки (рис.1,а), усилия в ней, лобовое сопротивление, если заданы давление в оболочке P_1 , скорость набегающего потока V , плотность воздушной среды вне оболочки ρ , скоростной напор $q = \rho V^2/2$.

Предполагается, что оболочка нерастяжима, а давление на поверхности определяется по теории Ньютона.

Форма мягкой цилиндрической оболочки на участке OA (рис.1,а) описывается уравнением [1,2], где решены задачи безотрывного обтекания мягкой цилиндрической оболочки плоским потоком идеальной несжимаемой жидкости и с отрывом струй по схеме Кирхгофа

$$\frac{ds}{d\theta} = \frac{T}{P_1 - P}, \quad (1)$$

где $P = 2q \sin^2 \theta$ - давление на поверхности оболочки, θ - угол между касательной к линии поперечного сечения оболочки и осью x , s - длина дуги, отсчитываемая от точки O на линии поперечного сечения, T - усилие натяжения в оболочке.

Так как донное давление равно нулю, то на участке AB выполняется соотношение $T = P_1 R_1$, где R_1 - радиус кривизны. Интегрирование уравнения (1) с условием $\theta = \theta_0$ при $s = 0$ дает

$$s = \frac{R_1}{\gamma_1} [\arctg(\gamma_1 \tg \theta) - \arctg(\gamma_1 \tg \theta_0)], \quad (2)$$

где

$$\gamma_1 = \sqrt{1 - \gamma}, \gamma = \frac{2q}{P_1}, \gamma < 1.$$

Длина дуги OA определяется из выражения (2) при $\theta = 0$

$$\angle O A = R_1 \alpha_1, \quad \alpha_1 = -\frac{1}{\gamma_1} \arctg(\gamma_1 \operatorname{tg} \theta_0).$$

Радиус кривизны определяется по формуле

$$R_1 = 2\pi R / (2\alpha_1 + \pi),$$

где R - радиус кривизны круглой мягкой цилиндрической оболочки, у которой периметр равен длине поперечного сечения деформированной оболочки. Отметим, что при $\gamma = 0$ поперечное сечение мягкой цилиндрической оболочки принимает вид окружности радиуса R .

Усилие в стяжке T_1 (лобовое сопротивление)

$$T_1 = 2 T \cos \theta_0 = -4 q T \int_{\theta_0}^0 \frac{\sin^3 \theta d\theta}{P_1 - 2q \sin^2 \theta}.$$

Отсюда следует

$$\cos \theta_0 = \sqrt{\frac{1-\gamma}{\gamma}} \cdot \operatorname{tg} \left[\arctg \sqrt{\frac{\gamma}{1-\gamma_1}} - \sqrt{\gamma(1-\gamma)} \right].$$

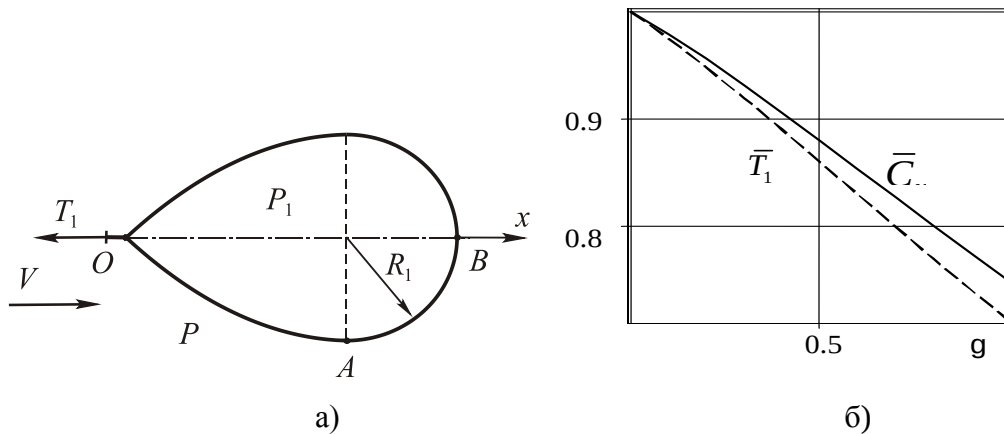


Рис.1.а) Расчетная схема; б) Зависимости отношений коэффициента сопротивления мягкой оболочки к коэффициенту сопротивления $\bar{C}_x$ круглого цилиндра радиуса R и лобового сопротивления мягкой оболочки к лобовому сопротивлению круглого цилиндра $\bar{T}_1$ от параметра γ .

Коэффициент лобового сопротивления и лобовое сопротивление мягкой цилиндрической оболочки находятся по формулам

$$C_x = \frac{2 \cos \theta_0}{\gamma}, T_1 = 2 C_x R_1 q.$$

Коэффициент лобового сопротивления и лобовое сопротивление кругового цилиндра определяются

$$C_{x0} = \frac{4}{3}, T_{10} = 2 C_{x0} R q.$$

На рис.1,б даются зависимости отношений коэффициента сопротивления мягкой оболочки к коэффициенту сопротивления $\bar{C}_x$ круглого цилиндра радиуса R и лобового сопротивления мягкой оболочки к лобовому сопротивлению круглого цилиндра $\bar{T}_1$ от параметра γ , откуда видно, что с увеличением γ происходит уменьшение указанных отношений, причем последнее уменьшается сильнее.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Получено, что отношение коэффициента сопротивления мягкой оболочки к коэффициенту сопротивления соответствующего изопериметрического круглого цилиндра и лобовое сопротивление мягкой оболочки к лобовому сопротивлению круглого цилиндра с ростом скоростного напора уменьшается, причем последнее уменьшается сильнее.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Киселев О.М.* К задаче об обтекании наполненной газом оболочки плоским потоком идеальной жидкости // Изв. АН СССР, МЖГ. - 1971. - № 3.
2. *Галимханов К.Г., Хакимов А.Г.* Обтекание воздухоопорной мягкой цилиндрической оболочки плоским потоком идеальной несжимаемой жидкости / Пятый Дальневосточный семинар по мягким оболочкам. Тезисы докладов. - Владивосток. 1976. - С.112-118.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОРЕОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СУСПЕНЗИЙ ПОЛИИМИДОВ С ЖЕСТКО СОПРЯЖЕННЫМИ МОЛЕКУЛЯРНЫМИ ЦЕПЯМИ

Семенов Н.А., Келбышева Е.С., Никитин С.М., Юмашев О.Б.

ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г.Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

Разработан новый метод синтеза полиимидов, проявляющий высокий электрореологический отклик в суспензиях на основе силиконовой среды. Установлена взаимосвязь между значением электрореологического эффекта и типом связи между мономерами полиимида.

Ключевые слова: Электрореологические суспензии, электрореология, полиимиды, наночастицы.

ВВЕДЕНИЕ

Электрореологические суспензии (ЭРС) относятся к числу, так называемых, «умных материалов», реологические и механические свойства которых (вязкость, предел текучести, модуль сдвига, и др.) в течение миллисекунд могут резко изменяться под воздействием прикладываемого внешнего электрического поля. В зависимости от параметров внешнего электрического поля и физико-химической природы ЭРС могут проявлять или свойства вязкой текучей среды или твердообразного вязкопластичного тела. В силу этого подобные материалы перспективны с практической точки зрения, в устройствах, требующих резких, мгновенных и обратимых перепадов свойств рабочего тела, например, гасители колебаний, демпферы, амортизаторы, стабилизаторы движения и т.п.

Создание нового поколения ЭРС с улучшенными технологическими и реологическими свойствами и сильно выраженным электрореологическим откликом по сравнению с уже используемыми промышленно образцами - важная научная и практическая задача. Перспективным направлением в этом плане могут быть ЭРС с дисперсной фазой на основе полимеров, например, наноразмерных частиц полиимида. Действительно, в работе [2] в рамках прямого вычислительного квантового механического метода (КМ) проводили моделирование наноструктуры и наноскопических реологических и электрореологических характеристик ЭР сред с дисперсной фазой на основе полимеров, в частности, полиимидов.

В этой работе рассматривается оптимизированная методика синтеза наноразмерных частиц полиимида.

1. СИНТЕЗ

Из литературы известно, что стандартным методом получения полиимидов является нагревание смеси реагентов в расплаве бензойной кислоты или растворе уксусной кислоты. Основными недостатками данных методов является трудность выделения целевых полимеров и отделение их от низкомолекулярных примесей и следов самих растворителей. В связи с этим нами была разработана эффективная методика синтеза полиимидов различного строения. Все полимеры получали при нагревании реагентов до 150-160⁰С в смеси растворителей диметилформамид/мезитилен, соотношение которых варьировалось в зависимости от растворимости исходных реагентов в течение 6-8 часов в инертной атмосфере аргона. Часть полимеров в ходе реакции выпадала в виде осадка, который промывали хлороформом или этилацетатом, в других случаях (если полимер

оказывался растворим в данных растворителях) растворитель отгоняли на роторном испарителе в вакууме, к остатку добавляли этанол и выпавший осадок промывали толуолом или петролевым эфиром.

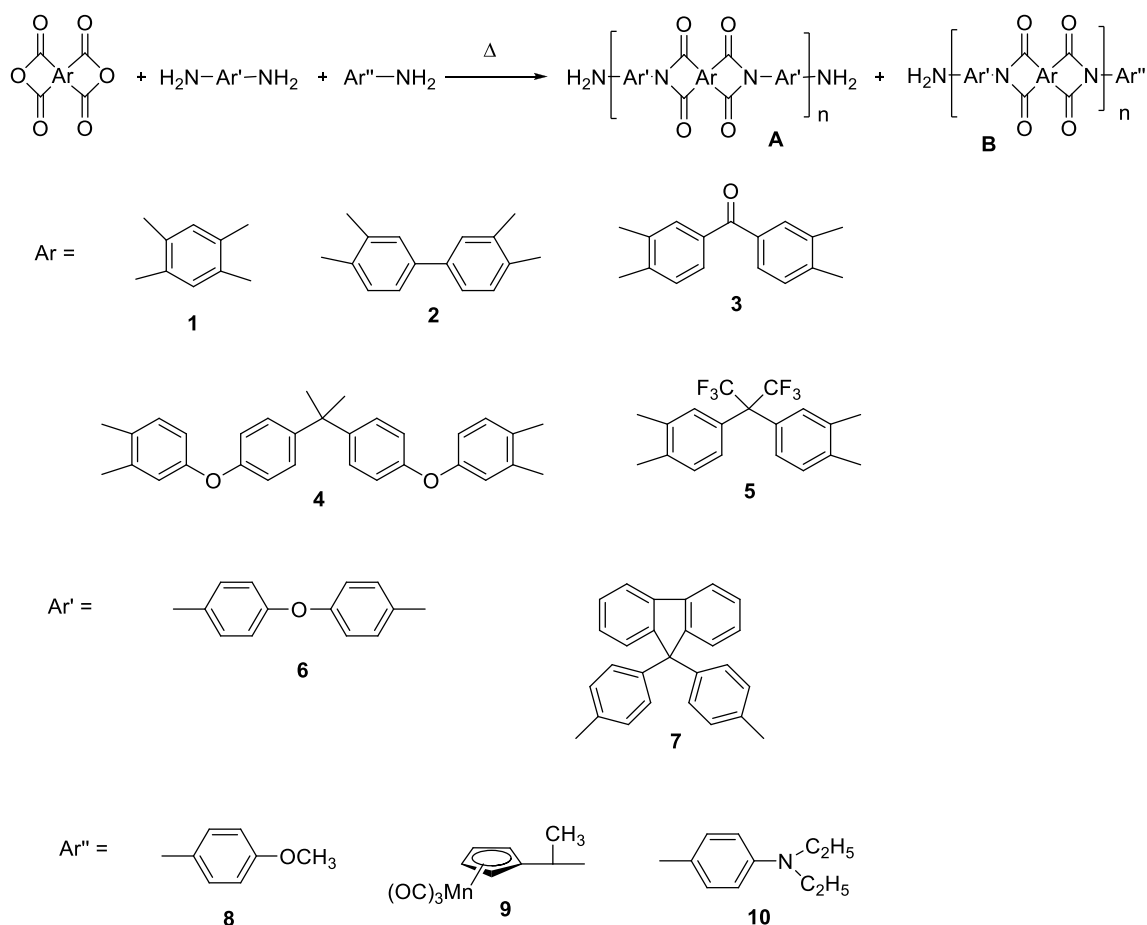


Рис.1. Общая схема синтеза полиимидов.

Строение полученных полимеров подтверждали с помощью ИК- или ^1H -ЯМР спектроскопий. Все полиимиды имели полосы симметричных валентных колебаний в области $1720\text{--}1730\text{ см}^{-1}$ и антисимметричных валентных колебаний в области $1760\text{--}1780\text{ см}^{-1}$, соответствующих циклическим имидным $\text{NC}=\text{O}$ группам, а также их полосы поглощения в области 750 и 1380 см^{-1} .

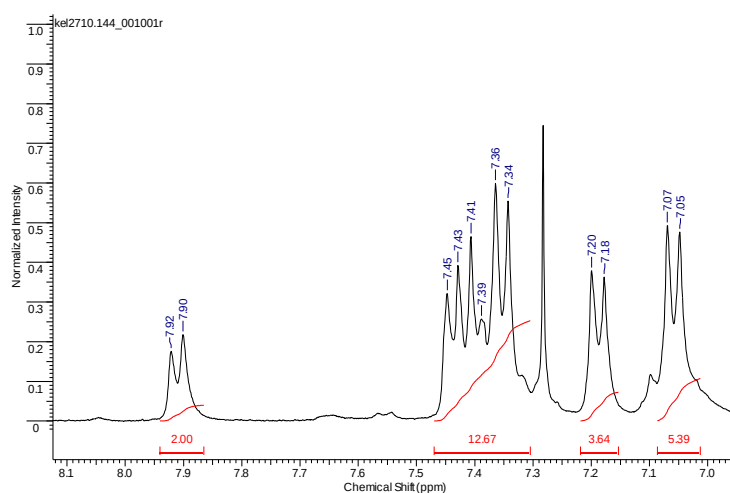


Рис.2. ^1H -ЯМР спектр PI-2210 в CDCl_3 .

Строение полиимида PI-2210 было также подтверждено с помощью ¹H-ЯМР спектроскопии. В области δ 7.91 м.д. мы наблюдаем дублетный сигнал для протона фенильного кольца рядом с C=O группой имидного фрагмента, тогда как все остальные протоны фенильных колец в том числе и от фрагмента диамина лежат в области с δ 7.06-7.44. При этом синглет метильной группы имеет δ 1.78, что соответствует литературным данным [1].

Размер частиц измерялся на интерферометре Zygo NewView и сканирующем электронном микроскопе. Обработка производилась в программных пакетах SPIP и Gwyddion.

Таблица 2.

Название	D(нм)	S(м ² /г)
PI 02 10-2	200	12,50
СП-27-1 5%	280	8,93
СП-20	150	16,67
PI 0110-1	600	4,17
СП 27-2	300	8,33
PI 0110-2	500	5,00
PI 2210 пмг	1150	2,17
PI 1010	1000	2,50
PI 0210	80	31,25
PI 2710	1200	2,08
PI 2710 5%	300	8,33
СП 27 ДИАН 5%	800	3,13

Площадь поверхности частиц определялась по формуле [2]

$$S_u = \frac{6}{\rho D_r}, \quad (1)$$

где ρ - плотность, D_r - размер диаметра частицы

Полученные в ходе химического синтеза порошки полиимидов использовали в качестве дисперсной фазы в суспензии. В качестве дисперсионной среды была взята полиметилсилоксановая жидкость (ПМС-400) с плотностью 0,95г/см³, так как все расчеты квантовой механики производились для дисперсионной среды с диэлектрической проницаемостью 4. ЭР жидкости готовили весовым методом, с содержанием твердой фазы 5%, 10% и 15%. Необходимые количества твердой фазы предварительно перед смешением тщательно растирали в агатовой ступке до получения однородной устойчивой суспензии. После приготовления образцов ЭР дисперсии выдерживали в течение часа для удаления пузырьков воздуха.

Для быстрого качественного определения электрореологического эффекта была разработана специальная методика. Для оптического микроскопа проходящего света было изготовлено предметное стекло с двумя приклеенными плоскими электродами. В зазор(1мм) между ними помещался, испытываемая суспензия и подавался электрический ток напряжением 2.5кВ. Если частички суспензии выстраивались вдоль силовых линий от катода к аноду, то суспензия электрореологические свойства проявляет.

Реологические исследования проводились на реовискозиметре Rheostress RS 150 (НААКЕ Германия) с измерительным узлом вида плоскость-плоскость и цилиндр в цилиндре. Электрореологический узел представляет собой систему электродов из нержавеющей стали, отделенных от механизма стандартного вискозиметра керамической осью. Специальная конструкция креплений ячейки к стационарной части вискозиметра на основе цилиндрических направляющих из полиметилметакрилата

должна жестко фиксировать взаимное положение пластин. На узел подавалось напряжение с помощью блока питания SRS PS-350. Контроль напряжения в зазоре осуществлялся с помощью разработанного программно-аппаратного комплекса управления блоком питания.

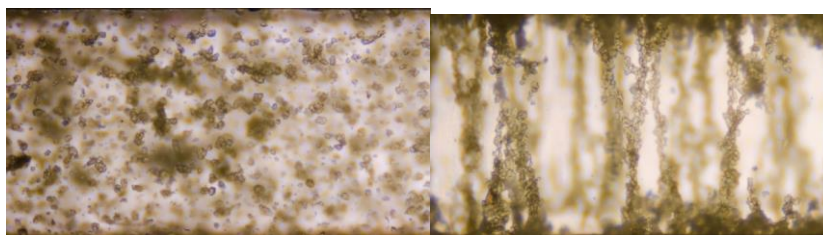


Рис.3. Микрофотографии суспензии полиимида СП-27-1 5% без поля(слева) и в поле 2.5кВ(справа).

Образцы испытывали в статическом режиме при постоянной скорости сдвига 20с^{-1} и плавном изменении электрического напряжения в зазоре от 0 до 3кВ (рис.4), и при увеличении скорости сдвига от 0,1 до 200с^{-1} и постоянном электрическом напряжении.

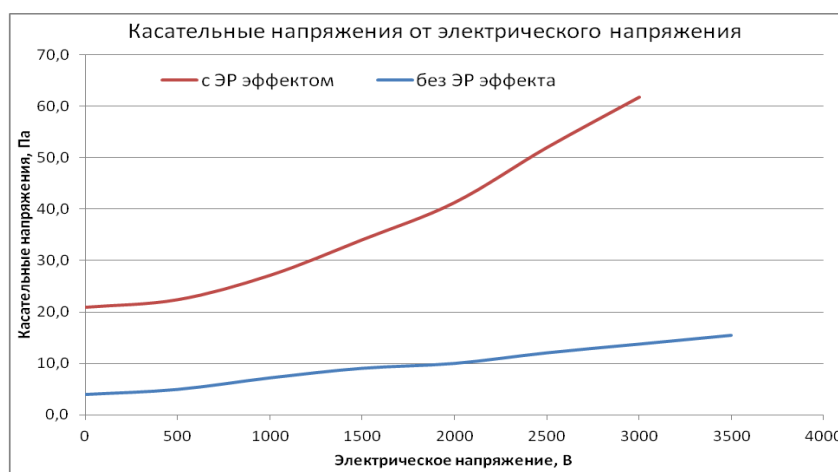


Рис.4. Сопоставление кривых изменения касательного напряжения от напряженности электрического поля.

2. ВЫВОДЫ

На основании проведенных экспериментов было показано, что требуемые свойства не проявляют полиимиды, имеющие в своей структуре алкильные фрагменты (PI-2210 и PI-2710). Тогда как полиимиды с жесткой сопряженной структурой (такие как СП-27, СП-20, PI 0210) показывают хорошие результаты, в частности, полиимид с индексом СП-27-1 (рис 3) в поле выстраивается в тяги между электродами. Данный факт можно объяснить тем, что за счет пи-связей бензольных колец полимерные цепочки имеют, по-видимому, линейную структуру. На основании этих наблюдений в дальнейшем решено использовать полиимиды с жестко сопряженными связями.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда: код проекта № 14-19-01653.

ЛИТЕРАТУРА

1. Wengrovius J.H., Powell V.M., Webb J.L. Synthesis of [(Trialkoxysilyl)propyl]imides // J. Org. Chem., 1994, 59 (10), pp 2813-2817
2. Яновский Ю.Г., Валиев Х.К., Корнев Ю.В., Карнет Ю.Н., Бойко О.В., Косичкина К.П., Юмашев О.Б. Роль масштабного фактора при изучении механических свойств композиционных материалов с нанонаполнителями. // Механика композиционных материалов и конструкций. 2010. Т.16. №2. С.291-304.

О СПОСОБЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ ГИСТЕРЕЗИСА ЭНЕРГОРАССЕЯНИЯ В УСТРОЙСТВАХ С УПРАВЛЯЕМЫМИ ЖИДКИМИ СРЕДАМИ В КАЧЕСТВЕ РАБОЧЕГО ТЕЛА

Данилин А.Н., Карнет Ю.Н., Галимов Р.А.

ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г.Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

Исследуется динамические характеристики гасителей колебаний с демпферным узлом, содержащим в качестве рабочего тела жидкие среды, управляемые внешними полями.

Разработана математическая модель гистерезиса энергорассеяния в условиях нестационарных колебаний гасителя с целью определения его геометрических, массовых и упругих характеристик.

Для описания гистерезиса предлагается кинематическая модель, согласно которой силовые и кинематические параметры гасителя связываются специальным дифференциальным уравнением первого порядка, коэффициенты которого определяются по экспериментальным данным для предельного гистерезисного цикла.

Ключевые слова: нестационарные колебания, гаситель колебаний, электро- и магнитореологические жидкости, энергорассеяние, кинематическая модель гистерезиса

ВВЕДЕНИЕ

Как правило, принцип действия гасителей основан на использовании сил гравитации, инерции, а также трения рабочих элементов внутри демпферных узлов. Любое из этих устройств имеет ряд недостатков и условий для их использования. Например, гасители колебаний при низких температурах могут частично или полностью потерять свои функции из-за гололедно-изморозевых отложений внутри демпферных узлов. Это является одним из основных ограничений их использования в холодных, полярных и высокогорных климатических зонах. В этой связи, поиск новых принципов демпфирования колебаний конструкций представляет значительный интерес.

Одним из путей создания гасителей колебаний нового типа является использование в качестве рабочего тела управляемых материалов, к которым относятся электро- и магнитореологические жидкости (ЭРЖ или МРЖ). Использование в качестве дисперсной фазы суспензии наноразмерных электро- или магниточувствительных частиц даёт возможность управлять свойствами таких ЭРЖ или МРЖ путем наложения соответствующих физических полей. Данная особенность позволяет называть такие жидкие среды «умными материалами» и открывает широкие перспективы их применения, в частности, в устройствах демпфирования колебаний, различных механизмах стабилизации и управления движением летательных аппаратов и т.п.

1. КОНСТРУКЦИИ ГАСИТЕЛЕЙ НИЗКОЧАСТОТНЫХ КОЛЕБАНИЙ

Возможны разнообразные варианты исполнения демпферного узла гасителя. Как правило, все они имеют маятник для демпфирования колебаний силами гравитации и инерции. Использование свойств ЭРЖ или МРЖ предоставляет уникальные возможности управления колебаниями маятника с помощью электрических и магнитных полей. Существуют и другие преимущества гасителей с ЭРЖ и МРЖ по сравнению с механическими вариантами. Например, взаимодействие исполнительных элементов конструкции с жидкостью в каналах можно сделать бесконтактным и дистанционным, используя электрические или магнитные силы. При наличии вращающихся валов их герметизацию можно осуществлять с помощью ЭРЖ или МРЖ [5]. Попадание влаги

в демпферный узел невозможно, поскольку жидкости содержатся в герметичном корпусе (оболочке). Точка замерзания дисперсионной среды может быть существенно ниже точки замерзания воды, т.д.

Общий вид конструкций гасителей с ЭРЖ и МРЖ подобен их механическим аналогам. Однако конструкции демпферных узлов гасителей с ЭРЖ и МРЖ отличаются по принципам рассеяния энергии колебаний от механических аналогов.

Возможные конструктивные варианты демпферных узлов гасителей с ЭРЖ или МРЖ показаны на рис. 1. Например, согласно схеме 1 а) гаситель может иметь маятник 7, с которым связан поршневой диск 8, заставляющий циклично перетекать жидкость 9 из

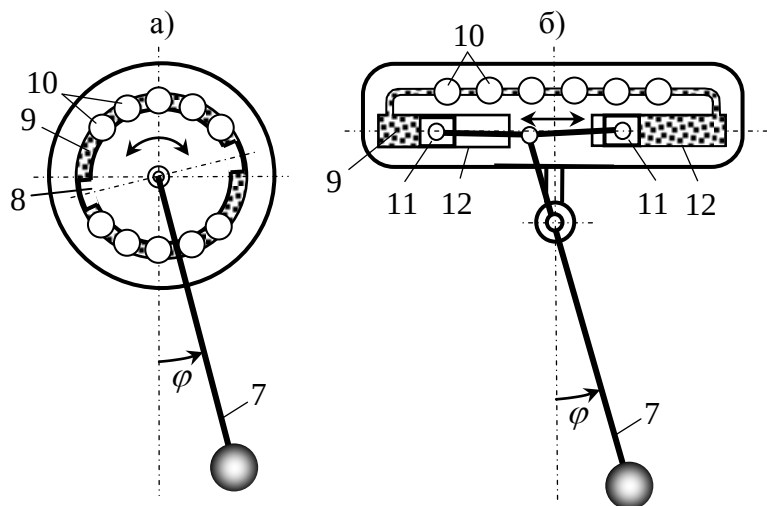


Рис. 1. Схема гасителей пляски с ЭРЖ и МРЖ

одной части рабочего объема в другую по герметичным каналам. Источники поля 10 помещаются на пути перемещения жидкости с внешней стороны рабочего объема. Магнитные или электрические поля локально воздействуют на жидкость, увеличивая её вязкость в зоне воздействия и, как следствие, увеличивая силы сопротивления течению. В этом случае, воздействием электрического или магнитного поля на жидкость можно управлять частотами колебаний маятника,

подбирая наиболее эффективные режимы для рассеяния энергии колебаний. Источники поля (например, магниты) могут быть установлены в поршни, контактирующие с ЭРЖ или МРЖ.

Демпферный узел может быть выполнен также по схеме 1 б), аналогичной 1 а). В этом случае поршни 11 двигаются внутри цилиндров 12, заставляя циклично перетекать жидкость 9 из одного цилиндра в другой по трубопроводу, на внешних поверхностях которого устанавливаются источники поля 10.

Для составления математической модели рассмотрим упрощенную схему конструкции гасителя, показанную на рис. 2. На схеме диск 13 крепится к несущему телу (конструкции) и является ведущим. Диск 14, скреплённый с маятником 7, является ведомым. Диски имеют общую центральную ось, позволяющую им вращаться друг относительно друга. Между дисками помещается механизм демпфирования 15, содержащий ЭРЖ или МРЖ. Конструкция гасителя может содержать дополнительные упругие элементы, которые на схеме изображены как один элемент 16 в виде упругого диска (вставки) толщиной l

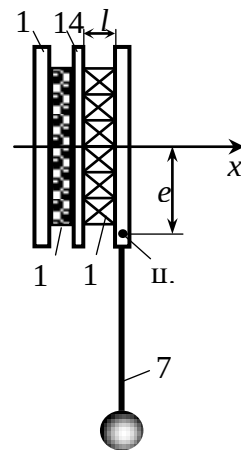


Рис. 2. Схема конструкции

Движение от несущего тела через тяги передаётся к ведущему диску и, далее, через демпферный узел к ведомому диску гасителя. В силу инерционности маятника и эксцентриситета его центра массы (ц.м.) ведомый диск прокручиваются относительно ведущего диска, скреплённого с проводами. При этом происходит перетекание жидкости по каналам, при воздействии на них электрических или магнитных полей, что обеспечивает сопротивление гасителя колебаниям и рассеяние энергии движения.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КОНСТРУКЦИИ ГАСИТЕЛЯ

Пусть φ_1 , φ_2 , φ_3 - углы поворотов соответственно ведущего и ведомого дисков, а также маятника, которые отсчитываются от вертикали в положительном направлении против часовой стрелки. Моменты, возникающие при прокручивании дисков друг относительно друга, показаны на рис. 3.

Момент $M_1 = M_1(\varphi_2 - \varphi_1)$ порождается в результате взаимодействия ведущего 13 и ведомого 14 дисков через систему демпфирования 15 с ЭРЖ или МРЖ. Момент M_2 возникает вследствие скручивания упругого элемента 16. Считается, что этот момент пропорционален углу $\varphi_3 - \varphi_2$. Тогда по закону Гука $M_2 = (\varphi_3 - \varphi_2)(GJ_t/l)$, где GJ_t - крутильная жесткость упругой элемента.

При вращении дисков возникают также инерционные моменты $I_2\ddot{\varphi}_2$ и $I_3\ddot{\varphi}_3$, где I_2 и I_3 - моменты инерции ведущего и ведомого дисков.

С учётом перечисленных моментов уравнения колебаний связанных дисков записываются в виде

$$\begin{aligned} I_2\ddot{\varphi}_2 + M_1 - M_2 &= 0, \\ I_3\ddot{\varphi}_3 + M_2 + m_3 g e \sin \varphi_3 &= 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Для анализа эффективности энергорассеяния гасителя закон движения ведущего диска задаётся в виде: $\varphi_1(t) = \Phi \sin \omega t$, где Φ и ω - амплитуда, и частота гармонических колебаний.

В итоге уравнения колебаний принимают вид

$$\begin{aligned} I_2\ddot{\varphi}_2 &= (\varphi_3 - \varphi_2) \frac{GJ_t}{l} - M_1(\varphi_2 - \varphi_1), \quad I_3\ddot{\varphi}_3 = -(\varphi_3 - \varphi_2) \frac{GJ_t}{l} - m_3 g e \sin \varphi_3; \\ \varphi_1 &= \Phi \sin \omega t; \quad \varphi_2(0) = \dot{\varphi}_2(0) = \varphi_3(0) = \dot{\varphi}_3(0), \end{aligned} \quad (2)$$

где зависимость $M_1(\varphi_2 - \varphi_1)$ формулируется в результате экспериментальных исследований.

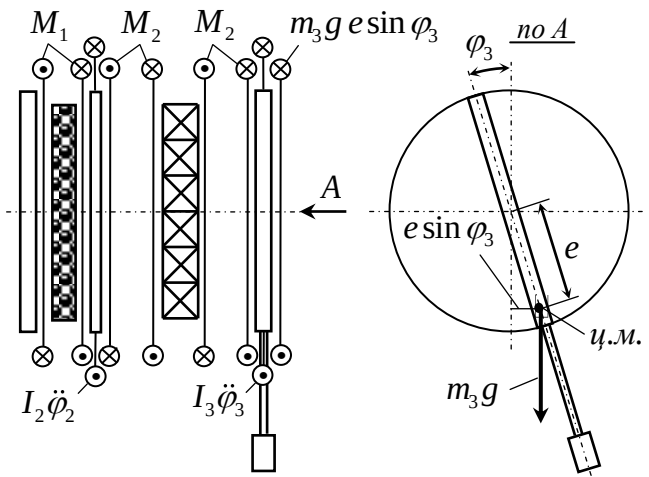


Рис.3. Моменты взаимодействия составных элементов демпферного узла гасителя

3. КИНЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГИСТЕРЕЗИСА ДИССИПАЦИИ ЭНЕРГИИ

При построении математической модели гистерезиса использовались данные, полученные как в результате изучения реологических свойств ЭРЖ и МРЖ [6,7], так и в результате экспериментальных исследований гасителей пляски механического типа с гистерезисным характером энергорассеяния [8]. В результате анализа диаграмм $\{M, \varphi\}$, полученных в различных экспериментах, установлено:

1. Деформирование демпферного узла характеризуется диаграммой, определяющей зависимость скручивающего момента M от относительного угла поворота дисков φ . Эта зависимость аппроксимируется непрерывной ломаной кривой $M(\varphi)$, каждый гладкий участок которой (ветвь) соответствует процессу увеличения или

процессу уменьшения угла φ , которые можно определить как процессы «нагрузки» или «разгрузки».

2. Зависимость $M(\varphi)$ образует на диаграмме $\{M, \varphi\}$ серию петель внутри кривых предельного цикла. Предельный цикл образуется двумя гистерезисными кривыми, соответствующими процессам «нагрузки» и «разгрузки» с максимальными амплитудами изменения угла φ при стационарных колебаниях.

3. Форма гистерезисных петель слабо зависит от угловой скорости относительного вращения дисков (или частоты колебаний маятника гасителя), поэтому демпфирование колебаний носит в основном гистерезисный характер, и вязкая составляющая в рассеянии энергии мала.

4. Существует бесконечное множество траекторий между предельными кривыми, позволяющих попасть в определенную точку пространства $\{M, \varphi\}$ в результате различных историй нагружения.

5. Каждая гладкая ветвь зависимости $M(\varphi)$ подобна соответствующей предельной кривой и приближается к ней с ростом или уменьшением угла φ .

6. Процессы «нагрузки» и «разгрузки» подобны и отличаются лишь направлением движения по ветвям траектории гистерезисного процесса.

Пример гистерезисных зависимостей, которые обладают перечисленными свойствами, показан на рис.4 [8].

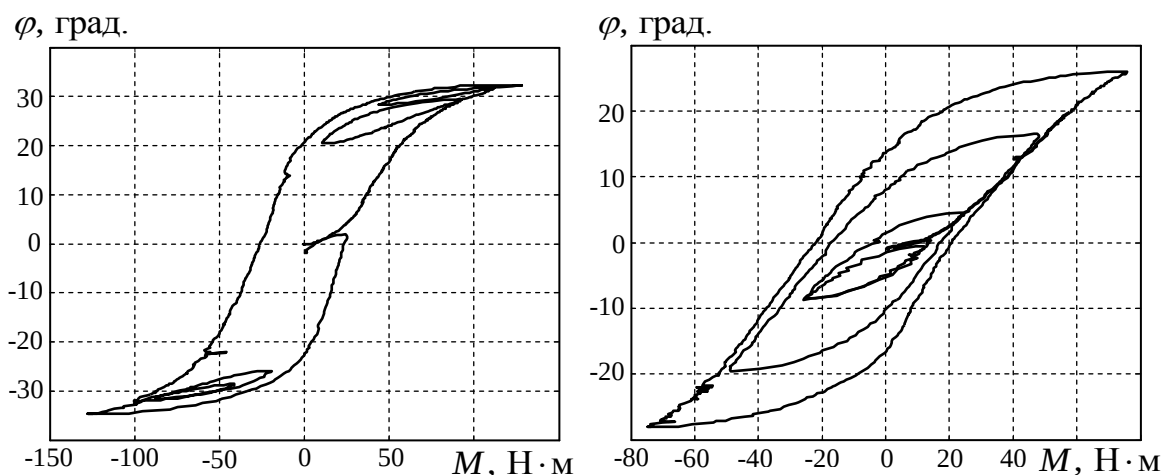


Рис.4. Гистерезисные петли при квазистатических вынужденных колебаниях маятника гасителя.

Перечисленные свойства гистерезиса позволяют представить зависимость $M(\varphi)$ на диаграмме $\{M, \varphi\}$ в виде непрерывной ломаной кривой, состоящей из гладких участков (ветвей), формирующих в совокупности петлеобразную траекторию внутри предельного цикла. Ветви зависимости $M(\varphi)$ образуют два множества, соответствующие процессам «нагрузки» и «разгрузки». Считается, что в каждом множестве ветви подобны между собой в асимптотическом смысле, т.е. каждая из них асимптотически приближается с ростом или уменьшением φ к соответствующим гистерезисным кривым предельного цикла. Скорость асимптотического сближения зависит от параметров конструкции и физических свойств эластомерных элементов.

Аналитическое описание зависимости $M(\varphi)$ представляет затруднения. Однако это возможно сделать, например, следуя методологии [8,9]. Тем не менее, изложенный

в этой работе алгоритм опирается на данные серии рутинных экспериментальных измерений и не является в реализации простым.

Более общим и простым является кинематический метод [6, 10], основанный на использовании обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка, интеграл которого представляет собой искомую связь между обобщенной силой и соответствующей ей обобщенным перемещением. В рассматриваемом случае обобщенными силой и перемещением являются соответственно, M и φ . Предлагаемый метод позволяет одним дифференциальным уравнением описать всевозможные ветви гистерезиса в условиях нестационарного движения, имеющих произвольные точки «старта» внутри предельного цикла.

Метод заключается в использовании обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка в общем виде $df(q)/dq = R(f, q)$, решение которого даёт $f(q)$. Правая часть этого уравнения $R(f, q)$ подбирается из класса функций, обеспечивающих асимптотическое приближение решения к кривым предельного цикла гистерезиса.

Для описания гистерезиса энергорассеяния TDD предлагается обыкновенное дифференциальное уравнение вида

$$\frac{dM}{d\varphi} = \sum_{i=0}^m k_i \varphi^i + \sum_{j=0}^n c_j \varphi^j \cdot M, \quad (3)$$

где коэффициенты k_i и c_j определяются методами приближения, минимизируя невязку аналитического представления $dM/d\varphi$ в виде правой части (3) к множеству значений $dM/d\varphi$, полученных из экспериментов для предельного цикла. Числа m, n подбираются в результате численных экспериментов. Например, возможными значениями являются $m=1$ и $n=5$, для которых были определены соответствующие k_i и c_j : $k_0 = 650,9$, $k_1 = 1422,2$; $c_0 = -23,9$, $c_1 = -4,1$, $c_2 = -2,0$, $c_3 = -0,35$, $c_4 = 143,2$, $c_5 = 419,8$. Эти значения получены по данным предельного цикла для примеров на рис. 5.

Уравнение (3) преобразуется к виду

$$\frac{dM}{dt} = \left(\sum_{i=0}^m k_i \varphi^i + \sum_{j=0}^n c_j \varphi^j \cdot M \right) \cdot \frac{d\varphi}{dt}, \quad (4)$$

что позволяет его интегрировать по времени совместно с уравнениями движения (2). Знак $d\varphi/dt$ определяет направление движения по траектории гистерезиса (процессы «нагрузки» и «разгрузки»).

Мощность энергорассеяния TDD определяется по формуле

$$A = \frac{1}{t} \int_t M_1 d\alpha = \frac{1}{t} \int_t M_1 \dot{\alpha} dt. \quad (5)$$

При исследовании нестационарных колебаний выражение (5) удобно представить в дифференциальной форме и включить в систему уравнений (2), (4). Дифференцирование по времени (5) даёт $t\dot{A} + A = M_1 \dot{\alpha}$, откуда получаем дифференциальное уравнение вида

$$\frac{dA}{dt} = \frac{1}{t} (M_1 \dot{\alpha} - A). \quad (6)$$

Решение (6) имеет горизонтальную асимптоту, соответствующую мощности рассеяния установившихся вынужденных колебаний.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Ниже представлены результаты анализа эффективности энергорассеяния гасителя низкочастотных колебаний, схематично изображенного на рис. 5. Масса и момент инерции ведомого диска принимались соответственно равными $m_0 = 1,15 \text{ кг}$ и $I_0 = 0,004 \text{ кг} \cdot \text{м}^2$.

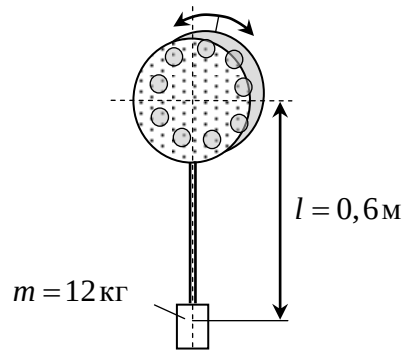


Рис.5. Схема гасителя

На рис.6 а) показана зависимость мощности рассеяния энергии от частоты при квазистатическом увеличении частоты гармонических колебаний ведущего диска от 0 до 3 Гц при амплитуде $\Phi = 0,3$ рад. На рис.7 б) показана та же зависимость, но в интервале частот от 0 до 0,8 Гц. Примеры гистерезисной зависимости $M(\varphi)$ при различных частотах колебаний ведущего диска даны на рис.7.

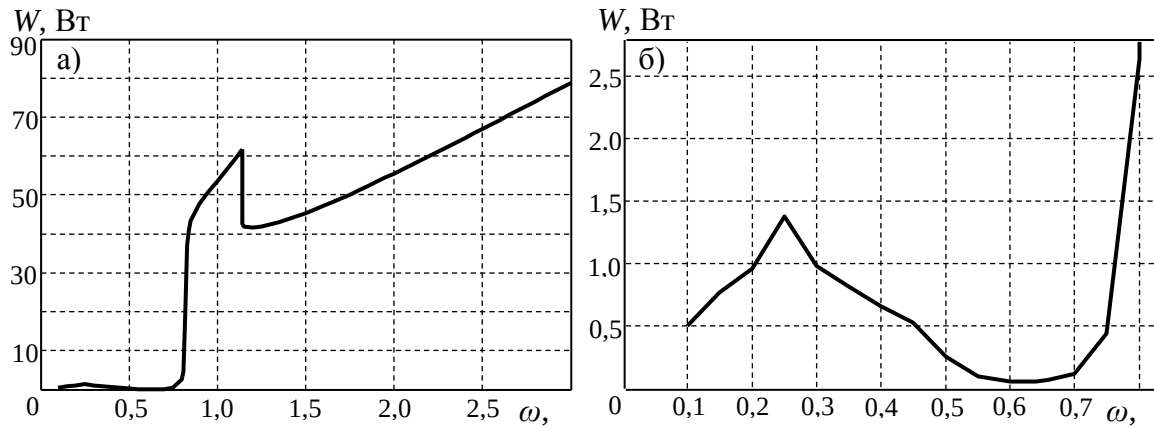


Рис.6. Зависимость мощности энергорассеяния гасителя от частоты колебаний ведущего диска.

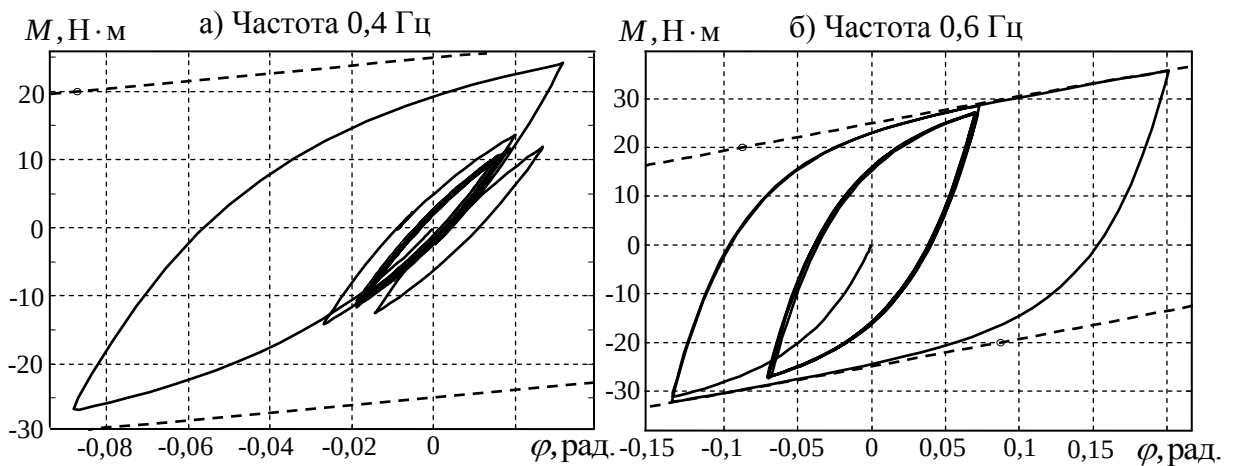


Рис.7. Гистерезис зависимости $M(\varphi)$ при гармонических колебаниях ведущего диска с амплитудой $\Phi = 0,3$ рад.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложен алгоритм построения математической модели гасителя низкочастотных колебаний, принцип действия которого механический или основан на использовании в качестве демпфирующих сред электро- или магнитореологические жидкости. В работе также дан способ идентификации параметров модели устройства по экспериментальным данным. Предложенная модель демпферного узла гасителя колебаний является аналитической, что является важным для её включения по иерархической ступени в модели, описывающих нелинейную динамику взаимодействия управляемой конструкции и гасителей их колебаний.

Разработанный подход может быть использован при решении иных задач о нестационарных колебаниях различных конструкций и механизмов с гистерезисным характером рассеяния энергии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда: код проекта № 14-19-01653.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бекметьев Р.М., Жакаев А.Ш., Ширинских Н.В. Пляска проводов воздушных линий электропередачи. - Алма-Ата: Изд-во «Наука» Казахской ССР, 1979. - 151 с.
2. Глазунов А.А. Основы механической части воздушных линий электропередачи. Т.1. Работа и расчет проводов и тросов. - М.-Л.: Госэнергоиздат, 1956. - 192 с.
3. State of the art of conductor galloping. Cigre: Task force B2.11.06. June 2007 - 140 p.
4. Damper for galloping conductors for overhead power transmission lines. Patent WO 2005/117228, PCT/RU2005/000302.
5. Такетоми С., Тикадзуми С. Магнитные жидкости. - М.: Мир, 1993. - 272 с.
6. Danilin A.N., Yanovsky Yu.G., Semenov N.A., Shalashilin A.D. Kinematic model of the rheological behavior of non-newtonian fluids in condition of nonstationary cyclic loading // Composites: Mechanics, Computations, Applications. An International Journal. 2012. V.3. No.4. Pp. 1-15.
7. Xinglong Gong, Yangguang Xu, Shouhu Xuan, Chaoyang Guo, Luhang Zong. The investigation on the nonlinearity of plasticine-like magnetorheological material under oscillatory shear rheometry // Journal of Rheology. 2012. V.56. No.6. Pp. 1375-1391.
8. Данилин А.Н., Захаров А.П. Подход к описанию гистерезиса с использованием данных серии типовых экспериментов на примере гасителя пляски проводов // Механика композиционных материалов и конструкций. 2008. Т.14. №4. С.604-622.
9. Danilin A.N., Shalashilin V.I. A method to identify hysteresis by an example of an antigalloping device // International Applied Mechanics. 2010. V.46. No.5. P.588-595 (www.springerlink.com).
10. Данилин А.Н., Козлов К.С. Моделирование колебаний многочастотного гасителя вибрации с учетом гистерезиса диссипации энергии // Труды IX всероссийской научной конференции им. Ю.И. Неймарка «Нелинейные колебания механических систем». Нижний Новгород, 24-29 сентября 2012 г. С.320-329.

ДВИЖЕНИЕ ЖИДКОСТИ В ТРЕЩИНОВАТЫХ ПОРИСТЫХ СРЕДАХ

Касумова Г.И., Джаббарова А.И.¹, Мамедов М.М., Джаббаров И.И., Сафарли И.С.

Сумгаитский Государственный Университет, г.Сумгаит, Азербайджан

¹Азербайджанский Государственный Экономический Университет

РЕЗЮМЕ

В данной работе предложены методы построения точных решений задач нестационарных процессов в гетерогенных сплошных средах описываемых системой дифференциальных уравнений Баренблатта-Желтова, основанные на интегральных преобразованиях Лапласа по переменной времени, основных свойств этих преобразований и идеи разложения дробно-рациональных функций в бесконечные ряды по корням их знаменателей. Применимость полученных методов показана на решениях конкретных задач термодинамики и гидродинамики в этих средах.

1. ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ

Нестационарные задачи термодинамических и гидродинамических процессов массообмена в гетерогенных средах для произвольной геометрии теплового, фильтрационного или диффузионного потока описываются в соответствующих терминах системой дифференциальных уравнений параболического типа.

$$\begin{aligned} \frac{1}{k_0} \frac{\partial^2 \varphi_1}{\partial \xi^2} + \frac{\sigma}{\xi} \frac{\partial \varphi_1}{\partial \xi} + \lambda(\varphi_2 - \varphi_1) - (1 - \omega) \frac{\partial \varphi_1}{\partial \tau} &= 0 \\ \frac{\partial^2 \varphi_2}{\partial \xi^2} + \frac{\sigma}{\xi} \frac{\partial \varphi_2}{\partial \xi} + \lambda(\varphi_1 - \varphi_2) - \omega \frac{\partial \varphi_2}{\partial \tau} &= 0 \end{aligned} \quad (1)$$

где $\varphi_i(\xi; \tau), (i=1, 2)$ – искомые обобщенные функции, описывающие изменение процесса в произвольных точках ξ взаимосвязанных сред 1 и 2 в произвольный момент времени τ ; ω и λ – постоянные параметры [1], характеризующие исследуемую среду, а значения $\sigma = 0, 1, 2$ характеризуют геометрию потока и соответствуют линейному, плоскорадиальному и центрально-симметричному изменению процесса.

$$\omega = \frac{\beta_2^*}{\beta_1^* + \beta_2^*}, \quad 1 - \omega = \frac{\beta_1^*}{\beta_1^* + \beta_2^*}$$

Подстановкой выражения функции $\varphi_1(\xi, \tau)$ из второго уравнения в первое и пренебрегая величиной $\frac{1}{\alpha R_c^2} \nabla^4 \varphi_2$, данную систему можно представить в виде (индекс 2 опущен)

$$\begin{aligned} \frac{1+k_0}{k_0} \nabla^2 \varphi + \frac{\frac{\omega}{k_0} + 1 - \omega}{\lambda} \frac{\partial}{\partial \tau} (\nabla^2 \varphi) - \frac{\omega(1-\omega)}{\lambda} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tau^2} - \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} &= \frac{k_0}{\lambda} \nabla^4 \varphi, \\ \nabla^2 &= \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\sigma}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi}. \end{aligned} \quad (2)$$

Многие отечественные и зарубежные исследователи заняты решением важных термодинамических, гидродинамических и газодинамических задач для данной системы уравнений, результаты которых вошли в монографии авторов [1-5].

Необходимо отметить, что применение интегральных преобразований к решению конкретных задач для системы (1) приводит к труднопреодолимым математическим

препятствиям, для преодоления которых исследователи пользуются упрощающими частными случаями [6]. Такой подход приводит к приближенным решениям исследуемых процессов, пригодным для ограниченного интервала изменения переменных ξ, τ и в дальнейшем становятся предметом дискуссий.

Применение интегрального преобразования Лапласа с параметром преобразования S как к системе (1), так и уравнению (2) сводит их к дифференциальному уравнению второго порядка

$$\begin{aligned} & \frac{1+k_0}{k_0} \nabla^2 \psi + \frac{1-\omega + \frac{\omega}{k_0}}{\lambda} \nabla [s\psi - \psi(\xi;0)] - \\ & - \frac{\omega(1-\omega)}{\lambda} \left[s^2 \psi - s\psi(\xi;0) - \frac{\partial}{\partial \tau} \psi(\xi;0) \right] - s\psi + \psi(\xi;0) = 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Общее решение которого с учетом нулевого начального условия

$$\psi_i(\xi, s) = A_i \xi^\nu I_\nu(\xi \sqrt{S(s)}) + B_i \xi^\nu K_\nu(\xi \sqrt{S(s)}), \quad (4)$$

$$\nu = \frac{1-\sigma}{2}, \quad S(s) = s \frac{\omega(1-\omega)s + \lambda}{\left(1 - \omega + \frac{\omega}{k_0}\right)s + \lambda \frac{2+k_0}{k_0}}. \quad (5)$$

$I_\nu(z)$ и $K_\nu(z)$ – функции Бесселя от мнимого аргумента первого и второго родов порядка ν , A и B – постоянные интегрирования, зависящие от параметра преобразования.

При $\omega=1$ или $\lambda \rightarrow \infty$ уравнения (1) и (2) переходят в известное уравнение Фурье

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi^2} + \frac{\sigma}{\xi} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} - \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = 0, \quad (\sigma = 0; 1; 2) \quad (6)$$

а из (4) ввиду справедливости соотношения

$$\lim_{k_0 \rightarrow \infty} S(s) = s \quad \text{при } \omega = 1. \quad (7)$$

получается соответствующее общее решение(6) вида

$$\psi(\xi, \nu) = A \xi^\nu I_\nu(\xi \sqrt{s}) + B \xi^\nu K_\nu(\xi \sqrt{s}). \quad (8)$$

Сравнение решений (5) с (8) показывает, что они отличаются между собой лишь функциональной зависимостью относительно параметра преобразования S в аргументах функций, входящих в эти общие решения. Отсюда следует, что при известном решении уравнения (6) в трансформанте Лапласа при определенных краевых условиях

$$[\psi(\xi, s)]_{\lambda=\infty}^{\omega=1} = \varphi(s) F(\xi; s) \quad (9)$$

соответствующее ему решение уравнений (1) и (2) при тех же краевых условиях можно представить в виде

$$\psi(\xi, s) = \varphi(s) F[\xi, S(s)], \quad (10)$$

где $\varphi(s)$ – лапласовское изображение функции, заданной на границе воздействия на среду.

В зависимости от свойств функции $F[\xi, S(s)]$ ниже приводятся способы перехода от изображения (10) к оригиналу.

2. ПРИМЕНЕНИЕ ОБОБЩЕННОЙ ТЕОРЕМЫ УМНОЖЕНИЯ А.М.ЭФРОСА

Ввиду сложной функциональной зависимости S от s для осуществления перехода от изображений вида (10) к их оригиналам целесообразно воспользоваться обобщенной теоремой умножения А.М.Эфроса [7], гласящей (вкратце), что

$$\varphi(s)F[\xi; S(s)] = \int_0^{\infty} f_*(\xi; \theta)g(\tau; \theta)d\theta \quad (11)$$

где

$$f_*(\xi, \tau) = F(\xi, s) = \frac{1}{\varphi(s)}[\psi(\xi, s)]_{\omega=1}, \quad (12)$$

$$g(\tau, \theta) = \varphi(s)\exp[-\theta S(s)] \quad (13)$$

Для применения формулы (11) к изображению (10) представим его в виде

$$\psi(\xi, s) = sG(s)\varphi(s)\frac{F[\xi; S(s)]}{S(s)}, \quad (14)$$

$$G(s) = \frac{S(s)}{s}. \quad (15)$$

Пусть

$$f(\xi; \tau) = \frac{1}{s}F(\xi; s) \quad (16)$$

есть соответствующее известное решение задачи для уравнения Фурье (6). Тогда для нахождения функции $g(\tau; \theta)$ по (13) представим ее с учетом (14) при $\varphi(s) = \frac{1}{s}$ (задан постоянный расход при $\xi = 1$) в виде

$$g(\tau, \theta) = G(s)\exp[-\theta S(s)] = \left(\omega\varepsilon_2 + \varepsilon_2 \frac{\Lambda_1 - \omega\varepsilon_1\Lambda_2}{s + \varepsilon_1\Lambda_2} \right) \times \\ \times \exp \left[-\omega\varepsilon_2 s\theta - \Lambda_2(1 - \varepsilon_1\varepsilon_2\omega)\theta + \varepsilon_1\Lambda_2(1 - \omega\varepsilon_1\varepsilon_2) \frac{\theta}{s + \varepsilon_1\Lambda_2} \right], \quad (17)$$

$$\varepsilon_1 = \frac{1+k_0}{k_0}, \varepsilon_2 = \frac{1-\omega}{1-\omega + \frac{\omega}{k_0}}, \Lambda_2 = \frac{\lambda}{1-\omega + \frac{\omega}{k_0}}, \Lambda_1 = \frac{\lambda}{1-\omega}.$$

Осуществляя переход к оригиналу в (17) и подставляя найденное выражение в (11), решение задачи можно представить в виде

$$\varphi_2(\xi; \tau) = \varepsilon_2 \exp(-\varepsilon_1\Lambda_2\tau) \int_0^{\infty} f(\xi; \theta)\exp(-c\theta) \times \\ \times \left\{ \omega \sqrt{\frac{\varepsilon_1 c \theta}{\tau}} I_1(2\sqrt{\varepsilon_1 c \theta \tau}) + \omega + BI_0(2\sqrt{\varepsilon_1 c \theta \tau}) \right\} H(\tau - \omega\varepsilon_2\theta) d\theta. \quad (18)$$

$$B = \Lambda_1 - \omega\varepsilon_1\Lambda_2, \quad c = \Lambda_2(1 - \varepsilon_1\varepsilon_2\omega), \quad H(\tau - x) = \begin{cases} 0, & \tau < x \\ 1, & \tau > x \end{cases}. \quad (19)$$

Формула (18) является точным решением задачи для гетерогенной среды, в которой использовано точное решение для однородной среды $\omega = 1, k_0 = \infty$.

Принимая другие выражения за функции $G(s)$ и $\varphi(s)$, из (10) можно найти различные аналитические выражения для функции $g(\tau; \theta)$ и тем самым – различные виды точных решений задачи. Так, например, принимая

$$f_*(\xi, \tau) = F(\xi, s), \quad G(s) = \varphi(s) = \frac{1}{s} \quad (20)$$

следует найти оригинал изображения

$$\begin{aligned} g(\tau, \theta) &= \frac{1}{s} \exp[-\theta S(s)] = \eta(\tau - \omega\theta) \exp(-\Lambda\theta) + \\ &+ e^{-\Lambda\theta} \int_0^{(\tau - \omega\theta)\eta(\tau - \omega\theta)} \exp(-\Lambda z) I_1[Z(z)] \sqrt{\frac{\lambda\Lambda}{z}} dz, \\ \eta(\tau - x) &= \begin{cases} 1, & \tau < x \\ 0, & \tau > x \end{cases}, \quad Z(z) = 2\lambda \sqrt{\frac{z}{1-\omega}}. \end{aligned} \quad (21)$$

С учетом (21) в (11) можно получить следующее точное решение

$$\begin{aligned} \psi(\xi; \tau) &= \int_0^{\tau/\omega} f'_\theta(\xi; \theta) \exp(-\Lambda\theta) d\theta + \\ &+ \frac{\lambda}{\sqrt{1-\omega}} \int_0^{\tau/\omega} f'_\theta(\xi; \theta) \exp(-\Lambda\theta) d\theta \int_0^{(\tau - \omega\theta)\eta(\tau - \omega\theta)} \exp(-\Lambda z) I_1[Z(z)] \frac{dz}{\sqrt{z}} \end{aligned} \quad (22)$$

в котором использована производная по времени точного решения для однородной среды.

В наших предыдущих работах получен другой вид формул (18) и (22), а именно,

$$\psi(\xi; \tau) = f\left(\xi; \frac{\tau}{\omega}\right) - \lambda \int_0^{\frac{\tau}{\omega}\eta(\tau - \omega\theta)} f'_\theta(\xi; \theta) \exp(-\Lambda(\tau - \omega\theta)) d\theta \int_0^\theta \exp(-\lambda z) I_0[Z(z)] dz \quad (23)$$

учитывающий как $f(\xi; \theta)$, так и $f'_\theta(\xi; \theta)$.

Все три формулы (18), (22) и (23) являются равносильными и удовлетворяют нулевому начальному условию. Для иллюстрации их удовлетворения также граничным условиям необходимо рассмотреть конкретную задачу из теории термо-гидро-динамики.

Пример 2.1. Гетерогенный кругового сечения цилиндр достаточно большой протяженности ограничен изнутри радиусом $r = R_c$, где задан постоянный тепловой поток q при нулевой начальной температуре. Требуется определить перераспределение температуры во времени в произвольной точке тела.

В терминах гидродинамики сформулированная задача соответствует разработке трещиновато-пористого пласта достаточно большой протяженности, находившегося в неразрешенном состоянии совершенной по степени вскрытия скважиной при постоянном дебите.

Решение соответствующей задачи для однородной среды в трансформанте Лапласа имеет вид

$$\begin{aligned} f(\xi; \tau) &= \frac{K_0(\xi\sqrt{s})}{S(s)K_1(\sqrt{s})} \equiv \frac{1}{s} F(\xi; s) = \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{J_1(u)Y_0(\xi u) - Y_1(u)J_0(\xi u)}{J_1^2(u) + Y_1^2(u)} [1 - \exp(-u^2\tau)] \frac{du}{u^2}, \end{aligned} \quad (24)$$

$$\xi = \frac{r}{R_c}, \quad \tau = \frac{xt}{R_c^2}, \quad f(\xi; \tau) = \frac{2\pi kh}{\mu q} [P_0 - P(\xi, \tau)] \quad (25)$$

$J_n(x), Y_n(x)$ – функции Бесселя от действительного аргумента первого и второго родов порядка n , P_0 и $P(\xi, \tau)$ – начальное и текущее давления в пласте, x – коэффициент пьезопроводности, r и t – радиальная координата и время, соответственно.

Пользуясь формулами (18) и (24) соответствующее решение для трещиновато-пористого пласта в обозначениях

$$\omega = \frac{\beta_2^*}{\beta_1^* + \beta_2^*}, \quad \lambda = \alpha R_c^2 \frac{k_1}{k_2}, \quad \tau = \frac{k_2 t}{\mu R_c^2 (\beta_1^* + \beta_2^*)} \quad (26)$$

нетрудно представить в виде

$$\begin{aligned} \psi(\xi; \tau) = & \frac{2}{\pi} \int_0^{\frac{\tau}{\omega}} \{ \omega + \lambda I_0[u(\tau, \theta)] + v(\tau, \theta) I_1[u(\tau, \theta)] \} \exp[-\Lambda \tau - (1 - \xi \omega) \Lambda \theta] d\theta \times \\ & \times \int_0^\infty \frac{J_1(u) Y_0(\xi u) - Y_1(u) J_0(\xi u)}{J_1^2(u) + Y_1^2(u)} [1 - \exp(-u^2 \theta)] \frac{du}{u^2}. \end{aligned} \quad (27)$$

Пример 2.2. Сохраним условия предыдущей задачи, приняв $\sigma = 2$ центрально-симметричный поток, и заменим условие неограниченности пласта условием наличия контура питания на внешней полусферической поверхности пласта радиуса $\xi = \xi_0$.

Решение данной задачи для однородной среды имеет вид

$$\begin{aligned} \psi(\xi, \tau) = & \frac{1}{\xi S} \cdot \frac{sh(\xi_0 - \xi) \sqrt{S}}{\sqrt{S(s)} ch(\xi_0 - 1) \sqrt{S} + sh(\xi_0 - 1) \sqrt{S}} \equiv \frac{1}{\xi S} F(\xi, s) \frac{\xi_0 - \xi}{\xi_0 - 1} + \\ & + \frac{2}{\xi} (\xi_0 - 1)^2 \sum_{m=1}^\infty \frac{1}{\alpha_m \cos \alpha_m} \cdot \frac{\sin \alpha_m \frac{\xi_0 - \xi}{\xi_0 - 1}}{\alpha_m^2 + \xi_0 (\xi_0 - 1)} \exp \left[- \left(\frac{\alpha_m}{\xi_0 - 1} \right)^2 \tau \right] \end{aligned} \quad (28)$$

где α_m – корни уравнения

$$tg \alpha + \alpha (\xi_0 - 1)^{-1} = 0. \quad (29)$$

Следовательно, по (16) можно из (28) выписать соответствующую трансформанту Лапласа для гетерогенной среды

$$\psi(\xi, S) = \frac{1}{\xi S} \cdot \frac{sh(\xi_0 - \xi) \sqrt{S(s)}}{\sqrt{S(s)} ch(\xi_0 - 1) \sqrt{S} + sh(\xi_0 - 1) \sqrt{S(s)}}. \quad (30)$$

Оригиналом изображения (30) с учетом (28) явится выражение

$$\psi(\xi, \tau) = \frac{2}{\xi} \sum_{m=1}^\infty \alpha_m \frac{\sin \alpha_m \frac{\xi_0 - \xi}{\xi_0 - 1}}{[\alpha_m^2 + \xi_0 (\xi_0 - 1)] \cos \alpha_m}. \quad (31)$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Баренблатт Г.И., Ентов В.М., Рыжик В.М. Теория нестационарной фильтрации жидкости и газа. М.: Недра, 1972.
2. Бан А., Басниев К.С., Николаевский В.Н. Об основных уравнениях фильтрации в сжимаемых пористых средах. М.: Гостоптехиздат, 1962.
3. Ромм Е.С. Фильтрационные свойства трещиноватых горных пород. М.: Недра, 1966.
4. Желтов Ю.П. Деформации горных пород. М.: Недра, 1966.
5. Николаевский В.Н. и др. Механика насыщенных пористых сред. М.: Недра, 1970.
6. Боярчук В.Т., Донцов К.М. О кривой восстановления давления в скважине трещинно-пористого коллектора. ПМТФ, 1971, №5.
7. Лаврентьев М.А., Шабат В.В. Методы теории функций комплексного переменного. М.: Наука, 1973.

Вычислительные методы механики наноструктурированных и гетерогенных сред

ОПРЕДЕЛЕНИЕ РЕЗОНАНСНЫХ КРИВЫХ ГРАФЕНОВОГО РЕЗОНАТОРА

Беринский Е.И., Индейцев Д.А., Морозов Н.Ф., Скубов Д.Ю., Штукин Л.В.

*ФГБУН Институт проблем машиноведения РАН, г.Санкт-Петербург, Россия
Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
г.Санкт-Петербург, Россия*

РЕЗЮМЕ

Нанорезонатор на основе графеного слоя исследуется как электромеханическая колебательная система. Механические колебания в ней возбуждаются переменным электрическим полем высокой частоты. Нанорезонатор рассматривается как конденсатор с кинематически меняющейся емкостью определяемой поперечной деформацией графенового слоя как одной из его обкладок. Уравнение колебаний слоя получено и решено с учетом нелинейной зависимости его натяжения от прогиба. Показано, что на резонансной кривой наблюдается срыв вынужденных колебаний, что дает возможность более надежного определения изменения собственной частоты нанорезонатора при осаждении на нем наночастицы.

Ключевые слова: графен, графеновый резонатор, нелинейная упругость, срыв колебаний

ВВЕДЕНИЕ

Данная работа посвящена исследованию наноэлектромеханической системы резонатора на основе графена. Одним из возможных применений такого резонатора является использование его в качестве детектора массы. Резонатор на основе графенового слоя рассматривается как электромеханическая колебательная система, в которой механические колебания графенового слоя возбуждаются переменным электрическим полем в пространстве между графеновым слоем и проводящей поверхностью. Такая система представляет собой конденсатор, емкость которого зависит от поперечной деформации графенового слоя. Электрическое поле внутри конденсатора создается внешним источником переменного напряжения. Основная проблема использования графена в таких системах - его невысокая добротность, которая не позволяет получить достаточную точность измерения собственной частоты по резонансной кривой.

В работе [1] рассматривается принципиально новая возможность использования графенового резонатора, позволяющая повысить точность измерения собственной частоты при невысокой добротности колебательной системы. Показано, что при больших амплитудах колебаний на резонансной кривой имеется характерный срыв при сканировании частот от более высоких к более низким («мягкая» резонансная кривая).

В работе [2] представлены результаты экспериментальных исследований, из которых следует, что резонансная кривая может быть как «мягкой», так и «жесткой» (т.е. имеющей срыв при сканировании частот от низших к высшим).

В настоящей работе предлагается механическая модель нанорезонатора, позволяющая объяснить имеющиеся экспериментальные результаты. Учет нелинейной упругости графенового слоя приводит, в зависимости от величины начального натяжения, к «жесткой» или «мягкой» резонансной кривой.

1. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ

В работе [1] графеновый слой и проводящая поверхность рассматриваются как обкладки конденсатора, подключенного к источнику переменного напряжения. Под действием сил взаимного притяжения между обкладками конденсатора графеновый

слой прогибается. Это приводит к изменению емкости конденсатора в зависимости от прогиба. В первом приближении считается, что емкость зависит от прогиба графенового слоя $u(t)$

$$C = \varepsilon \varepsilon_0 \frac{S}{d_0 - u} \quad (1)$$

где S - площадь обкладки, d_0 - расстояние между графеновым слоем и проводящей поверхностью при отсутствии электрического поля.

По аналогии с [1] уравнения колебаний резонатора описывается системой взаимосвязанных уравнений

$$m\ddot{u} - \frac{Q^2}{2C^2} \frac{dC}{du} + P(u) = 0, \quad \dot{Q} + \frac{1}{RC} Q = \frac{U}{R} \sin \omega t \quad (2)$$

где m - масса графенового слоя, Q - заряд конденсатора, R - сопротивление электрической цепи, подводимой к конденсатору переменное напряжение $U \sin \omega t$, $P(u)$ это упругая сила, действующая на слой.

Первое уравнение системы (2) описывает механические колебания графенового слоя (обкладки конденсатора) под действием электрической силы взаимного притяжения. Второе уравнение системы (2) представляет собой уравнение баланса напряжений в электрической цепи.

В первом из уравнений системы (2) полагается, что графеновый слой рассматривается как натянутая струна и обладает линейной поперечной упругостью. Это предположение о линейности может оказаться несправедливым именно для графенового слоя. Дело в том, что графеновый слой в силу технологии изготовления закреплен так, что его концы не могут перемещаться как в поперечном, так и в продольном направлениях. Жесткость графенового слоя на растяжение весьма велика, эквивалентный модуль Юнга для графена в 5 раз больше, чем у конструкционных сталей. При изгибе графенового слоя продольное натяжение будет возрастать вследствие его удлинения в продольном направлении, что будет приводить к увеличению дифференциальной жесткости.

Для понимания характера этой зависимости рассмотрим статическое деформирование струны, предварительно натянутой и закрепленной по концам так, что запрещены перемещения ее концов в поперечном и продольном направлениях (рис.1).

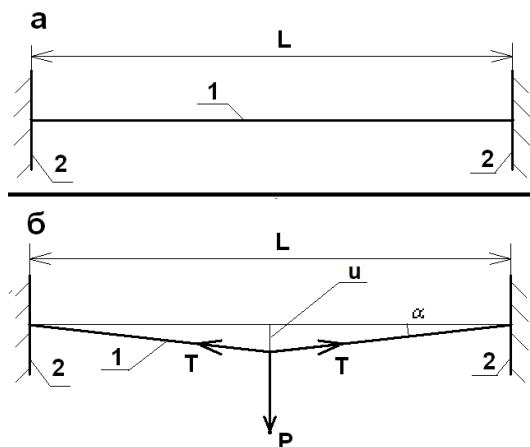


Рис.1. Равновесие струны при приложении поперечной нагрузки.

Струна 1 натянута между стенками 2 с начальным натяжением T_0 (рис.1а) раздвиганием стенок 2, после чего стенки 2 жестко зафиксированы. Затем в середине струны статически приложена сила P , вследствие чего образовался прогиб u . Запишем уравнения равновесия

$$P - 2T \sin \alpha = 0 \quad (3)$$

Из геометрии ясно, что

$$\sin \alpha = \frac{u}{\sqrt{\left(\frac{L}{2}\right)^2 + u^2}}, \quad \operatorname{tg} \alpha = \frac{2u}{L} \quad (4)$$

Сила натяжения с учетом податливости струны

$$T = T_0 + T_* \varepsilon \quad (5)$$

где ε есть деформация струны, которая определяется уравнением

$$\varepsilon = \frac{ds - dx}{dx}, \quad ds = dx \sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 \alpha} \quad (6)$$

Здесь dx это недеформированный элемент струны, а ds - элемент, удлиненный в результате прогиба.

Подставляя в (3) выражения (4), (5) и (6), получим связь между силой P и прогибом струны u

$$P = \frac{4u}{L} \left(T_0 + T_* \left(\sqrt{1 + \left(\frac{2u}{L} \right)^2} - 1 \right) \right) / \sqrt{1 + \left(\frac{2u}{L} \right)^2} \quad (7)$$

Простейшее линейное приближение дает классическое выражение для связи силы P и прогиба струны u

$$P = \frac{4uT_0}{L} \quad (8)$$

Однако следующее приближение с оставлением третьей степени прогиба u показывает, что влияние дополнительного натяжения, получающегося вследствие увеличения длины струны при ее деформировании, может быть весьма серьезным

$$P(u) = \frac{4uT_0}{L} + (T_* - T_0) \left(\frac{2u}{L} \right)^3 \quad (9)$$

В выражении (9) коэффициент при третьей степени прогиба может быть представлен как

$$T_* - T_0 = T_* (1 - \varepsilon_0) \quad (10)$$

где ε_0 - продольная деформация, полученная при предварительном натяжении слоя силой T_0 . Для графена известно, что его упругая деформация может достигать величины 0.25, но и при этом разность $(1 - \varepsilon_0)$ останется положительной.

2. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ

Введем безразмерные переменные: время $\tau = \lambda t$, заряд $q = Q/Q_0$ и прогиб $\xi = u/d_0$, d_0 - изначальный зазор между пленкой и подложкой, $Q_0 = C_0 U_0$ исходный постоянный заряд конденсатора, возникающий под действием приложенного постоянного напряжения U_0 . Собственная частота колебаний графенового слоя λ определяется из выражения $\lambda^2 = 4T_0 d_0 / (ml)$. В результате получим систему уравнений с «основными» параметрами, где () теперь обозначена производная по новому «безразмерному» времени τ , $\Omega = \omega / \lambda$

$$\ddot{\xi} - \alpha q^2 + \xi + \beta \xi^3 = 0, \quad \dot{q} + \kappa(1 - \xi) = \tilde{u} \kappa \sin \Omega \tau \quad (11)$$

Здесь введены параметры

$$\alpha = \frac{C_0 U_0^2}{2m\lambda^2 d_0}, \quad \beta = \frac{8(T_* - T_0) d_0^3}{m\lambda^2 L^3}, \quad \kappa = \frac{1}{RC}, \quad \tilde{u} = \frac{U}{U_0} \quad (12)$$

Физический смысл введенных параметров следующий: α - отношение потенциальной (электрической) энергии конденсатора при начальном запасенном заряде $Q_0 = C_0 U_0$ амплитуде кинетической энергии при гармонических колебаниях обкладки массы m с собственной частотой λ и амплитудой d_0 , κ - отношение периода свободных механических колебаний обкладки конденсатора к величине времени затухания - убывания начального заряда емкости, включенной на сопротивление R , $\tilde{u}$ - масштабированная амплитуда внешнего гармонического напряжения. Отметим, что в соответствии с (10), параметр β всегда положителен.

Квазистационарное решение второго уравнения системы (10) ищем, пренебрегая первым слагаемым. Физически такое пренебрежение соответствует малой постоянной времени электрической цепи, тогда для заряда имеем следующее выражение

$$q = \frac{\tilde{u} \sin \Omega \tau}{1 - \xi} \quad (13)$$

Подстановка уравнения (12) в первое уравнение системы (10) дает нелинейное уравнение относительно прогиба мембраны. Будем искать численное решение этого уравнения, дополнительно введя в него демпфирование, которое неизбежно возникает в любой электромеханической системе

$$\ddot{\xi} + \delta \dot{\xi} + \xi + \beta \xi^3 - \alpha \left(\frac{\tilde{u} \sin \Omega \tau}{1 - \xi} \right)^2 = 0 \quad (14)$$

где δ коэффициент демпфирования. Результаты решения для параметров $\alpha = 0.01$, $\delta = 0.01$, $\Omega = 0.52$ приведены на рис.2 и рис.3. Их графиков видно, что при $\beta = 0.1$ амплитуды колебаний почти вдвое меньше, чем при $\beta = 10$. Таким образом, влияние нелинейного члена на решение уравнения существенно, и чем он больше, тем лучше с точки зрения диагностики колебаний.

Резонансные кривые построены по результатам численного интегрирования и представлены на рис. 4 и 5.

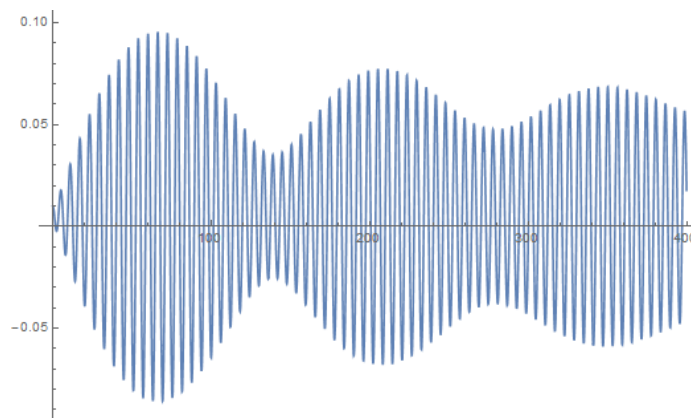


Рис.2. Отклонение мембраны при $\beta = 0.1$.

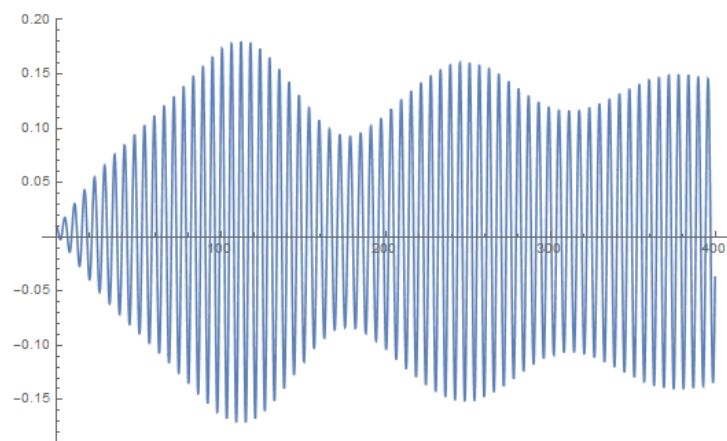


Рис.3. Отклонение мембраны при $\beta = 10$.

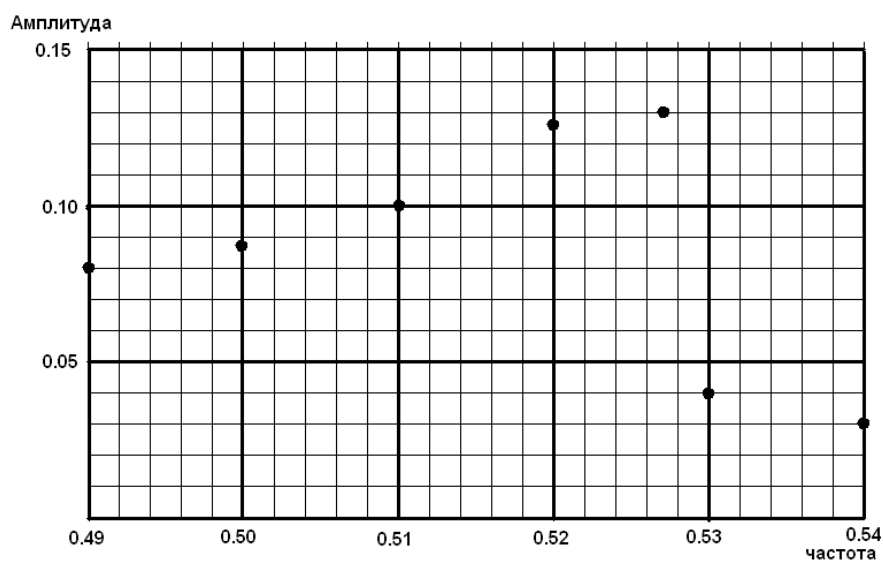


Рис.4. Резонансная кривая при малом начальном натяжении ($\beta = 10$).

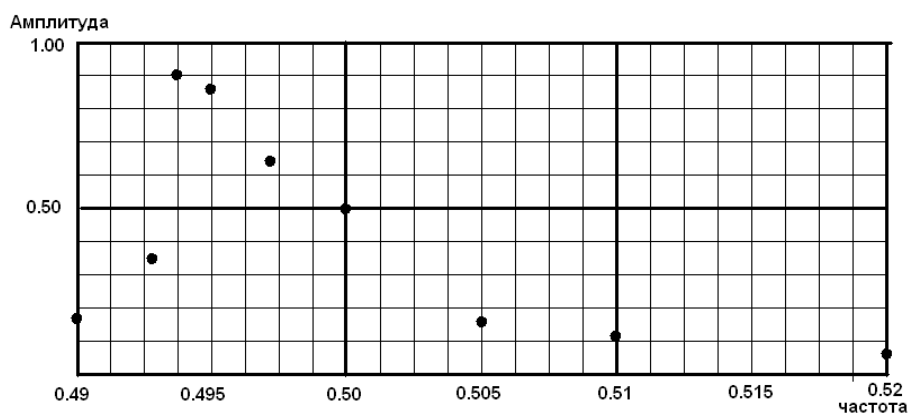


Рис.5. Резонансная кривая при большом начальном натяжении ($\beta = 0.1$).

При малом начальном натяжении велико влияние нелинейной жесткости самого графенового слоя. При этом срыв наблюдается при сканировании частоты возбуждения снизу вверх. При достаточно большом начальном натяжении преобладает нелинейность, связанная с изменением емкости конденсатора при изгибе графенового слоя. Срыв колебаний наблюдается при сканировании частоты возбуждения сверху вниз.

ВЫВОДЫ

В результате работы предложена электромеханическая модель графенового нанорезонатора с учетом изменения емкости конденсатора, возникающим при деформировании графенового нанослоя (одной из обкладок) и с учетом нелинейных упругих свойств графенового листа при малом начальном натяжении. Показано, что при возбуждении колебаний гармоническим внешним напряжением в системе возникает как обычный резонанс, так и параметрический. В случае обычного резонанса, когда частота внешнего воздействия (прикладываемого электрического напряжения) близка к половине собственной механической частоты, система может иметь как «жесткую», так и «мягкую» резонансную кривую. Наличие срыва на резонансной кривой дает возможность более надежного определения изменения собственной частоты резонатора при осаждении на нем наночастицы.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 14-01-00845 и гранта Президента Российской Федерации МК-4873.2014.1.

ЛИТЕРАТУРА

1. Морозов Н. Ф., Беринский И. Е., Индейцев Д. А., Привалова О. В., Скубов Д. Ю., Штукин Л. В. Срыв колебаний графенового резонатора как способ определения его спектральных характеристик. Доклады Академии наук, 2014. Т.456 №5, с. 537-540.
2. Chen C., Hone J. Graphene nanoelectromechanical systems. Proceedings of the IEEE. Vol.101, No 7, pp.1766-1779.

СРАВНЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ И АНАЛИТИЧЕСКИХ ПОДХОДОВ К ОПРЕДЕЛЕНИЮ УПРУГИХ МОДУЛЕЙ АЛМАЗА

Беринский И.Е.^{1,2}, Кривцов А.М.^{1,2}, Лобода О.С.^{1,2}, Цаплин В.А.²

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет, г. Санкт-Петербург, Россия

² ФГБУН Институт проблем машиноведения РАН, г. Санкт-Петербург, Россия

РЕЗЮМЕ

В статье приводится описание компьютерных экспериментов по определению модулей упругости кристаллической решетки алмаза статическим и динамическим способом с использованием потенциалов Терзоффа и Бреннера. Полученные результаты сравниваются с аналитическими расчетами и результатами натуральных экспериментов.

Ключевые слова: упругие модули; углеродные структуры; решетка алмаза; потенциал Терзоффа; потенциал Бреннера; компьютерный эксперимент.

ВВЕДЕНИЕ

Создание аналитических и компьютерных моделей, имеющих предсказательную силу и позволяющих сократить количество дорогостоящих натуральных экспериментов, занимает исследователей не одно десятилетие. Описание углеродных структур, уникальные механические свойства которых открывают широкие перспективы их практического использования в различных областях науки и техники, приобретает в последнее время особую актуальность.

В данной работе исследуются упругие свойства кристаллов, имеющих решетку алмаза. В результате статических и динамических численных экспериментов определяются модули упругости. При вычислении используется метод молекулярной динамики (ММД) [1,2] с применением многочастичных потенциалов Терзоффа [3-5] и Бреннера первого [6] и второго [7] поколения. Полученные результаты сравниваются с аналитическими расчетами и результатами натуральных экспериментов. Аналитические расчеты проводились на основе механической модели двухатомной кристаллической решетки, предложенной в [8] и получившей развитие в [9]. В соединениях углерода (в том числе алмазе) связь является направленной (ковалентной), поэтому простейшая модель, где атомы представляются материальными точками, связанными парным силовым взаимодействием, оказывается недостаточной. Подход, рассматриваемый в упомянутых работах, состоит в дополнительном учете парного моментного взаимодействия: потенциалы зависят от относительных положений и поворотов двух взаимодействующих частиц. Это приводит к тому, что силы взаимодействия между атомами перестают быть центральными: наряду с усилием вдоль связи появляется поперечное усилие, что позволяет учесть направленность связей в ковалентных структурах.

Использованию моментного взаимодействия для описания кристаллических структур посвящены работы [1-16]. Отметим также работы [17-20], в которых обсуждаются вопросы описания механических свойств углеродных структур.

1. РЕШЕТКА АЛМАЗА

Кристаллическая решетка алмаза является сложной двухатомной, т. е. содержит атомы двух типов, различающиеся по геометрическому расположению окружающих их атомов. Плотность упаковки решетки алмаза очень низкая — она составляет лишь 46% от плотности ГЦК (гранецентрированной кубической) решетки, но по твердости кристаллы алмаза превосходят все известные минералы.

Элемент кристаллической решетки алмаза показан на рис.1. Как видно, кристалл обладает кубической симметрией. Изображенные на рисунке атомы расположены по вершинам куба, в центре его граней (атомы 1,5,7) и в центрах четырех несмежных октантов куба (атомы 2,4,6,8). Решетка может быть получена из ОЦК (объемоцентрированной кубической) удалением с первой координационной сферы каждого второго атома так, чтобы оставшиеся атомы лежали на вершинах тетраэдра. Каждый атом находится в центре тетраэдра, вершинами которого служат четыре ближайших атома, угол между ковалентными связями составляет $109^{\circ}28'$.

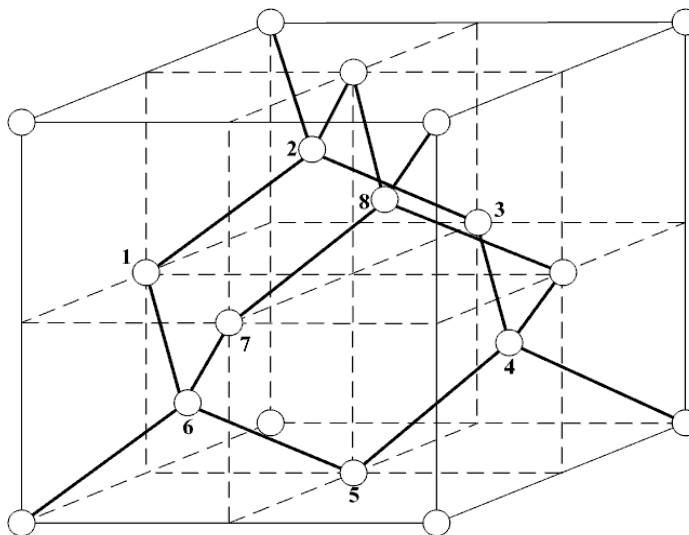


Рис.1. Элемент кристаллической решетки алмаза.

2. ОПИСАНИЕ ИСПОЛЪЗУЕМЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

С целью описания взаимодействия между атомами в кристаллической решетке традиционно используются эмпирические потенциалы взаимодействия. Среди них большую популярность приобрели потенциалы, зависящие от порядка связи. Общая идея для таких потенциалов состоит в том, что прочность химической связи зависит от ее окружения (например, от количества смежных связей), а также от способности длины связи и углов между смежными связями изменяться. Одним из наиболее распространенных таких потенциалов является потенциал, предложенный в 1988 году Дж. Терзоффом в статье [3]. Этот потенциал использовался для расчета углеродных структур [3-5], в том числе и с кристаллической решеткой алмаза. В 1990 году этот потенциал был доработан Д. Бреннером для расчета углеводородов [6], при этом в него были добавлены дополнительные слагаемые, учитывающие перевязывание радикалов, и, таким образом, учитывающие нелокальные эффекты. В 2002 году группой Бреннера была предложена новая версия потенциала (потенциал второго поколения) [7], в которой были доработаны аналитические функции, входящие в потенциал, и скорректированы параметры. Новая версия потенциала должна была существенно лучше описать энергии и длины связей и силовые константы для углеводородов, а также упругие свойства и поверхностную энергию алмаза.

Потенциал Терзоффа

Энергия системы частиц, в соответствии с [3-5] задается с помощью выражений

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}, \quad (1)$$

где i, j - индексы частиц, E - полная потенциальная энергия; E_i - энергия, приходящаяся на одну частицу; E_{ij} - энергия, приходящаяся на пару частиц

$$V_{ij} = f_C(r_{ij})(f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})) \quad (2)$$

r_{ij} - расстояние между частицами i, j ; $f_C(r)$ - функция обрезания (cutoff function)

$$f_C(r) = \begin{cases} 1, & r < R - D, \\ \frac{1}{2} \left[1 - \sin\left(\frac{\pi(r-R)}{2D}\right) \right], & R - D < r < R + D, \\ 0, & r > R + D, \end{cases} \quad (3)$$

$f_R(r)$ - функция отталкивания, $f_A(r)$ - функция притяжения. Выражения для функций притяжения и отталкивания имеют вид

$$f_R(r) = A \exp(-\lambda_1 r),$$

$$f_A(r) = -B \exp(-\lambda_2 r).$$

Коэффициент b_{ij} задается следующим образом

$$b_{ij} = (1 + \beta^n \zeta_{ij}^n)^{-1/(2n)},$$

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_C(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) \exp(\lambda_3^3 (r_{ij} - r_{ik})^3), \quad (4)$$

$$g(\theta) = 1 + \frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{d^2 + (h - \cos \theta)^2},$$

где θ_{ijk} - угол между связями, соединяющими атомы i, j и i, k . Коэффициенты, используемые для атомов углерода

$$A = 1393.6 \text{ eV}, \quad c = 38049,$$

$$B = 346.74 \text{ eV}, \quad d = 4.3484,$$

$$\lambda_1 = 3.4879 \text{ \AA}^{-1}, \quad h = -0.57058,$$

$$\lambda_2 = 2.2119 \text{ \AA}^{-1}, \quad R = 1.95 \text{ \AA},$$

$$\beta = 1.5724 \cdot 10^{-7}, \quad D = 0.15 \text{ \AA},$$

$$n = 0.72751, \quad \lambda_3 = 0.$$

Потенциал Бреннера

При вычислении энергии межатомного взаимодействия с помощью потенциала Бреннера [6] используются следующие выражения

$$V_B(r_{ij}) = \sum_i \sum_{j(>i)} (V_R(r_{ij}) - \bar{B}_{ij} V_A(r_{ij})), \quad (5)$$

где r_{ij} - расстояние между частицами i, j ; $V_R(r), V_A(r)$ - функции отталкивания и притяжения, имеющие вид

$$V_R(r) = \frac{D^{(e)}}{S-1} \exp(-\sqrt{2S} \beta (r - R^{(e)})) f_C(r),$$

$$V_A(r) = \frac{D^{(e)} S}{S-1} \exp(-\sqrt{2/S} \beta (r - R^{(e)})) f_C(r).$$

Константы имеют значения

$$D^{(e)} = 6.0 \text{ eV}, S = 1.22, \beta = 21 \text{ нм}^{-1} = 2.1 \text{ \AA}^{-1}; \quad R^{(e)} = 0.1390 \text{ нм} = 1.390 \text{ \AA}.$$

Функция обрезания (cut-off function) $f_C(r)$ имеет вид

$$f_C(r) = \begin{cases} 1, & r < R^{(1)}, \\ \frac{1}{2} \left[1 + \cos \left(\frac{\pi(r-R^{(1)})}{R^{(2)}-R^{(1)}} \right) \right], & R^{(1)} < r < R^{(2)}, \\ 0, & r > R^{(2)}, \end{cases} \quad (6)$$

где константы $R^{(1)} = 0.17 \text{ нм} = 1.7 \text{ \AA}$; $R^{(2)} = 0.2 \text{ нм} = 2 \text{ \AA}$. Параметр в выражении (5) равен $\bar{B}_{ij} = (B_{ij} + B_{ji})/2$

$$B_{ij} = \left[1 + \sum_{k(\neq i, j)} G(\theta_{ijk}) f_C(r_{ik}) \right]^{-\delta},$$

где $\delta = 0.5$, θ_{ijk} - угол между связями, соединяющими атомы i, j и i, k . Функция G имеет вид

$$G(\theta) = a_0 \left[1 + \frac{c_0^2}{d_0^2} - \frac{c_0^2}{d_0^2 + (1 + \cos \theta)^2} \right],$$

где $a_0 = 0.00020813$, $c_0 = 330$, $d_0 = 3.5$.

Потенциал Бреннера второго поколения

Потенциал Бреннера второго поколения [7] позволяет представить энергию связи в виде

$$E_B(r_{ij}) = \sum_i \sum_{j(>i)} (V^R(r_{ij}) - b_{ij} V^A(r_{ij})), \quad (7)$$

где i, j - индексы частиц, E_b - полная потенциальная энергия; r_{ij} - расстояние между частицами i, j . Функции отталкивания и притяжения между атомами углерода имеют вид

$$\begin{aligned} V^R(r) &= f^C(r) (1 + Q/r) A e^{-\alpha r}, \\ V^A(r) &= f^C(r) \sum_{n=1,3} B_n e^{-\beta_n r}, \end{aligned} \quad (8)$$

$$f^C(r) = \begin{cases} 1, & r < D_{\min}, \\ \frac{1}{2} \left[1 + \cos \left(\frac{\pi(r-D_{\min})}{D_{\max}-D_{\min}} \right) \right], & D_{\min} < r < D_{\max}, \\ 0, & r > D_{\max}, \end{cases}$$

Параметры, используемые для атомов углерода

$$\begin{aligned} \alpha &= 4.74653906 \text{ \AA}^{-1}, & \beta_1 &= 4.7204523127 \text{ \AA}^{-1}, \\ \beta_2 &= 1.4332132499 \text{ \AA}^{-1}, & \beta_3 &= 1.3826912506 \text{ \AA}^{-1}, \\ B_1 &= 12388.79197798 \text{ eV}, & B_2 &= 17.5674064650 \text{ eV}, \\ B_3 &= 30.7149320806 \text{ eV}, & D_{\min} &= 1.7 \text{ \AA}, D_{\max} = 2.0 \text{ \AA}, \\ Q &= 0.3134602960 \text{ \AA}^{-1}, & A &= 10953.544162170 \text{ eV}, \end{aligned}$$

Множитель b_{ij} в выражении (7) равен $b_{ij} = (B_{ij} + B_{ji})/2$

$$B_{ij} = \left[1 + \sum_{k(\neq i, j)} f^C(r_{ik}) G(\cos(\theta_{ijk})) \right]^{-1/2}$$

где θ_{ijk} - угол между связями, соединяющими атомы i, j и i, k . Функция $G(\cos \theta)$ строится как полином через значения функции и ее производных в точках, соответствующих равновесным конфигурациям алмаза $\cos \theta = -1/3$; $G(-1/3) = 0.09733$, $dG(-1/3)/d(\cos \theta) = 0.4$.

3. ОПИСАНИЕ КОМПЬЮТЕРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Вычислительный эксперимент для определения упругих характеристик алмаза проводится двумя способами, статическим и динамическим. Статический способ состоит в том, что находящейся изначально в положении равновесия кристаллической решетке задается либо растяжение, либо сдвиг, и по реакции системы на приложенную деформацию определяются компоненты тензора жесткости. Динамический способ состоит в том, что в кристаллической решетке возбуждаются гармонические колебания, и компоненты тензора напряжений определяются по скорости распространения продольной и поперечной волн. Сравнение результатов, полученных разными способами, позволяет судить о корректности произведенных вычислений.

Статический эксперимент

На первом этапе вычислений находится положение равновесия решетки в растянутом состоянии. При этом задается либо растяжение вдоль двух осей симметрии решетки, либо сдвиговая деформация вдоль одной из осей. Решается динамическая задача достижения положения равновесия. Компьютерный эксперимент производится посредством вычисления радиус векторов и векторов скорости частиц в зависимости от времени. Интегрирование ведется методом центральных разностей. Метод состоит в том, что координаты и силы вычисляются во временных точках, разделенных интервалами, равными шагу интегрирования, а скорости вычисляются во временных точках, находящихся в серединах вышеупомянутых интервалов

$$\underline{v}(t + \tau / 2) = \underline{v}(t - \tau / 2) + \underline{w}(t)\tau,$$

$$\underline{r}(t + \tau) = \underline{r}(t) + \underline{v}(t + \tau / 2)\tau,$$

где τ - шаг интегрирования. Ускорение $\underline{w}(t)$ вычисляется через приложенную к частице силу.

Для нахождения силы, приложенной к одной частице, рассматриваемая область разбивается на квадратные ячейки. Рассматриваются все частицы, находящиеся в одной ячейке, либо в соседних ячейках к ячейке, где находится частица, для которой вычисляется приложенная сила.

В начальный момент времени задаются координаты частиц решетки, соответствующие линейной деформации с учетом растяжения вдоль координатных осей, либо с учетом сдвига. В задаче со сдвигом координаты задаются в косоугольном базисе, поскольку тогда вектор периода решетки направлен вдоль координатных осей. Для вычисления сил взаимодействия и скоростей частиц координаты пересчитываются в ортогональной системе с учетом заданного сдвига. Колебания атомов гасятся введением коэффициента трения в уравнения движения. При этом достигается однородное деформированное состояние. При вычислении используется несколько ячеек периодичности, и ставятся периодические граничные условия.

Механические напряжения в решетке вычисляются по формулам

$$\underline{\tau}_i = \frac{1}{2V} \sum_{\alpha} \underline{F}_{\alpha}^i A_{\alpha}^i = \frac{1}{2V} \sum_{\alpha} \underline{F}_{\alpha}^i (\underline{r}_{\alpha}^i - \underline{r}_i), \quad (9)$$

$\underline{\tau}_i$ - тензор механических напряжений для частицы (атом углерода) с номером i . При однородном поле деформации находится средний тензор напряжений $\underline{\tau}_i$ по всем частицам. V - объем ячейки периодичности. $\underline{F}_{\alpha}^i$ - векторный коэффициент, равный $2 \frac{\partial \Pi^i}{\partial A_{\alpha}^i}$

где α - номер соседней частицы к частице с номером i . $\underline{A}_{\alpha}^i$ - вектор относительного положения соседней частицы: $\underline{A}_{\alpha}^i = \underline{r}_{\alpha}^i - \underline{r}_i$, $\underline{r}_i$ - радиус-вектор частицы с номером i , $\underline{r}_{\alpha}^i$ -

радиус-вектор соседней частицы (α). V_{ij} - энергия, приходящаяся на одну связь, см. (1), (2), (7).

$$\Pi^i = \frac{1}{2} \sum_{j(\neq i)} V_{ij} \quad (10)$$

В трехмерном ортотропном материале с кубической симметрией, каким является алмаз, выполняются следующие соотношения упругости

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= C_{11}\varepsilon_{11} + C_{12}\varepsilon_{22} + C_{12}\varepsilon_{33}, & \sigma_2 &= C_{12}\varepsilon_{11} + C_{11}\varepsilon_{22} + C_{12}\varepsilon_{33}, \\ \sigma_3 &= C_{12}\varepsilon_{11} + C_{12}\varepsilon_{22} + C_{11}\varepsilon_{33}, \\ \tau_{12} &= 2C_{44}\varepsilon_{12}, \tau_{23} = 2C_{44}\varepsilon_{23}, & \tau_{31} &= 2C_{44}\varepsilon_{31}. \end{aligned} \quad (11)$$

$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \tau_{12}, \tau_{23}, \tau_{31}$ - компоненты тензора напряжений, ε_{nm} - компоненты тензора деформаций, C_{nm} - коэффициенты жесткости. Зная напряжения и деформации, можно по (11) определить C_{11}, C_{12} и C_{44} .

Коэффициент Пуассона, модуль Юнга и коэффициент объемного сжатия выражаются через коэффициенты жесткости

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}}, \quad E = \frac{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}{(C_{11} + C_{12})}, \quad K = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \quad (12)$$

Динамический эксперимент

Для вычисления модулей упругости динамическим способом находится период гармонических колебаний кристаллической решетки. Форма колебаний задается синусоидальной, с длиной пространственного периода, кратного длине ячейки периодичности.

Рассматриваются два вида колебаний: продольные и поперечные. В обоих случаях отношение пространственного и временного периода колебаний равно скорости распространения соответствующей бегущей волны. Если u_1, u_2 - компоненты вектора смещения частиц, зависящие от координаты x_1 , что соответствует распространению волны вдоль оси OX_1 , то уравнение продольных колебаний

$$C_{11}\partial_{11}u_1 = \rho\ddot{u}_1, \quad (13)$$

откуда следует выражение для скорости распространения волны

$$V^2 = \frac{C_{11}}{\rho} = \left(\frac{l}{T}\right)^2,$$

где ρ - плотность среды, l - длина волны, T - период колебаний. Уравнение поперечных колебаний имеет вид

$$C_{44}\partial_{11}u_2 = \rho\ddot{u}_2, \quad (14)$$

соответствующее выражение для скорости: $V^2 = C_{44}/\rho$. Аналогично, для волн вдоль оси OX_2 имеем

$$\begin{aligned} C_{22}\partial_{22}u_2 &= \rho\ddot{u}_2, & V^2 &= C_{22}/\rho, \\ C_{44}\partial_{22}u_1 &= \rho\ddot{u}_1, & V^2 &= C_{44}/\rho. \end{aligned} \quad (15)$$

Длина волны выбирается так, чтобы задача максимально соответствовала распространению волн в линейной сплошной среде, когда скорость волны не зависит от длины волны (50 ячеек периодичности). Так, при уменьшении длины волны в два раза относительное изменение скорости волны не превышает погрешности вычисления.

Результаты статического и динамического численных экспериментов по определению модулей упругости алмаза приведенные в таблицах 1 и 2.

Таблица 1.

Результаты статического эксперимента

Потенциал	K , ГПа	E , ГПа	ν	C_{44} , ГПа	C_{11} , ГПа	C_{12} , ГПа
Терзофф	425	1056	0.087	642	1074	102
Бреннер	485	291	0.400	386	623	415
Бреннер 2	442	1049	0.104	721	1075	125

Таблица 2.

Результаты динамического эксперимента

Потенциал	$C_{11} = C_{22}$, ГПа	C_{44} , ГПа
Бреннер	613.8 +/- 0.2	379.8 +/- 0.1
Бреннер 2	1060.3 +/- 0.4	711.5 +/- 0.3

В таблице 3 приведены экспериментальные данные для модулей упругости алмаза. Как видно из таблицы, эти значения отличаются друг от друга, иногда существенно, так что можно говорить лишь о наиболее вероятном интервале значений упругих постоянных.

Таблица 3.

Экспериментальные значения модулей упругости алмаза (в ГПа)

C_{11} , ГПа	C_{12} , ГПа	C_{44} , ГПа	Источник
1076	125	576	McSkimin (1957)[21]
1076	275	519	Markham (1965)[22]
1079	124	578	McSkimin (1972)[23]
1076	125	577	Grimsdich (1975)[24]
1080	125	577	Gilman (2002)[25]

При сравнении таблиц 1 и 3 можно заметить, что значения C_{11} и C_{12} получаются наиболее близкими к экспериментальным при использовании потенциала Бреннера второго поколения, однако значение C_{44} оказывается сильно завышенным (на 25%). При использовании потенциала Терзоффа мы получаем близкое C_{11} , завышенное на 11% значение C_{44} и заниженное на 18% C_{12} . Потенциал Бреннера первого поколения дает значения модулей, сильно расходящихся с экспериментальными значениями. Результаты динамического эксперимента отличаются от результатов статического не более, чем на 2%.

4. АНАЛИТИЧЕСКАЯ МЕХАНИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В работе [9] была предложена механическая модель двухатомной кристаллической решетки при учете силового и моментного взаимодействия. Подход, используемый в данной работе, состоит в дополнительном учете парного моментного взаимодействия - потенциалы зависят от относительных положений и поворотов двух взаимодействующих частиц. Это приводит к тому, что силы взаимодействия между атомами перестают быть центральными: наряду с усилием вдоль связи появляется поперечное усилие, что позволяет учесть направленность связей в ковалентных структурах.

В работе исследовалась сложная кристаллическая решетка, элементарная ячейка которой содержит два атома. Можно называть их атомами первого и второго типа, соответственно. Атомы каждого типа образуют простую кристаллическую решетку, причем эти решетки конгруэнтны. Рассматривалось линейное упругое деформирование системы. Каждая частица считается взаимодействующей лишь с ограниченным числом соседей - это позволяет при переходе к макроскопическому масштабному уровню

получить локальную теорию. Для получения характеристик упругости использовался энергетический подход - связь микро- и макропараметров получается из сравнения выражений для энергии деформирования. Выражение для результирующего тензора жесткости двухатомной кристаллической решетки ${}^4\underline{\underline{C}}$ получено [9] в форме

$${}^4\underline{\underline{C}} = {}^4\underline{\underline{C}}^* - {}^4\underline{\underline{C}}', \quad {}^4\underline{\underline{C}}' = {}^3\underline{\underline{C}}^* \cdot {}^4\underline{\underline{C}}^{-1} \cdot {}^3\underline{\underline{C}}^T \quad (16)$$

$$\text{где } {}^4\underline{\underline{C}} = \frac{a^2}{V_0} ((c_A - c_D) \sum_{\alpha} \underline{n}_{\alpha} \underline{n}_{\alpha} \underline{n}_{\alpha} \underline{n}_{\alpha} + \frac{M}{2d} c_D J_{\underline{\underline{23}}})$$

$${}^3\underline{\underline{C}} = \frac{a^2}{V_0} ((c_A - c_D) \sum_{\alpha} \underline{n}_{\alpha} \underline{n}_{\alpha} \underline{n}_{\alpha}), \quad {}^2\underline{\underline{C}} = \frac{M}{V_0 d} ((c_A + d_1 c_D) \underline{\underline{E}}); \quad (17)$$

$$J_{\underline{\underline{23}}} = \underline{e}_k \underline{e}_n \underline{e}_n \underline{e}_k + \underline{e}_k \underline{e}_n \underline{e}_k \underline{e}_n, \quad d_1 = d - 1.$$

V_0 - объем элементарной ячейки недеформированной решетки; c_A и c_D продольная и поперечная жесткости связей; M - координационное число; d - размерность пространства; $\underline{e}_k$ - ортонормированный базис; $\underline{a}_{\alpha}$ - векторы, направленные из отсчетного атома в соседний атом с номером α

$$\underline{n}_{\alpha} = \frac{1}{a} \underline{a}_{\alpha}, \quad a = |\underline{a}_{\alpha}|.$$

Для вычисления объема элементарной ячейки может использоваться следующая общая формула (полученная эмпирически)

$$V_0 = \sqrt{\frac{(d+1)^{d+1}}{d^d}} a^d; \quad d = 1, 2, 3 \quad (18)$$

Предложенная математическая модель двухатомной кристаллической решетки была применена к решетке алмаза. Компоненты тензора жесткости алмаза C_{11} , C_{12} и C_{44} , а также коэффициент объемного сжатия K могут быть вычислены по формулам

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{12a} (c_A + 2c_D), \quad C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{12a} (c_A - c_D), \quad C_{44} = \frac{3\sqrt{3}}{8a} \frac{c_A c_D}{c_A + 2c_D};$$

$$K = \frac{\sqrt{3}}{12a} c_A \quad (19)$$

Как и следовало ожидать, модуль объемного сжатия зависит только от коэффициентов c_A (характеризующих продольную жесткость связи) и не зависит от коэффициентов c_D (характеризующих поперечную жесткость).

Определение параметров межатомных связей

Кристаллы с кубической симметрией имеют три независимых модуля упругости, в качестве которых могут быть выбраны C_{11} , C_{12} и C_{44} . Пусть нам известны экспериментальные значения указанных модулей. Тогда любые два значения и известное межатомное расстояние a позволят по формулам определить микроскопические характеристики межатомных связей - коэффициенты c_A и c_D . Таким образом, безмоментные макроскопические характеристики материала позволяют найти не только чисто силовую характеристику межатомной связи c_A , но и коэффициент c_D , характеризующий поперечную жесткость межатомной связи и присутствующий только при наличии моментного взаимодействия на микроуровне. Значение третьего модуля упругости можно использовать для оценки погрешности модели.

Используя данные из таблицы 3 для C_{11} , C_{12} и величину межатомного расстояния a , из формул (19) получаем значения коэффициентов продольной и поперечной жесткостей межатомных связей в кристаллах, которые приведены в таблице 4.

Таблица 4.

Расчетные значения упругих постоянных для идеальной кристаллической решетки алмаза

c_A	c_D	c_D/c_A	C_{44} эксп.	C_{44} расч.	Отклонение
Н/м	Н/м		Гпа	Гпа	%
472	338	0.72	576 [21]	586	1.7
578	285	0.49	519 [22]	605	17
472	340	0.72	578 [23]	587	1.6
472	340	0.72	577 [24]	586	1.6
473	340	0.72	577 [25]	588	1.9

Используем найденные коэффициенты продольной и поперечной жесткости и формулы (19) для определения значений постоянной C_{44} (см. табл.4). Согласно таблице 4 для алмаза имеются экспериментальные данные, дающие погрешность в определении C_{44} не более 2%, что свидетельствует в пользу предлагаемой модели. Однако разброс в экспериментальных данных достаточно велик, что приводит к несколько большим отклонениям в значениях C_{44} . Возможно, это связано с чисто экспериментальными погрешностями.

5. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВЫВОДЫ

В работе исследованы упругие свойства кристаллов, имеющих решетку алмаза. При вычислении методом молекулярной динамики использовались многочастичные потенциалы Терзоффа, и Бреннера первого и второго поколения. В результате статических и динамических численных экспериментов были определены модули упругости алмаза. Наибольшее совпадение с экспериментальными результатами получилось при использовании потенциала Бреннера второго поколения. Потенциал Бреннера первого поколения дает значения модулей, сильно расходящихся с экспериментальными значениями. При этом результаты динамического эксперимента отличаются от результатов статического не более, чем на 2%. Все три потенциала дают неточные значения модуля C_{44} . Причина этого объяснялась в работе [20]: параметры потенциалов Терзоффа и Бреннера были подобраны без учета возможности внутренней релаксации решеток графита и алмаза, и, в результате, дают неверные значения модулей, связанных со сдвигом. В то же время, рассматриваемая аналитическая модель лишена этого недостатка. Имея ясный физический смысл и, не отягощенная большим числом параметров, она позволяет определить модуль сдвига C_{44} с погрешностью, не превышающей 2%. Таким образом, эта модель является базой для создания новых потенциалов взаимодействия, имеющих более высокую предсказательную силу, чем существующие.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных исследований и гранта Президента РФ для молодых кандидатов наук МК-4873.2014.1.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Кривцов А.М.*. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой, М: ФИЗМАТЛИТ, 2007, 304 стр.
2. *Кривцов А.М., Волковец И.Б., Ткачев П.В., Цаплин В.А.*, Применение метода динамики частиц для описания высокоскоростного разрушения твердых тел // Математика. Механика. Информатика. Труды конференции, посвященной 10-летию РФФИ. - М. ФИЗМАТЛИТ, 2004. С. 361-377.

3. Tersoff J. New empirical approach for the structure and energy of covalent system // Phys.Rev. B (1988) V. 37, No 12, P.6991-6999
4. Erkoç S.. Empirical many-body potential energy functions used computer simulations of condensed matter properties, Physics Reports 278 (1997), P. 79-105
5. Tersoff J. Empirical Interatomic Potential for Carbon, with Applications to Amorphous Carbon // Phys.Rev. B. 1988. 61, 2879-2882.
6. Brenner D.W. Empirical Potential for Hydrocarbons for Use in Simulating the Chemical Vapor Deposition of Diamond Films // Phys.Rev. B. 1990. V.42, pp. 9458-9471.
7. Brenner D.W., Shenderova O.A, Harrison J.A., Stuart S.J., Ni B., Sinnott S.B. A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons // J.Phys: Condens. Matter 14 (2002), 783-802.
8. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф., Получение макроскопических соотношений упругости сложных кристаллических решеток с учетом моментных взаимодействий на микроуровне // Прикладная математика и механика. 2007. Т.71. Вып.4. С.595-615.
9. Кривцов А.М., Лобода О.С. Описание упругих свойств двухатомных кристаллов со структурой алмаза и сфалерита с использованием моментного взаимодействия. Физическая мезомеханика. 2012, № 2, стр. 23 - 29.
10. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф., Фирсова А.Д., Описание кристаллической упаковки частиц с учетом моментных взаимодействий // Известия РАН. Механика твердого тела. 2003. № 4, 110-127.
11. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф., Фирсова А.Д. Теоретическая механика. Описание механических свойств кристаллических твердых тел на микро- и макроуровне. Учеб. пособие. СПб: Изд-во СПбГПУ. 2004. 32 с.
12. Кривцов А.М. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов. Учеб. пособие. СПб: Изд-во СПбГПУ. 2009. 125 с.
13. Беринский И.Е., Двас Н.Г., Кривцов А.М. и др., Теоретическая механика. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов // Под ред. А.М. Кривцова. СПб.: Изд-во Политех. ун-та, 2009. 144 с
14. Беринский И. Е., Стержневая модель кристаллической решетки графена // Научно-технические ведомости СПбГПУ. 2010. 3, 13-20.
15. Кузькин В.А., Кривцов А.М., Описание механических свойств графена с использованием частиц с вращательными степенями свободы // ДАН, 2011, том 440, № 4, 476-479.
16. Кривцов А. М., Подольская Е. А., Моделирование упругих свойств кристаллов с гексагональной плотноупакованной решеткой // Известия РАН. Механика твердого тела. 2010, № 3, 77-86.
17. Гольдштейн Р.В., Ченцов А.В., Дискретно-континуальная модель нанотрубки// Известия РАН. Механика твердого тела. 2005, № 4, с. 57-74.
18. Алёхин В.В., Аннин Б.Д., Бабичев А.В., Коробейников С.Н., Собственные колебания и выпучивание графеновых листов // Изв. РАН. МТТ. 2013. №5. С.34-38.
19. Валуев И. А., Норман Г. Э., Шуб Б. Р., Механизмы окисления бездефектных поверхностей углеродных наноструктур: влияние кривизны поверхности // Химическая физика. - 2011. Т. 30, № 1. - С. 82-88.
20. Беринский И. Е., Кривцов А. М., Об использовании многочастичных межатомных потенциалов для расчета упругих характеристик графена и алмаза // Известия РАН. Механика твердого тела. 2010, № 6, 60-85.
21. McSkimin H. J. and Bond W. L., Elastic moduli of diamond // Phys. Rev. 1957. V.105.
22. Markham H.F., National Physical Laboratory measurements presented by Musgrave: Diamond conf.(Reading, 1965).
23. McSkimin H. J. and P. Andreatch // J. Appl. Phys. 1972. 43 2944-2948.

24. *Grimsditch M. H., Ramdas A. K.*, Brillouin scattering in diamond // Phys. Rev. 1975. V. B11, 10, 3139-3148.
25. *Gilman J. J.*, Origins of the outstanding mechanical properties of diamond // Springer-Verlag, Mat. Res. Innovat, 2002. V.6, pp.112-117.

ЭФФЕКТ ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ КАК УНИВЕРСАЛЬНОЕ СВОЙСТВО ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Гергега А.Н.¹, Костюк А.И.², Столевич И.А.²

¹Одесская национальная академия пищевых технологий, г.Одесса, Украина

²Одесская государственная академия строительства
и архитектуры, г.Одесса, Украина

РЕЗЮМЕ

Проанализированы литературные данные экспериментальных исследований эффекта дального действия в полупроводниках и металлах. Рассматривается перколяционная модель эффекта, обсуждается возможность его наблюдения в твердых телах различной природы, в частности, в керамзитобетоне.

Ключевые слова: структурный фазовый переход; универсальность свойств; имплантация полупроводников; строительные композиты; керамзитобетон

ВВЕДЕНИЕ

Совокупность явлений, возникающая в полупроводниках как следствие ионной имплантации, и получившая название «эффект дального действия», привлекла внимание исследователей в конце шестидесятых годов XX века [1]. Суть эффекта состоит в изменении структуры материала на расстояниях от облучаемой поверхности, на несколько порядков превышающих длину проективных пробегов ионов, т.е. глубину проникновения энергии облучения. Обычно это проявляется в увеличении плотности дефектов упаковки в объеме кристалла по сравнению с областью пробега ионов [2], возникновении в облученном кристалле аномальной диффузии [3,4], в немонотонном изменении (по мере набора дозы облучения) микротвердости образца на расстояниях до нескольких сотен микрометров от дефектного слоя [5,6] и некоторых других явлениях.

В [7] сформулировано представление об эффекте дального действия как о различных проявлениях фазового перехода второго рода. Такой взгляд на явление позволяет предположить наличие аналогичных закономерностей в материалах различной природы.

Ниже описан эффект дального действия в полупроводниках и металлах, приведены данные о его проявлении в керамзитобетоне.

1. ИСТОРИЯ ЭФФЕКТА

Эффект дального действия исследуется в течение, примерно, сорока лет, но, как отмечают авторы [1,2,5], ни убедительного объяснения в рамках классических моделей радиационной физики твердого тела, ни сколько-нибудь законченной теории, ни единства взглядов на механизмы, лежащие в основе этих явлений, сегодня нет.

Попытки объяснить явление дального действия радиационно-динамическими эффектами при корпускулярном облучении, формированием послекаскадных ударных волн неудовлетворительны: по оценке в [1] пробег таких волн «в стабильной среде до уровня десятикратного затухания ограничивается в лучшем случае несколькими десятками нанометров, что не позволяет объяснить эффект на расстояниях в несколько десятков, сотен или даже тысяч микрометров».

Большинство предложенных механизмов реализации эффекта дального действия не учитывает отклика подвергаемой воздействию среды, в то время как он может иметь решающее значение [1]. «Не удастся объяснить эти явления и на основе анализа процессов генерации пар Френкеля, дислокаций и других типов дефектов при облучении, так как масштабы дального действия часто многократно превышают размеры зерен в

поликристаллах, границы которых являются стоками либо препятствиями для структурных дефектов» [1].

Рассмотрим подробнее несколько характерных экспериментов, отражающих типические черты эффекта дальнего действия [7].

В [8] описаны эксперименты по облучению галогенной лампой мощностью 300 Вт фольги из пермаллоя толщиной 20 мкм. В работе обнаружено изменение микротвердости на обеих сторонах фольги.

Авторами установлено, что зависимость относительного изменения микротвердости от длительности облучения немонотонна, что интервал доз облучения ограничен сверху и снизу: вне этого интервала микротвердость не изменялась, и что эффект не зависит от нагрева образца.

Объяснение эффекта авторы [8] строят на аналогии между ионным и световым облучением: они считают, в отсутствие температурных градиентов, а также возбуждения его электронной подсистемы материала, «наиболее вероятным является механизм возбуждения ионами упругих (деформационных) волн и их взаимодействие с исходными структурными несовершенствами». Нужно согласиться с авторами: «допущение, что генерация деформационных волн происходит при воздействии света от лампы накаливания, является наиболее трудным пунктом модели [8]».

В [6, 9] наблюдалось изменение микротвердости поликристаллических металлов и сплавов толщиной несколько сотен микрометров при дозах облучения ионами $10^{13} - 10^{16} \text{ см}^{-2}$. В работе показано, что величина микротвердости является немонотонной функцией дозы с резко выраженными максимумами, и что явление носит пороговый (по энергии облучения) характер и практически не зависит от сорта ионов, вида металла, толщины фольги, плотности ионного тока, и возникает с обеих сторон фольги.

Авторы [10] полагают «ответственными за эффект дальнего действия гиперзвуковые волны». Они считают, что «ион, сталкиваясь с поверхностью, производит своего рода микровзрыв, порождая высокочастотную акустическую волну», и, хотя «как правило, волны быстро затухают и сами по себе не могут достичь обратной стороны пластины, но, встречая на своем пути протяженные дефекты, они вызывают их перестройку, которая сопровождается испусканием вторичных волн. Возникает своего рода цепной процесс, который, в конечном счете, способен охватить всю толщу пластины и привести к изменению ее свойств».

Недавняя работа [2] существенно дополнила экспериментальные данные об эффекте. Авторы провели металлографическое исследование образцов кремния, облученных альфа-частицами с энергией 27.2 МэВ при интегральной плотности потока $\Phi = 10^{17} \text{ см}^{-2}$ с интенсивностью в пределах $10^{12} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$. Образцы во время облучения охлаждались, их температура не превышала 100°C.

При проекционной глубине проникновения $R_p = 360 \text{ мкм}$, авторы [2] обнаружили не только пять слоев дефектов, расположенных ниже слоя внедрения (380, 423, 627, 720, 764 мкм), но и три - на глубине меньшей, чем проекционная (132, 242 и 341 мкм). Кроме того, в области R_p обнаружена мелкомасштабная структура дефектной системы. В работе отмечается, что и наличие мелкомасштабной структуры, и периодичность дефектной системы - свидетельствуют о волновом механизме их образования. При этом авторы отмечают, что, с другой стороны, известный автоволновой механизм не может объяснить воздействие облучения в области ниже слоя внедрения, так как предусматривает поддержание амплитуды распространения концентрационного фронта радиационных дефектов за счет пластической деформации, которая возможна лишь при более высокой температуре образцов.

Эти результаты, устраняющие «односторонность» экспериментальных данных, явились существенным компонентом в череде фактов, позволивших сформулировать представление об эффекте дальнего действия как о различных проявлениях фазового перехода второго рода.

Предложенная в [7] перколяционная модель позволяет интерпретировать эффект дальнего действия как результат критического поведения аморфизированного (дефектного) слоя. Положения модели такие:

1) дефектный слой, расположенный на глубине максимально вероятного проективного пробега ионов, представляет собой квазиплоское несплошное «облако» аморфизированных областей различных размеров;

2) при критической дозе облучения, часть областей объединяется, и в кристалле возникает перколяционный кластер аморфизированного слоя [11,12];

3) поле механических напряжений, создаваемое таким слоем, - дальнедействующее, убывающее с расстоянием пропорционально r^{-b} , при b , примерно, равном единице.

Рассмотрим возможный механизм явления, описанный в [7].

Пусть при малых дозах облучения дефектные образования можно рассматривать как отдельные скопления, создающие механические напряжения, которые убывают как $\sigma \sim r^{-3}$ [13]. По мере роста дозы в материале возникает разупорядоченная область перколяционного типа, которая превращается в бесконечный кластер «только при условии, что его плотность превышает некоторую критическую величину [14]». При этом скачкообразно изменяется закон падения напряжений: оно уменьшается заметно медленней, и может быть аппроксимировано законом $\sigma \sim r^{-1}$. При дальнейшем увеличении дозы перколяционный кластер аморфизированного слоя превращается в «сплошную стенку» с экспоненциально спадающим полем напряжений [13]. Естественно, что столь резкие изменения характера механических полей в материале, существенно видоизменяют равновесное распределение дефектов, и могут привести к образованию областей с повышенным содержанием дефектов вдали от области вероятнейшего пробега ионов.

Модель позволяет также интерпретировать немонотонность в зависимости свойств образца от дозы облучения: области одной степени разупорядоченности по мере набора дозы теряют связность, и заменяются перколяционным кластером более разупорядоченных областей. В процессе облучения это происходит неоднократно, и приводит к колебанию величины механических напряжений, к выраженной немонотонности свойств облучаемого образца, в частности, микротвердости, а также позволяет объяснить наличие «магических» доз, при которых наблюдаются экстремумы свойств.

2. АНАЛОГ ЭФФЕКТА ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ В КЕРАМЗИТОБЕТОНЕ

Получение строительных композиционных материалов с заданными диапазонами свойств - сложный многофакторный процесс. Таким его делают и многокомпонентный состав материала, и диапазон характерных размеров составляющих, протяжённостью в три порядка – от десятков микрон (зерно цемента) до десятков миллиметров (крупный заполнитель).

Хорошо известно, что на прочность конструкционного керамзитобетона значительно влияют зерновой состав, пористость заполнителя, водоцементное отношение, агрегатно-структурный фактор [15,16]. В литературе неоднократно отмечалась важность прочности и крупности фракции керамзита для получения конструкционного керамзитобетона [15,16]. Данные многочисленных экспериментов показали, что с уменьшением крупности фракции керамзита прочность легкого бетона растёт, так как мелкие гранулы имеют более высокую прочность.

При проектировании состава керамзитобетона необходимы также данные о влиянии объёмной концентрации керамзита на его свойства. Нами (А.К. и И.С.) были проведены экспериментальные исследования влияния концентрации керамзита на прочность керамзитобетона (табл. 1).

Таблица 1.

Зависимость прочности керамзитобетона от крупности фракции,
прочности и объемной концентрации керамзита

Крупность фракции, мм	Прочность керамзита, МПа	Объемная концентрация керамзита	Средняя плотность бетона, кг/м ³	Предел прочности при сжатии, МПа		
				1 сут.	7 сут.	28 сут.
0-10	5,93	0,54	1572	27,3	31,5	34,5
0-10	5,93	0,55	1572	25,5	29,1	37,6
0-10	5,93	0,60	1467	26,5	29,9	32,3
0-10	5,93	0,70	1312	22,3	23,6	29,1
0-10	5,93	0,71	1330	20,7	25,7	30,3
5-10	4,4	0,42	1486	23,8	25,8	31,4
5-10	4,4	0,43	1481	22,1	22,8	30,4
10-20	3,8	0,45	1454	19,7	19,8	30,7
10-20	3,8	0,42	1527	19,2	23,8	29,2

Из анализа представленных в таблице данных видно:

- 1) зависимость прочности керамзитобетона от объемной концентрации керамзита имеет нелинейный характер: повышается при увеличении концентрации до 0,55, и уменьшается при ее дальнейшем росте до 0,71;
- 2) оптимальная концентрация керамзитового заполнителя в бетоне составляет 0,54-0,6;
- 3) наибольшую прочность имеет керамзитобетон с включением керамзита фракции от нуля до 10 мм: при этом прочность увеличивается, примерно, на 20% при повышении средней плотности на (3-5)%.

Взаимодополняющие интерпретации этих выводов связаны с представлениями классического материаловедения строительных материалов и перколяционной теории.

Первая рассматривает соотношение между объемными долями керамзита, песка, цемента, воды. По мере роста содержания керамзита в бетоне прочность последнего возрастает за счет прочности заполнителя. Если же содержание керамзита слишком велико, возрастает вероятность разрушения бетона не по растворной части бетона, а по зерну заполнителя, что приводит к снижению прочности материала.

Вторая трактовка основана на качественном анализе свойств перколяционного кластера (квазикластера) гранул керамзита, который возникает в бетоне при достижении объемной концентрацией заполнителя критического значения. Если исходить из того, что механические напряжения в бетоне в процессе твердения возникают за счет увеличения объема растворной части в результате процессов гидратации, и, следовательно, всестороннего сжатия гранул керамзита, то при критической концентрации керамзита величина механических напряжений в материале скачкообразно возрастает в соответствии с механизмом, описанном в предыдущем разделе. Перколяционная теория интерпретирует этот факт, как результат структурного фазового перехода, который и провоцирует в системе рост напряжений. Это связано с возникновением в материальной системе выделенного направления и протяженных образований, которые создают механические напряжения, спадающие значительно медленнее, чем при докритических концентрациях. Именно эти внутренние напряжения способствуют повышению прочности материала.

Дальнейший рост концентрации гранул приводит, в соответствии с положениями перколяционной модели, к снижению прочности [7,13]. Наличие такого максимума

в зависимости прочности от концентрации позволяет провести аналогию с эффектом дальнего действия в полупроводниках и металлах.

О получении образцов большей прочности при использовании фракции (0÷10) мм. Этот результат требует дополнительного изучения. Не исключено, что это - артефакт, связанный с размерами образцов (15×15×15) см³, что в таком объеме именно на базе фракции наименьших размеров возможно образование сформировавшегося перкокластера.

Если перколяционный кластер, возникающий в керамзитобетоне при определенных концентрациях заполнителя, вносит существенный вклад в повышение прочности, то подобный эффект можно будет наблюдать и на других заполнителях - гравии, шлаках, щебне: определяющим в возникновении эффекта является образование связной, или квазисвязной, области перколяционного типа.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Перколяционные методы исследования вещества неоднократно демонстрировали свою эффективность при рассмотрении обширной области вопросов, относящихся к генезису и эволюции связных областей в стохастических процессах в материале [11,12,17]. В таких задачах одновременно изучается и кластерная система физического тела, и ее влияние на объект в целом [7,11]. В зависимости от физической природы перколяционного кластера это может привести к возникновению аномальной диффузии, к эффектам упрочнения или к деструкции материала [11], к появлению спонтанной намагниченности в ферромагнетиках, к переходу Мотта в примесных полупроводниках [12], изменению тепло- и влагоемкости тела [11,17] и другим эффектам.

Предложенная модель эффекта дальнего действия допускает наличие подобных явлений и в квазидвумерных средах. Исследования, подобные описанным, возможно приведут к технологиям производства изделий с планируемыми свойствами при создании покрытий различной природы и функционального назначения в микроэлектронике, нанотехнологиях и других отраслях, а также в производстве строительных материалов: отделочных, облицовочных, дорожного покрытия и тому подобного.

Если эффект – универсальное свойство твердых тел, то он должен проявиться также в полимерах, керамике, композитах различной природы и других материалах. Решение этого вопроса видится на пути обширных экспериментальных исследований, и, что очень важно, построении развернутой теории явления.

ЛИТЕРАТУРА

1. Овчинников В.В. Радиационно-динамические эффекты. Возможности формирования уникальных структурных состояний и свойств конденсированных сред. // УФН. - 2008. - Т. 178, № 9. - С. 991-1001.
2. Гроза А.А. и др. Особенности эффекта дальнего действия в кремнии при имплантации ядер водорода и гелия. // Украинский физический журнал. - 2010. - Т. 55, № 6. - С. 699-705.
3. Блейхер Г.А., Кривобоков В.П., Пащенко О.В. Тепломассоперенос в твердом теле под воздействием мощных пучков заряженных частиц. - Новосибирск: Наука, 1999. - 176 с.
4. Ovchinnikov V.V., Chernoborodov V.I., Ignatenko Yu.G. Change of electrical properties of alloys and excitation of low-temperature atom mobility by ion bombardment. // Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. - 1995. - В 103. - Р. 313-317.
5. Тетельбаум Д.И., Баянкин В.Я. Эффект дальнего действия. // Природа. - 2005. - № 4. - С. 9-17.

6. *Tetelbaum D.I., Azov A.Yu. et al.* The long-range influence of the ion and photon irradiation on the mechanical properties and on the composition of the permalloy-79. // *Vacuum*. - 2003. - V.70, № 2-3. - P.169-173.
7. *Герега А.Н.* Моделирование кластерных структур в материале: силовые поля и дескрипторы. // *Физическая мезомеханика*. - 2013. - Т. 16, №5. - С. 87-93.
8. *Тетельбаум Д.И., Азов А.Ю., Голяков П.И.* Влияние облучения светом на механические свойства металлов. // *Письма в ЖТФ*. - 2003. - Т. 29, вып. 2. - С. 35-41.
9. *Tetelbaum D.I., Kuril'chik E.V., Latisheva N.D.* Long-range effect of low-dose ion and electron irradiation of metals. // *Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res.* - 1997. - B 127/128. - P.153-156.
10. *Павлов П.В., Семин Ю.А., Скупов В.Д. и др.* Ударно-акустические эффекты в кристаллах при ионном облучении. // *ФТП*. - 1986. - Т. 20, вып. 3. - С. 503-507.
11. *Соколов И.М.* Размерности и другие критические показатели в теории протекания. // *УФН*. - 1986. - Т. 150, вып. 2. - С. 221-255.
12. *Шкловский Б.И., Эфрос А.Л.* Электронные свойства легированных полупроводников. - М.: Наука, 1979. - 416 с.
13. *Косевич А.М.* Физическая механика реальных кристаллов. - Киев: Наукова думка, 1981. - 328 с.
14. *Смирнов Б.М.* Свойства фрактального агрегата. // *УФН*. - 1989. - Т.157, вып. 2. - 357-360.
15. *Шорт А., Абелес П.В. и др.* Легкие бетоны: проектирование и технология. Пер. с англ. под ред. В.Н. Ярмановского - М.: Стройиздат, 1981. - 240 с.
16. *Вилков К.И.* Конструкционный керамзитобетон при обычных и сложных деформациях. - М.: Стройиздат, 1984. - 240 с.
17. *Федер Е.* Фракталы. - М.: Мир, 1991. - 254 с.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ОПТИМАЛЬНОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ КОНСТРУКЦИЙ С ТРЕБУЕМЫМ КОМПЛЕКСОМ СВОЙСТВ ПРИ ВОЛНОВЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ

Гусев Е.Л.

*ФГБУН Институт проблем нефти и газа Сибирского Отделения РАН,
г.Якутск, Россия*

*Институт математики и информатики Северо-Восточного Федерального
университета, г.Якутск, Россия*

РЕЗЮМЕ

Методами математического и компьютерного моделирования проведено исследование вариационной постановки задач оптимального проектирования композиционных конструкций с требуемым комплексом свойств при волновых воздействиях. На основе конструктивного анализа дифференциальных уравнений, описывающих динамику композиционных конструкций, развития теории методов продолжения по параметру разработана эффективная методика оптимального проектирования, позволяющая осуществлять эффективное проектирование композиционных конструкций с требуемым комплексом свойств при волновых воздействиях.

Ключевые слова: оптимальное проектирование, неоднородные структуры, композиционные материалы, требуемый и регулируемый комплекс свойств, вариационная постановка, необходимые условия оптимальности, принцип максимума Л.С. Понтрягина

ВВЕДЕНИЕ

Широкое распространение композиционных материалов, композиционных конструкций, покрытий в различных областях физики, техники, приборостроения, связанных с волновыми процессами, общность математического описания задач оптимального синтеза структуры композиционных конструкций, взаимодействующих с волновыми полями различной физической природы (электромагнитных, акустических, температурных, упругих) приводят к необходимости создания единого подхода к задачам исследования их предельных возможностей по достижению требуемого комплекса свойств [1-10].

Исследователя в первую очередь интересует, каких предельных возможностей по управлению параметрами волнового поля можно достичь, используя в качестве управляющего устройства систему, состоящую из чередующихся слоев с различными физическими свойствами. Чрезвычайно важное значение слоистых композитных конструкций в физике и технике обуславливается тем обстоятельством, что они являются одним из существенных элементов различных устройств, управляющих энергетическими характеристиками волновых процессов. Развитие научно-технического прогресса необходимо сопровождается расширением областей применения устройств, принципы работы которых основаны на использовании закономерностей, возникающих при взаимодействии волновых процессов различной физической природы с неоднородными структурами. Проблема наиболее эффективного функционирования таких устройств связана с проблемой всестороннего исследования предельных возможностей неоднородных структур как фактора управления параметрами волнового поля. Решение же последней проблемы возможно только на основе разработки эффективных методов конструирования предельных структур.

Таким образом, изучение предельных возможностей неоднородных композитных конструкций по достижению требуемого комплекса свойств при воздействии волновых

процессов различной физической природы является актуальной задачей, имеющей важное теоретическое и прикладное значение.

1. ОСОБЕННОСТИ ВОЛНОВЫХ ЗАДАЧ ОПТИМАЛЬНОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ КОНСТРУКЦИЙ С ТРЕБУЕМЫМ КОМПЛЕКСОМ СВОЙСТВ

Возникающие при решении задач оптимального синтеза структуры композиционных конструкций с требуемым комплексом свойств при волновых воздействиях задачи оптимизации обладают целым рядом специфических особенностей. Основные из этих особенностей следующие:

- При исследовании предельных возможностей слоистых конструкций как фактора управления параметрами волнового поля в число варьируемых должна быть включена совокупность всех переменных, определяющих структуру слоистой среды, а именно: физические свойства материалов слоев, толщины слоев, число слоев, а также характер сочленения слоев с различными физическими свойствами в конструкции. Для реального проектирования наиболее характерна ситуация, когда физические свойства материалов меняются не непрерывно, а могут выбираться из некоторого конечного набора. Т.к. в реальных условиях всегда имеется ограниченное число исходных материалов, из которых может быть синтезирована слоистая структура. Для задач оптимального проектирования в такой постановке отсутствуют вариации переменных, малых в равномерной метрике, что приводит к неэффективности их решения существующими методами.
- Решения краевых задач, описывающих волновые процессы в слоисто-неоднородных средах, как правило, претерпевают разрывы в точках разрыва распределений физических свойств вдоль направления стратификации среды. Поэтому задачам синтеза слоисто-неоднородных композитных конструкций при волновых воздействиях соответствуют разрывные задачи оптимального управления специальной структуры. Причем разрывам в распределениях физических свойств в общем случае соответствуют разрывы в распределениях фазовых переменных. Это приводит к значительным сложностям при разработке вычислительных методов оптимизации.
- Волновые задачи оптимального проектирования относятся к числу существенно многоэкстремальных задач. Многоэкстремальность волновых задач синтеза значительно затрудняет исследование предельных возможностей и характеристик композитных конструкций.
- Специфической особенностью задач оптимального проектирования слоисто-неоднородных композитных конструкций является также то, что при их решении должны учитываться условия наилучшей конструктивной реализуемости. Эти условия обеспечивают в определенном смысле большую простоту, надежность, лучшие эксплуатационные качества реализуемых конструкций. Условия наилучшей конструктивной реализуемости могут включать ограничения сверху на число слоев, на предельные размеры слоев, на число различных материалов, одновременно входящих в конструкцию.
- При оптимальном проектировании требуется достичь не одной, а нескольких целей, т.е. задачи оптимального проектирования являются многокритериальными. Наряду с условием близости функциональных характеристик конструкции к требуемым необходимо удовлетворить еще ряд требований, налагаемых проектировщиком на конструкцию. Однако основополагающим критерием в задачах оптимального синтеза, как правило, является критерий близости функциональных характеристик синтезируемой структуры конструкции к требуемым.

- Вторым по значимости является критерий наилучшей конструктивной реализуемости. Вследствие неединственности решения задачи синтеза возникает важная проблема выделения такого варианта слоистой структуры, который одновременно реализует предельные возможности конструкции и удовлетворяет условиям наилучшей конструктивной реализуемости. Очевидно, что для решения поставленной проблемы необходимо выделить множество всех допустимых вариантов, реализующих точную нижнюю грань функционала качества, а затем уже из этого множества выбрать вариант конструкции, наиболее приемлемый с точки зрения конструктивной реализуемости. И только в том случае, если на множестве вариантов, реализующих предельные возможности конструкции, отсутствует удовлетворительное с точки зрения конструктивной реализуемости решение, необходимо ослабить требования к близости функциональных характеристик к заданным. Таким образом, специфические особенности задач синтеза слоистых композитных конструкций приводит к тому, что в этих задачах представляет существенный интерес выделение всей совокупности вариантов конструкций, реализующих предельные возможности, т.е. выделение всей совокупности решений, доставляющих функционалу качества глобальный минимум.
- Задачи оптимального синтеза структуры композитных конструкций как обратные задачи математической физики, относятся к числу некорректных по А.Н. Тихонову задач, что проявляется в неустойчивости рассматриваемых задач минимизации функционалов [11]. Вследствие этого результирующее решение может являться в значительной степени неудовлетворительным, с точки зрения конструктивной реализуемости (например иметь большое число слоев), даже в том случае, когда искомое решение задачи синтеза будет в достаточной степени удовлетворять этим условиям. Поэтому в задачах оптимального синтеза структуры неоднородных композитных конструкций с требуемым комплексом свойств вычислительные процедуры оптимизации должны обладать свойством устойчивости.
- При реализации вычислительных процедур минимизации функционала качества необходимо проводить дискретизацию диапазона частот $[\omega_{\min}, \omega_{\max}]$, на котором осуществляется приближение функциональных характеристик слоистых структур к требуемым. Поэтому функциональные характеристики результирующей структуры могут быть близки к требуемым только на выбранном множестве точек дискретизации. Вне этих точек они могут быть произвольными. Для устранения данного недостатка необходимо брать очень мелкий шаг дискретизации по частоте, что приводит к существенному увеличению объема вычислений. Эта особенность задач оптимального синтеза структуры неоднородных композитных конструкций при волновых воздействиях накладывает дополнительные требования к эффективности вычислительных процедур оптимизации.

2. НЕОБХОДИМЫЕ УСЛОВИЯ ОПТИМАЛЬНОСТИ, СВЯЗАННЫЕ С НЕЛОКАЛЬНЫМИ ВАРИАЦИЯМИ УПРАВЛЯЮЩИХ ПАРАМЕТРОВ В ВАРИАЦИОННЫХ ПОСТАНОВКАХ ВОЛНОВЫХ ЗАДАЧ ОПТИМАЛЬНОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ КОНСТРУКЦИЙ

Создание методов оптимизации, эффективно учитывающих отмеченные основные особенности задач оптимального синтеза структуры композитных конструкций при волновых воздействиях, представляет собой достаточно сложную проблему. Поэтому в настоящее время задачи синтеза рассматриваются в значительно более упрощенной постановке, не учитывающей большинство из перечисленных особенностей.

Отмеченные трудности приводят к необходимости разработки новых методов исследования предельных возможностей. Это позволит повысить эффективность

применения слоисто-неоднородных композиционных структур в различных областях физики, техники, приборостроения.

Процесс оптимального проектирования в самом общем плане может быть представлен как процесс сжатия множества допустимых вариантов. Общепринятый путь сжатия множества допустимых вариантов связан с построением методов последовательных приближений, позволяющих осуществлять отображение исходного множества допустимых вариантов на множество, имеющее значительно меньшее число элементов, но тем не менее содержащее всю совокупность вариантов, реализующих предельные возможности. На этом пути создание эффективных методов синтеза связано с разработкой таких необходимых условий оптимальности, которым бы удовлетворяло как можно меньшее число вариантов допустимых структур, не являющихся оптимальными. Идеальными были бы такие необходимые условия оптимальности, которые совпадают с достаточными условиями, т.е. им удовлетворяли бы только глобально-оптимальные решения. Однако к такому идеалу можно лишь неограниченно приближаться, поскольку условия оптимальности аккумулируют лишь те свойства систем и множеств, которые связаны с некоторыми управлениями и траекториями. Т.е. используют не всю информацию о задаче. В соответствии с этим возникает проблема построения таких необходимых условий оптимальности, учитывающих дискретность множества допустимых решений U , которым удовлетворяло бы как можно меньшее число решений, не являющихся глобально-оптимальными.

Один из путей создания эффективных необходимых условий оптимальности состоит в изменении понятия близости управляющих параметров при исследовании оптимального решения. При оценке близости в пространстве управлений к сравнению допускаются лишь те управляющие параметры, которые находятся в малой окрестности оптимального решения. Однако мера близости может быть перенесена из пространства управлений в пространство состояний. В этом случае к сравнению будут допускаться только фазовые траектории, близкие к оптимальной фазовой траектории. Если в пространстве управлений близость фазовых траекторий определяется близостью управлений, то теперь близость фазовых траекторий определяется независимо. В фазовом пространстве состояний два управления считаются близкими, если близки порожденные ими фазовые траектории. Рассмотрение всего множества U вместо некоторой малой окрестности оптимального решения приводит к существенному усилению необходимых условий оптимальности. При этом дискретность области управления U уже не является препятствием, т.к. вариации управляющих параметров могут быть произвольными. Такой переход от пространства управлений в пространство фазовых состояний приводит к принципу максимума Л.С. Понтрягина [4,12]. Поэтому в вариационной постановке одними из наиболее эффективных методов построения оптимальных решений в задачах оптимизации, модели в которых описываются системами дифференциальных уравнений, являются методы, основанные на принципе максимума Л.С. Понтрягина [4,12]. Тем не менее методы, основанные на принципе максимума Л.С. Понтрягина, позволяют строить лишь локально-оптимальные решения, т.е. носят лишь локальный характер.

В соответствии с этим возникает необходимость в разработке новых эффективных методов численного анализа и оптимального синтеза композиционных структур с требуемым комплексом свойств, которые были бы свободными от перечисленных недостатков. В вариационной постановке данная проблема связана с разработкой эффективных методов нелокального оптимального синтеза, позволяющих осуществлять построение глобально-оптимальных решений или в определенной мере близких к ним [13-17].

3. УРАВНЕНИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН В КОМПОЗИЦИОННЫХ КОНСТРУКЦИЯХ

Для случая электромагнитных волн внутри слоев распространение волн в системе слоев будет описываться системой уравнений Максвелла

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{H}_s - \frac{\varepsilon_s}{c} \frac{\partial \vec{E}_s}{\partial t} &= 0, \\ \operatorname{rot} \vec{E}_s + \frac{\mu_s}{c} \frac{\partial \vec{H}_s}{\partial t} &= 0, \\ b_{s-1} \leq z \leq b_s, \quad s &= 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (3.1)$$

В этих обозначениях $\vec{H}_s, \vec{E}_s$ - векторы электрической и магнитной напряженности электромагнитного поля в s-м слое, ε_s, μ_s - диэлектрическая и магнитная проницаемости s-го слоя; b_s - координаты границ раздела слоев с различными физическими свойствами, N - число слоев.

На границах раздела слоев будут выполняться условия сопряжения решений, заключающиеся в непрерывности нормальной и тангенциальной составляющей векторов электрической и магнитной напряженности

$$E_{s,\tau} \Big|_{z=b_{s-1}} = E_{s-1,\tau} \Big|_{z=b_{s-1}}, H_{s,\tau} \Big|_{z=b_{s-1}} = H_{s-1,\tau} \Big|_{z=b_{s-1}} \quad (3.2)$$

Граничные условия, отражают взаимосвязь падающей и отраженной волн на внешней и внутренней поверхностях конструкции.

В качестве показателя эффективности решений в исследуемой вариационной постановке выбрана среднеквадратическая мера близости зависимости энергетического коэффициента пропускания $T(\omega)$ электромагнитной волны к требуемой зависимости $\tilde{T}(\omega)$ в заданном диапазоне частот $[\omega_{\min}, \omega_{\max}]$

$$J = \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} [T(\omega) - \tilde{T}(\omega)]^2 d\omega \Rightarrow \min. \quad (3.3)$$

В этих обозначениях

$$T(\omega) = \Pi_z^{np} / \Pi_z^{nad}, \quad (3.4)$$

Π_z^{np}, Π_z^{nad} - проекции вектора Пойнтинга на ось z в прошедшей и падающей электромагнитных волнах соответственно.

4. УРАВНЕНИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН В КОМПОЗИЦИОННЫХ КОНСТРУКЦИЯХ

Распространение акустических волн в слоисто-неоднородных средах в рамках моделей линейной акустики может быть описано следующей системой уравнений

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{v}_s(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{1}{\rho_s} \nabla p_s(\vec{r}, t) &= 0, \\ \frac{\partial p_s(\vec{r}, t)}{\partial t} + \rho_s c_s^2 \operatorname{div} \vec{v}_s(\vec{r}, t) &= 0. \end{aligned} \quad (4.1)$$

В этих обозначениях ρ_s - плотность s-го слоя; c_s - скорость распространения волны в s-ом слое; $\vec{v}_s$ - колебательная скорость акустической волны в s-ом слое; p_s - давление в акустической волне в s-ом слое.

На границах раздела слоев, разделяющих s-ую и (s-1)-ую среды, непрерывными остаются давление и нормальная составляющая скорости

$$p_s \Big|_{z=b_{s-1}} = p_{s-1} \Big|_{z=b_{s-1}}, \quad v_{n,s} \Big|_{z=b_{s-1}} = v_{n,s-1} \Big|_{z=b_{s-1}} \quad (4.2)$$

Граничные условия, отражают взаимосвязь падающей и отраженной волн на внешней и внутренней поверхностях конструкции.

В качестве показателя эффективности решений в исследуемой вариационной постановке также, как и для случая электромагнитных волн выбрана среднеквадратическая мера близости зависимости энергетического коэффициента пропускания $T(\omega)$ акустической волны к требуемой зависимости $\tilde{T}(\omega)$ в заданном диапазоне частот $[\omega_{\min}, \omega_{\max}]$

$$J = \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} [T(\omega) - \tilde{T}(\omega)]^2 d\omega \Rightarrow \min. \quad (4.3)$$

В этих обозначениях

$$T(\omega) = \Pi_z^{np} / \Pi_z^{nad}, \quad (4.4)$$

Π_z^{np}, Π_z^{nad} – проекции вектора Пойнтинга на ось z в прошедшей и падающей акустических волнах соответственно.

5. УРАВНЕНИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ УПРУГИХ ВОЛН В КОМПОЗИЦИОННЫХ КОНСТРУКЦИЯХ

При воздействии упругих волн на композиционную конструкцию, распространение упругих волн в системе слоев с различными физическими свойствами будет описываться системой уравнений динамической теории упругости

$$\mu_s \Delta u_s + (\lambda_s + 2\mu_s) \text{grad div}(u_s) = \rho_s \frac{\partial^2 u_s}{\partial t^2}, \quad (5.1)$$

$$(s = 1, \dots, N).$$

В этих обозначениях: $u_s(x, y, z, t)$ – вектор смещения частиц в s -ой среде, ρ_s – плотность s -го слоя, λ_s, μ_s – параметры Ламэ s -го слоя. В качестве показателя эффективности решений в исследуемой вариационной постановке, также как и для случая электромагнитных и акустических волн выбрана среднеквадратическая мера близости зависимости энергетического коэффициента пропускания $T(\omega)$ упругой волны к требуемой зависимости $\tilde{T}(\omega)$ в заданном диапазоне частот $[\omega_{\min}, \omega_{\max}]$

$$J = \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} [T(\omega) - \tilde{T}(\omega)]^2 d\omega \Rightarrow \min. \quad (5.2)$$

В этих обозначениях

$$T(\omega) = \Pi_z^{np} / \Pi_z^{nad}, \quad (5.3)$$

Π_z^{np}, Π_z^{nad} – проекции вектора Пойнтинга на ось z в прошедшей и падающей упругих волнах соответственно.

6. УРАВНЕНИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ УПРУГИХ ВОЛН В КОМПОЗИЦИОННЫХ КОНСТРУКЦИЯХ

Будем рассматривать распространение температурного поля в плоской слоисто-неоднородной конструкции. Выберем декартову систему координат так, чтобы плоскость xy совпадала с наружной поверхностью конструкции, а ось z была направлена внутрь конструкции. Для исследуемого случая линейной постановки, когда материалы, используемые при проектировании, не обладают анизотропией физических свойств, и в отсутствие внутренних источников тепла, распространение температурных полей в неоднородной конструкции может быть описано следующей системой дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned}
\frac{\partial T_s(x, y, z, t)}{\partial t} &= a_s \nabla^2 T_s(x, y, z, t), \\
-\infty < x, y < +\infty, b_{s-1} \leq z \leq b_s, s = 1, \dots, N, \\
T_s(x, y, z, t) \Big|_{(x, y, z) \in G_{s-1}} &= T_s(x, y, z, t) \Big|_{(x, y, z) \in G_{s-1}}, \\
\lambda_s \frac{\partial T_s(x, y, z, t)}{\partial n} \Big|_{(x, y, z) \in G_{s-1}} &= \lambda_{s-1} \frac{\partial T_{s-1}(x, y, z, t)}{\partial n} \Big|_{(x, y, z) \in G_{s-1}}, \\
s = 2, \dots, N, \\
\lambda_1 \frac{\partial T_1(x, y, z, t)}{\partial n} \Big|_{(x, y, z) \in G_0} &= \alpha_{in} \left(T_1(x, y, z, t) \Big|_{(x, y, z) \in G_0} - T_{in}(t) \right), \\
\lambda_N \frac{\partial T_N(x, y, z, t)}{\partial n} \Big|_{(x, y, z) \in G_N} &= \alpha_{out} \left(T_N(x, y, z, t) \Big|_{(x, y, z) \in G_N} - T_{out}(t) \right).
\end{aligned} \tag{6.1}$$

В этих обозначениях $T_s(x, y, z, t) (s = 1, \dots, N)$ - значение температуры внутри s -го слоя конструкции; N - число слоев конструкции; $\lambda_s, a_s (s = 1, \dots, N)$ - коэффициенты теплопроводности и температуропроводности слоев соответственно; $G_s, (s = 0, \dots, N)$ - плоские поверхности раздела слоев; n - нормаль к поверхности конструкции; $\alpha_{in}, \alpha_{out}$ - коэффициенты теплообмена на внешней и внутренней поверхностях конструкции соответственно; $T_{in}(t), T_{out}(t)$ - заданные в функции от времени температуры наружной и внутренней сред, окаймляющих конструкцию.

Как правило, требуется направленным выбором структуры неоднородной конструкции обеспечить наиболее эффективное гашение уровня интенсивности температурного поля на внутренней поверхности конструкции в заданном временном промежутке: $0 \leq t \leq \tau_{max}$. Обозначим через S_0, S_1 внешнюю и внутреннюю поверхности конструкции соответственно. Тогда в вариационной постановке в качестве критерия, подлежащего оптимизации, целесообразно выбрать следующий критерий

$$J = \int_0^{\tau_{max}} \left[\text{mod}(T(x, y, z, t)) \right]^2 \Big|_{(x, y, z) \in S_1} dt \Rightarrow \min. \tag{6.2}$$

Варьируемыми являются параметры, определяющие структуру конструкции, а именно: теплофизические свойства материалов слоев, толщины слоев, число слоев, а также порядок взаимного расположения материалов слоев с различными теплофизическими свойствами в конструкции. Набор материалов, используемых при проектировании, предполагается дискретным, что более соответствует реальной ситуации, чем случай, когда теплофизические характеристики материалов предполагаются имеющими непрерывную область задания. Необходимо установить структуру конструкции, реализующую предельные возможности по гашению уровня интенсивности температурного поля. Параметры, определяющие структуру такой конструкции, доставляют глобальный минимум функционалу оптимизации (6.2).

7. МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРЕДЕЛЬНЫХ ВОЗМОЖНОСТЕЙ, ОСНОВАННЫЕ НА СВОЙСТВЕ ВНУТРЕННЕЙ СИММЕТРИИ В СТРУКТУРЕ ОПТИМАЛЬНЫХ РЕШЕНИЙ, В ВОЛНОВЫХ ЗАДАЧАХ ОПТИМАЛЬНОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ КОНСТРУКЦИЙ

Одними из наиболее эффективных методов построения решений с требуемым комплексом свойств в вариационной постановке являются методы, основанные на принципе максимума Л.С. Понтрягина [4,12]. Применение методики оптимального синтеза, основанной на принципе максимума Л.С. Понтрягина, и связанной с игольчатым варьированием допустимого решения, позволяет осуществлять синтез композиционных

структур, для которых функциональные зависимости энергетических характеристик от частоты являются более эффективными во всем фильтруемом диапазоне частот по сравнению с соответствующими зависимостями энергетических коэффициентов, построенными с помощью известных подходов.

Однако, несмотря на то, что методы оптимального синтеза, основанные на необходимых условиях оптимальности, связанными с нелокальными вариациями параметров, типа принципа максимума Л.С. Понтрягина, позволяют строить эффективные решения, тем не менее получаемые результирующие решения являются локально-оптимальными. Поэтому применение методологии принципа максимума Л.С. Понтрягина не позволяет исследовать предельные возможности слоисто-неоднородных композиционных структур по достижению требуемого комплекса свойств. Для исследования предельных возможностей многослойных интерференционных систем необходима разработка методов оптимального синтеза на качественно иной основе.

Отсутствие эффективных методов исследования предельных возможностей приводит к тому, что с одной стороны, отсутствует возможность оптимального конструирования слоисто-неоднородных конструкций с характеристиками предельно близкими к требуемым. А с другой стороны, отсутствует возможность оценить насколько существенно многослойные конструкции, функционирующие в различных областях физики и техники, отличаются по своим характеристикам от предельно-достижимых.

Одним из наиболее эффективных подходов к решению данной проблемы является разрабатываемый подход, основанный на установленном свойстве внутренней симметрии в структуре оптимальных композиционных конструкций и теории многозначных отображений [13-18]. Показано, что данный подход позволяет исследовать предельные возможности слоисто-неоднородных композиций по достижению заданного комплекса свойств.

Проблема синтеза слоисто-неоднородных композиций в рассматриваемой постановке может быть отнесена к числу проблем, связанных с организацией взаимосогласованного, кооперативного поведения элементов, составляющих систему, при котором реализуются ее предельные возможности. Достижение предельных возможностей связано с одновременным взаимосогласованием всех параметров, определяющих структуру многослойной системы. Вследствие этого можно предположить, что предельные возможности реализуются лишь при строго определенном характере согласованного, кооперативного взаимодействия элементов, составляющих систему. Взаимосвязь элементов, составляющих систему, в этом случае может характеризоваться некоторым внутренним порядком или внутренней симметрией.

Существование такой внутренней симметрии в задачах оптимального синтеза может говорить о том, что структуры, реализующие предельные возможности, будут группироваться только внутри узкого компактного множества Q . Внутренний порядок или внутренняя симметрия во взаимосвязи элементов, составляющих систему, может приводить к тому, что структуры, реализующие предельные возможности, будут удовлетворять дополнительным связям. Выявление таких связей позволяет существенно уменьшить размерность задачи, т.е. может оказаться, что структуры, реализующие предельные возможности, дополнительно удовлетворяют некоторой системе m уравнений $M_j(u^*) = 0$. Множество решений этой системы и есть искомое компактное множество

$$Q = \{u : Q_j(u) = 0, j = 1, \dots, m\}.$$

Выделение этой системы уравнений может позволить в ряде случаев полностью решить проблему синтеза. Главная проблема здесь заключается в разработке методики аналитического описания границ выделяемого компактного множества.

Поэтому представляет значительный интерес выделение задач синтеза слоистых систем, в которых структуры, реализующие предельные возможности по управлению

параметрами волнового поля, обладают внутренней симметрией. С исследованием возможности выделения узкого компактного множества Q , содержащего всю совокупность вариантов, реализующих предельные возможности, связан качественно новый путь сжатия множества допустимых вариантов структур и разработке на этой основе эффективных методов синтеза.

Для определенного круга волновых задач синтеза показано, что во взаимосвязи параметров в слоисто-неоднородных композициях, реализующих предельные возможности, существует внутренняя симметрия, что позволяет существенно уменьшить их размерность [13,14,17]. В таких задачах, которые мы в дальнейшем будем называть опорными, совокупность всех вариантов многослойных интерференционных покрытий, реализующих предельные возможности по управлению параметрами волнового поля, оказывается принадлежащей узкому компактному множеству.

Разработана методика аналитического описания границ выделяемого компактного множества. Для опорных задач оптимального синтеза может быть эффективно выделена совокупность всех вариантов слоистых структур, параметры которых доставляют глобальный минимум функционалу качества, характеризующему близость функциональных характеристик к требуемым.

Тем не менее, существует широкий круг волновых задач синтеза в различных областях физики и техники, для которых не представляется возможным аналитически описать границы компактных множеств, содержащих всю совокупность оптимальных решений. Однако эти задачи могут быть некоторым образом связаны с опорными задачами синтеза. Например, при определенных способах введения параметра в модель они могут оказаться в одном параметрическом семействе, таком, что одному значению параметра соответствует исходная задача синтеза, а другому - опорная задача. При этом возникает проблема как на основе знания оптимальных решений опорных задач синтеза разработать эффективные методы исследования предельных возможностей для широкого круга волновых задач синтеза, возникающих в различных областях физики и техники.

Погрузим исходную задачу оптимального синтеза в параметрическое семейство задач оптимального синтеза, зависящее от вещественного параметра δ ($\delta_0 \leq \delta \leq \delta_1$). При этом значению параметра $\delta = \delta_0$ соответствует опорная задача синтеза, для которой эффективно может быть выделена вся совокупность оптимальных решений, реализующих предельные возможности по достижению заданного комплекса свойств $U^*(\delta_0)$. Значению же параметра $\delta = \delta_1$ соответствует исходная задача оптимального синтеза. Множество глобально-оптимальных решений в исходной задаче синтеза обозначим через U^* . При этом $U^* = U^*(\delta_1)$.

На основе теории многозначных отображений [18] разработана методика продолжения решения по параметру, позволяющая осуществлять эффективное продолжение множества глобально-оптимальных решений опорной задачи синтеза по параметру. Разработанная методика исследования предельных возможностей, основанная на теории многозначных отображений и методах продолжения по параметру, позволяет осуществлять эффективное конструирование слоисто-неоднородных структур со сложными характеристиками при волновых воздействиях.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований - грант №13-08-00229.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Бабе Г.Д., Гусев Е.Л., Уржумцев Ю.С.* Эффект синергизма в механике многослойных конструкций. Синтез оптимальных акустических систем// Механика композитных материалов. - 1984, № 4. - С. 686 - 691.
2. *Баничук Н.В., Кобелев В.В., Рикардс Р.Б.* Оптимизация элементов конструкций из композиционных материалов. - М. : Машиностроение, 1988. - 224 с.
3. *Баничук Н.В., Бирюк В.И., Сейранян А.П., Фролов В.М., Яремчук Ю.Ф.* Методы оптимизации авиационных конструкций. - М.: Машиностроение, 1989. - 296 с.
4. *Гусев Е.Л.* Математические методы синтеза слоистых структур. - Новосибирск: Наука, 1993. - 262 с.
5. *Тетерс Г.* Многокритериальная оптимизация прямоугольных композитных пластинок, подверженных продольным термическим напряжениям и теряющим устойчивость при касательном нагружении// Механика композитных материалов. - 2007, № 1. - С. 85 - 93.
6. *Тетерс Г.* Компромиссная оптимизация композитной прямоугольной пластинки при двухосном термическом нагружении, теряющей устойчивость в случае сдвигового воздействия // Механика композитных материалов. - 2008, № 4. - С. 471-479.
7. *Смердов А.А.* Основы оптимального проектирования композитных конструкций. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2006.
8. *Бакулин В.Н., Гусев Е.Л., Марков В.Г.* Методы оптимального проектирования и расчета композиционных конструкций. В 2 т. Т.1. Оптимальное проектирование конструкций из композиционных и традиционных материалов. М. Наука-Физматлит. 2008. 256с.
9. *Баничук Н.В., Бирюк В.И., Сейранян А.П., Фролов В.М., Яремчук Ю.Ф.* Методы оптимизации авиационных конструкций. М.: Машиностроение, 1989. 296 с.
10. *Струминский В.В.* Механика неоднородных гетерогенных сред // Научные основы прогрессивной техники и технологии, М., 1986, с.141-155.
11. *Тихонов А.Н., Арсенин В.Я.* Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1986. 286 с.
12. *Понтрягин Л.С., Болтянский В.Г., Гамкрелидзе Р.В., Мищенко Е.Ф.* Математическая теория оптимальных процессов.- М.: Наука. 1983.-392 с.
13. *Гусев Е.Л.* Качественные закономерности взаимосвязи параметров в оптимальных структурах в задачах оптимального синтеза неоднородных структур из дискретного набора материалов при волновых воздействиях //Доклады РАН. 1996. т.346, № 3. С. 324-326.
14. *Гусев Е.Л.* Об априорном сужении допустимого набора материалов в задачах оптимального синтеза неоднородных структур из дискретного набора материалов при волновых воздействиях//Доклады РАН. 1996. т. 349, №3. С. 329-331.
15. *Gusev E.L.* Mathematical methods of investigation limit possibilities of interference coatings for the reaching of the given complex of properties//Optical Interference Coatings,vol.9,OSA, Technical Digest Series (Optical Society of America). 1998. P.286-287.
16. *Gusev E.L.* Optimal synthesis methodology of nonhomogeneous structures under the influence of electromagnetic waves// Int. J. Of Applied Electromagnetics and Mechanics. 1999. N 10 P. 405-416.
17. *Гусев Е.Л.* Свойство внутренней симметрии во взаимосвязи параметров в оптимальных структурах в задачах оптимального синтеза неоднородных структур при волновых воздействиях//Труды Международной конференции «Симметрия в естествознании». Красноярск. 1998. С. 47-48.
18. *Лисковец О.А.* Некорректные задачи с замкнутым необратимым оператором//Дифференциальные уравнения. 1967. № 4. С. 636-646.

ПОЛУЧЕНИЕ ТОЧНЫХ СТАЦИОНАРНЫХ РЕШЕНИЙ НЕОДНОРОДНОГО УРАВНЕНИЯ БЮРГЕРСА

Кудрявцев А.Г.¹, Сапожников О.А.²

¹ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г.Москва, Россия,
²МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет, г.Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

Описывается метод нахождения точных стационарных решений неоднородного уравнения Бюргерса на основе преобразования Дарбу. Базируясь на точном решении однородного уравнения Бюргерса, для задачи о потоке в сопле выписаны все возможные регулярные стационарные решения.

Ключевые слова: неоднородное уравнение Бюргерса, преобразование Дарбу, сопло Лавалья.

ВВЕДЕНИЕ

Уравнение Бюргерса

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} - \delta \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad (1)$$

является одним из эталонных нелинейных уравнений математической физики. Изначально оно было выписано как модельное уравнение для описания одномерной турбулентности [1], но позже было показано, что это уравнение описывает ряд других различных по своей природе физических явлений. В частности, в нелинейной акустике уравнение Бюргерса используется для описания распространения одномерных акустических волн конечной амплитуды в условиях проявления диссипации; при этом $u(x, t)$ задает колебательную скорость гидродинамических частиц как функцию координаты x и времени t , а константа δ характеризует вязкость и теплопроводность среды [2,3].

При наличии в среде источников уравнение Бюргерса модифицируется и принимает вид неоднородного уравнения

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} - \delta \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = F, \quad (2)$$

где функция $F(x, t)$ в правой части описывает источники. Такое уравнение было впервые выведено из уравнений гидродинамики и использовалось в связи с исследованиями по лазерной генерации звука [4,5]. Позже по аналогии были рассмотрены и другие физические ситуации [6]. Примерно в это же время неоднородное уравнение Бюргерса стало анализироваться в работах математиков [7-10].

Уравнение (1) уникально тем, что с помощью подстановки

$$u = -\frac{2\delta}{w} \frac{\partial w}{\partial x} \quad (3)$$

оно сводится к линейному уравнению теплопроводности для вспомогательной функции $w(x, t)$. Указанная линеаризация позволяет записать общее решение уравнения Бюргерса. Преобразование (3) для однородного уравнения было найдено в работе [11], но стало более известным после появления работ [12,13] и поэтому получило название подстановки Хопфа-Коула. Линеаризация позволяет выписать решение начальной задачи в интегральном виде. Соответствующий интеграл при произвольном начальном профиле $u(x, 0)$ в аналитическом виде не вычисляется, но для ряда случаев это сделать удаётся. Такой подход позволяет регулярным образом выписать точное решение уравнения Бюргерса для ряда физически интересных ситуаций [14].

Весьма примечательно, что подстановка Хопфа-Коула (3) линеаризует и неоднородное уравнение (2), на что впервые было указано в работе [5]. Соответствующее линейное уравнение имеет вид

$$\frac{\partial w}{\partial t} - \delta \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + V w = 0 \quad (4)$$

где «потенциал» $V(x, t)$ определяется источниками

$$F = 2\delta \frac{\partial V}{\partial x} \quad (5)$$

Уравнение (4) для краткости будем называть уравнением теплопроводности, т.е. так же как в случае $V = 0$. Применительно к задаче теплопроводности дополнительный член $V w$ описывает внутренний теплоотвод (или теплоподвод), пропорциональный локальной температуре. Подобная ситуация, например, характерна для процесса теплопроводности в насыщенных мелкими кровеносными сосудами биотканях [15]. Отметим, что уравнение (4) входит в класс уравнений вида

$$\alpha \frac{\partial \psi}{\partial t} - \delta \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V \psi = 0, \quad (6)$$

для решения которых показал свою эффективность метод преобразования Дарбу [16]. В частности, при $\alpha = i$ указанное уравнение (6) представляет собой нестационарное уравнение Шрёдингера для волновой функции ψ частицы при одномерном движении в потенциальном поле V . Именно в применении к уравнению Шрёдингера преобразования Дарбу привлекало в последние годы наибольшее внимание. Такой подход дает возможность получения новых решаемых моделей квантовой механики; он представляет интерес также в связи с его многочисленными связями с популярной тематикой метода обратной задачи рассеяния и теорией солитонов (см., например, [17]).

1. О ПРЕОБРАЗОВАНИИ ДАРБУ

Преобразование Дарбу для уравнения вида (6) представляет собой следующее линейное преобразование волновой функции [16]

$$\tilde{\psi}(x, t) = [R(x, t) + \partial/\partial x] \psi(x, t) \quad (7)$$

Особенность такого перехода состоит в том, что если функция ψ удовлетворяет уравнению (6) с потенциалом V , то при определённом выборе зависимости $R(x, t)$ функция $\tilde{\psi}$ также будет удовлетворять уравнению (6), но уже с другим потенциалом $\tilde{V}$. На этой возможности и основан метод преобразования Дарбу. Идея состоит в том, чтобы для известного решения уравнения с «простым» потенциалом (например, $V = 0$) подобрать функцию R так, чтобы получить решение уравнения с более «сложным» потенциалом.

Покажем, как метод работает в случае уравнения (4). Обозначим в (7) $s = 2\delta R$ и рассмотрим следующий вид преобразования Дарбу для решений уравнения (3)

$$\tilde{w}(x, t) = \left[s(x, t)/(2\delta) + \frac{\partial}{\partial x} \right] w(x, t) \quad (8)$$

Вычисляя отсюда производные $\partial \tilde{w}/\partial t$ и $\partial^2 \tilde{w}/\partial x^2$ и учитывая соотношение (4) получим, что если вспомогательная функция $s(x, t)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial s}{\partial t} + s \frac{\partial s}{\partial x} - \delta \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} = F \quad (9)$$

с правой частью (5), то новая функция $\tilde{w}(x, t)$ является решением уравнения вида (4) с новым потенциалом $\tilde{V} = V + \partial s/\partial x$

$$\frac{\partial \tilde{w}}{\partial t} - \delta \frac{\partial^2 \tilde{w}}{\partial x^2} + \tilde{V} \tilde{w} = 0, \quad (10)$$

Условие (9) на функцию $s(x, t)$ есть не что иное как неоднородное уравнение Бюргерса (2), решения которого связаны преобразованием Хопфа-Коула (3) с решениями соответствующего уравнения теплопроводности (4). Этот факт весьма примечателен и указывает на более глубокую связь между уравнением Бюргерса и уравнением теплопроводности, чем просто переход от одного уравнения к другому посредством преобразования Хопфа-Коула (хотя существование указанного преобразования (3), сводящего нелинейное уравнение к линейному, само по себе уникально).

Из приведённых соотношений нетрудно видеть, что преобразование Дарбу и для неоднородного уравнения Бюргерса, и для парного ему уравнения теплопроводности можно записать в виде, относящемся только к одному из этих двух типов уравнений.

Например, рассмотрим уравнение теплопроводности (4) для функции $w(x, t)$. Пусть $v(x, t)$ - одно из его частных решений. Тогда для функции

$$\tilde{w} = w \cdot 2\delta \frac{\partial}{\partial x} (\ln v - \ln w)$$

получим то же самое уравнение вида (4), но с новым потенциалом

$$\tilde{V} = V - 2\delta \cdot \partial^2 (\ln v) / \partial x^2.$$

Аналогично можно оставаться в рамках уравнения вида (2). Если взять одно из решений $s(x, t)$ уравнения Бюргерса (2) с правой частью (5), то при замене

$$\tilde{u} = u - 2\delta \frac{\partial}{\partial x} \ln(u - s) \quad (11)$$

вновь придём к неоднородному уравнению Бюргерса, но с новой правой частью

$$\tilde{F} = F + 2\delta \cdot \partial^2 s / \partial x^2. \quad (12)$$

В частном случае $s = \text{const}$ преобразование Дарбу не меняет правую часть: $\tilde{F} = F$, и для $F = 0$ формула (11) совпадает с формулой автопреобразования Бэклунда однородного уравнения Бюргерса [18]. Формулы (11)-(12) по-видимому впервые появились в работе [19], где они были использованы для анализа решений неоднородных уравнений Бюргерса с правыми частями, получающимися на основе класса точных решений неоднородного уравнения Бюргерса с линейной по x правой частью.

Примечательно, что указанная процедура перехода от уравнения Бюргерса с источником F к уравнению с другим источником $\tilde{F}$ (или, то же самое, переход от задачи теплопроводности с одним потенциалом V к задаче с другим потенциалом $\tilde{V}$) может быть повторена. Многократное применение преобразований Дарбу может в принципе позволить найти решения неоднородного уравнения Бюргерса для ряда нетривиальных источников.

2. РЕШЕНИЯ НЕОДНОРОДНОГО УРАВНЕНИЯ БЮРГЕРСА, ПОЛУЧАЮЩЕГОСЯ ПРИ ОДНОКРАТНОМ ПРИМЕНЕНИИ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ДАРБУ К ОДНОРОДНОМУ УРАВНЕНИЮ

Ограничимся рассмотрением класса стационарных неоднородностей, т.е. будем предполагать, что правая часть неоднородного уравнения Бюргерса не зависит от времени t .

Будем исходить из однородного уравнения Бюргерса (1). Его решения хорошо известны и выражаются с помощью подстановки Хопфа-Коула (3) через решения классического уравнения теплопроводности. Как отмечалось выше, неоднородное уравнение Бюргерса, «порождаемое» преобразованием Дарбу, имеет вид

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} + \tilde{u} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} - \delta \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2} = \tilde{F} \quad (13)$$

где $\tilde{F}$ выражается по формуле (12), в которой $s(x, t)$ - некоторое решение однородного уравнения Бюргерса (1). Если интересоваться случаем не зависящих от времени источников, то в качестве s можно брать стационарные решения. Поскольку физические источники предполагаются регулярными в пространстве, в качестве таких стационарных решений выступают решения вида $u = s_0 = -(2\delta/L)\tanh[(x-x_0)/L]$, где постоянная L имеет смысл характерной ширины переходного участка в сглаженной ступенчатой функции, а x_0 - координата центра указанного участка. Без ограничения общности можно считать $L=1$ и $x_0=0$, т.к. более общая ситуация сводится к простой замене переменных.

Итак, примем

$$s_0(x) = -2\delta \tanh x, \quad (14)$$

Примечательно, что при использовании решения (14) неоднородное уравнение Бюргерса с правой частью

$$\tilde{F} = 2\delta \cdot d^2 s_0 / dx^2 = -4\delta^2 \frac{d}{dx} (\cosh^{-2} x) \quad (15)$$

описывает распространение нелинейной акустической волны навстречу околосзвуковому потоку в трубе с участком уменьшенного сечения (сопле Лаваля). Действительно, одномерное распространение волны в трубе с плавным изменением сечения $A(x)$ описывается неоднородным уравнением вида (1) с правой частью $F \sim dA/dx$ [20]. Поэтому функция (15) даёт зависимость $A(x) \sim \text{const} - \cosh^{-2} x$, описывающую плавное сужение-расширение в окрестности $x=0$ на участке протяжённостью $\Delta x \sim 1$. Отметим, однако, что получившаяся сила неоднородности $\tilde{F}$ (15) не является произвольной: она пропорциональна квадрату диссипативного коэффициента δ и поэтому описывает сопло, подобранное под заданный коэффициент вязкости среды. Однако разумно предположить, что выбранный частный случай отражает основные особенности эволюции волны в сопле Лаваля произвольного вида. Данное предположение может быть обосновано рассмотрением цепочки неоднородностей с увеличивающейся амплитудой.

Рассмотрим возможный вид стационарных решений получившегося неоднородного уравнения. Их можно найти по формуле (11), где $s = s_0$, т.е. задаётся формулой (14), а в качестве u следует использовать другие возможные стационарные решения уравнения Бюргерса (1). В общем случае стационарные решения однородного уравнения Бюргерса разбиваются на три класса: (i) постоянные решения $u = U_0 = \text{const}$; (ii) решения в виде плавного перехода от $u(-\infty) = U_\infty$ к $u(+\infty) = -U_\infty$ с центром при $x = x_0$: $u = -U_\infty \tanh[U_\infty(x-x_0)/(2\delta)]$; решение (14) именно этого типа; (iii) сингулярные решения в виде гиперболического котангенса: $u = -U_\infty / \tanh[U_\infty(x-x_0)/(2\delta)]$. Заметим, что при анализе решений уравнения Бюргерса (1) обычно решения (i) и (iii) не рассматриваются, поскольку первое является тривиальным, а второе - нефизичным. Однако для нашего рассмотрения именно эти решения оказываются полезными. Регулярное же решение вида (ii) только при $U_\infty = 2\delta$ и отличных от нуля x_0 не пересекает кривую (14), и поэтому его подстановка в формулу (11) приводит к сингулярности, т.е. соответствующее решение является нефизичным.

При использовании $u = U_0$ сингулярность в формуле (11) исключается, если $|U_0| > 2\delta$.

При этом получается целое семейство стационарных решений неоднородного уравнения Бюргерса. В безразмерном виде соответствующие зависимости (11) принимают вид

$$\tilde{U} = \alpha - \frac{\cosh^{-2} x}{\alpha + \tanh x}, \quad (16)$$

где $\alpha = U_0/(2\delta)$ - параметр семейства, $|\alpha| \geq 1$, $\tilde{U} = \tilde{u}/(2\delta)$. Опуская в уравнении (13) член $\sim \partial^2 \tilde{u}/\partial x^2$, для стационарного решения в среде без диссипации получим в безразмерных переменных $\tilde{U} = \pm \sqrt{\beta^2 - \cosh^{-2} x}$, где β - параметр семейства.

При отсутствии вязкости чётко различаются три режима: дозвуковой ($\tilde{U} < 0$), сверхзвуковой ($\tilde{U} > 0$) и трансзвуковой. При дозвуковом режиме скорость потока $\tilde{U}$ увеличивается в окрестности критического (минимального) сечения, в сверхзвуковом, наоборот, уменьшается. Трансзвуковой режим может быть разгонным (с ростом x величина $\tilde{U}$ увеличивается) или тормозным ($\tilde{U}$ уменьшается). Существует чёткая область, ограниченная трансзвуковыми сепаратрисами, в которой не могут находиться кривые стационарного потока.

В случае ненулевой вязкости стационарные режимы также можно разделить на три выделенных выше типа. Однако трансзвуковой режим представлен уже не двумя сепаратрисами, а целым семейством кривых, причём соответствующие потоки, являющиеся дозвуковыми вдали от области неоднородности, становятся сверхзвуковыми лишь на некотором участке справа от критического сечения. Аналогично, сверхзвуковые при $|x| \gg 1$ потоки становятся локально дозвуковыми непосредственно перед критическим сечением. Таким образом, вязкость качественно меняет характер околосредового течения.

Описанные выше стационарные решения уравнения (13) с правой частью (15) - лишь один из двух возможных классов. Как отмечалось выше, второй класс получается из сингулярных решений однородного уравнения Бюргерса $u = -U_\infty / \tanh[U_\infty(x - x_0)/(2\delta)]$. Из формул (11) и (14) в этом случае для $\tilde{U} = \tilde{u}/(2\delta)$ получим двухпараметрическое семейство кривых

$$\tilde{U} = \frac{\gamma \tanh x + (\cosh^{-2} x - \gamma^2) \cdot \tanh[\gamma(x - x_0)]}{\gamma - \tanh x \tanh[\gamma(x - x_0)]}, \quad (17)$$

где константы $\gamma = U_\infty/(2\delta)$ и x_0 - параметры, причем $\gamma \geq 1$, а x_0 - любое число.

Заметим, что при $x \ll x_0$ можно считать $\tanh[\gamma(x - x_0)] \approx -1$, тогда из (17) получим формулу (16) $\tilde{U} \approx \alpha - \cosh^{-2} x/(\alpha + \tanh x)$, где $\alpha = \gamma$. Точно так же в приближении $x \gg x_0$ опять получим формулу (16) $\tilde{U} \approx \alpha - \cosh^{-2} x/(\alpha + \tanh x)$, где $\alpha = -\gamma$. Таким образом, стационарные решения вида (17) описывают решения в виде перехода между сверхзвуковыми ($\alpha = \gamma$) и дозвуковыми ($\alpha = -\gamma$) профилями семейства (16). Координата центра этого перехода задаётся параметром x_0 . В случае невязкой среды соответствующие стационарные профили могут быть построены как слабые решения соответствующего неоднородного уравнения путём введения при $x = x_0$ скачкообразного перехода от сверхзвукового при $x < x_0$ стационарного потока к дозвуковому при $x > x_0$ стационарному потоку.

Наряду с описанными выше регулярными стационарными решениями, существуют сингулярные стационарные решения, подобно тому как в случае однородного уравнения Бюргерса наряду с гладкими решениями в виде гиперболического тангенса имеются решения с особенностью в виде гиперболического котангенса. Такие сингулярные решения неоднородного уравнения Бюргерса нефизичны, поэтому здесь не анализируются. Однако в случае многократного применения преобразования Дарбу и сингулярные стационарные решения представляют ценность, т.к. при подстановке в формулу (11) они позволяют получить гладкие решения. Пример получения семейства (17) уже проиллюстрировал такую возможность.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подход, использованный в данной работе для анализа неоднородного уравнения Бюргерса, основан на совместном использовании двух эффективных математических методов. Первый метод - преобразование Хопфа-Коула - связывает решения нелинейного уравнения Бюргерса с описывающей неоднородность правой частью с решениями линейного уравнения теплопроводности с соответствующим этой правой части потенциалом. Второй метод - преобразование Дарбу - связывает решения уравнений теплопроводности с разными потенциалами. Однократным или многократным применением преобразования Дарбу из одного интегрируемого уравнения теплопроводности (например с нулевым потенциалом) получается новое интегрируемое уравнение теплопроводности с новым потенциалом. Это новое интегрируемое уравнение теплопроводности за счет преобразования Хопфа-Коула приводит к новому интегрируемому неоднородному уравнению Бюргерса.

За счёт имеющегося произвола в выборе функции, входящей в преобразование Дарбу, и возможности многократного применения преобразования Дарбу, указанный подход был применен в работе [23] при получении точных решений для различных правых частей неоднородного уравнения Бюргерса. В настоящей работе метод проиллюстрирован на примере получения стационарных решений. Базируясь на точном решении однородного уравнения Бюргерса, для задачи о потоке в сопле выписаны все возможные регулярные стационарные решения.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Burgers J.M.* Mathematical examples illustrating relations occurring in the theory of turbulent fluid motion // Trans. Roy. Neth. Acad. Sci. Amsterdam. 1939. V.17. P.1-53.
2. *Mendousse J.S.* Nonlinear dissipative distortion of progressive sound waves at moderate amplitudes // J. Acoust. Soc. Am. 1953. V.25, P.51-54.
3. *Хохлов Р.В.* К теории ударных радиоволн в нелинейных линиях // Радиотехника и электроника. 1961, Т.6, №6, С.917-925.
4. *Руденко О.В.* О возможности генерации мощного гиперзвука с помощью лазерного излучения // Письма в ЖЭТФ. 1974, Т.20, №7, С.445-448.
5. *Карабутов А.А., Лапшин Е.А., Руденко О.В.* О взаимодействии светового излучения со звуком в условиях проявления акустической нелинейности // ЖЭТФ. 1976. Т.71, №1(7), С.111-121.
6. *Васильева О.А., Карабутов А.А., Лапшин Е.А., Руденко О.В.* Взаимодействие одномерных волн в средах без дисперсии. М.: Изд. МГУ. 1983.
7. *Moulana M. and Nariboli G.A.* On Backlund transformations of some 2nd-order nonlinear equations // J.Math.Phys.Sci. 1977. V.11, P.491-504.
8. *Nimmo J.J.C and Crighton D.G.* Backlund transformations for nonlinear parabolic equations: the general results // Proc. R. Soc. Lond. 1982. A384. P.381-401.
9. *Pasmanter R.A.* Stability and Backlund transform of the forced Burgers equation // J.Math.Phys. 1986. V. 29, P. 2744-2746.
10. *Sachdev P.L.* Nonlinear Diffusive Waves. Cambridge: Cambridge University Press. 1987. 246pp.
11. *Forsyth A.R.* Theory of differential equations, v. VI. Cambridge: Cambridge University Press. 1906. 582pp.
12. *Cole J.D.* On a quasilinear parabolic equation occurring in aerodynamics // Quart. Appl. Math. 1951, V.9, P.225-236.
13. *Hopf T.* The partial differential equation $u_t + uu_x = u_{xx}$ // Comm. Pure Appl. Math. 1950. V.3, P.201-230.

14. *Benton E.R. and Platzman G.W.* A table of solutions of the one-dimensional Burgers equation // *Quart. Appl. Math.*, 1972, V. 30, P. 195-212.
15. *Бэйли М.Р., Хохлова В.А., Сапожников О.А., Каргл С.Г., Крам Л.А.* Физические механизмы воздействия терапевтического ультразвука на биологическую ткань (обзор) // *Акуст.ж.* 2003. Т.49, №4, С. 437-464.
16. *Matveev V.B. and Salle M.A.* Darboux transformations and solitons. Springer. 1991.
17. *Захарьев Б.Н., Чабанов В.М.* Послушная квантовая механика. Новый статус теории в подходе обратной задачи. Москва: Институт компьютерных исследований. 2002.
18. *Ablowitz M.J. and Segur H.* Solitons and the inverse scattering transform. SIAM. Philadelphia. 1981.
19. *Schulze-Halberg A. and Jimenez J.M.* Darboux transformations for the timedependent nonhomogeneous Burgers equation in (1+1) dimensions // *Phys. Scr.* 2009. V. 80, P.1-8.
20. *Карабутов А.А., Сапожников О.А.* Об отражении акустических возмущений от околосзвуковой области сопла Лавалья. *Акуст. ж.* 1986. Т. 32. № 4. С. 538-542.
21. *Карабутов А.А., Сапожников О.А.* Акустические волны конечной амплитуды в околосзвуковой области течения сжимаемого газа // *Акуст. ж.* 1988. Т. 34, № 5, С. 865-870.
22. *Crum M.M.* Associated Sturm-Liouville systems // *Quart. J. Math.* 1955. V. 6, P. 121-127.
23. *Кудрявцев А.Г., Сапожников О.А.* Получение точных решений неоднородного уравнения Бюргерса с использованием преобразования Дарбу // *Акустический журнал.* 2011. Т.57, №3, С. 313-322.

ОЦЕНКА ДОСТОВЕРНОСТИ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ УПРУГИХ ВОЛН НАПРЯЖЕНИЙ В ОБЛАСТЯХ СЛОЖНОЙ ФОРМЫ

Мусаев В.К.

*Московский государственный машиностроительный университет,
г. Москва, Россия*

РЕЗЮМЕ

Рассматриваются некоторые вопросы численного моделирования нестационарных упругих волн в сложных деформируемых областях. При решении сложных задач возникают проблемы оценки достоверности полученных результатов. В работе рассматривается оценка точности и достоверности результатов численного моделирования волн напряжений в областях сложной формы. Приводится сопоставление с результатами экспериментального, аналитического и численного методов.

Ключевые слова: математическое моделирование, нестационарная динамическая теория упругости, продольная волна, поперечная волна, метод конечных элементов, фотоупругость, контурное напряжение, комплекс программ, узловые точки, явная двухслойная схема.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время активно применяются численные методы для решения различных задач нестационарной механики деформируемого твердого тела. Однако при решении сложных задач возникают проблемы оценки достоверности полученных результатов. На основании изложенного можно утверждать, что оценка точности и достоверности результатов численного моделирования волн напряжений в областях сложной формы является актуальной фундаментальной и прикладной научной задачей. На основе метода конечных элементов в перемещениях разработаны алгоритм и комплекс программ для решения линейных плоских двумерных задач, которые позволяют решать сложные задачи при нестационарных динамических воздействиях на сложные системы. При разработке комплекса программ использовался алгоритмический язык Фортран-90. Исследуемая область разбивается по пространственным переменным на треугольные конечные элементы с тремя узловыми точками и на прямоугольные конечные элементы с четырьмя узловыми точками. По временной переменной исследуемая область разбивается на линейные конечные элементы с двумя узловыми точками. Некоторые вопросы в области постановки, разработки методики и алгоритма и результаты решенных нестационарных динамических задач рассмотрены в работах [4-12].

1. РЕШЕНИЕ МЕТОДИЧЕСКИХ И ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАДАЧ

1. Рассматривается задача о воздействии плоской продольной упругой волны на свободное круглое отверстие. Начальные условия приняты нулевыми. В сечении на расстоянии $1,9H$ (рис.1) при $0 \leq n \leq 10$ ($n = t / \Delta t$) скорость упругого перемещения $\dot{u}$ изменяется линейно от 0 до P ($P = \sigma_0 / (\rho C_p)$ ($\sigma_0 = -0,1$ МПа)), а при $n \geq 10$ $\dot{u} = P$. Контур круглого отверстия $ABCD$ предполагается свободным от нагрузок при $t > 0$. Граничные условия для контура $EFGH$ при $t > 0$ $u = v = \dot{u} = \dot{v} = 0$. Отраженные волны от контура $EFGH$ не доходят до исследуемых точек при $0 \leq n \leq 260$.

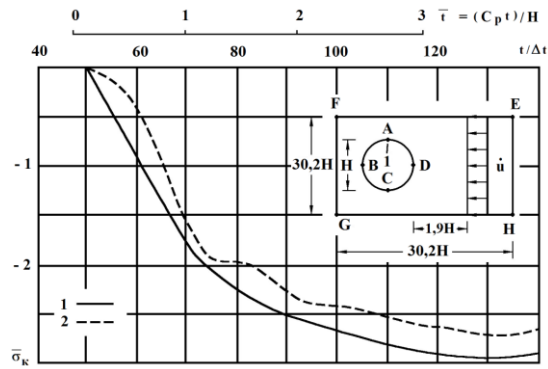


Рис.1. Изменение упругого напряжения $\bar{\sigma}_k$ в точке 1 во времени $\bar{t}$ на контуре свободного круглого отверстия при воздействии плоской продольной упругой волны в виде ступеньки.

Исследуемая расчетная область имеет 1536 узловых точек. Контур круглого отверстия аппроксимирован 28 узловыми точками. На рис.1 показано изменение нестационарного упругого контурного напряжения $\bar{\sigma}_k$ ($\bar{\sigma}_k = \sigma_k / |\sigma_0|$) в точке 1 во времени $\bar{t}$ ($\bar{t} = (C_p t)/H$): 1 - результаты аналитического решения [1]; 2 - результаты численного решения, полученные методом конечных элементов в перемещениях [4-5, 9-12]. Расхождение для максимального упругого контурного напряжения составляет 6 %. На рис.2 показано экспериментальное воздействие σ_{01} во времени $\bar{t}$, полученное методом динамической фотоупругости: а - фотограмма картин полос; б - экспериментальное воздействие, принятое при численном решении методом конечных элементов в перемещениях.

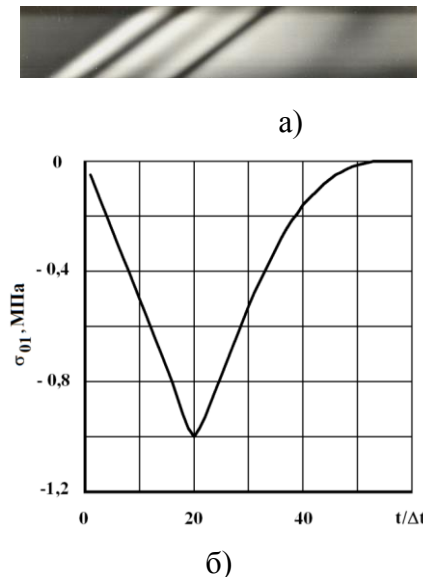


Рис.2. Экспериментальное воздействие σ_{01} во времени $\bar{t}$, полученное методом динамической фотоупругости: а - фотограмма картин полос; б - экспериментальное воздействие, принятое при численном решении методом конечных элементов в перемещениях.

На рис.3 показано изменение упругого контурного напряжения $\bar{\sigma}_k$ в точке 1 во времени $\bar{t}$ при воздействии σ_{01} : а - фотограмма картин полос; б: 1 - экспериментальные результаты, полученные методом динамической фотоупругости [4-5,9-12];

2 - результаты численного решения, полученные методом конечных элементов в перемещениях [4-5,9-12]. Расхождение для максимального упругого контурного напряжения составляет 2 % .

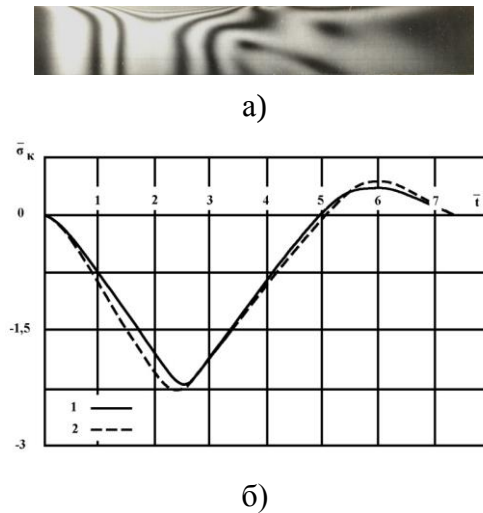


Рис.3. Изменение упругого контурного напряжения $\bar{\sigma}_k$ в точке 1 во времени $\bar{t}$ на контуре свободного круглого отверстия при воздействии σ_{01} : а - фотограмма картин полос; б: 1 - экспериментальные результаты, полученные методом динамической фотоупругости; 2 - результаты численного решения, полученные методом конечных элементов в перемещениях.

2. Рассматривается задача о воздействии плоской продольной упругой волны на подкрепленное круглое отверстие. Начальные условия приняты нулевыми. В сечении на расстоянии $1,6H$ (рис.4) при $0 \leq n_1 \leq 10$ ($n_1 = t / \Delta t_1$) скорость упругого перемещения $\dot{u}_2$ изменяется линейно от 0 до $P_1 = \sigma_0 / (\rho_2 C_{p2})$ ($\sigma_0 = -0,1$ МПа), а при $n_1 \geq 10$ $\dot{u}_2 = P_1$. Внутренний контур подкрепленного отверстия $ABCD$ предполагается свободным от нагрузок при $t > 0$. На границе подкрепления и среды $EFGH$ приняты условия непрерывности перемещений. Граничные условия для контура $IJKL$ при $t > 0$ $u_2 = v_2 = \dot{u}_2 = \dot{v}_2 = 0$. Отраженные волны от контура $IJKL$ не доходят до исследуемых точек при $0 \leq n_1 \leq 540$ (...1 - подкрепление; ...2 - среда). Исследуемая расчетная область имеет 1536 узловых точек. Внутренний контур подкрепления аппроксимирован 28 узловыми точками. По толщине подкрепление аппроксимировано двумя узловыми точками.

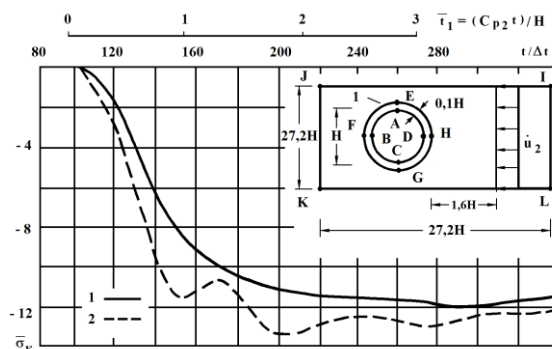


Рис.4. Изменение упругого контурного напряжения $\bar{\sigma}_k$ в точке 1 во времени $\bar{t}_1$ на внутреннем контуре подкрепленного круглого отверстия при воздействии плоской продольной упругой волны в виде ступеньки.

На рис.4 показано изменение контурного напряжения $\bar{\sigma}_k$ в точке 1 во времени $\bar{t}_1$ ($\bar{t}_1 = (C_p t)/H$): 1 - результаты аналитического решения [2]; 2 - результаты численного решения, полученные методом конечных элементов в перемещениях [5-6,11-12]. Расхождение для максимального упругого контурного напряжения составляет 12%.

3. Рассматривается задача о воздействии плоской продольной упругой волны на Курпсайскую плотину с основанием. Начальные условия приняты нулевыми. В сечении на расстоянии $2,3H$ (рис.5) при $0 \leq n \leq 25$ скорости упругих перемещений $\dot{u}$ и $\dot{v}$ изменяются линейно от 0 до $\dot{u} = P \sin \alpha$ и $\dot{v} = P \cos \alpha$, а при $n \geq 25$ $\dot{u} = P \sin \alpha$ и $\dot{v} = P \cos \alpha$ ($P = \sigma_0 / (\rho C_p)$ ($\sigma_0 = 0,1$ МПа)). Контур плотины $HIJABCDE$ (кроме точки D) предполагается свободным от нагрузок при $t > 0$ $u = v = \dot{u} = \dot{v} = 0$. Отраженные волны от контура $EFGH$ не доходят до исследуемых точек при $0 \leq n \leq 2000$. Исследуемая расчетная область имеет 953 узловых точек. Курпсайская плотина аппроксимирована 224 узловыми точками. На рис.5 показано изменение контурного напряжения $\bar{\sigma}_k$ в точке 1 во времени $\bar{t}$, полученное с помощью интеграла Дюамеля при воздействии типа полупериода синусоиды при $\lambda/H = 3$ (λ - длина волны): 1 - результаты численного решения, полученные методом конечных элементов в перемещениях [5,11]; 2 - результаты численного решения, полученные смешанным методом конечных элементов [5, 11]. Расхождение для максимального упругого контурного напряжения составляет 5 %.

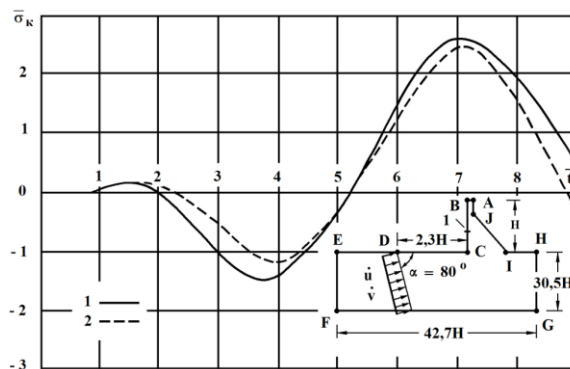


Рис.5. Изменение упругого контурного напряжения $\bar{\sigma}_k$ в точке 1 во времени $\bar{t}$ на контуре Курпсайской плотины при воздействии плоской продольной упругой волны типа полупериода синусоиды при $\lambda/H = 3$.

4. Рассмотрим задачу о воздействии плоской продольной волны (рис.7) на упругую полуплоскость (рис.6).

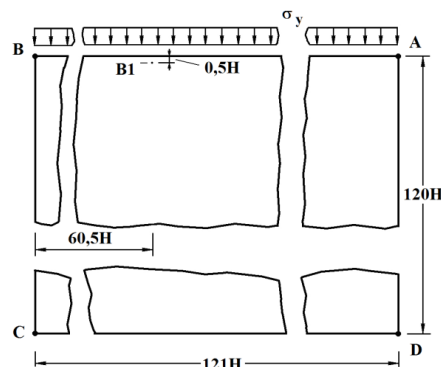


Рис.6. Постановка задачи о распространении плоских продольных волн в упругой полуплоскости.

На границе полуплоскости AB приложено нормальное напряжение σ_y , которое при $0 \leq n \leq 10$ ($n = t / \Delta t$) изменяется линейно от 0 до P , а при $10 \leq n \leq 20$ от P до 0 ($P = \sigma_0, \sigma_0 = -0,1$ МПа). Граничные условия для контура $BCDA$ при $t > 0$ $u = v = \dot{u} = \dot{v} = 0$. Отраженные волны от контура $BCDA$ не доходят до исследуемых точек при $0 \leq n \leq 100$. Исследуемая расчетная область имеет 14762 узловых точек и 14520 конечных элементов. Решается система уравнений из 59048 неизвестных. На рис.8 представлено изменение нормального напряжения $\bar{\sigma}_x$ ($\bar{\sigma}_x = \sigma_x / |\sigma_0|$) во времени n в точке $B1$. На рис.9 представлено изменение нестационарного нормального напряжения $\bar{\sigma}_y$ ($\bar{\sigma}_y = \sigma_y / |\sigma_0|$) во времени n в точке $B1$.

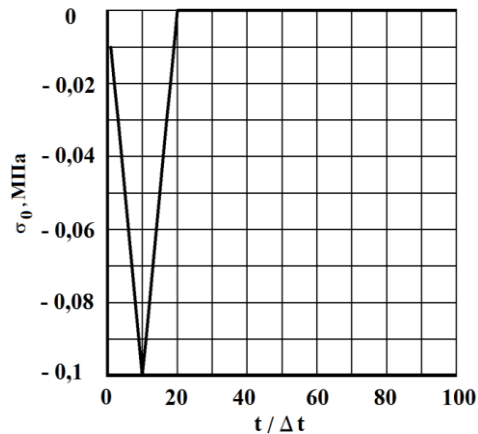


Рис.7. Воздействие в виде треугольного импульса.

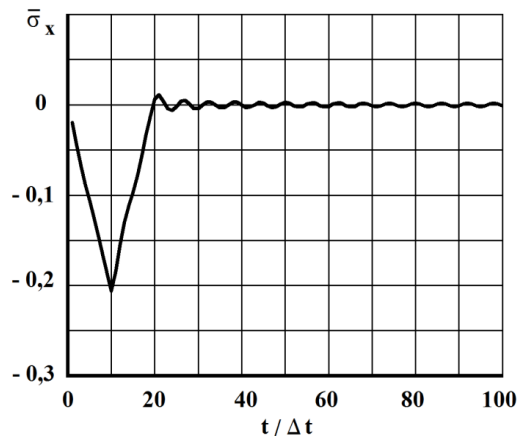


Рис.8. Изменение нормального напряжения $\bar{\sigma}_x$ во времени n в точке $B1$.

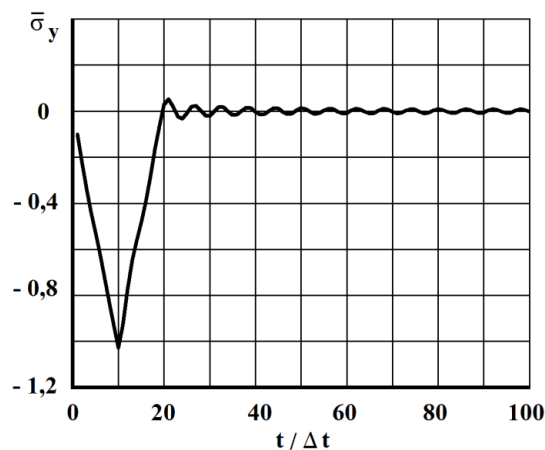


Рис.9. Изменение нормального напряжения $\bar{\sigma}_y$ во времени n в точке $B1$.

В данном случае можно использовать условия на фронте плоской волны, которые изложены в работе [3]. Предположим, что от некоторых точек упругой среды производится какое-то возмущение. На фронте плоской продольной волны имеются следующие аналитические зависимости для плоского напряженного состояния $\sigma_y = -|\sigma_0|$ и $\sigma_x = -\nu|\sigma_0|$. Отсюда видим, что точное решение задачи соответствует воздействию σ_0 (рис.7). Для упругих нормальных напряжений σ_x и σ_y имеется хорошее качественное и количественное согласование с результатами точного решения. Сравнение результатов нормальных напряжений, полученных с помощью метода конечных элементов в перемещениях, при решении задачи о распространении плоских продольных упругих волн в полуплоскости с результатами аналитического решения, показало хорошее совпадение.

5. Рассмотрим задачу о воздействии плоской продольной волны (рис.10) на упругую полуплоскость (рис.6). На границе полуплоскости AB приложено нормальное напряжение σ_y , которое при $0 \leq n \leq 10$ ($n = t / \Delta t$) изменяется линейно от 0 до P , а при $n \geq 10$ равно P ($P = \sigma_0, \sigma_0 = -0,1$ МПа). Граничные условия для контура $BCDA$ при $t > 0$ $u = v = \dot{u} = \dot{v} = 0$. Отраженные волны от контура $BCDA$ не доходят до исследуемых точек при $0 \leq n \leq 100$. Исследуемая расчетная область имеет 14762 узловых точек и 14520 конечных элементов. Решается система уравнений из 59048 неизвестных. На рис.11 представлено изменение нестационарного нормального напряжения $\bar{\sigma}_x$ ($\bar{\sigma}_x = \sigma_x / |\sigma_0|$) во времени n в точке $B1$. На рис.12 представлено изменение нормального напряжения $\bar{\sigma}_y$ ($\bar{\sigma}_y = \sigma_y / |\sigma_0|$) во времени n в точке $B1$.

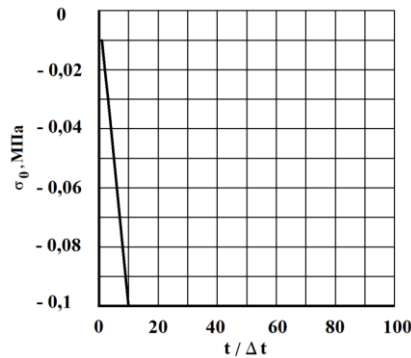


Рис.10. Воздействие в виде ступеньки.

В данном случае можно использовать условия на фронте плоской волны, которые изложены в работе [3]. На фронте плоской продольной волны имеются следующие аналитические зависимости для плоского напряженного состояния $\sigma_y = -|\sigma_0|$ и $\sigma_x = -\nu|\sigma_0|$.

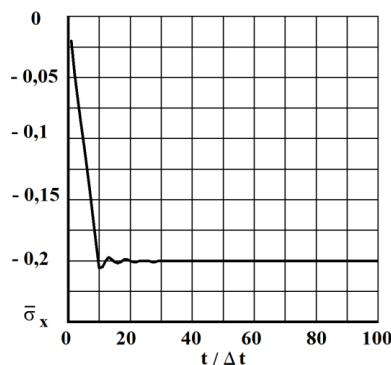


Рис.11. Изменение упругого нормального напряжения $\bar{\sigma}_x$ во времени n в точке $B1$.

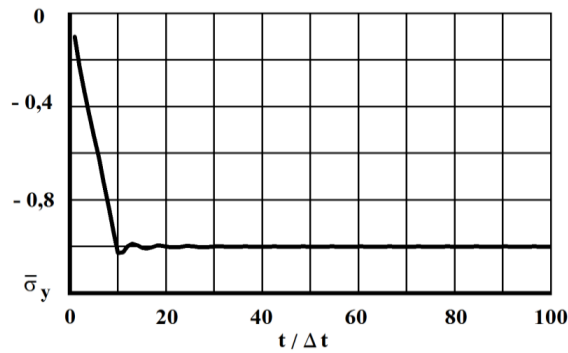


Рис.12. Изменение упругого нормального напряжения $\bar{\sigma}_y$ во времени n в точке $B1$.

Отсюда видим, что точное решение задачи соответствует воздействию σ_0 (рис.10). Для нормальных напряжений σ_x и σ_y имеется хорошее качественное и количественное согласование с результатами точного решения. Сравнение результатов нормальных напряжений, полученных с помощью метода конечных элементов в перемещениях, при решении задачи о распространении плоских продольных упругих волн в полуплоскости с результатами аналитического решения, показало хорошее совпадение.

6. Рассмотрим задачу о воздействии плоской продольной волны в виде прямоугольного импульса (рис.13) на упругую полуплоскость (рис.6). На границе полуплоскости AB приложено нестационарное нормальное напряжение σ_y , которое при $0 \leq n \leq 10$ ($n = t / \Delta t$) изменяется линейно от 0 до P , а при $n \geq 10$ равно P ($P = \sigma_0$, $\sigma_0 = -0,1$ МПа). Граничные условия для контура $BCDA$ при $t > 0$ $u = v = \dot{u} = \dot{v} = 0$. Отраженные волны от контура $BCDA$ не доходят до исследуемых точек при $0 \leq n \leq 100$. В качестве примера приводится изменение нестационарных нормальных напряжений $\bar{\sigma}_x$ ($\bar{\sigma}_x = \sigma_x / |\sigma_0|$) (рис.14) и $\bar{\sigma}_y$ ($\bar{\sigma}_y = \sigma_y / |\sigma_0|$) (рис.15) во времени n в точке $B1$. В данном случае можно использовать условия на фронте плоской волны [3].

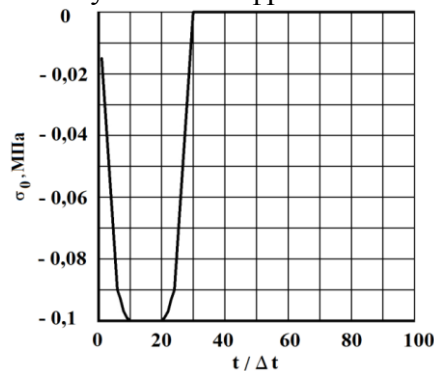


Рис.13. Воздействие в виде прямоугольного импульса.

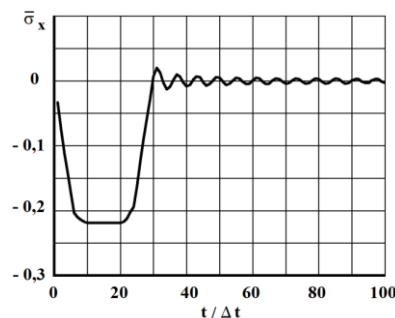


Рис.14. Изменение упругого нормального напряжения $\bar{\sigma}_x$ во времени $t / \Delta t$ в точке $B1$.

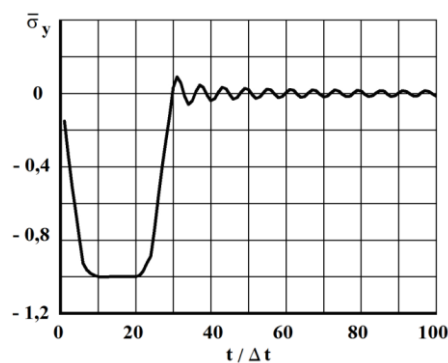


Рис.15. Изменение упругого нормального напряжения $\bar{\sigma}_y$ во времени $t / \Delta t$ в точке B1.

На фронте плоской волны имеются следующие аналитические зависимости для плоского напряженного состояния $\sigma_y = -|\sigma_0|$ и $\sigma_x = -\nu|\sigma_0|$. Отсюда видим, что точное решение задачи соответствует воздействию σ_0 (рис.13). Для нормальных напряжений σ_x и σ_y имеется хорошее качественное и количественное согласование с результатами точного решения. Сравнение результатов нормальных напряжений, полученных с помощью метода конечных элементов в перемещениях, при решении задачи о распространении плоских продольных упругих волн в полуплоскости с результатами аналитического решения, показало хорошее совпадение. На основании проведенных исследований можно сделать вывод о физической достоверности результатов численного решения.

7. Рассмотрим задачу о воздействии плоской продольной волны в виде импульсного воздействия (восходящая часть - линейная, нисходящая - четверть круга) (рис.16) на упругую полуплоскость (рис.6). На границе полуплоскости AB приложено нормальное напряжение σ_y , которое при $1 \leq n \leq 11$ ($n = t / \Delta t$) изменяется от 0 до P и при $11 \leq n \leq 21$ изменяется от P до 0 ($P = \sigma_0$, $\sigma_0 = -0,1$ МПа). Граничные условия для контура BCDA при $t > 0$ $u = v = \dot{u} = \dot{v} = 0$. Отраженные волны от контура BCDA не доходят до исследуемых точек при $0 \leq n \leq 80$. Исследуемая расчетная область имеет 20402 узловых точек. Решается система уравнений из 81608 неизвестных.

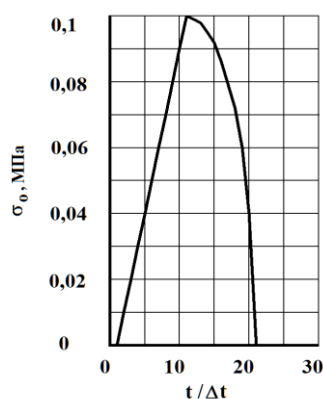


Рис.16. Импульсное воздействие (восходящая часть - линейная, нисходящая - четверть круга).

Результаты расчетов представлены в характерных точках. В качестве примера приводится изменение нестационарных нормальных напряжений $\bar{\sigma}_x$ ($\bar{\sigma}_x = \sigma_x / |\sigma_0|$) (рис.17) и $\bar{\sigma}_y$ ($\bar{\sigma}_y = \sigma_y / |\sigma_0|$) (рис.18) во времени n в точке B1. На фронте плоской

продольной волны имеются следующие аналитические зависимости для плоского напряженного состояния $\sigma_x = -|\sigma_0|$ и $\sigma_y = -\nu|\sigma_0|$. Точное решение задачи [3] соответствует воздействию σ_0 (рис.16). Для упругих нормальных напряжений σ_x и σ_y имеется хорошее качественное и количественное согласование с результатами точного решения.

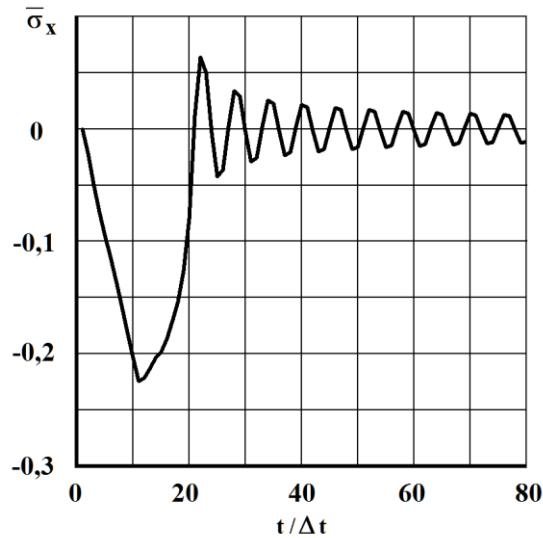


Рис.17. Изменение нормального напряжения $\bar{\sigma}_x$ во времени $t / \Delta t$ в точке $B1$.

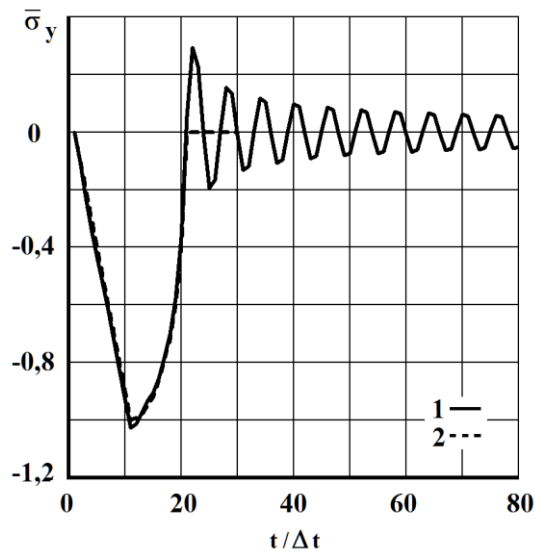


Рис.18. Изменение нормального напряжения $\bar{\sigma}_y$ во времени $t / \Delta t$ в точке $B1$: 1 - численное решение; 2 - аналитическое решение.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сравнение с результатами других методов показало хорошее совпадение, что позволяет сделать вывод о физической и математической достоверности результатов численного решения динамических задач, полученных методом конечных элементов в перемещениях.

Методика, алгоритм, комплекс программ и результаты решенных задач рекомендуются для использования в научно-технических организациях, специализирующихся в области динамического расчета сложных систем при ударных, взрывных и сейсмических воздействиях.

ЛИТЕРАТУРА

1. Барон М., Мэтьюс А. Дифракция волны давления относительно цилиндрической полости в упругой среде // Прикладная механика. Труды американского общества инженеров-механиков. - Сер. Е. - 1961. - Т. 28, № 3. - С. 31-38.
2. Гернет Х., Крузе-Паскаль Д. Неустановившаяся реакция находящегося в упругой среде кругового цилиндра произвольной толщины на действие плоской волны расширения // Прикладная механика. Труды американского общества инженеров-механиков. - Сер. Е. - 1966. - Т. 33, № 3. - С. 48-60.
3. Тимошенко С.П., Гудьер Д. Теория упругости. - М.: Наука, 1975. - 576 с.
4. Мусаев В.К. Решение задачи дифракции и распространения упругих волн методом конечных элементов // Строительная механика и расчет сооружений. - 1990. - № 4. - С. 74-78.
5. Мусаев В.К. Численное решение волновых задач теории упругости и пластичности // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия прикладная математика и информатика. - 1997. - № 1. - С. 87-110.
6. Мусаев В.К. О моделировании сейсмических волновых процессов в подкрепленном круглом отверстии // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия проблемы комплексной безопасности. - 2006. - № 1. - С. 6-17.
7. Мусаев В.К. Численное моделирование задачи о воздействии плоской продольной сейсмической волны на упругую полуплоскость // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия проблемы комплексной безопасности. - 2007. - № 1. - С. 6-13.
8. Мусаев В.К. Численное моделирование плоских продольных взрывных волн в упругой полуплоскости // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия проблемы комплексной безопасности. - 2007. - № 1. - С. 29-37.
9. Мусаев В.К. Об оценке достоверности и точности численного решения нестационарных динамических задач // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия проблемы комплексной безопасности. - 2007. - № 3. - С. 48-60.
10. Мусаев В.К. Численное, аналитическое и экспериментальное решение задачи о концентрации нестационарных динамических напряжений в свободном круглом отверстии // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия проблемы комплексной безопасности. - 2008. - № 4. - С. 67-71.
11. Мусаев В.К. Оценка достоверности и точности результатов вычислительного эксперимента при решении задач нестационарной волновой теории упругости // Научный журнал проблем комплексной безопасности. - 2009. - № 1. - С. 55-80.
12. Мусаев В.К. О достоверности компьютерного моделирования нестационарных упругих волн напряжений в деформируемых телах сложной формы // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. - 2014. - № 11 - С. 10-14.

РАСЧЕТНО-ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕНЗОРА ГРЮНАЙЗЕНА ДЛЯ УГЛЕРОДНОГО МАТЕРИАЛА С 4D-СТРУКТУРОЙ

Острик А.В.¹, Антипов Е.А.², Кульков А.А.²

¹ФГБУН Институт проблем химической физики РАН, г.Черноголовка, Россия

²Центральный научно-исследовательский институт специального машиностроения,
г.Хотьково, Россия

РЕЗЮМЕ

Предлагается метод определения компонент тензора Грюнайзена с использованием стандартно измеряемых температурных зависимостей тепловых и деформационных свойств материалов. Приводится пример расчета коэффициентов Грюнайзена для углерод-углеродного материала с 4D-структурой. Получены отрицательные значения этих коэффициентов на начальном участке изменения температуры. Предлагаемый метод и полученные данные могут быть полезны при оценке параметров механического действия интенсивных потоков излучений и частиц на углерод-углеродные композитные материалы.

Ключевые слова: композитные материалы; структура композитов; энергосодержание; механическое действие потоков энергии; уравнения состояния; тензор Грюнайзена

ВВЕДЕНИЕ

Коэффициент Грюнайзена $\Gamma = \Gamma(\rho, T)$ является одной из основных характеристик вещества, входящей в большинство феноменологических уравнений состояния [1-3] и являющейся мерой ангармоничности тепловых колебаний атомов или молекул в твердом теле [1]. Эта характеристика определяет коэффициент пропорциональности между объемной плотностью тепловой энергии и тепловым давлением и требуется при оценке параметров механического действия высокоинтенсивных потоков излучений и частиц [4,5] на композитные конструкции ракетно-космической техники. Точное термодинамическое определение коэффициента Грюнайзена для изотропного тела записывается в виде [6]

$$\Gamma(\rho, T) = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho \bigg/ \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_\rho = \frac{1}{\rho c_V} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho, \quad (1)$$

где ρ, P, T - плотность, давление и температура вещества; E - удельная внутренняя энергия; c_V - теплоемкость при постоянном объеме.

Из (1), используя известное термодинамическое соотношение

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho \left(\frac{\partial T}{\partial \nu} \right)_P \left(\frac{\partial \nu}{\partial P} \right)_T = -1,$$

получаем формулу Грюнайзена

$$\Gamma(\rho, T) = \frac{1}{\rho c_V} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho = \frac{1}{\rho c_V} \frac{(\partial \nu / \partial T)_P / \nu}{-(\partial \nu / \partial P)_T / \nu} = \frac{\beta}{\rho c_V K}, \quad (2)$$

где $\nu = 1/\rho$ - удельный объем; β - коэффициент объемного теплового расширения; K - модуль объемного сжатия.

1. ТЕНЗОР ГРЮНАЙЗЕНА

В случае анизотропного материала отдельное рассмотрение процессов изменения объема и формы тела уже не представляется возможным и определение (1) оказывается неприменимым. Для нелинейно упругого (предполагается существование однозначной

связи между тензором напряжений σ_{ij} , тензором деформаций ε_{ij} и температурой $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}(\varepsilon_{ij}, T)$ можно по аналогии с (1) ввести тензор Грюнайзена Γ_{ij} [7]

$$\Gamma_{ij}(\varepsilon_{ij}, T) = -\frac{1}{\rho c_\varepsilon} \left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial T} \right)_\varepsilon, \quad (3)$$

где C_ε - теплоемкость при постоянной деформации.

Записывая полный дифференциал (по повторяющимся индексам предполагается суммирование)

$$d\sigma_{ij} = \left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial T} \right)_\varepsilon dT + \left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} \right)_T d\varepsilon_{kl}$$

и полагая, что процесс происходит при постоянном напряженном состоянии ($d\sigma_{ij} = 0$), получаем

$$\left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial T} \right)_\varepsilon = - \left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} \right)_T \left(\frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial T} \right)_\sigma. \quad (4)$$

Из (3), (4) находим

$$\Gamma_{ij}(\varepsilon_{ij}, T) = -\frac{1}{\rho c_\varepsilon} \left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial T} \right)_\varepsilon = \frac{1}{\rho c_\varepsilon} \left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} \right)_T \left(\frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial T} \right)_\sigma = \frac{\alpha_{kl}}{\rho c_\varepsilon} \left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} \right)_T, \quad (5)$$

где $\alpha_{kl} = \alpha_{kl}(\varepsilon_{ij}, T)$ - компоненты тензора теплового расширения при постоянном напряженном состоянии.

В соотношении (5) не предполагается малости деформаций и какой-либо симметрии свойств композитного материала. Рассмотрим случай transversально - изотропного материала и достаточно малых деформаций, при которых справедлив закон Гука и компоненты тензора теплового расширения зависят лишь от температуры. Будем считать, что Z (3) - есть ось перпендикулярная плоскости изотропии. Тогда диагональные

для transversально - изотропного материала тензоры α_{kl} и Γ_{ij} имеют компоненты

$$\Gamma_{11} = \Gamma_{22} = \Gamma_\perp, \quad \Gamma_{33} = \Gamma_\parallel, \quad \alpha_{11} = \alpha_{22} = \alpha_\perp, \quad \alpha_{33} = \alpha_\parallel. \quad (6)$$

Закон Гука для transversально - изотропного тела записывается в виде (для расчета коэффициента Грюнайзена в нашем случае требуются только нормальные компоненты тензора напряжений)

$$\begin{cases} \sigma_{11} = C_{12}\varepsilon_{11} + C_{12}\varepsilon_{22} + C_{13}\varepsilon_{33} \\ \sigma_{22} = C_{21}\varepsilon_{11} + C_{22}\varepsilon_{22} + C_{23}\varepsilon_{33} \\ \sigma_{33} = C_{31}\varepsilon_{11} + C_{32}\varepsilon_{22} + C_{33}\varepsilon_{33} \end{cases} \quad (7)$$

где коэффициенты жесткости C_{ij} - симметричны ($C_{ij} = C_{ji}$) и являются функциями только температуры. Кроме того, $C_{11} = C_{22}$, $C_{31} = C_{32}$ в силу transversальной изотропии. Поэтому вводя в общие обозначения

$A = C_{11} = C_{22}$, $B = C_{13} = C_{31} = C_{32} = C_{23}$, $C = C_{12} = C_{21}$, получаем

$$\begin{cases} \sigma_{11} = A\varepsilon_{11} + C\varepsilon_{22} + B\varepsilon_{33} \\ \sigma_{22} = C\varepsilon_{11} + A\varepsilon_{22} + B\varepsilon_{33} \\ \sigma_{33} = B\varepsilon_{11} + B\varepsilon_{22} + C_{33}\varepsilon_{33}. \end{cases} \quad (8)$$

Из (5)-(8) находим компоненты тензора Грюнайзена для упругого transversально-изотропного материала

$$\begin{aligned}\Gamma_{\perp} &= \frac{1}{\rho c_{\varepsilon}} [\alpha_{\perp} (C_{11} + C_{12}) + \alpha_{\parallel} C_{13}] = \frac{1}{\rho c_{\varepsilon}} [\alpha_{\perp} (A + C) + \alpha_{\parallel} B], \\ \Gamma_{\parallel} &= \frac{1}{\rho c_{\varepsilon}} [\alpha_{\perp} (C_{31} + C_{32}) + \alpha_{\parallel} C_{33}] = \frac{1}{\rho c_{\varepsilon}} [2\alpha_{\perp} B + \alpha_{\parallel} C_{33}].\end{aligned}\quad (9)$$

Отметим, что поскольку в (5) производная компонент напряжений по компонентам деформаций берется при постоянной температуре, то коэффициенты жесткости в (9) являются изотермическими.

Как уже отмечалось, коэффициенты теплового расширения и жесткости считаются функциями только температуры. Поскольку мы рассматриваем твердое состояние материала в пределах применимости закона Гука, то изменения плотности невелики и тем более не велико их влияние на удельную теплоемкость. Таким образом, в нашем случае компоненты тензора Грюнайзена являются функцией одной температуры. При этом малые изменения плотности также могут быть учтены введением экспериментальной зависимости $\rho = \rho(T)$.

2. МАТРИЦА ЖЕСТКОСТИ

Согласно (9) для расчета коэффициентов Грюнайзена требуются характеристики жесткости. Жгуты углеродных волокон, в которых микропустоты заполнены связующим (материалом матрицы), представляют собой трансверсально-изотропный материал [8], который характеризуется пятью константами: $E_{f\parallel}, E_{f\perp}$ - модулями Юнга вдоль и поперек волокна; $G_{f\parallel}, G_{f\perp}$ - модулями сдвига; $\mu_{f\parallel}$ - коэффициентом Пуассона (выполняется соотношение $E_{f\parallel} / \mu_{f\parallel} = E_{f\perp} / \mu_{f\perp}$). Материал матрица предполагается изотропным и характеризуется модулем Юнга E_b и коэффициентом Пуассона μ_b . Таким образом, упругое поведение композита, армированного углеродными волокнами, полностью описывается перечисленными семью константами, а также геометрией армирования и объемным содержанием армирующих волокон в заданном направлении.

Рассмотрим пространственно-армированный углеродными нитями материал, имеющий 4D-структуру. Структура его такова, что три направления равноориентированы в одной плоскости, а четвертое перпендикулярно ей. Поэтому этот материал имеет ось упругой симметрии шестого порядка и согласно [9] гомогенной моделью такой среды служит трансверсально-изотропная.

Рассмотрим простейшую модель композита в виде суперпозиции двух сред: ортотропного материала, полученного размазыванием каркаса углеродных стержней (армирующих волокон пропитанных связующим), и изотропного материала матрицы. Из условия равенства энергии деформирования гетерогенного и гомонизированного материалов получаем [8]

$$[C] = [C]_b + [C]_f, \quad (10)$$

где $[C]$ - матрица жесткости композита в целом; $[C]_b$ - матрица жесткости связующего; $[C]_f$ - матрица жесткости размазанного по представительному объему каркаса из углеродных стержней.

Матрица жесткости изотропного связующего имеет вид (далее выписываются только первые три строки матриц жесткости, поскольку лишь они требуются для расчета коэффициентов Грюнайзена)

$$[C]_b = \begin{bmatrix} (1-\mu_b)\tilde{E}_b & \mu_b\tilde{E}_b & \mu_b\tilde{E}_b & 0 & 0 & 0 \\ \mu_b\tilde{E}_b & (1-\mu_b)\tilde{E}_b & \mu_b\tilde{E}_b & 0 & 0 & 0 \\ \mu_b\tilde{E}_b & \mu_b\tilde{E}_b & (1-\mu_b)\tilde{E}_b & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \tilde{E}_b = \frac{E_b^{4D}}{(1+\mu_b)(1-2\mu_b)}, \quad (11)$$

Поскольку часть матрицы замещена армирующим материалом, то её модуль Юнга E_b^{4D} приближенно может быть оценен при известных объемных содержаниях углеродных волокон $\eta_{\parallel}, \eta_{\perp}$ в направлениях армирования

$$E_b^{4D} = E_b(1 - 3\eta_{\perp} - \eta_{\parallel}). \quad (12)$$

Матрица жесткости $[C]_f$ усредненного материала из углеродных стержней определяется векторами преобразования $\{T\}_i (i=1, \dots, 4)$ вектора деформации $\{\varepsilon\}$ в одноосные деформации ε_i в направлениях армирования ($\varepsilon_i = \{T\}_i^T \{\varepsilon\}$). Для рассматриваемой 4D-структуры имеем

$$\begin{aligned} \{T\}_1 &= \frac{1}{4} [3, 1, 0, \sqrt{3}, 0, 0]^T, \quad \{T\}_2 = \frac{1}{4} [3, 1, 0, -\sqrt{3}, 0, 0]^T, \\ \{T\}_3 &= [0, 1, 0, 0, 0, 0]^T, \quad \{T\}_4 = [0, 0, 1, -\sqrt{3}, 0, 0]^T. \end{aligned} \quad (13)$$

Тогда

$$[C]_f = E_{f\parallel}^{4D} \sum_1^4 \{T\}_i \{T\}_i^T = \frac{E_{f\parallel}^{4D}}{8} \begin{bmatrix} 9 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 9 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad E_{f\parallel}^{4D} = \eta_{\parallel} E_{f\parallel}. \quad (14)$$

Из (8), (10), (11), (12), (14) получаем требуемые коэффициенты жесткости

$$\begin{aligned} A &= \frac{(1 - \mu_b)(1 - 3\eta_{\perp} - \eta_{\parallel})}{(1 + \mu_b)(1 - 2\mu_b)} E_b + \frac{9}{8} \eta_{\parallel} E_{f\parallel}, & B &= \frac{\mu_b(1 - 3\eta_{\perp} - \eta_{\parallel})}{(1 + \mu_b)(1 - 2\mu_b)} E_b, \\ C &= \frac{(1 - \mu_b)(1 - 3\eta_{\perp} - \eta_{\parallel})}{(1 + \mu_b)(1 - 2\mu_b)} E_b + \frac{3}{8} \eta_{\parallel} E_{f\parallel}, & C_{33} &= \frac{(1 - \mu_b)(1 - 3\eta_{\perp} - \eta_{\parallel})}{(1 + \mu_b)(1 - 2\mu_b)} E_b + \eta_{\parallel} E_{f\parallel}. \end{aligned} \quad (15)$$

Отметим, что в силу использования упрощенной модели при расчете коэффициентов жесткости вместо пяти констант, характеризующих трансверсально-изотропный материал волокон, пропитанных связующим, используется лишь одна $E_{f\parallel}$.

3. ЭФФЕКТИВНЫЙ КОЭФФИЦИЕНТ ГРЮНАЙЗЕНА

При оценке механического действия высокоинтенсивных потоков излучений и частиц на конструкции летательных аппаратов, а также при экспериментальных исследованиях волн, генерируемых лазерными [10] или электронными [11] пучками, используются эффективные коэффициенты Грюнайзена Γ_{ij}^{eff} , определяющие начальные профиль напряжений по выделенной при облучении энергии Q в предположении, что подвод энергии реализуется практически мгновенно и деформации не успевают развиться ($\varepsilon_{ij} = const$, где константа обозначает квазистатический тензор деформаций от полетных нагрузок)

$$\sigma_{ij} = \rho \Gamma_{ij}^{eff}(Q) Q. \quad (16)$$

Из (3) следует, что (при постоянной деформации и, следовательно, $\rho = const$)

$$\sigma_{ij} = \int_{T_0}^T \Gamma_{ij}(\varepsilon_{ij}, T) \rho c_{\varepsilon} dT = \rho \int_0^Q \Gamma_{ij}(\varepsilon_{ij}, Q) dQ \quad (17)$$

Сравнивая (16) и (17) находим

$$\Gamma_{ij}^{eff}(Q) = \frac{1}{Q} \int_0^Q \Gamma_{ij}(\varepsilon_{ij}, Q) dQ. \quad (18)$$

В данном случае эффективные значения коэффициентов Грюнайзена совпадают со средними значениями на интервале подведенной энергии $(0, Q)$. Отметим,

что определение (16) вводится для более общего случая неравновесного по температуре объемно поглощающего гетерогенного материала [4].

4. РЕЗУЛЬТАТЫ

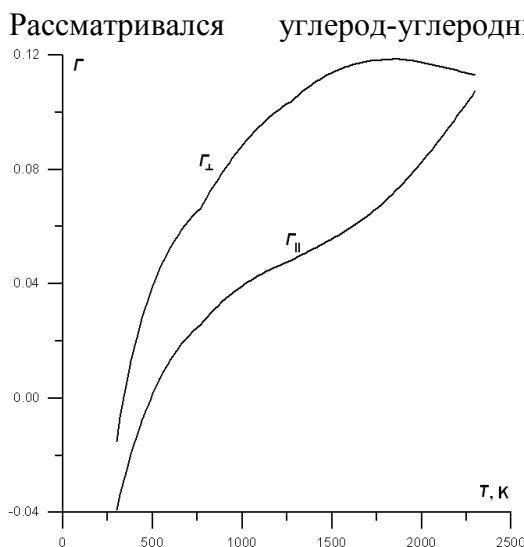


Рис.1. Зависимость коэффициентов Грюнайзена от температуры

Рассматривался углерод-углеродный материал, имеющий 4D-структуру, с объемным содержанием волокон 32,8%. Объемное содержание волокон в направлении оси Z принималось равным 10,4%. При расчетах компонент тензора Грюнайзена $\Gamma_{||}, \Gamma_{\perp}$ учитывались зависимости модулей Юнга, коэффициентов линейного расширения и удельной теплоемкости от температуры. Эти зависимости определялись экспериментально и в расчетной программе использовались в форме полиномиальных аппроксимаций табличных данных.

В частности, средние линейные коэффициенты теплового расширения $\bar{\alpha}_{||,\perp}(T)$ определялись в заданном

интервале температур $[T_0, T]$ ($T_0 = 20^\circ\text{C}$) по стандартной методике измерений [11].

Полученные по экспериментальным данным полиномиальные зависимости средних коэффициентов теплового расширения имеют вид ($[\alpha] = 1/\text{K}$, $[T] = 10^3 \text{ K}$):

$$\bar{\alpha}_{\perp} = (0,0887 T^4 - 0,5666 T^3 + 0,7066 T^2 + 1,9534 T - 8109) \times 10^{-6},$$

$$\bar{\alpha}_{||} = (-0,2007 T^5 + 1,6003 T^4 - 4,5472 T^3 + 5,4642 T^2 - 1,0026 T - 0,7877) \times 10^{-6}$$

По этим зависимостям находятся значения коэффициентов при заданном T

$$\alpha_{||,\perp}(T) = \bar{\alpha}_{||,\perp}(T) + \frac{d\bar{\alpha}_{||,\perp}(T)}{dT} (T - T_0).$$

Результаты расчетов компонент тензора Грюнайзена $\Gamma_{||}, \Gamma_{\perp}$ по соотношениям (9) представлены на рис.1. Видно, что значения компонент тензора Грюнайзена в рассматриваемом интервале температур не превосходят величины 0,12. Полученные на начальном интервале температур отрицательные значения $\Gamma_{||}, \Gamma_{\perp}$ наблюдались для анизотропных углеродных материалов экспериментально в работе [12].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для трансверсально-изотропных материалов с 4D-структурой предложен расчетно-экспериментальный метод определения компонент тензора Грюнайзена с использованием стандартно измеряемых температурных зависимостей тепловых и деформационных свойств материалов. Получены ранее экспериментально наблюдаемые отрицательные значения этих коэффициентов на начальном участке изменения температуры. Предлагаемый метод и полученные данные могут быть полезны при оценке параметров механического действия интенсивных потоков излучений и частиц на углерод-углеродные композитные материалы.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 13-08-01401-а, 13-08-12239-офи-м).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. - М: Наука, 1966.
2. *Бушман А.В., Ломоносов И.В., Фортков В.Е.* Уравнения состояния металлов при высоких плотностях энергии. Черногловка: ИХФЧ РАН, 1992. 196с.
3. *Куропатенко В.Ф.* Уравнения состояния в математических моделях механики и физики. //Сборник научных трудов «Экстремальные состояния вещества» под редакцией В.Е. Фортова - М.: ИВТАН, 1991, стр. 3-38.
4. *Острик А.В.* Термомеханическое действие рентгеновского излучения на многослойные гетерогенные преграды в воздухе. - М.: НТЦ «Информтехника», 2003. 160с.
5. *Грибанов В.М., Острик А.В., Ромадинова Е.А.* Численный код для расчета многократного комплексного действия излучений и частиц на многослойный многофункциональный гетерогенный плоский пакет. - Черногловка: ИПХМ РАН, 2006.- 92с.
6. Физика высоких плотностей энергии /Под ред. П. Кальдиаролы, Г. Кнопфеля. М.: Мир, 1974.- 484с.
7. *F.C. Perry* Grunaisen Tensor of Anisotropic Composite //J. Composite Mater., 1972. 6, No. 1. P. 2-12.
8. *Воробей В.В., Морозов Е.В., Татарников О.В.* Расчет термонапряженных конструкций из композиционных материалов. - М: Машиностроение, 1992. 240с.
9. *Лехницкий С.Г.* Теория упругости анизотропного тела. М.: Наука. 1977. 415с.
10. *Anderholm N. C., Anderson Ph. D.* Laser-Heating Studies of Composite Materials // Journal of Applied Physics. 1972. -Vol. 43, N. 4.
11. ГОСТ 15173-70 Пластмассы. Метод определения среднего коэффициента линейного теплового расширения.
12. *Степовик А.П.* Измерение коэффициента Грюнайзена некоторых анизотропных углеродных материалов //ПМТФ, 2005. Т. 46 № 6. С. 171-179.

ОСОБЕННОСТИ ПРОЦЕССА ГОРЯЧЕГО ИЗОСТАТИЧЕСКОГО ПРЕССОВАНИЯ ТЕЛ БОЛЬШИХ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ РАЗМЕРОВ В УСЛОВИЯХ НЕОДНОРОДНОГО НЕСТАЦИОНАРНОГО ТЕМПЕРАТУРНОГО ПОЛЯ

Хомяков Е.И.¹, Бочков А.В.², Головешкин В.А.^{2,3}, Зазовский Л.М.², Козырев Ю.М.²,
Пономарев А.В.²

¹ *Синертех, США*

² *Московский государственный университет приборостроения и информатики,
г.Москва, Россия*

³ *ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г.Москва, Россия*

РЕЗЮМЕ

При исследовании поведения порошковых материалов в условиях неоднородного температурного поля существенны следующие два момента: коэффициент теплопроводности значительно возрастает с ростом относительной плотности; предел текучести существенно уменьшается с ростом температуры. Исследование процесса горячего изостатического прессования (ГИП) тел больших геометрических размеров показывает, что неоднородное нестационарное температурное поле существенно влияет на конечную форму изделия.

Ключевые слова: порошковый материал, горячее изостатическое прессование, условие Грина, неоднородное нестационарное температурное поле.

ВВЕДЕНИЕ

Современное производство требует все больше материалов и конструкций с повышенными эксплуатационными характеристиками. Одним из методов получения таковых является порошковая металлургия, использующая в качестве исходного сырья металлический порошок.

Одним из методов порошковой металлургии является горячее изостатическое прессование (ГИП), основанное на компактировании порошкового материала под воздействием высоких давлений (порядка 1000 атм.) и температур (порядка 1000°C). В капсулу определенной формы помещается порошковый материал и закладные элементы (образующие полости в готовом изделии), после чего из нее откачивается воздух. Далее капсула помещается в газостат, где под воздействием газа (аргон) осуществляется процесс ГИП. На последнем этапе с готового изделия химическим или механическим путем удаляется капсула и закладные элементы.

Основной проблемой математического моделирования процесса ГИП создание такой начальной геометрии изделия, чтобы по окончании процесса форма конечного изделия удовлетворяла нужной геометрии с достаточно высокой степенью точности, что обусловлено трудностями последующей обработки из-за высоких прочностных свойств изделия и высокой стоимостью порошкового материала.

При моделировании поведения тел больших геометрических размеров, а эта задача стала актуальной в последнее время, дополнительно возникла проблема учета влияния неоднородного нестационарного температурного поля.

Причинами данной проблемы являются: зависимость коэффициента теплопроводности порошкового материала от плотности; зависимость предела текучести от температуры. Качественно их влияние можно объяснить следующим образом - при повышении температуры происходит уменьшение предела текучести, что приводит к уплотнению материала вблизи границ. Это, в свою очередь, увеличивает коэффициент теплопроводности, что приводит к росту температуры. В итоге, мы наблюдаем аналог движения фронта уплотнения материала. Впервые существование подобного фронта было

показано в работе [1]. Отдельные аспекты поведения порошковых материалов в условия неоднородного нестационарного температурного поля исследовались в [2-4].

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Математическая постановка задачи моделирования поведения порошкового материала в процессе горячего изостатического прессования включает следующее.

Уравнение равновесия

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad (1)$$

где σ_{ij} - тензор напряжений.

ГИП - достаточно медленный процесс, поэтому ускорениями в уравнениях движения пренебрегаем.

Связь тензора напряжений с тензором скоростей деформаций определяется уравнением поверхности текучести

$$\Phi(\sigma_{ij}) = 0 \quad (2)$$

и законом течения:

$$\varepsilon_{ij} = \omega \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{ij}} \quad (3)$$

где ε_{ij} - тензор скоростей деформации.

Как правило, при моделировании процесса ГИП уравнение (2) принимается в форме Грина [5,6]

$$\frac{\sigma^2}{f_2^2} + \frac{S^2}{f_1^2} = Y^2 \quad (4)$$

где $\sigma = \sigma_{ii}/3$ - среднее напряжение; $S^2 = \frac{3}{2}(\sigma_{ij} - \sigma\delta_{ij})(\sigma_{ij} - \sigma\delta_{ij})$; f_1 и f_2 - экспериментально определяемые функции относительной плотности ρ , Y - предел текучести монолита порошкового материала, являющийся экспериментально определяемой функцией температуры.

Для описания характера изменения температуры используется уравнение теплопроводности

$$C\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div} \lambda \text{grad} T - C\rho \bar{U} \text{grad} T \quad (5)$$

где C - теплоемкость единицы объема монолита; ρ - относительная плотность; $\bar{U}$ - скорость; $\lambda = \lambda(\rho, T)$ - коэффициент теплопроводности порошкового материала.

Обычно $\lambda(\rho, T)$ представляется в виде $\lambda(\rho, T) = \lambda_1(T)\lambda(\rho)$, где $\lambda_1(T)$ - коэффициент теплопроводности монолита, определяемый как функция температуры, а $\lambda(\rho)$ - множитель, отражающий зависимость коэффициента теплопроводности порошкового материала от относительной плотности ($0 < \lambda(\rho) < 1$).

При исследовании влияния неоднородного нестационарного температурного поля на процесс ГИП необходимо иметь в виду следующие соображения.

1. Функция $\lambda(\rho)$ является малой при начальной насыпной плотности порошка ρ_0 (0,6 - 0,7), и равна 1 при $\rho = 1$. $\lambda(\rho)$ в ходе процесса ГИП изменяется примерно на 2 порядка и быстро возрастает с ростом плотности ρ .

2. Предел текучести $Y(T)$ в диапазоне температур, характерных для процесса ГИП (20°C - 1000°C), уменьшается примерно на 2 порядка.

Чтобы качественно понять суть проблемы, рассмотрим простейшую задачу - одномерный процесс прессования порошкового слоя.

Постановка задачи.

В области $0 < x < \infty$ имеется порошковый слой с начальной относительной плотностью ρ_0 и температурой T_0 . На границе слоя ($x=0$) приложено внешнее давление P и температура T_1 . Исследуем характер деформации такого слоя.

Поскольку задача одномерная, то из уравнения (1) следует

$$\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} = 0; \quad \sigma_x = -P \quad (6)$$

В силу одномерного характера процесса деформации

$$\varepsilon_x = \varepsilon_z = 0 \quad (7)$$

Уравнение поверхности текучести (4) примет вид

$$\frac{(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z)^2}{9f_2^2} + \frac{1}{6f_1^2} \left[(2\sigma_x - \sigma_y - \sigma_z)^2 + (2\sigma_y - \sigma_x - \sigma_z)^2 + (2\sigma_z - \sigma_x - \sigma_y)^2 \right] = Y^2 \quad (8)$$

Согласно (3,7,8) имеем

$$\left(\frac{2}{9f_2^2} - \frac{1}{f_1^2} \right) \sigma_x + \left(\frac{2}{9f_2^2} + \frac{2}{f_1^2} \right) \sigma_y + \left(\frac{2}{9f_2^2} - \frac{1}{f_1^2} \right) \sigma_z = 0$$

$$\left(\frac{2}{9f_2^2} - \frac{1}{f_1^2} \right) \sigma_x + \left(\frac{2}{9f_2^2} - \frac{1}{f_1^2} \right) \sigma_y + \left(\frac{2}{9f_2^2} + \frac{2}{f_1^2} \right) \sigma_z = 0 \quad (9)$$

Согласно (9)

$$\sigma_y = \sigma_z = \frac{9f_2^2 - 2f_1^2}{2f_2^2 + 4f_1^2} \sigma_x \quad (10)$$

Тогда уравнение (8), с учетом (7), примет вид

$$\sigma_x^2 = Y^2 \frac{9f_2^2 + 4f_1^2}{9} \quad (11)$$

Поскольку $\sigma_x = -P$ - заданная величина, Y - известная функция температуры, f_1 и f_2 - известные функции относительной плотности ρ , то соотношение (8), при известной температуре, определяет плотность порошкового материала.

Обратим внимание на то, что если $P^2 < Y^2 \frac{9f_2^2(\rho_0) + 4f_1^2(\rho_0)}{9}$, то материал остается недеформированным, и его плотность равна начальной насыпной плотности ρ_0 .

Предположим, что давление P и температура T_1 таковы, что

$$P^2 < Y(T_0)^2 \frac{9f_2^2(\rho_0) + 4f_1^2(\rho_0)}{9}$$

$$P^2 > Y(T_1)^2 \frac{9f_2^2(\rho_0) + 4f_1^2(\rho_0)}{9}$$

то есть холодный материал не уплотняется при заданном давлении, а нагретый уплотняется.

Отметим, что $Y(T)$ - монотонно убывающая функция с ростом температуры, а $9f_2^2(\rho) + 4f_1^2(\rho)$ - монотонно возрастающая функция относительной плотности.

Введем температуру $T_u \in [T_0; T_1]$ из условия $P^2 = Y^2(T_u) \frac{9f_2^2(\rho_0) + 4f_1^2(\rho_0)}{9}$, которая будет определять начало уплотнения при заданном давлении.

Соотношение (8) позволяет определить ρ как функцию температуры $\rho = g(T)$, где $g(T) = \rho_0$ при $T < T_u$, а при $T > T_u$ относительная плотность определяется из решения относительно ρ уравнения

$$P^2 = Y(T)^2 \frac{9f_2^2(\rho) + 4f_1^2(\rho)}{9} \quad (12)$$

Таким образом, деформированное состояние слоя полностью определяется решением уравнения теплопроводности (5).

Запишем уравнение (5) в Лагранжевой системе координат, заменив x на z - где z начальное положение точки.

Из закона сохранения массы следует

$$\rho dx = \rho_0 dz \quad (13)$$

Тогда координаты x на z связаны соотношением

$$\rho(x - z) = \int_x^\infty (\rho - \rho_0) dx \quad (14)$$

Уравнение (5) в Лагранжевой системе координат примет вид

$$C\rho_0 \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \frac{\rho}{\rho_0} \lambda_1(T) \lambda(\rho) \frac{\partial T}{\partial z} \quad (15)$$

Для качественного анализа примем $\lambda_1(T) = \lambda_0 = \text{const}$. Тогда, в силу того, что $\rho = g(T)$, уравнение (15) примет вид

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda_0}{C\rho_0^2} \frac{\partial}{\partial z} \Psi(T) \frac{\partial T}{\partial z} \quad (16)$$

где $\Psi(T) = g(T) \lambda[g(T)]$.

Уравнение (16) с начальным условием $T = T_0$, при $t = 0$, и граничным условием $T = T_1$ при $z = 0$, определяет решение задачи.

Решение (16) будем искать в виде

$$T = T(S), \text{ где } S = \frac{z}{\sqrt{\frac{\lambda_0}{C\rho_0^2} t}} \quad (17)$$

Согласно (16,17), для T получаем дифференциальное уравнение

$$-\frac{z}{2} \frac{\partial T}{\partial S} = \frac{\partial}{\partial S} \left(\Psi(T) \frac{\partial T}{\partial S} \right) \quad (18)$$

с условиями $T(0) = T_1$ и $T(\infty) = T_0$.

Пусть $T(S_u) = T_u$, тогда можно утверждать, что в порошковом слое существует граница $z_u = S_u \sqrt{\frac{\lambda_0}{C\rho_0^2} t}$. При этом для $Z > Z_u$ материал остается недеформированным.

Перенося полученный вывод для изделий больших геометрических размеров, можно сделать следующий качественный вывод. На начальном этапе процесса ГИП в порошковом материале деформируется слой, граничащий с капсулой. Деформация в этом слое носит одномерный характер в направлении, перпендикулярном поверхности капсулы. То есть формируется фронт уплотнения. Область, прилегающая к фронту, характеризуется значительными градиентами плотности. Вдали от фронта материал остается недеформированным. Как было указано ранее, теоретическое обоснование существования такого фронта дано в работе [1].

Наиболее явно влияние такого фронта проявляется, когда тела больших геометрических размеров имеют существенно различные размеры в разных направлениях.

Ниже приведен пример расчета длинного цилиндра. Для того, чтобы более явно показать этот эффект, расчет приводится без капсулы.

Зависимость коэффициента теплопроводности от плотности принималась в виде

$$\lambda(\rho) = \lambda_0 * \left(\frac{\rho - \rho_0}{1 - \rho_0} \right)^{1,46 * (1 - \rho_0)}$$

Законы изменения температуры и внешнего давления приведены на рис.1.

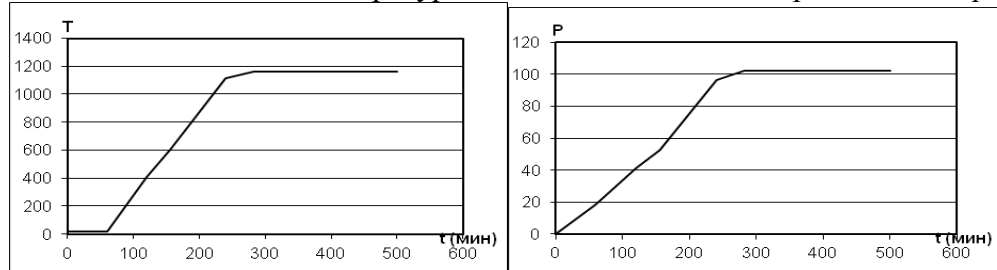


Рис.1. Графики изменения внешней температуры (°C) и давления (МПа).

Характер изменения пределов текучести в зависимости от температуры представлен на рис.2.

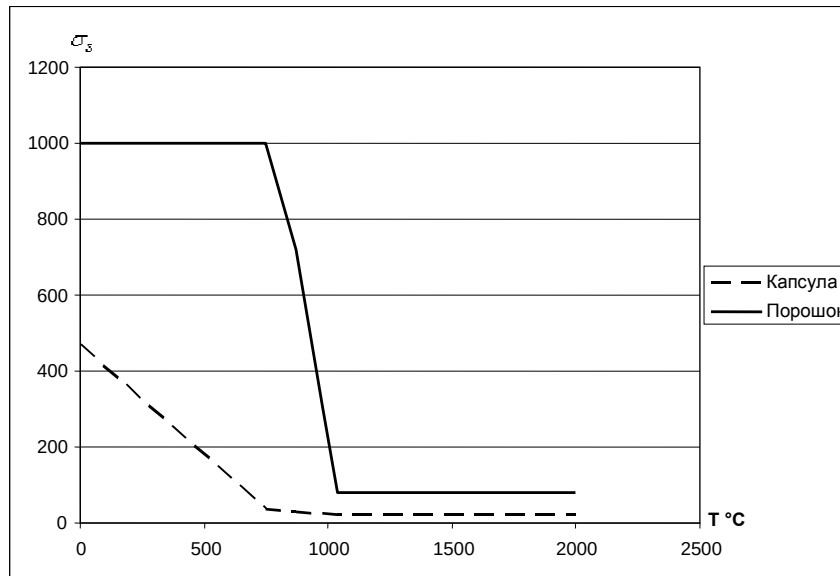


Рис.2. График изменения предела текучести капсулы и порошкового материала (МПа).

Значения экспериментальных функций f_1 и f_2 приведены в таблице 1.

Таблица 1.

Экспериментальные функции f_1 и f_2

Плотность ρ	f_1	f_2
0,63	0,0036	0,054
0,656	0,0071	0,093
0,701	0,12	0,124
0,8	0,47	0,305
0,88	0,66	0,48
0,982	0,86	1,221
0,995	0,95	3

Результаты расчета представлены на рис.3.

В приведенном случае усадки (отношение начальных размеров к конечным) по радиусу и по высоте получились равными соответственно 1,154 и 1,115. В случае однородного температурного поля усадки были бы равны. Разница в 4% обусловлена влиянием нестационарного неоднородного температурного поля. Это влияние сказалось в

том, что на начальном этапе процесса деформировался слой, прилегающий к границе, и фронт уплотнения распространялся перпендикулярно границе капсулы.

Отметим так же появление менисков на границе. Обычно появление менисков является следствием влияния капсулы на процесс деформации.

Данный расчет показывает, что уплотнившийся на начальном этапе процесса порошковый слой, начинает вести себя по отношению к еще недеформированному материалу, так же как и капсула.

Проведено сравнение результатов расчета с экспериментальными данными, полученными при изготовлении конкретного образца [4]. Параметры процесса и свойства материалы были те же, что и представленные ранее.

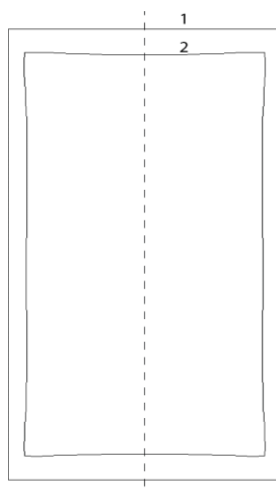


Рис.3. Исходная геометрия (1) и результаты расчета (2).

На рис.4-7 приводятся соответствующие чертежи половины продольного сечения трубы. Соответствующие размеры указаны в метрах.

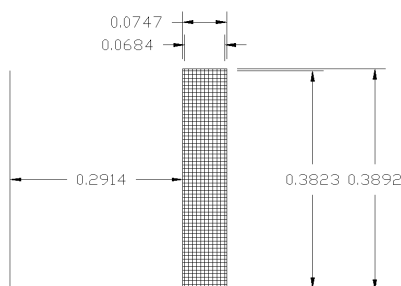


Рис.4. Исходная геометрия.

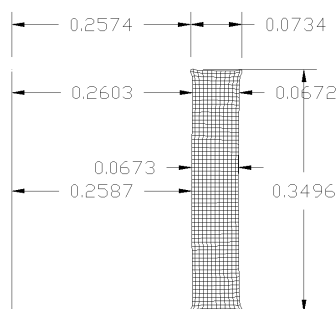


Рис.5. Результаты расчета без учета неоднородности температурного поля.

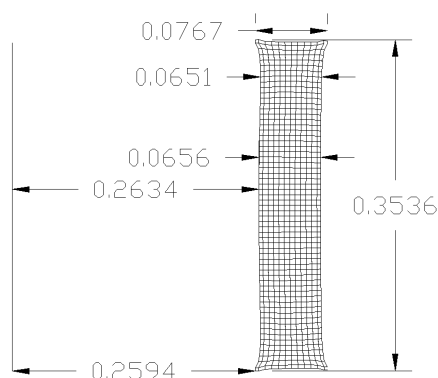


Рис.6. Результаты расчета с учетом неоднородности температурного поля.

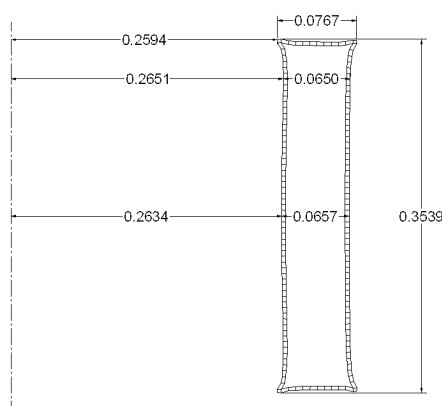


Рис.7. Экспериментальные данные.

Из приведенных рисунков видно, что моделирование процесса ГИП с учетом влияния существенной зависимости коэффициента теплопроводности от плотности, а предела текучести от температуры, позволяет осуществить гораздо более точный расчет формы конечного изделия. Причина существенного улучшения точности вызвана тем, что проведенный расчет выявил одномерный характер деформации на начальном этапе процесса

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный анализ показывает, что для тел, геометрические размеры которых существенно различны в разных направлениях, учет влияния неоднородного нестационарного температурного поля существенно увеличивает точность расчетов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Дрянов Б.А., Самаров В.Н. Уплотнение порошкового материала в неоднородном температурном поле. «Порошковая металлургия», №3, т.25, 1989.
2. Bochkov A.V., Kozyrev Y.M., Ponomarev A.V. Modeling Process of Hot Isostatic Pressing with Nonstationary Temperature Field. - Manufacturing Science and Technology 2(2): 45-50, 2014.
3. Бочков А.В., Головешкин В.А., Пирумов А.Р., Пономарев А.В., Самаров В.Н. Особенности влияния неоднородного нестационарного температурного поля на процесс горячего изостатического прессования труб. Фундаментальные и прикладные проблемы техники и технологии. Научно - технический журнал Орел ГТУ, № 6 (284), 2010, с. 3-9.

4. Бочков А.В., Головешкин В.А., Козырев Ю.М., Пономарев А.В., Самаров В.Н. Особенности процесса уплотнения порошковых материалов в неоднородном нестационарном температурном поле. Механика композиционных материалов и конструкций. - Т.11. - №3. - 2011. - С. 401-410.
5. Друянов Б.А. Прикладная теория пластичности пористых тел. - М.: Машиностроение, 1989, 168 с.
6. Грин Р.Дж. Теория пластичности пористых тел. - 1 сб. переводов. «Механика», 1973, №4, с. 109-120.

Проблемы горения и детонации сложных сред

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПЛАМЁН ПРЕДВАРИТЕЛЬНО ПЕРЕМЕШАННЫХ ГАЗОВ В СТАТИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ В ЦИЛИНДРИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ

Набоко И.М.¹, Рубцов Н.М.², Сеплярский Б.С.², Черныш В.И.², Цветков Г.И.²

¹ФГБУН Объединенный институт высоких температур РАН, г. Москва, Россия

²ФГБУН Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения РАН, г.Черноголовка, Россия

РЕЗЮМЕ

Установление закономерностей взаимодействия фронтов пламён с другом при инициировании горения горючей смеси одновременно включаемыми несколькими источниками малой энергии на примере горения смесей водорода и углеводородов с воздухом и кислородом.

1. НОВЫЕ НАУЧНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ, ПОЛУЧЕННЫЕ В 2014 г

Взаимодействие пламён, распространяющихся навстречу друг другу, слабо изучено, данные, имеющиеся в литературе, носят фрагментарный характер. Отметим, что малые лабораторные установки, подобные используемой в данной работе, дают возможность проводить фундаментальные исследования с минимальными затратами, существенно повышая эффективность работы на больших стендах, таких как «Сфера», «Пирамида», «Конус» ОИВТ РАН, с объемами от 150 л до 900 м³, и на которых возможно получать результаты, близкие к натурным условиям. Совместная работа ИСМАН и ОИВТ РАН преследует эти цели.

Исследования взаимодействия пламён водорода и метана, как распространяющихся навстречу друг другу, так и инициированных одним источником, проведены при общем давлении горючей смеси 50-300 торр в трех кварцевых цилиндрических реакторах: диаметром 140 мм и длиной 700 мм (рис.1 слева) при инициировании с торца реактора, а также одновременном искровом инициировании с обоих концов реактора; диаметром 30 мм и длиной 1 м, диаметром 40 мм и длиной 35 см (рис.2 слева). В экспериментах осуществлена цветная скоростная киносъемка горения с торца и через боковую поверхность реакторов с одновременной регистрацией давления в реакторе и колебаний догорающего газа (рис.1).

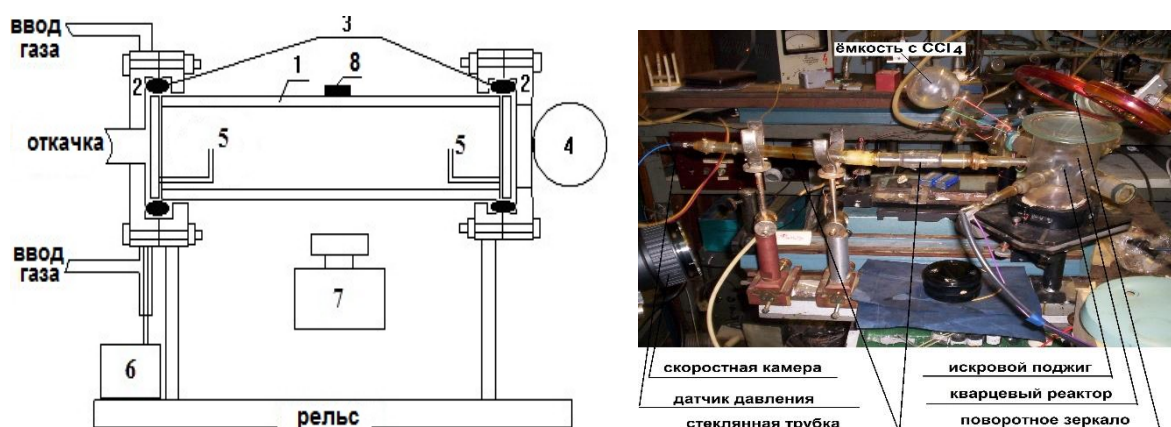


Рис. 1. Экспериментальные установки. Слева: 1 - цилиндрический кварцевый реактор, 2 - шлюз из нержавеющей стали, 3 - прокладка из витона, 4 - дверца, 5 - электроды, 6 - источник питания разряда, 7 - скоростная камера Casio Exilim F1 Pro (60-1200 кадров/сек). Справа - установка для исследования ускорения пламени.

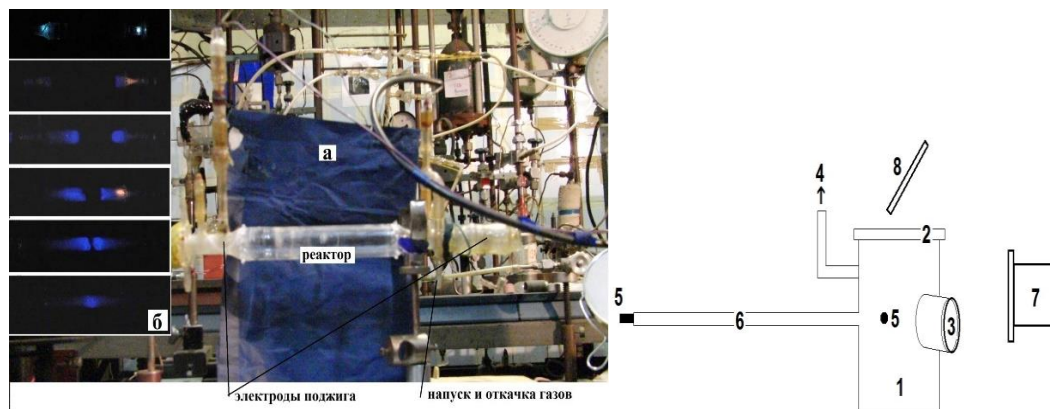


Рис.2. Экспериментальные установки. Слева: а) установка для изучения встречных пламен (реактор диаметром 4 см длиной 35 см), б) киносъемка распространения сферических ФП стехиометрической смеси метан -кислород навстречу друг другу, 100 Торр, 300 кадров/сек. Справа: блок-схема установки для исследования ускорения пламени, фотография которой приведена на рис.1, справа): 1- кварцевый цилиндрический реактор длиной 12 см и диаметром 8 см, 2- съёмная крышка, 3- оптическое окно, 4 - откачка, 5 - пьезодатчик давления, 6 - акустический резонатор, 7 - видеокамера, 8 - поворотное зеркало.

При изучении встречных пламен инициирование проводили у обоих торцов реактора, при этом искровые промежутки включали в цепь разрядника последовательно, что обеспечивало одновременное возникновение разрядов. Регистрацию воспламенения и распространения ФП осуществляли с боковой стороны реактора цветной скоростной кинокамерой Casio Exilim F1 Pro (частота кадров - 60 - 1200 с⁻¹). Полученный видеофайл записывали в память компьютера и затем проводили его покадровую обработку. Между опытами реактор откачивали до давления 10-2 Торр с использованием форвакуумного насоса 2НВР-5Д.

На рис.3(а,б) приведены типичные результаты скоростной киносъемки распространения пламен в реакторе диаметром 30 мм длиной 1 м. Из рис.1 видно, что ФП распространяется с переменной скоростью, как в случае горения водорода, так и при горении метана, поэтому нестационарность распространения ФП не определяется кинетическим механизмом горения, поскольку реакции разные. Из рис.1 видно, что ФП даже останавливается посередине трубы. Видно также, что скоростная киносъемка дает возможность контролировать постоянство скорости ФП в трубе; использование нескольких "одномерных" сенсоров (датчиков давления, ионизационных датчиков) может привести к недостоверным результатам.

Нестационарный характер распространения пламени особенно ярко проявляется на примере встречных пламен (рис.4а,б). На этом рисунке приведены типичные результаты скоростной киносъемки встречных пламен в стехиометрической смеси (метан + O₂) +50% Kr в реакторе диаметром 40 мм а), и метан + O₂ + 50%CO₂ в реакторе диаметром 30 мм б). Из рис.4 видно, что в быстрогорящей смеси а) встречные ФП изменяют свою форму в процессе распространения (рис.4а, кадры 2 и 3. Для смеси, разбавленной CO₂ (рис.4б), распространение каждого из встречных ФП нестационарно, при этом расстояние между ФП зависит от времени не гладко (рис.4в).

Следует обратить внимание также на то, что если в медленно горящей смеси (рис.4б) после встречи ФП свечение в реакторе не регистрируется, то в быстро горящей смеси (рис.4а) свечение в ректоре наблюдается после касания ФП (рис.4а, кадры 5-9). Это означает, что горючая смесь выгорает не полностью, т.е. имеет место стадийность горения в согласии с результатами, полученными нами в 2013 году. Обращает на себя

внимание также спиральный светящийся след догорающего газа (рис.4а, кадр 9) в конце горения. Анализ этого явления требует постановки трехмерной задачи.

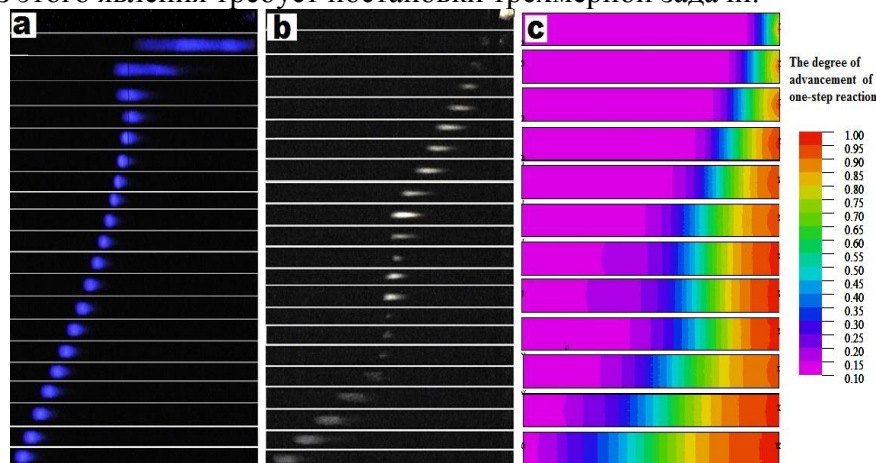


Рис.3. Скоростная киносъемка пламен в кварцевом цилиндрическом реакторе диаметром 30 мм длиной 1 м. а - 50%(33% CH_4 + 67% O_2)+50% CO_2 , $P = 200$ Торр, 60 кадров/с; б - 50%(15% H_2 + 85% O_2)+45% CO_2 + 5% CCl_4 , $P = 200$ Торр, 60 кадров/с; с - расчет с использованием системы уравнений Навье Стокса для сжимаемой реагирующей среды в приближении малого числа Маха с использованием одной активированной реакции.

Следует обратить внимание также на то, что если в медленно горящей смеси (рис.4б) после встречи ФП свечение в реакторе не регистрируется, то в быстро горящей смеси (рис.4а) свечение в реакторе наблюдается после касания ФП (рис.4а, кадры 5-9). Это означает, что горючая смесь выгорает не полностью, т.е. имеет место стадийность горения в согласии с результатами, полученными нами в 2013 году. Обращает на себя внимание также спиральный светящийся след догорающего газа (рис.4а, кадр 9) в конце горения. Анализ этого явления требует постановки трехмерной задачи.

В реакторе диаметром 140 мм нестационарность горения выражается только в возникновении инверсных фронтов встречных пламен (рис. 5 а,б). После встречи пламен свечение в реакторе не наблюдается. Как обнаружено нами (рис.5), фронты пламени при встречном распространении демонстрируют инверсный характер поочередно: инверсный фронт одного из встречных пламен становится плоским, в то время как противоположный плоский фронт пламени становится инверсным. Отметим, что оба эксперимента, представленные на рис.5, были выполнены при тех же самых условиях, однако динамика развития инверсии фронтов пламени различна. Нет возможности воспроизвести динамику возникновения и эволюции инверсии встречных пламен в идентичных экспериментальных условиях, хотя время встречи пламен остается почти тем же самым. Это должно быть принято во внимание при численных расчётах распространения встречных пламен. Кроме того, в реакторе диаметром 140 мм после ФП формируется светящийся диск (особенно хорошо видимый с правой стороны кадра, рис.4а, кадры 33-45), отстающий от ФП. Возможно, он связан с возникновением второго фронта "горячего" пламени в активированной "голубым" пламенем среде. Установление причин возникновения этого светящегося диска требует дальнейших исследований.

Было показано, что распространение встречных ФП окисления метана при одновременном инициировании у противоположных концов без препятствий, сопровождается тем же самым увеличением давления (саморазогревом, поскольку при окислении метана число молей не меняется) по сравнению с распространением ФП от одного источника инициирования. Поэтому причина резкого (в 2-3 раза) увеличения саморазогрева при инициировании у обоих концов реактора в присутствии сеточного препятствия, которую мы обнаружили при выполнении Программы 2013 года, заключается в том, что в присутствии препятствия происходит быстрое сгорание

продуктов неполного окисления CH_4 (горячее пламя) по сравнению со сгоранием в отсутствие препятствий, где только первый комплекс реакций горения ($\text{CH}_4 \rightarrow \text{CO}$) имеет место.

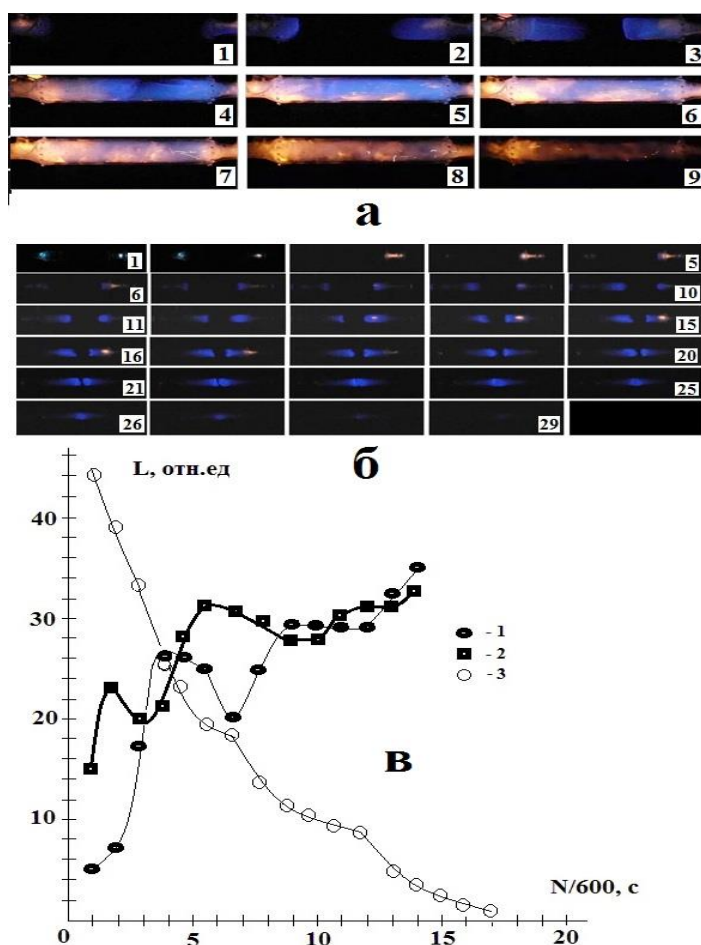


Рис.4. Скоростная киносъемка распространения встречных пламен в смеси а) 50%(33% CH_4 + 67% O_2)+50% Kr, $P=95$ Торр, 600 кадров/с при одновременном инициировании искрой с обоих концов реактора диаметром 40 мм; б) 50%(33% CH_4 + 67% O_2)+50% CO_2 , $P=200$ Торр, 60 кадров/с при одновременном инициировании искрой с обоих концов реактора диаметром 30 мм. в) Зависимость от времени (данные Рис.4б) 1 - расстояния левого фронта пламени от левой стенки реактора; 2 - расстояния правого фронта пламени от правой стенки реактора; 3 - расстояние между фронтами пламен.

Для проверки этого были выполнены следующие опыты. Как известно, в противоположность окислению углеводородов, механизм окисления H_2 содержит только один комплекс реакций. Эксперименты были выполнены в реакторе из нержавеющей стали. На рис.6 представлены результаты скоростной съёмки встречных ФП а) и единственного ФП б) в смеси 4% CCl_4 + 12% H_2 + 84% воздуха при 1 атм при одновременном инициировании искрой а) и единственном инициировании б) у боковой поверхности реактора 4. Кривые изменения давления представлены справа. Видно, что величины повышения давления почти равны как для встречных пламен, так и для единственного пламени. Поэтому увеличение саморазогрева при одновременном инициировании с противоположных концов реактора по сравнению с единственным инициированием возможно только в двухстадийной экзотермической реакции горения, когда дополнительный источник инициирования (наряду с турбулизатором пламени) обеспечивает реализацию второй более экзотермической стадии.

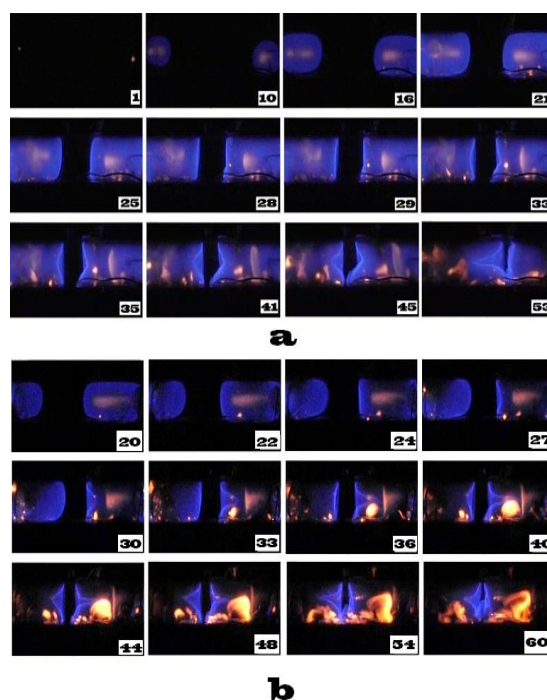


Рис.5. Высокоскоростная киносъемка распространения встречных пламён в смеси 50% (33%CH₄ + 67%O₂) + 50%CO₂, P = 170 Торр, 600 кадров/с, при одновременном инициировании с обоих концов реактора 3 (а, б). Два разных опыта.

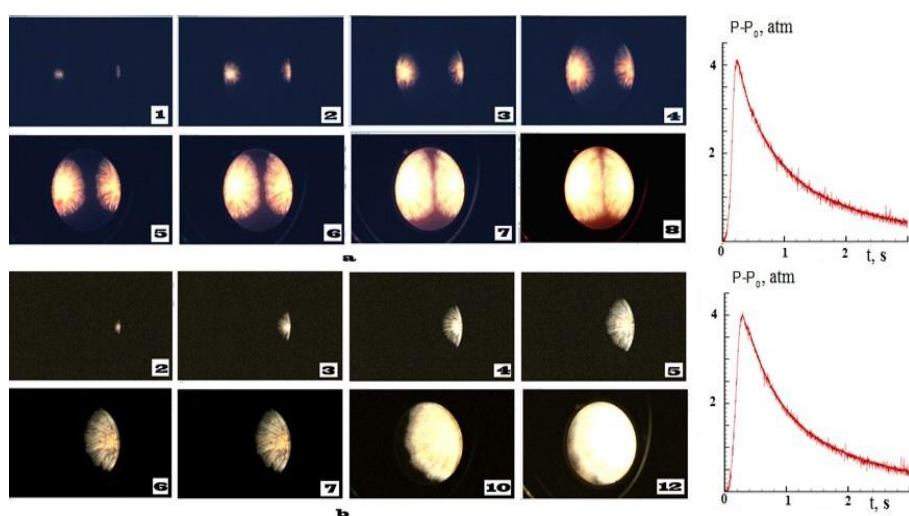


Рис.6. Скоростная киносъемка встречного а) и одностороннего б) распространения пламени в смеси 4% CCl₄ + 12%N₂ + 84% воздух, P = 1 атм, 600 кадров/с, при одновременном искровом инициировании с образующих реактора а) и инициировании одной искрой б) у боковой поверхности реактора 4. Соответствующие кривые изменения давления показаны на Рис.6 справа.

Укажем, что исследование закономерностей ускорения пламени остаётся актуальным. Это относится к влиянию геометрии реактора на ускорение пламени и переход дозвукового горения в сверхзвуковые режимы, что важно при анализе проблем взрывобезопасности для объёмов сложной геометрии и замкнутых помещений. Детонация возникает в горячих точках - областях более низкой плотности с высокой скоростью энерговыделения. В области этого пространственного градиента исходная горючая смесь спонтанно воспламеняется, и реакция распространяется в направлении градиента как ускоряющаяся волна, затем может произойти переход в детонацию. Флуктуации плотности могут быть вызваны акустическими колебаниями, возникающими

при дефлаграционном горении. Этот эффект должен быть ярче выражен вблизи предела детонации, где горючая смесь более всего чувствительна к возмущениям. Было экспериментально исследовано влияние акустического резонатора (резонатора Гельмгольца) на интенсивность горения бедной (15%) смеси водорода с кислородом при общем давлении 200-300 Торр. Состав горючей смеси был выбран вблизи нижнего концентрационного предела детонации (13-15% H_2 в кислороде), что позволяет допустить возможность ускорения горения. Экспериментальная установка представлена на рис.1.2 справа. Воспламенение инициировали в центре реактора, для визуализации водородного пламени в смесь добавляли 2.5% четыреххлористого углерода (CCl_4).

Было показано, что при центральном инициировании в реакторе без резонатора при общем давлении 300 Торр распространяется сферический фронт пламени, который касается стенок реактора и затем затухает. В присутствии акустического резонатора при 250 Торр после инициирования в реакторе распространяется сферический фронт, при этом в резонаторе появляется волна горения и осциллирует в нём, пока горение в реакторе не закончится (рис.7а). При увеличении полного давления горючей смеси до 300 Торр в присутствии акустического резонатора (рис.7б) сферический фронт пламени распространяется в реакторе с той же самой скоростью как в предыдущих экспериментах. На рис.7б на 10-ом кадре в нижней части кварцевого реактора наблюдаются два ярких вертикальных следа, один из которых еще заметен на 11-ом кадре. Эксперимент сопровождается резким звуком, при этом реактор разрушается. Действительно, как видно из рис.7б, после 13-ого кадра изображение кварцевого реактора на видеосъемке исчезает (сравните с рис.7а, в котором реактор можно видеть в течение всего времени видеосъемки). Этот результат воспроизводим. Таким образом, в условиях рис.7б происходит интенсификация горения, вызванная акустическими колебаниями пламени в резонаторе.

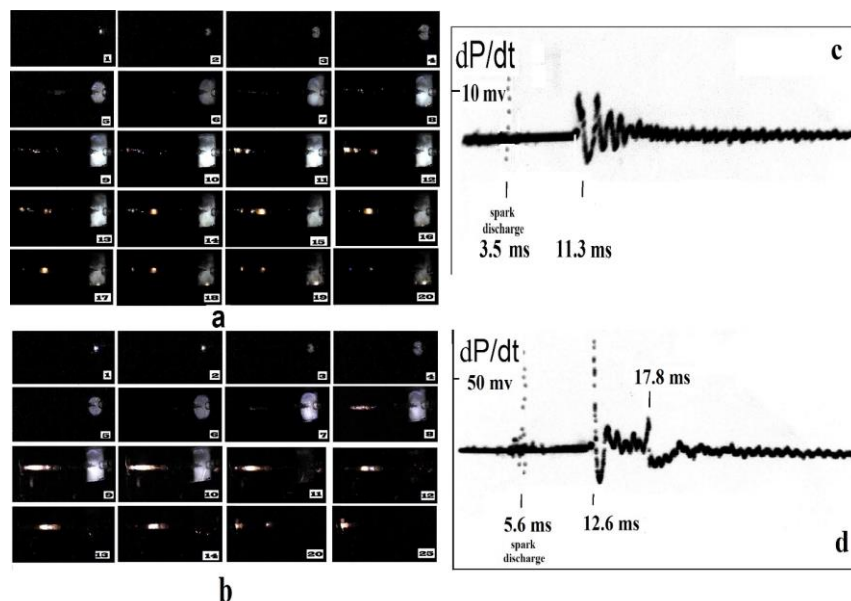


Рис.7. а) Последовательность видеок кадров при инициированном горении 15% $H_2 + O_2$ в присутствии акустического резонатора. Общее давление 250 Торр. 1200 кадров в секунду, начальная температура 300К; б) Последовательность видеок кадров при инициированном горении 15% $H_2 + O_2$ в присутствии акустического резонатора. 300 Торр; в) осциллограмма зависимости скорости изменения давления от времени. Общее давление 250 Торр; д) осциллограмма зависимости скорости изменения давления от времени. 300 Торр.

Осциллограммы зависимости скорости изменения общего давления от времени приведены на рис.7с,д. Как видно из рис.7с,д, максимальное значение производной давления при интенсификации горения (рис.7с) приблизительно в 7 раз больше, чем при

дефлаграционном горении (рис.7d). Поскольку различие между процессами а) и б) устанавливается по разрушительной способности волны горения, можно строго говорить только о возникновении ускорения пламени при центральном инициировании горения в присутствии акустического резонатора; без резонатора или при более низком давлении наблюдается только дефлаграция. Следует отметить, что в дефлаграционное горение имеет место и в присутствии акустического резонатора при 300 Торр, но только на определенной стадии взаимодействия сферического фронта пламени с пламенем в акустическом резонаторе происходит интенсификация горения и, возможно, переход в детонационно-подобный режим, приводящий к разрушению реактора.

Получен важный предварительный результат, требующий дальнейшего исследования. При использовании одиночного препятствия в середине реактора, приведенного на рис.1 слева и одиночном инициировании установлено, что фронт пламени после одиночного препятствия возникает не сразу, а на некотором расстоянии (достигающем в наших условиях 30 см) от поверхности препятствия. Использование сеточной сферы как препятствия приводит к увеличению этого расстояния по сравнению с круглым отверстием.

2. ОРИГИНАЛЬНОСТЬ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ИЛИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ РАЗРАБОТОК

Оригинальным и наиболее значимыми являются следующие результаты.

1. Экспериментально показано, что акустический резонатор (резонатор Гельмгольца), соединённый с цилиндрическим реактором, может обеспечить разрушение кварцевого реактора при инициировании искровым разрядом дефлаграционного горения в бедной (15%) смеси водорода с кислородом, что указывает на возможность перехода дефлаграционного горения в детонационно-подобный режим даже вблизи нижнего концентрационного предела детонации, а также указывает на возможную природу большого разброса экспериментальных значений нижнего концентрационного предела детонации (13-15% при 1 атм).

2. На примере реакций окисления метана и водорода показано, что увеличение саморазогрева при одновременном инициировании у противоположных торцов реактора по сравнению с инициированием у одного торца возможно только в двустадийной экзотермической реакции горения (окисление метана), когда дополнительный источник инициирования (наряду с турбулизатором пламени) обеспечивает реализацию второй, более экзотермической стадии.

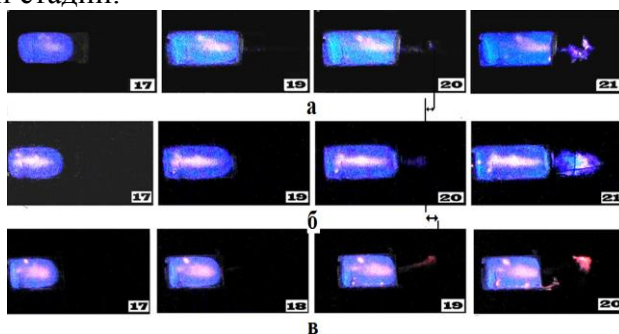


Рис.8. а - скоростная съемка распространения ФП через круглое отверстие 2.5 см в диаметре в плоском препятствии 14 см в диаметре, б - скоростная съемка распространения ФП через круглое отверстие 4 см в диаметре в плоском препятствии 14 см в диаметре, в - скоростная съемка распространения ФП через сеточную сферу диаметром 4 см (диаметр проволоки 0.1 мм, размер ячейки 0.15 мм²) вставленную в плоское препятствие диаметром 14 см), 15.4% CH₄ + 30.8% O₂ + 46% CO₂ + 7.8% Kr при начальном давлении 170 Торр. Номер кадра

отсчитывается от момента инициирования. Указаны расстояния возникновения фронта пламени после препятствия.

3. Получен важный предварительный результат, требующий дальнейшего исследования. При использовании одиночного препятствия в середине реактора и инициировании у одного торца установлено, что фронт пламени после одиночного препятствия возникает не сразу, а на некотором расстоянии (достигающем в наших условиях 30 см) от поверхности препятствия (рис.8). Использование сеточной сферы как препятствия приводит к увеличению этого расстояния по сравнению с круглым отверстием.

4. Опубликовано книга “Режимы газового горения” под ред. Н.М.Рубцова (ИСМАН), В.А.Петухова (ОИВТАН), посвященная памяти Идеи Михайловны Набоко. В ней рассмотрены вопросы, которые авторский коллектив обсуждал совместно с И.М.Набоко и представлены материалы, опубликованные в соавторстве с И.М.Набоко.

3. ВОЗМОЖНОЕ ПРАКТИЧЕСКОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Полученные новые результаты по закономерностям распространения ФП важны при решении вопросов:

- о возможности эффективнее сжигать углеводородное топливо, обеспечивая полноту его сгорания;
- о предотвращении аварийных и нештатных ситуаций при обеспечении взрывобезопасности объемов сложной геометрии (конфайнментов АЭС, заправочных станций автомобилей с водородными и гибридными двигателями, шахт и помещений, подсоединенных к газовым магистралям, и.т.д.).

Обнаруженное различие в поведении встречных пламен водорода и метана указывает на то, что, что активные центры горения водорода и метана, определяющие распространение пламени, имеют разную химическую природу в согласии с результатами, полученными при выполнении Программы 2013 года. Учёт этого необходим при разработке методов химического ингибирования горения, которые должны различаться для H_2 и углеводородов.

Полученные результаты непосредственно указывают на необходимость дальнейших исследований в области предварительно полученных результатов.

ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗВИТИЯ ГАЗОВЫХ СТРУЙ ПРИ АКУСТИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Кривокорытов М.С.^{1,2}, Голуб В.В.¹

¹ ФГБУН Объединенный институт высоких температур РАН, г.Москва, Россия

² Московский Физико-Технический Институт (НИУ), г.Долгопрудный, Россия

РЕЗЮМЕ

В эксперименте исследованы струи реагирующего (метан) и нереагирующих (гелий, углекислый газ) газов. Струи формировались в длинных (более ста калибров внутреннего диаметра) трубках. Визуализация струй проводилась теневым методом на базе теневого прибора ИАБ-45. Обнаружено, что с ростом значения числа Рейнольдса длина ламинарно-турбулентного перехода экспоненциально уменьшается. Обнаружено, что в ряде случаев при акустическом воздействии на газовую струю наблюдается бифуркация струи. Получены зависимости угла раскрытия струи и расстояния от открытого конца трубки до места деления струи от частоты акустического воздействия и уровня звукового давления.

ВВЕДЕНИЕ

Главной научной и технической задачей связанной с использованием природного газа является разработка методов повышения эффективности горения за счет снижения выхода выхлопных газов и увеличения полноты сгорания топлива. Горение начинается с межмолекулярной экзотермической реакции, но управляют его поддержанием и развитием физические процессы, протекающие на макроуровне. Существует два вида горения газов: диффузионные пламена и пламена предварительно перемешанной смеси. Главным преимуществом использования предварительно перемешанных смесей является возможность лучшего управления процессом горения. Перемешанная до молекулярного уровня смесь горючего газа с окислителем обеспечивает практически постоянную скорость горения, нужную температуру, заданный химический состав, что весьма важно в теплотехнической практике и при решении экологических задач, в частности, для сокращения выбросов оксидов азота, бензапирена, сажи. Однако приготовление, и тем более хранение предварительно перемешанных смесей опасно, а в устройствах с такими пламенами всегда существует опасность встречного проскока пламени в объем, занятый такой смесью, ее воспламенением, взрывом. Поэтому на практике более широкое распространение получило горение предварительно не смешанных смесей, диффузионное горение. Лимитирующим процессом, определяющим скорость горения топлива, является диффузия (в более общем случае, тепломассообмен), обеспечивающая взаимный перенос горючего и окислителя и получение концентрации смеси, при которой происходит ее воспламенение и горение. Для диффузионных пламен повысить эффективность горения можно за счет интенсификации смешения горючего с окислителем. [1,2] Добиться этого можно за счет турбулизации потоков горючего и окислителя. Настоящая работа посвящена исследованию акустического воздействия на струи реагирующих и нереагирующих газов, с целью поиска явлений и эффектов, которые могут быть использованы для повышения эффективности горения.

1. ИССЛЕДОВАНИЕ ЛАМИНАРНО-ТУРБУЛЕНТНОГО ПЕРЕХОДА В ГАЗОВЫХ СТРУЯХ МИЛЛИМЕТРОВОГО МАСШТАБА

В эксперименте моделировались струи реагирующего (метан) и нереагирующих (гелий, углекислый газ) газов. Струи формировались в длинных (более ста калибров внутреннего диаметра) трубках с внутренним диаметром 0.52, 0.82, 1.00, 1.13

и 1.58 мм. Значение числа Рейнольдса, вычисленное по средней по сечению скорости течения и внутреннему диаметру трубок, менялось в пределах от 100 до 8000, позволяя тем самым моделировать как ламинарные, так и турбулентные струи. Визуализация пламен и струй проводилась теневым методом на базе теневого прибора ИАБ-451. В качестве регистрирующего устройства использовалась камера ВИДЕОСКАН-2-285, экспозиция кадров составляла 100 мкс.

На рис.1. представлены теневые фотографии струй гелия при различных средних по сечению скоростях струи. Начальный диаметр струи 1.00 мм. Как видно из рис.1. характер течения сильно зависит от скорости струи, а значит и от значения числа Рейнольдса (здесь ρ - плотность гелия, η - его динамическая вязкость, V - средняя по сечению трубки скорость, d - диаметр трубки). Вплоть до $Re = 630$ наблюдается ламинарное течение. Начиная с $Re = 760$ струя становится турбулентной, причем переход к турбулентности наблюдается на некотором расстоянии от начала струи (сечение А-А на рис.1). На участке струи от ее начала до сечения А-А сохраняется ламинарное течение, длина этого участка достигает значений $L/d = 110$, где d - начальный диаметр струи. При значениях числа Рейнольдса $Re > 760$ (турбулентные струи) отклонения значения L/d не превышают 3, что меньше погрешности измерений L/d , которая составляет 5, поэтому положение перехода к турбулентности (сечения А-А) можно считать квазистационарным. В переходном режиме течения, при $Re = 630 - 760$ положение перехода к турбулентности ведет себя нестационарно (рис.2).

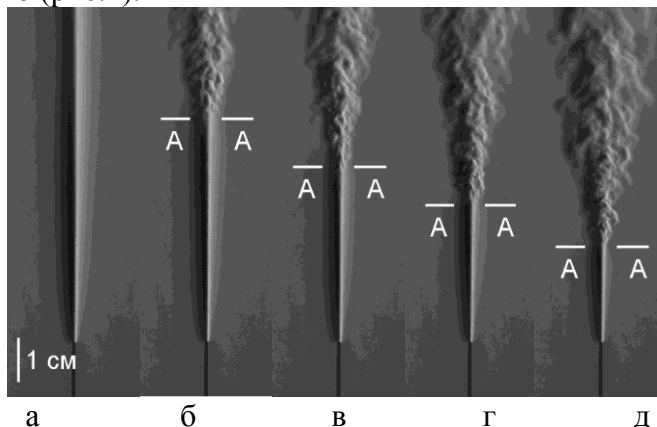


Рис.1. Теневые фотографии струй гелия при различных скоростях струи: а) $V = 70$ м/с, $Re = 630$; б) $V = 85$ м/с, $Re = 760$; в) $V = 92$ м/с, $Re = 820$; г) $V = 100$ м/с, $Re = 900$; д) $V = 115$ м/с, $Re = 1030$. Начальный диаметр струи $d = 1$ мм.

На рис.3. схематически изображены области, соответствующие различным режимам течения, а также зависимость длины ламинарного участка струи от значения числа Рейнольдса.



Рис.2. Теневые фотографии струи гелия ($V = 79$ м/с, $Re = 710$) в различные моменты времени. Начальный диаметр струи $d = 1$ мм.

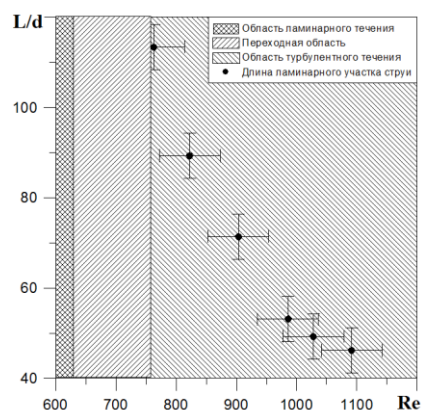


Рис.3. Зависимость длины ламинарного участка струи от значения числа Рейнольдса, гелиевая струя с начальным диаметром 1 мм.

Эксперименты, проведенные со струями различного начального диаметра (рис.4), показали, что при одинаковом значении числа Рейнольдса длина ламинарного участка струи зависит от ее диаметра. Чем меньше начальный диаметр струи, тем длиннее ламинарный участок струи, при одном и том же значении числа Рейнольдса (рис.5(а)).

Эксперименты, проведенные со струями различных газов, показали, что при увеличении плотности газа струи и уменьшении его динамической вязкости значение числа Рейнольдса, при котором происходит переход к турбулентному режиму течения, возрастает. Так для гелия это значение составляет 760, для метана 1600, а для углекислого газа 2200, при начальном диаметре струи 1.00 мм.

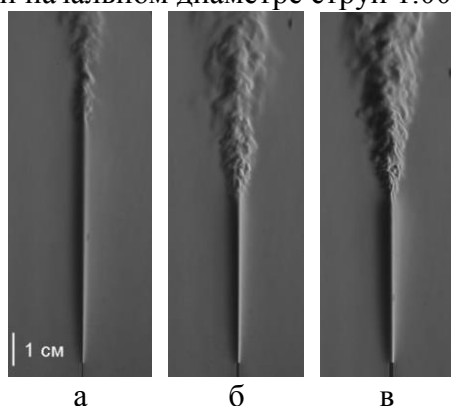


Рис.4. Теневые фотографии струй гелия различного начального диаметра: а) $d = 0.52$ мм, $V = 170$ м/с, $Re = 790$; б) $d = 1.00$ мм, $V = 85$ м/с, $Re = 760$; в) $d = 1.58$ мм, $V = 56$ м/с, $Re = 790$.

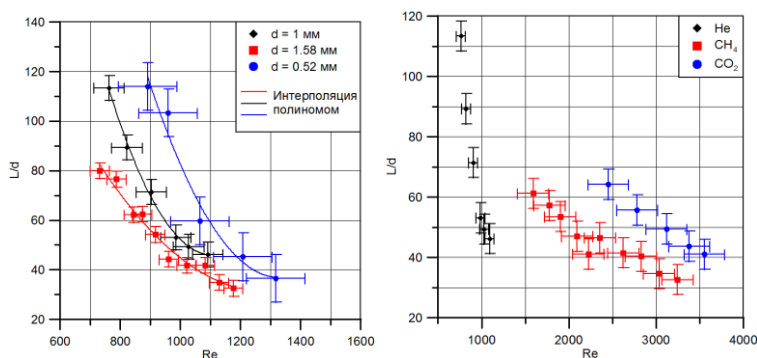


Рис.5. Зависимость длины ламинарного участка струи от значения числа Рейнольдса: а) струи гелия различного начального диаметра; б) струи различных газов, начальный диаметр $d = 1.00$ мм.

2. БИФУРКАЦИЯ ГАЗОВЫХ СТРУЙ ПРИ АКУСТИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Система создания внешнего акустического воздействия состояла из 2-х-канального генератора сигналов произвольной формы Актаком АНР-3122, усилителя и излучателя звука Ibanez SWX20. Во всех экспериментах по исследованию влияния акустического воздействия на струи реагирующих и нереагирующих газов ось трубки была параллельна плоскости излучателя звука, открытый конец трубки располагался напротив центра источника звука, уровень звукового давления 80 дБ. Исследовались струи различного начального диаметра, а именно: 0.52, 0.58, 0.82, 1.00, 1.13 и 1.58 мм, а также разных газов: гелий, углекислый газ, метан. В качестве регистрирующего устройства использовалась камера Cordin 222-16. Как уже отмечалось ранее, в ряде случаев при акустическом воздействии на струю газа можно наблюдать эффект бифуркации. На рис.6 представлены теневые фотографии струи гелия, начальный диаметр струи 1 мм, средняя по сечению скорость струи 66.5 ± 2.8 м/с, что соответствует значению числа Рейнольдса $Re \approx 590$.

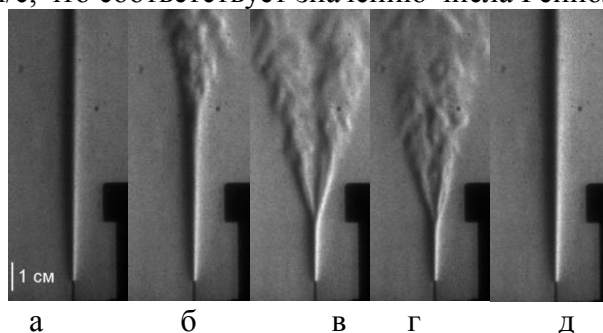


Рис.6. Бифуркация струи (начальный диаметр струи 1 мм, средняя по сечению скорость струи 66.5 ± 2.8 м/с) гелия при внешнем акустическом воздействии: а) 0 Гц; б) 200 Гц; в) 2300 Гц; г) 3200 Гц; д) 4800 Гц.

Как видно из рис.6. поведение газовой струи значительно зависит от внешнего акустического воздействия. При низкой частоте воздействия ламинарная струя (рис.6.(а)) становится турбулентной (рис.6(б)), при увеличении частоты можно наблюдать бифуркацию (деление струи, рис.6(в) и рис.6(г)), при дальнейшем увеличении частоты воздействия струя снова становится ламинарной (рис.6(д)). При этом значение числа Струхала изменяется в пределах $St = 0 - 0.07$.

На рис.7. и рис.8. представлены теневые фотографии струи гелия с начальным диаметром 1 мм и средней по сечению скоростью 42.8 ± 2.0 м/с и 76.1 ± 3.2 м/с соответственно.

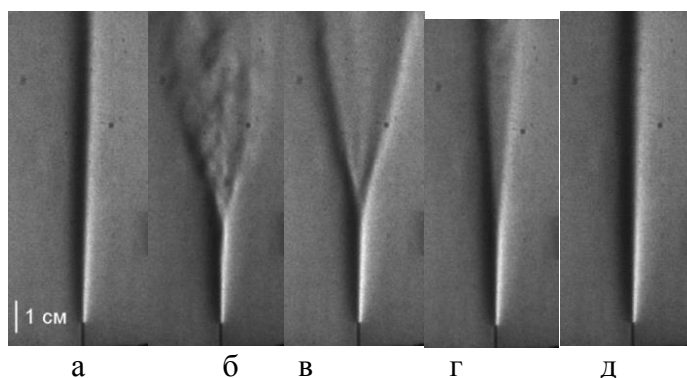


Рис.7. Бифуркация струи (начальный диаметр струи 1 мм, средняя по сечению скорость струи 42.8 ± 2.0 м/с) гелия при внешнем акустическом воздействии: а) 0 Гц; б) 140 Гц; в) 300 Гц; г) 560 Гц; д) 800 Гц

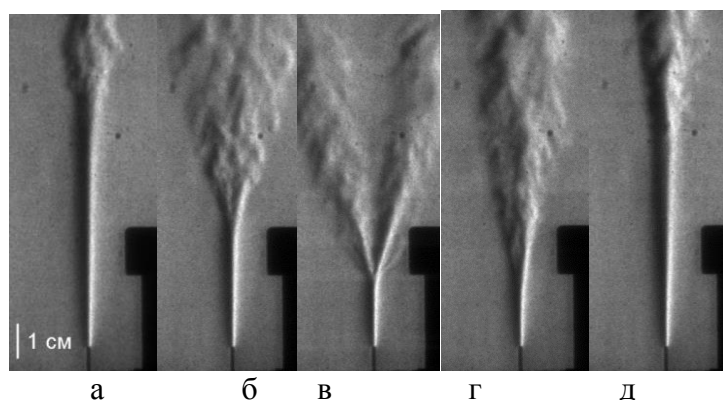


Рис.8. Бифуркация струи (начальный диаметр струи 1 мм, средняя по сечению скорость струи 76.1 ± 3.2 м/с) гелия при внешнем акустическом воздействии: а) 0 Гц; б) 1100 Гц; в) 3100 Гц; г) 6000 Гц; д) 8000 Гц.

Как видно из приведенных выше фотографий гелиевых струй, частота звука, при которой наблюдается эффект зависит от скорости струи. В дальнейших разделах приведено исследование этой зависимости, а также влияния других параметров, таких как диаметр и газ струи.

3. ВЛИЯНИЕ ЧАСТОТЫ ЗВУКА И УРОВНЯ ЗВУКОВОГО ДАВЛЕНИЯ

На рис.9. представлены теневые фотографии струи гелия истекающего в окружающий воздух из трубки с $d = 1.00$ мм и $D = 1.60$ мм. Средняя скорость потока в трубке 65 м/с что соответствует значению числа Рейнольдса 590.

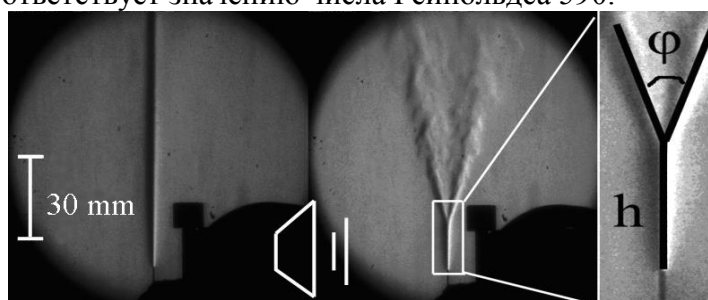


Рис.9. Теневые фотографии струи гелия: слева - в отсутствии звука, справа - под действием звука 1700 Гц, 80 дБ, $\text{Std} = 3.5 \cdot 10^{-2}$.

В работе измерялся угол бифуркации, φ и расстояние от открытого конца трубки до места деления струи, h . На рис.10. представлены результаты таких измерений. Чтобы не перегружать рисунок, погрешность измерений показана отдельно. Линии на рисунке построены методом скользящего среднего с шириной окна 5.

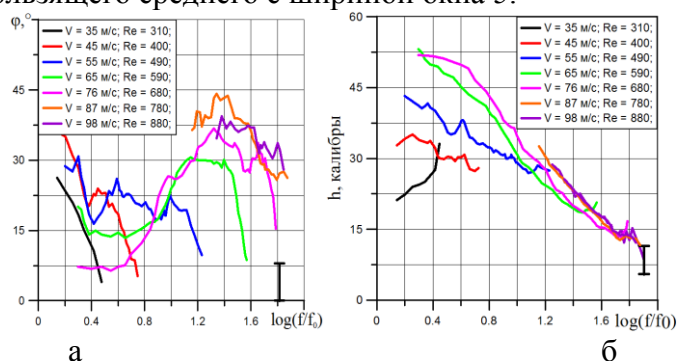


Рис.10. Зависимость угла (а) и высоты (б) бифуркации от частоты внешнего воздействия, $f_0 = 100$ Гц.

Как видно из рис.10. поведение газовой струи значительно зависит от частоты внешнего акустического воздействия. При появлении внешнего воздействия низкой частоты ~ 100 Гц ламинарные (начальная скорость 35 - 65 м/с) струи турбулизуются, наблюдается бифуркация, при увеличении частоты воздействия угол бифуркации уменьшается, а высота растет. В турбулентных струях при внешнем воздействии низкой частоты сокращается длина ламинарно-турбулентного перехода. С увеличением частоты воздействия длина ламинарно-турбулентного перехода уменьшается, начинает отчетливо наблюдаться бифуркация, угол бифуркации также растет вплоть до некоторого значения ($\sim 20-40^\circ$). При дальнейшем увеличении частоты воздействия угол бифуркации остается практически неизменным, высота бифуркации уменьшается. Если и дальше продолжать увеличивать частоту воздействия, то угол бифуркации будет уменьшаться, высота расти, и при некотором значении частоты эффект пропадает.

На рис.11. представлены результаты измерения угла и высоты бифуркации для струи гелия с начальным диаметром 1 мм и скоростью 65 м/с при акустическом воздействии с различным уровнем звукового давления. Чтобы не загружать рисунок, погрешность измерений показана отдельно. Линии на рисунке построены методом скользящего среднего с шириной окна 5.

Как видно из рис.11. угол и высота бифуркации зависят от уровня звукового давления. При увеличении уровня звукового давления угол бифуркации растет, а высота уменьшается. Эти изменения становятся заметными при увеличении уровня звукового давления на 30 дБ.

4. ВЛИЯНИЕ ГАЗА СТРУИ И ЕЁ ДИАМЕТРА

Как уже говорилось в предыдущих разделах, в ряде случаев при акустическом воздействии на струю газа можно наблюдать эффект бифуркации (рис.12.). Эффект наблюдается при акустическом воздействии определенной частоты и зависит от уровня звукового давления. Относительно частоты эффект обладает пороговыми свойствами - при частотах выше некоторой пороговой эффект не наблюдается. Значение этой пороговой частоты зависит от скорости струи, ее диаметра и газа.

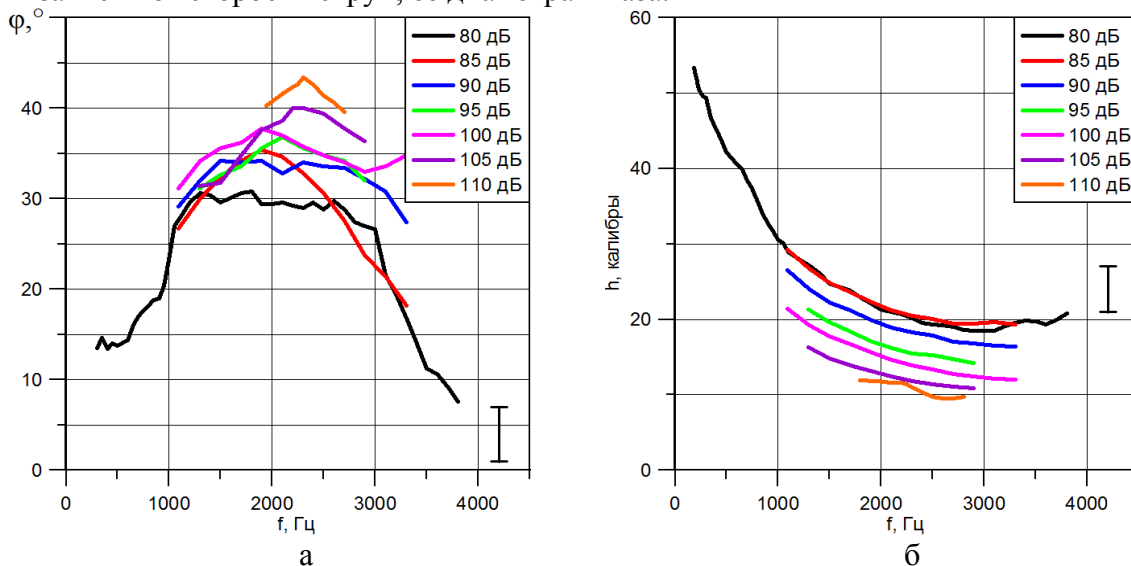


Рис.11. Зависимость угла (а) и высоты (б) бифуркации от частоты акустического воздействия при различных уровнях звукового давления.

На рис.12(а) представлена зависимость пороговой частоты f_b от скорости струи V_0 для различных гелиевых струй, на рис.12(б). представлена зависимость пороговой частоты f_b от скорости струи V_0 для струй разных газов.

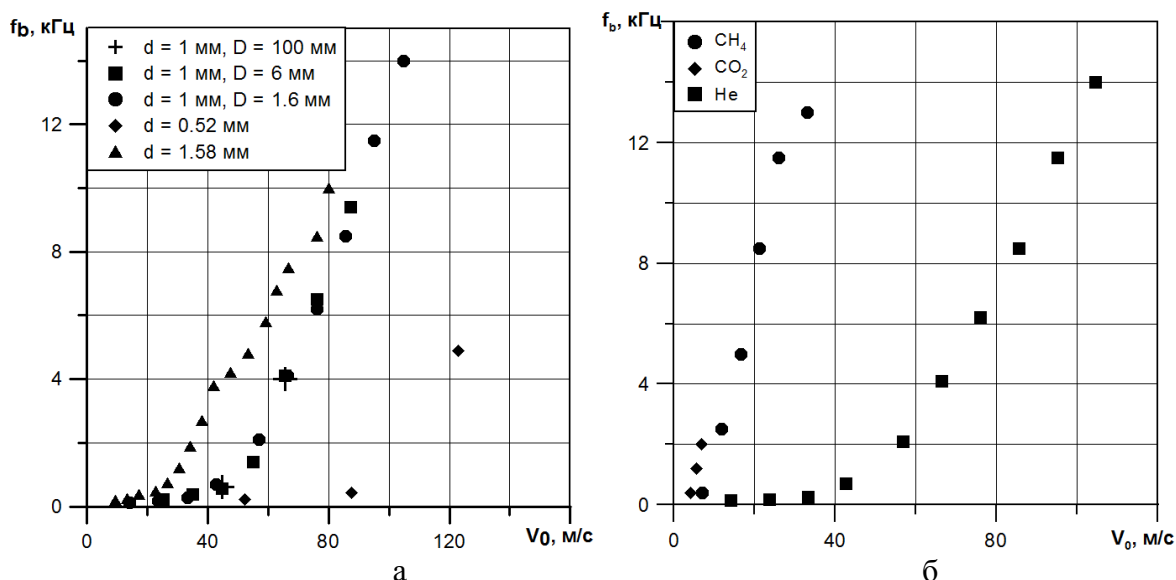


Рис.12. Зависимость пороговой частоты бифуркации от скорости струи: а) гелиевые струи различной геометрии; б) струи разных газов, $d = 1$ мм.

Как видно из рис.12(а) внешний диаметр трубки, в которой формировалась струя (D), не влияет на эффект бифуркации, а именно, значения пороговой частоты при одинаковой скорости струи одинаковы для трубок с различным внешним диаметром. Напротив, внутренний диаметр трубки (начальный диаметр струи) заметно влияет на зависимость пороговой частоты бифуркации от скорости струи. При одной и той же скорости струи значение пороговой частоты больше для струи большего начального диаметра. На рис.12 (б) приведены зависимости пороговой частоты бифуркации от скорости струи для струй разных газов с начальным диаметром 1.00 мм. При одной и той же скорости струи значение пороговой частоты больше для струи более плотного газа.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Получены зависимости длины ламинарно-турбулентного перехода в струях различного диаметра (0.52, 1.00 и 1.58 мм), а также разных газов (метан, гелий, углекислый газ) от значения числа Рейнольдса. Обнаружено, что с ростом значения числа Рейнольдса длина ламинарно-турбулентного перехода экспоненциально уменьшается.

Обнаружено, что в ряде случаев при акустическом воздействии на газовую струю наблюдается бифуркация (на некотором расстоянии от начала струи турбулизуется и приобретает Υ форму). Получены зависимости угла раскрытия струи и расстояния от открытого конца трубки до места деления струи от частоты акустического воздействия и уровня звукового давления для гелиевых струй различной скорости.

Показано, что бифуркация газовой струи при акустическом воздействии наблюдается вплоть до некоторой пороговой частоты, при воздействии с большей частотой эффект не наблюдается. Показано, что пороговая частота зависит от скорости струи, ее диаметра, а также газа.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ 13-08-01227 и Президиума РАН «Горение и взрыв».

ЛИТЕРАТУРА

1. *Кривокорытов М.С., Голуб В.В., Володин В.В.*, «Влияние акустических колебаний на диффузионное горение метана», Письма в ЖТФ, том 38, вып. 10, с. 57 - 63, 2012.
2. *Кривокорытов М.С., Голуб В.В.*, «Акустическое управление горением газовых топлив», приложение к журналу Физическое образование в вузах, Том 18, номер 1, с.42, 2012.

ФОРКАМЕРНОЕ ИНИЦИИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИИ В УЗКИХ КАНАЛАХ

Головастов С.В., Бивол Г.Ю., Голуб В.В.

ФГБУН Объединенный институт высоких температур РАН, г.Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

Экспериментально исследован процесс перехода горения в детонацию в канале субкритического диаметра в пропано-бутано-кислородных и ацетилено-кислородных смесях. Инициирование детонации осуществлялось за счет сжигания смеси в форкамере, пристыкованной к торцу канала диаметром 3 мм. Определены размеры форкамеры и состав топливной смеси, при которых осуществляется либо переход горения в детонацию в канале, либо прямое инициирование на входе в узкий канал. Проведена классификация воздействия форкамерного способа инициирования на эволюцию фронта пламени в узком канале.

ВВЕДЕНИЕ

Среди известных способов инициирования детонации в газовых средах можно выделить два предельных случая: прямое инициирование и переход горения в детонацию. При прямом инициировании плотность выделяемой энергии превышает плотность энергии, выделяемую на фронте детонационной волны. Детонация формируется практически сразу же после выделения энергии [1]. Параметры, характеризующие прямое инициирование детонации и распространение уже сформированной волны детонации, приведены в электронной базе данных [2] за период 1956-1999 гг. При переходе горения в детонацию осуществляется постепенное ускорение фронта пламени до формирования детонации [3]. Преддетонационное расстояние при этом составляет десятки и сотни калибров канала. Общий механизм ускорения фронта пламени приведен, например, в [4]. Однако, ускорение фронта пламени во многом зависит от наличия препятствий, спиралей, шероховатостей, турбулентности, акустического поля и др.

Отличительная особенность форкамеры заключается в том, что, что в качестве источника инициирования детонации используется энергия, выделяющаяся при сгорании определенного конечного объема собственного газа. Так, например, механизм ускорения пламени на ранней стадии горения в трубах был экспериментально изучен для медленных пропано-воздушных смесей в [5], аналитически и численно в [6], в пределе несжимаемого потока для быстрого горения - в [7]. В [8] проведены эксперименты по прямому инициированию детонации с помощью струи горячих продуктов реакции, возникающих при взрыве при постоянном объеме.

Форкамеры больших размеров, превышающих диаметр канала, используются как средство создания заведомо стационарной детонации для исследований распространения детонации внутри присоединенного к ним канала [9]. Эти исследования определили критический размер канала, в котором детонация может успешно распространяться. Манжалей [10] исследовал околоскритическое распространение детонационных волн при пониженных давлениях в капиллярных трубках с внутренним диаметром 1 мм с использованием ацетилено - кислородных смесей. Сценариев распространения горения было несколько: низкоскоростная детонация, галолирующая детонация и высокоскоростная детонация. Камеры большего диаметра используются с целью дополнительного ускорения фронта пламени [11]. В работе [12] форкамера использовалась для генерации дополнительной струи продуктов горения, взаимодействующей с фронтом пламени. В работе [13] форкамера использовалась как секция меньшего диаметра для генерирования детонационной волны.

При изучении форкамерного инициирования детонации в узких каналах необходимо принимать во внимание не только поведение горения внутри форкамеры,

но и особенности распространения фронта пламени вдоль оси узкого канала. Существует множество работ, отображающих существенно отличие динамики горения в узких и широких каналах. Распространение пламени, особенно переход горения в детонацию в гладких трубах или каналах с характерными размерами, близкими к ширине детонационной ячейки, были предметом научного интереса в последние несколько лет [14].

О том, насколько важно принимать во внимание временную протяженность источника во времени, подробно описано в работе [15], где приведена зависимость энергии прямого инициирования детонации от длительности выделения энергии. Особое внимание следует обратить на работу [16], в которой изучен переход ламинарного пламени из форкамеры в узкий канал. Охлаждение продуктов сгорания в форкамере способно даже затормозить движение фронт пламени в канале.

Целью работы являлось определение условий формирования детонации с помощью форкамеры в присоединенном к ней канале, в том числе определение характеристик указанного источника инициирования детонации. Также целью работы было определение критических энергий инициирования детонации при форкамерном инициировании.

1. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА

Схема экспериментальной установки представлена на рисунке 1. Она состояла из форкамеры (PC), присоединенного к ней узкого открытого канала, системы откачки (2), системы наполнения смесью (3), измерительного манометра (1), системы воспламенения с энергией искры 0.1Дж (SG) и измерительной системы. Форкамера и канал изготовлены из латуни. Внутренний диаметр канала составлял 3 мм, толщина стенок 7-8 мм. Длина канала равнялась 500 мм, т.е. 166 калибров. Диаметр форкамеры мог задаваться равным 10, 16 или 20 мм. Минимальная толщина стенок форкамеры составляла 8 мм, максимальная - 15 мм. Длина форкамеры варьировалась в диапазоне 8-34 мм. Для того, чтобы избежать влияния истечения продуктов сгорания из топливной магистрали на динамику горения в узком канале, выводы топливной магистрали и вакуумного насоса располагались у открытого конца канала.

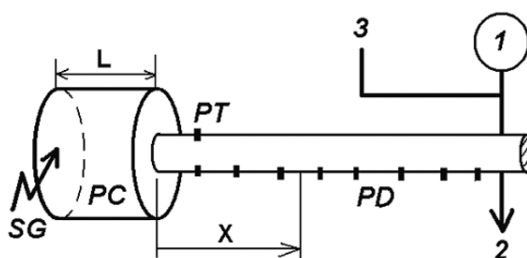


Рис.1. Схема экспериментального стенда. PC - форкамера, SG - искровой разрядник, PT - датчик давления, PD - фотодиоды, X - расстояние от начала канала, L - длина форкамеры, 1 - манометр, 2 - вакуумный насос, 3 - газовая смесь.

Детонационная смесь приготавливалась по парциальным давлениям в сосуде объемом 3 л. Перед каждым экспериментом форкамера и канал откачивались до давления 2 кПа. После этого происходило заполнение форкамеры и канала детонационноспособной смесью до избыточного давления, превышающего 1 атм. За 2-3 с. до воспламенения канал открывался, и давление в канале выравнивалось с атмосферным давлением.

Для измерения скорости фронта пламени использовались фотодиоды, установленные вдоль оси канала на боковой поверхности канала. Измерительная система включала 12 фотодиодов ФД-256. Для измерения давления на входе в узкий канал использовался пьезоэлектрический датчик давления РСВ 113.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

2.1. Влияние размеров форкамеры на граничные условия на входе в канал и на эволюцию скорости фронта пламени.

В данной главе приведены осциллограммы давления на входе в канал и эволюции скорости пламени вдоль оси канала для пропано-бутано-кислородной смеси с соотношением $ER=0.9$. При постоянном значении состава смеси изменялись длина и диаметр форкамеры. Среди всех полученных осциллограмм давления и эволюции скорости фронта пламени мы выделили три характерных случая. На рис.2 приведены осциллограммы датчика давления и эволюции скорости фронта пламени для следующих размеров форкамеры: диаметр/длина 10/7 mm, 20/8 mm и 10/20 mm.

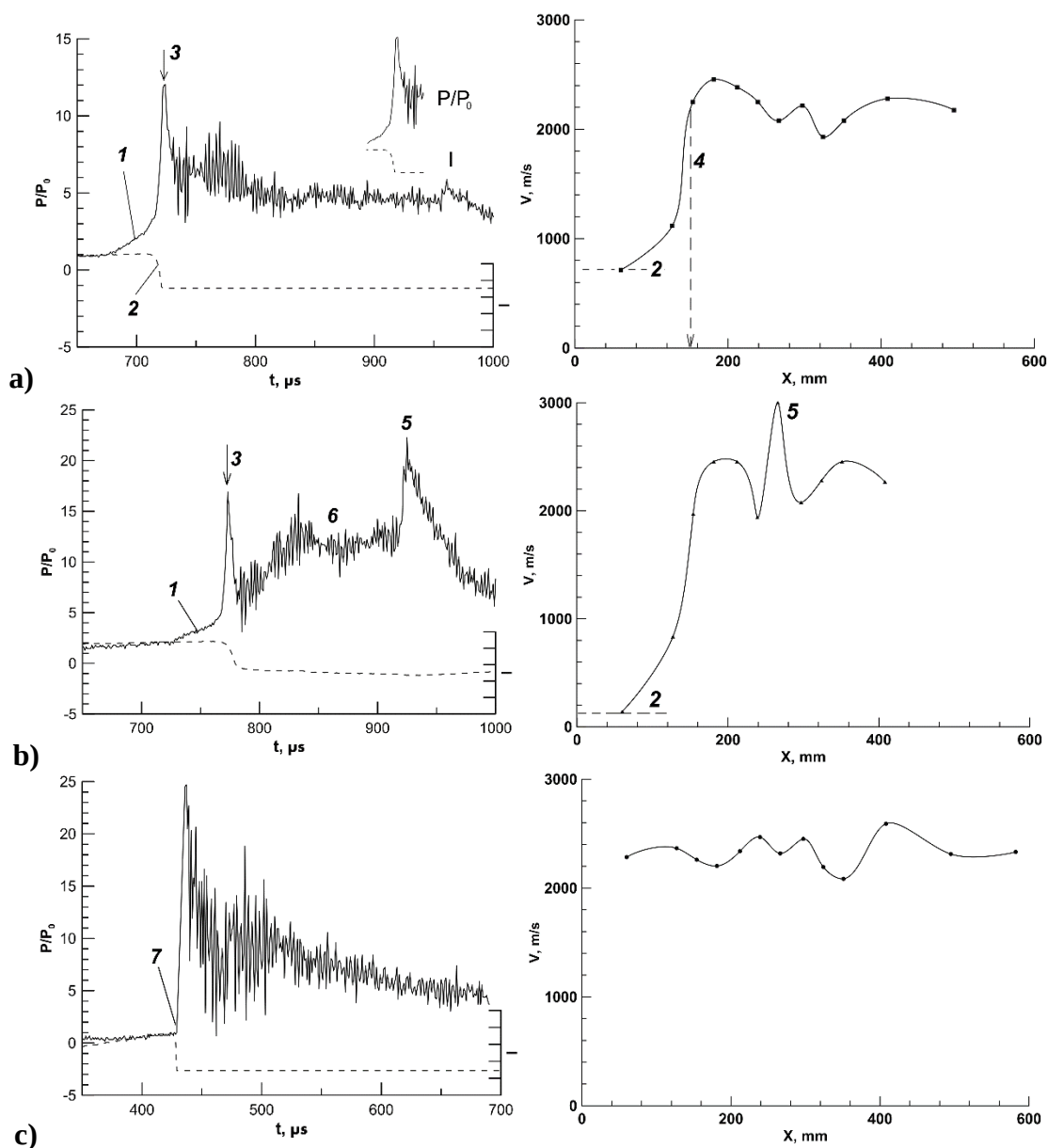


Рис.2. Показания датчика давления (P/P_0) и фотодиода (I , отн. ед.) в положении 10 калибров от начала канала. Скорости фронта пламени в канале. Диаметр/длина форкамеры: а, 10/7 мм; б, 20/8 мм; с, 10/20 мм. 1 - повышение давления вследствие истечения продуктов горения, 2 - фронт пламени и скорость фронта пламени, 3 - повышение давления на фронте пламени, 4 - преддетонационное расстояние, 5 - повышение скорости вследствие волны сжатия, 6 - стационарное истечение продуктов их форкамеры, 7 - детонационная волна.

При сгорании смеси в форкамере длиной 7 мм и диаметром 10 мм датчик давления в течение 40 мкс регистрирует незначительное повышение давления до 3 атм (рис.2а). Повышение давления вызвано сложением акустических возмущений, создаваемых ускоряющимся фронтом пламени внутри форкамеры и на входе в канал. Скорость фронта пламени, регистрируемая фотодиодами в месте расположения датчика давления, равна 700 м/с. Одновременно с фронтом пламени датчик давления регистрирует пик давления 10 атм. Можно предполагать, что данный пик давления вызван выходом из форкамеры продуктов сгорания. В канале наблюдалось постепенное ускорение фронта пламени вдоль оси канала до момента формирования детонации. Преддетонационное расстояние составило 150 мм (50 калибров). Скорость стационарной детонации составила 2100-2300 м/с. Это значение соответствует значению стационарной скорости детонации для $ER=0.9$.

Отсутствие регистрируемых ударных волн на входе в канал дает возможность предположить, что сгорание в форкамере при указанных размерах происходит без формирования ударных волн внутри форкамеры. Схематически процесс определенного здесь эффекта поджатия с помощью форкамеры и на начальном участке канала представлен на рис.3а. При сгорании смеси в форкамере длиной 8 мм и диаметром 20 мм датчик давления в течение 50 мкс регистрирует незначительное повышение давления до 3 атм, аналогично предыдущему случаю (рис.2б). Повышение давления вызвано сложением акустических возмущений, создаваемых ускоряющимся фронтом пламени внутри форкамеры и на входе в канал. Скорость фронта пламени, регистрируемая фотодиодами в месте расположения датчика давления, равна 150 м/с.

Одновременно с фронтом пламени датчик давления регистрирует пик давления 15 атм. Можно предполагать, что данный пик давления вызван выходом из форкамеры продуктов сгорания. Через 150 мкс после первого пика давления датчик давления регистрирует второй пик давления. В течение этого промежутка времени датчик давления регистрирует постоянный рост давления. Это также может быть обусловлено продолжительным истечением продуктов сгорания из форкамеры.

Аналогично первому случаю, в канале наблюдалось постепенное ускорение фронта пламени вдоль оси канала до момента формирования детонации. Преддетонационное расстояние составило 150-160 мм (50-53 калибра). Скорость стационарной детонации составила 2200-2300 м/с. Это значение соответствует значению стационарной скорости детонации для $ER=0.9$.

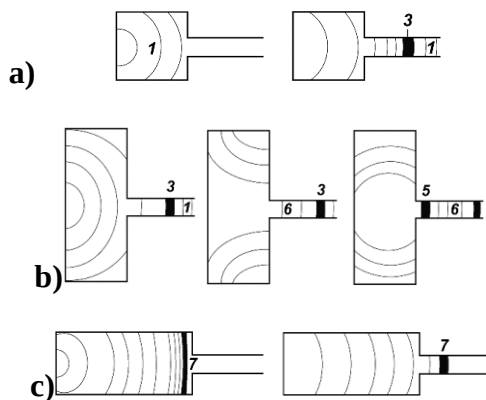


Рис.3. Схема движения волн сжатия внутри форкамеры. Диаметр/длина форкамеры: а, 10/7 мм; б, 20/8 мм; в, 10/20 мм. 1 - волны сжатия, 3 - повышение давления на фронте пламени, 5 - повышение скорости вследствие волны сжатия, 7 - детонационная волна.

На первом этапе горения данный случай аналогичен предыдущему случаю. Отсутствие регистрируемых ударных волн на входе в канал дает возможность предположить, что сгорание в форкамере при указанных размерах происходит без формирования ударных волн внутри форкамеры. Так как помимо основного

направления вдоль оси канала продукты сгорания расширяются в радиальном направлении в форкамере, скорость истечения продуктов сгорания существенно снижается. В данном случае скорость истечения продуктов сгорания составила 100-150 м/с, в отличие от 700 м/с в первом случае.

Однако, в отличие от первого случая, фронт горения распространяется также и в радиальном направлении в форкамере и достигает стенок через определенное время. Схематически предполагаемый процесс распространения горения в подобной форкамере и на начальном участке канала представлен на рис.3б. Ускоряющийся фронт пламени генерирует волны сжатия. При отражении от стенок форкамеры волны сжатия объединяются в центральной части форкамеры в один общий фронт волны. Этот фронт волны регистрируется датчиком давления на входе в узкий канал. Затем, на расстоянии 260 мм от входа в узкий канал наблюдалось резкое увеличение скорости пламени, вызванное указанным вторичным пиком давления. Скорость фронта пламени достигала 3000 м/с, что значительно превышает скорость стационарной детонации 2100 м/с.

При сгорании смеси в форкамере длиной 20 мм и диаметром 10 мм датчик давления регистрирует резкое повышение давления до 20 атм (рис.2в). Профиль давления имеет типичный профиль детонационной волны. Скорость фронта пламени на входе в канал волны равнялась 2250 м/с и соответствовала скорости стационарной детонации. На всем протяжении канала скорость фронта пламени практически не изменялась и составляла 2100-2200 м/с. Таким образом, преддетонационное расстояние было гораздо меньше длины первой измерительной базы.

В форкамере длиной 20 мм успевает возникнуть волна сжатия. Ускоряющийся фронт пламени может перейти в детонацию даже в форкамере. Поэтому на входе в узкий канал можно наблюдать уже сформированную детонационную волну. Схематически предполагаемый процесс распространения горения в подобной форкамере и на начальном участке канала представлен на рис.3в.

В отличие от предыдущих случаев, когда регистрировался выброс продуктов сгорания из форкамеры в узкий канал, в данном случае воспламенение смеси в канале осуществлялось за счет детонации. В данном случае сгорание детонационноспособной смеси в форкамере можно рассматривать как прямое инициирование детонации.

На основании приведенных выше экспериментальных данных можно сделать вывод о том, что в зависимости от размеров форкамеры динамика фронта пламени и ударных волн в канале может развиваться по-разному: переход горения в детонацию за счет истекающих продуктов сгорания, формирование детонации за счет волны сжатия или прямое инициирование детонации. Для используемой пропано-бутано-кислородной смеси возможно определить предельные линейные размеры форкамеры: длину L и радиус $D/2$. В том случае, когда длина и радиус не превышает предельные размеры форкамеры, сгорания топливной смеси можно рассматривать как эффект поджатия. Для рассматриваемой смеси такие размеры можно задать равными $x^*=8$ мм, $r^*=5$ мм. Если размеры форкамеры будут превышать указанные размеры, то сгорание смеси в форкамере будет сопровождаться наличием волн сжатия и ударных волн (Таблица 1).

2.2. Влияние ER на динамику фронта пламени.

Изменяя соотношение между компонентами детонационноспособной смеси, можно попытаться варьировать значение предельных размеров форкамеры. Это может быть достигнуто за счет изменения периода индукции и скорости звука смеси. Также это может быть достигнуто за счет изменения величины энергии, выделяющейся в объеме форкамеры. Для примера приведены результаты для форкамеры длиной 10 мм и диаметром 20 мм, а также для трех составов пропано-бутано-кислородной смеси: $ER = 0.9$; $ER = 0.65$ и $ER = 0.4$.

Таблица 1.

Максимальные радиус и длина форкамеры, при которых формирование детонации осуществляется за счет истечения продуктов горения.

Смесь	ER	D/2, мм	L, мм	Смесь	ER	D/2, мм	L, мм
пропано- бутано- кислородная смесь	0.30	10	37	ацетилено- кислородная смесь	0.20	10	20
	0.40	10	20		0.23	10	20
	0.65	10	8		0.28	10	8
	0.90	5	7		0.48	5	7

При использовании форкамеры указанных размеров наблюдалась принципиально разная эволюция скорости фронта пламени для разного состава смесей (рис.4). При $ER = 0.9$ наблюдалось два выраженных максимума скорости. Эти максимумы объяснялись ранее наличием первичной волны сжатия и следующей за ней ударной волны, возникшей вследствие догорания смеси и формированием отраженной от краев форкамеры ударной волны. Преддетонационное расстояние составляло 150 мм. При уменьшении ER до 0,65 наблюдалось только монотонное повышение скорости фронта пламени до формирования детонации.

Отсутствие дополнительного максимума в значении скорости фронта пламени может быть объяснено тем, что в форкамере не возникают отраженные от краев форкамеры волны сжатия. Уменьшение ER могло привести к увеличению периода индукции смеси. А это, в свою очередь, могло привести к тому, что сгорание смеси в форкамере происходил эффект поджата.

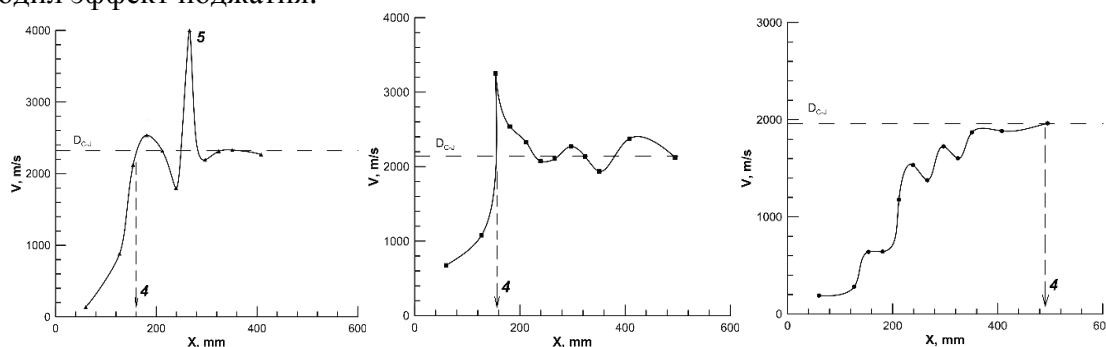


Рис.4. Зависимость скорости фронта пламени вдоль оси канала для форкамеры диаметром 20 мм и длиной 8 мм. а, $ER=0.9$; б, $ER=0.65$; в, $ER=0.4$. 4 - преддетонационное расстояние, 5 - повышение скорости вследствие волны сжатия.

Преддетонационное расстояние для $ER = 0.65$ не изменилось по сравнению с $ER = 0.9$. Т.е. полезная работа, совершенная продуктами сгорания для формирования детонации, при $ER = 0.65$ оказалась сравнима с аналогичной работой при $ER = 0.9$. Это может быть объяснено тем, что при $ER = 0.9$ скорость распространения фронта пламени в форкамере сравнима со скоростью распространения слабых возмущений. При этом не выполняется условие поджата. Поэтому распространение фронта пламени носит трехмерный характер. Таким образом, значительная доля кинетической энергии продуктов сгорания распространяется в радиальном направлении.

Напротив, при меньших ER скорость распространения слабых возмущений превышает скорость распространения фронта пламени. Поэтому сгорание в форкамере может быть рассмотрено как эффект поджата. В радиальном направлении не формируются волны сжатия, и большая часть кинетической энергии продуктов сгорания распространяется в сторону канала. Это может объяснить численное сходство в величине преддетонационного расстояния.

Дальнейшее уменьшение ER до 0.4 не привело к принципиально отличной эволюции скорости фронта пламени относительно $ER = 0.65$. Наблюдалось монотонное увеличение

скорости фронта пламени до значений детонации. Преддетонационное расстояние составляло 350 мм (117 калибров).

Таким образом, для значений ER не превышающих 0.65, сгорание в форкамере может быть рассмотрено как эффект поджатия. В двух последних случаях динамика движения фронта пламени в канале носила одинаковый характер.

На основании приведенных выше экспериментальных данных можно сделать вывод о том, что для заданных размеров форкамеры можно определить такое соотношение между компонентами смеси, при котором динамика фронта пламени и ударных волн в канале может развиваться по одному из предложенных выше сценариев: переход горения в детонацию за счет истекающих продуктов сгорания, формирование детонации за счет волны сжатия или прямое инициирование детонации. Например, для форкамеры длиной 10 мм и диаметром 20 мм значение ER определено 0.65. А для форкамеры длиной 20 мм и диаметром 10 мм значение ER определено 0.4. Изменение «индукционного размера» вызвано, таким образом, влиянием состава смеси на период индукции.

2.3. Влияние горючего на инициирование детонации.

В данной главе приведено качественное сравнение форкамерного инициирования детонации в пропано-бутано-кислородной смеси с инициированием детонации в ацетилено - кислородной смеси. В качестве примера, на рис.5 приведены осциллограммы давления и эволюции скорости фронта пламени в канале для двух смесей в форкамере длиной 20 мм и диаметром 10 мм. Выбрано такое ER для обеих смесей, при котором в форкамере происходил эффект поджатия при сгорании детонационноспособной смеси. Для пропано-бутано-кислородной смеси $ER = 0.4$, для ацетилено - кислородной смеси $ER = 0.2$.

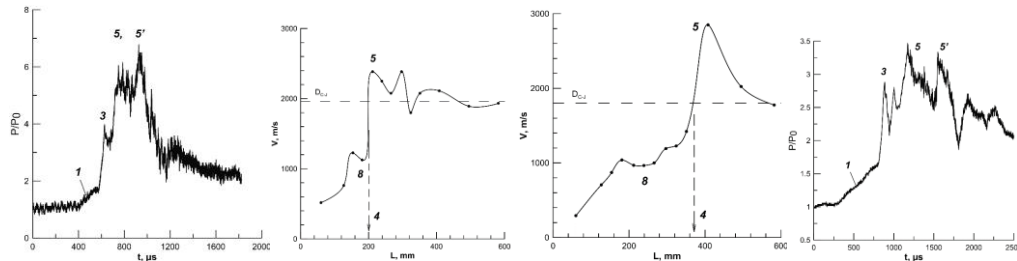


Рис.5. Сравнение двух профилей давления (P/P_0) на расстоянии 10 калибров от начала канала и скорости фронта пламени для пропано-бутано-кислородной смеси и для ацетилено - кислородной смеси. Диаметр/длина форкамеры: 10/20 мм. 1 - повышение давления вследствие истечения продуктов горения, 3 - повышение давления на фронте пламени, 4 - преддетонационное расстояние, 5,5' - повышение скорости вследствие волны сжатия, 8 - локальный минимум скорости.

На обоих осциллограммах давления наблюдаются в указанной последовательности: монотонное повышение давления, волна сжатия, следующий за первой волной сжатия комплекс из двух скачков уплотнения, понижение давления. Для обеих смесей скорость фронта пламени повышается немонотонно, наблюдается один локальный экстремум. После экстремума наблюдалось резкое ускорение фронта пламени до формирования пересжатой детонации. После формирования пересжатой детонации происходило снижение скорости фронта пламени до стационарного значения: в пропано-бутано-кислородной смеси скорость равнялась 2000 м/с, в ацетилено - кислородной смеси скорость равнялась 1900 м/с. Таким образом, для приведенных двух смесей наблюдались качественно схожие осциллограммы давления на входе в канал и эволюция скорости фронта пламени в канале.

Количественное отличие в приведенном сравнении заключается в том, что повышение давления в форкамере при сжигании ацетилено - кислородной смеси

при $ER = 0.2$ происходило медленнее в 2 раза. Как следствие, это вызывало более медленное ускорение фронта пламени и увеличение преддетонационного расстояния до 400 мм (130 калибров) по сравнению с 200 мм (65 калибрами) в пропано-бутано-кислородной смеси.

Для того, чтобы сгорание ацетилена происходило в режиме эффекта поджатия, необходимо использовать более бедные смеси, чем в пропано-бутано-кислородной смеси. Такое сгорание в форкамере с указанными линейными размерами наблюдалось только при ER , не превышающим 0.2.

3. ОБСУЖДЕНИЕ

На основе приведенных выше результатов и рассуждений возможно выделить два предельных случая инициирования детонации в канале с помощью форкамеры: переход горения в детонацию при поджатии за счет истечения продуктов сгорания и прямое инициирование детонации.

3.1. Переход горения в детонацию

На рис.6 представлены зависимости преддетонационного расстояния в пропано-бутано-кислородной смеси и в ацетилено - кислородной смеси от ER . Данные приведены для бедных смесей, ER меньше 1. При одинаковом ER преддетонационное расстояние в ацетилено - кислородных смесях на 30-40% меньше, чем в пропан-бутановых смесях. Это объясняется меньшей шириной детонационной ячейки в ацетиленовых смесях. В стехиометрической ацетилено - кислородной смеси она равна 0.1 мм, в то время, как в стехиометрической пропано-бутано-кислородной она равна 1 мм.

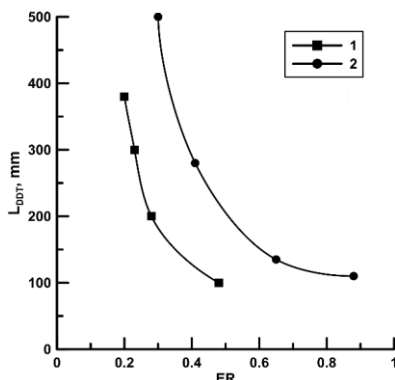


Рис.6. Преддетонационные расстояния в зависимости от ER при воздействии продуктов горения, истекающих из форкамеры. 1 - для ацетилено - кислородной смеси, 2 - для пропано-бутано-кислородной смеси.

3.2. Прямое инициирование детонации

Во втором случае из форкамеры в узкий канал входит уже сформированная детонационная волна. На рис.7 представлены экспериментальные данные о возможности прямого инициирования детонации в зависимости от энергии, выделяющейся при сгорании газа в форкамере, и от соотношения компонентов ER для пропан-бутановой и для ацетилено - кислородной смесей. Как и следовало ожидать, кривые, разграничивающая предельные значения, имеет вид параболы.

На рисунке представлены точки, выделенные треугольниками. Эти точки соответствуют экспериментам, при которых первая измерительная пара не регистрирует детонационную волны. Однако формирование детонации регистрируется на второй измерительной базе между 10 и 40 калибрами канала.

Полученные энергии инициирования для форкамерного инициирования существенно выше, чем энергии для плоского или даже сферического инициирования детонации:

10^{-2} -0.5 Дж для ацетилена [17] и 0.6 Дж (ER=1) для пропано-бутановой смеси [18]. Это вызвано тем, что энергия выделяется не в узком пространственном промежутке, сравнимым с размером радиуса индукции, как в случае плоского или сферического инициирования, а в протяженном объеме конечной длины за длительное время.

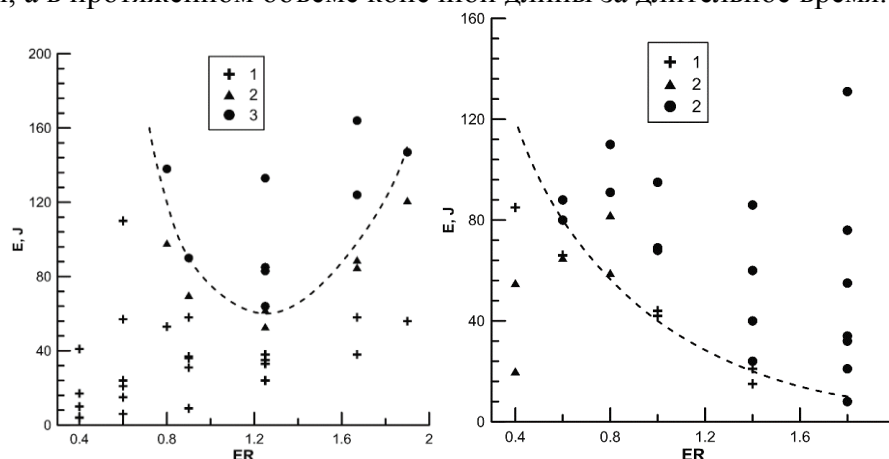


Рис.7. Зависимость энергии прямого инициирования с помощью форкамеры от ER. а, пропано-батано-кислородная смесь; б, ацетилено - кислородная смесь. 1, прямое инициирование; 2, формирование детонации между 10 и 40 калибрами канала; 3, нет формирования детонации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Показано экспериментально, что динамика фронта пламени и волн сжатия в канале может развиваться по одному из трех сценариев: эффект поджатия за счет истекающих продуктов горения, комбинированное воздействие истекающих продуктов и волн сжатия, прямое инициирование детонации.

2. Для заданных размеров форкамеры можно определить такое соотношение между компонентами смеси, при котором динамика фронта пламени и ударных волн в канале может развиваться по одному из предложенных выше сценариев.

3. Аналогичная связь между сценарием формирования детонации, ER и размерами форкамеры обнаружена для ацетилено - кислородной смеси.

4. Представлена связь между энергией прямого инициирования с помощью форкамеры в зависимости от энергии сгорания смеси внутри форкамеры для пропано-бутано-кислородной смеси и для ацетилено - кислородной смеси.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (13-08-01227 А) и Президиума РАН («Горение и взрыв»).

ЛИТЕРАТУРА

1. Зельдович Я.Б., Когарко С., Смирнов Н.Н. Экспериментальные исследования сферической детонации в газах // Сов. физ.-тех. Физика. - 1956. - т.1. с.1689-1713.
2. http://www.galcit.caltech.edu/detn_db/html/
3. Щелкин К. И. Два случая нестационарного горения // Журнал экспериментальной и теоретической Физики. - 1959. - № 36(2). - С. 600 -609.
4. Lee J. H. S. The detonation phenomenon. - Cambridge: Cambridge University Press, 2008. - Т. 2.
5. Clanet C., Searby G. On the “tulip flame” phenomenon //Combustion and flame. - 1996. - Т. 105. - №. 1. - С. 225-238.
6. Bychkov V. et al. Flame acceleration in the early stages of burning in tubes //Combustion and Flame. - 2007. - Т. 150. - №. 4. - С. 263-276.

7. *Valiev D. M. et al.* Influence of gas compression on flame acceleration in the early stage of burning in tubes //Combustion and Flame. - 2013. - Т. 160. - №. 1. - С. 97-111.
8. *Carnasciali F. et al.* Turbulent jet initiation of detonation //Combustion and Flame. - 1991. - Т. 84. - №. 1. - С. 170-180.
9. *Ishii K., Monwar M.* Detonation propagation with velocity deficits in narrow channels //Proceedings of the Combustion Institute. - 2011. - Т. 33. - №. 2. - С. 2359-2366.
10. *Manzhalei V. I.* Gas detonation in a flat channel of 50- μ m depth //Combustion, Explosion and Shock Waves. - 1998. - Т. 34. - №. 6. - С. 662-664.
11. *Smirnov N. N., Nikitin V. F.* Effect of Channel Geometry and Mixture Temperature on Detonation - to - Deflagration Transition in Gases //Combustion, Explosion and Shock Waves. - 2004. - Т. 40. - №. 2. - С. 186-199.
12. *Frolov S. M., Aksenov V. S., Basevich V. Y.* Detonation initiation by shock wave interaction with the prechamber jet ignition zone //Doklady Physical Chemistry. - MAIK Nauka/Interperiodica, 2006. - Т. 410. - №. 1. - С. 255-259.
13. *Baklanov D. I., Gvozdeva L. G.* Unsteady processes during the propagation of detonation waves in channels of variable section //Теплофизика высоких температур. - 1995. - Т. 33. - №. 6. - С. 958-961.
14. *Ivanov M. F., Kiverin A. D., Liberman M. A.* Hydrogen-oxygen flame acceleration and transition to detonation in channels with no-slip walls for a detailed chemical reaction model //Physical Review E. - 2011. - Т. 83. - №. 5. - С. 056313.
15. *Levin V. A., Markov V. V., Osinkin S. F.* Simulation of detonation initiation in a combustible mixture of gases by an electric-discharge //Химическая физика. - 1984. - Т. 3. - №. 4. - С. 611-614.
16. *Iida N., Kawaguchi O., Sato G. T.* Premixed flame propagating into a narrow channel at a high speed, part 1: flame behaviors in the channel //Combustion and flame. - 1985. - Т. 60. - №. 3. - С. 245-255.
17. *Knystautas R., Lee J. H.* On the effective energy for direct initiation of gaseous detonations //Combustion and flame. - 1976. - Т. 27. - С.221-228.
18. *Zhang F.* Shock wave science and technology reference library, vol. 6: detonation dynamics. - Springer, 2012. - Т. 6.

ФОРМИРОВАНИЕ ПЕРЕСЖАТОЙ ВОЛНЫ ДЕТОНАЦИИ В ПОТОКЕ МЕТАНО-КИСЛОРОДНЫХ СМЕСЕЙ В КАНАЛЕ ПЕРЕМЕННОГО СЕЧЕНИЯ

Бивол Г.Ю., Головастов С.В., Голуб В.В.

Объединенный институт высоких температур РАН, г.Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

Экспериментально исследовано формирование пересжатой волны детонации в метано-кислородных смесях в канале. Воспламенение газовой смеси осуществлялось за счет искрового разрядника, расположенного в торце камеры сгорания. Для создания пересжатой волны детонации осуществлялся распад стационарной детонационной волны при переходе в канал большего сечения. Затем созданный комплекс ударной волны и движущегося за ним фронта пламени распространялся в канале с коническим сужением. Формирование пересжатой детонационной волны с параметрами, в несколько раз превышающими параметры стационарной детонации Чепмена-Жуге, регистрировалось на выходе из конического сужения. Определены скорости и давления на фронте детонационной волны в зависимости от состава смеси. Представлены размеры детонационных ячеек, диаграммы распространения волн сжатия, фронта пламени и детонационной волны в камере сгорания в зависимости от состава смеси.

ВВЕДЕНИЕ

При переходе детонации из узкой трубки в широкую обычно возникает пересжатая волна детонации, у которой давление и температура превышают параметры самоподдерживающихся детонационных волн Чепмена-Жуге. Пересжатая волна по механизму не отличается от обычной. Однако происходит повышение давления в непрореагировавшей смеси за проходящей ударной волной [1]. Давление на фронте пересжатой детонационной волны в 1.4-1.6 раза выше давления на фронте стационарной детонации Чепмена-Жуге. Такое превышение параметров за фронтом пересжатых детонационных волн позволяет производить детонационное напыление материалов с высокой температурой плавления [2], увеличить производительность и качество напыления, а также производить детонационное напыление наноматериалов [3]. Режим многоступенчатого формирования детонации исследован в работе [4] в движущейся и неподвижной газовых смесях. Влияние конуса на переотражение ударной волны и формирование детонации было исследовано в работе [5]. Результаты исследования дифракции приведены в работе [6,7]. Один из примеров использования детонации для напыления приведен в работе [8].

Однако добиться нестационарного двойного разрыва в стехиометрической метано-кислородной смеси крайне сложно из-за малого размера детонационной ячейки 3 мм. Для получения нестационарного разрыва необходимо добиться того, чтобы размер детонационной ячейки соответствовал диаметру камеры сгорания. Таким образом, для каналов переменного сечения необходимо подбирать топливную смесь таким образом, чтобы размер детонационной ячейки смеси был немного меньше диаметра канала. Оптимальное отношение диаметра канала к размеру ячейки составляет 2-5.

Работы по влиянию азота на размер ячейки [9] показывают, что добавление даже небольшого количества азота сильно меняет размер ячейки. В работе [10] процесс расслоения детонационной волны и реинициирования детонации был изучен с помощью шпирен метода и компьютерного моделирования.

Повторное инициирование детонации при выходе из канала в свободное пространство наблюдалось в [11] После распада детонационной волны на ударную волну и фронт горения, наблюдались локальные центры воспламенения во время дифракции

ударной волны. Детонация возникла снова при всех углах расширения. Интересным фактом является возникновение сильной поперечной волны при углах стенки более 45 градусов. Работа [12] показывает, что переход детонационной волны через расширяющийся канал может проходить двумя способами: с разрушением структуры детонационной волны и непрерывный переход без разрушения волны. Во втором случае падение скорости волны в конусе составляет не более 15%. В первом случае падение скорости значительно выше. Рассмотрен переход детонационной волны из цилиндра в другой геометрии [13]. Результаты показывают, что возможность повторного инициирования зависит как от геометрии камеры, так и от отношения диаметра канала к размеру детонационной ячейки. Зависимость условий распространения детонации от угла расширения получена в работе [14]. Исследовано поведение детонации в ацетилен-кислородной смеси при прохождении конуса [15]. Во всех случаях фронт пламени отрывался от ударной волны и была обнаружена пересжатая детонация, распространяющаяся до фронта пламени по газу, сжатому ударной волной.

Пересжатая детонация может быть использована для создания реактивной тяги в пульсирующих детонационных двигателях [16,17], в том числе, с использованием природного газа либо метана [18,19]. Влияние сужения канала, турбулизации потока газа за счет преград и профилированного центрального тела на параметры перехода горения в детонацию также представлены в работах [20,21].

Целью данной работы было определение давления на фронте пересжатой волны детонации и скорости фронта после сужения конического участка детонационной трубы. Определялось влияние мольного соотношения между компонентами метано-кислородной смеси на параметры пересжатой детонационной волны.

1. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА

Детонационная камера сгорания переменного сечения состояла из нескольких секций: секции формирования детонационной волны (ФС), U-образной секции (УС), секции реиницирования детонации (РС) и выходной секции (ВС). Схема детонационной камеры сгорания представлена на рис.1.

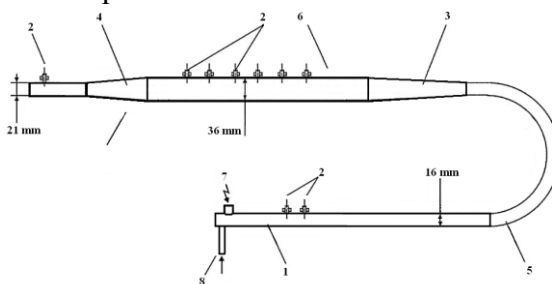


Рис.1. Схема установки. 1 - формирующая секция (ФС), 2 - датчики давления и светимости, 3 - конус расширения, 4 - конус сужения, 5 - U-образная секция, 6 - измерительная секция (ИС), 7 - свеча зажигания, 8 - магистрали с топливом и окислителем.

В секции формирования детонационной волны (формирующая секция ФС) происходило воспламенение горючей смеси. После этого фронт пламени ускорялся до формирования детонации. Датчики давления, расположенные на выходе из ФС, регистрировали профиль детонационной волны и ее скорость. Расстояние между датчиками давления составляло 100 мм. Длина ФС составляла 1200 мм, диаметр 16 мм.

После формирования детонационная волна переходила в U-образную секцию (УС). Эта секция предназначалась для создания стационарной волны детонации с параметрами детонации Чепмена-Жуге. Длина УС составляла 400 мм, диаметр 16 мм.

Далее волна проходила расширяющийся конус с углом расширения 10. Начальный радиус был 16 мм, конечный 36 мм. Датчики давления, расположенные вдоль оси ИС, и фотодиоды ФД-256, соединенные с ИС оптическим проводом, регистрировали движение детонации либо комплекса волны сжатия и фронта пламени. Расстояние между датчиками давления составляло 60 мм. Оптопровод находился в одном сечении с датчиками давления. Длина ИС составляла 400 мм, диаметр 36 мм.

На выходе из ИС располагалась выходная секция с коническим сужением (выходная секция ВС). В проводимых нами экспериментах угол схождения равнялся 8°. Длина ВС составляла 300 мм, выходной диаметр 21 мм.

ВС имела открытый конец. Так что начальное давление внутри камеры сгорания перед каждым экспериментом равнялось атмосферному давлению. Начальная температура равнялась температуре окружающего воздуха 300 К.

Раздельная подача топлива в ФС осуществлялась за счет двух подводящих магистралей с топливом (метан) и окислителем (кислород либо кислород с азотом).

Воспламенение горючей смеси производилось при помощи искрового разряда в начале ФС через автомобильную катушку зажигания. Энергия искрового разряда не превышала 0,1 Дж.

Для измерения давления использовались пьезоэлектрические датчики РСВ. Для определения размера детонационной ячейки использовалась медная фольга, покрытая сажей.

2. ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ СМЕСИ

Используемые смеси метана с кислородом и воздухом представлены в Таблице 1. Коэффициент мольного избытка горючего (equivalence ratio *ER*) изменялся от 0.75 до 2.35.

Таблица 1.

Используемые газовые смеси на основе метана и их параметры. *ER* - коэффициент мольного избытка горючего; *CH₄* - объемная концентрация метана, *O₂* - объемная концентрация кислорода, *N₂* - объемная концентрация азота, γ - показатель адиабаты,

Сзв - скорость звука, *л* - измеренная ширина детонационной ячейки

<i>CH₄</i> , %(mol)	<i>O₂</i> , %(mol)	<i>N₂</i> , %(mol)	<i>ER</i>	γ	<i>Сзв</i> , м/с	λ , мм
33	67	0	1	1,37	343	3
21	50	29	0,85	1,38	338	8
15	40	45	0,75	1,39	336	—
42	58	0	1,45	1,37	352	6
54	46	0	2,35	1,36	365	—
40	60	0	1,35			
45	55	0	1,6			

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Для достижения высоких параметров на фронте пересжатой волны необходимо прежде всего добиться распада детонационной волны. Для достижения этой цели мы изменяли соотношение между компонентами смеси и проводили сравнение в неподвижной и движущейся газовых смесях. Более детально приведены характерные результаты для трех соотношений *ER*: 1, 0.75, 1.45.

На Рис.2 представлены осциллограммы датчиков давления и фотодиодов в ФС, ИС и ВС для стехиометрической смеси метана с кислородом (*ER*=1). Также на рис.3 показана *x-t*-диаграмма движения детонационной волны в этих секциях.

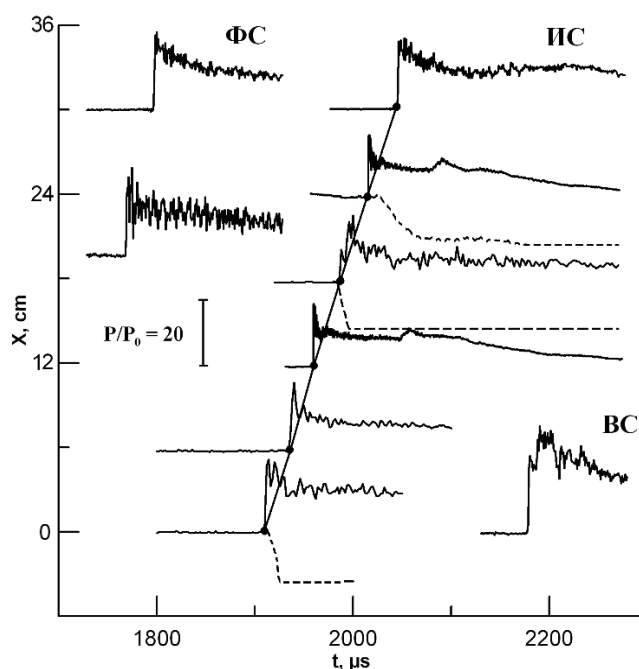


Рис.2. Осциллограммы давления и свечения в трех секциях камеры сгорания, X-t-диаграмма движения детонационной волны. ФС - динамика в формирующей секции, ИС - динамика в измерительной секции, ВС - динамика в выходной секции. Сплошные линии - осциллограммы давления, штриховые линии - осциллограммы свечения.

Два датчика давления, расположенные в ФС, регистрируют движение сформированной детонационной волны. Скорость волны составляла 2200 м/с. Давление на фронте волны составляло 20 атм. Таким образом, в УС распространялась стационарная детонационная волна, в ИС также входила детонационная волна. Датчики давления, расположенные в ИС, регистрировали постоянную скорость распространения детонационной волны, равную 2500 м/с. Фотодиоды, расположенные в одном сечении с датчиками давления, не регистрировали замедления фронта пламени относительно фронта ударной волны. Таким образом, комплекс ударная волна-фронт пламени представлял собой устойчивую детонационную волну вдоль всей ИС. Распада детонационной волны не происходило.

На рис.3 представлен след, оставленный ячейистым фронтом детонационной волны при прохождении вдоль ИС. Измерения показали, что ширина детонационной ячейки при $ER=1$ составила 4 мм.



Рис.3. Фотография закопченной фольги, вынутой из измерительной секции. Видна ячейистая структура детонации.

При переходе детонационной волны из ИС в ВС наблюдалось повышение давления на фронте до 28 атм, вызванное интерференцией детонационной волны в конической секции.

При уменьшении ER до 0,75 и раздельной подаче реагентов в камеру сгорания, датчики давления регистрировали прохождение сформировавшейся детонационной волны (рис.4). Скорость между пиками давления, регистрируемыми этими двумя датчиками, составляет 2000 м/с. Давление на фронте волны составляло 20 атм. Из-за турбулентности, возникающей при перемешивании реагентов в камере, детонация оказалась стабильной даже при $ER=0.7$ и распада волны не происходило.

Измерение ширины детонационной ячейки методом закопченной фольги показало значение 8 мм при $ER=0,85$ (рис.5).

Для получения пересжатой волны, было решено убрать конус расширения из установки (3 на рис.1), т. к. внезапное расширение канала может привести к распаду детонационной волны на ударную волну и фронт горения. При использовании стехиометрической смеси распада волны опять не наблюдалось. Также не наблюдалось усиления волны в сужающемся конусе.

Для богатой смеси с $ER=1.3$ после вхождения в широкую часть камеры наблюдалась ударная волна с амплитудой 10 атм (рис.6). Скорость волны составляла около 1200 м/с. Также световые датчики показали заметное отставание фронта горения от ударной волны (более 100 мкс). Это позволяет нам говорить о том, что произошел распад детонационной волны из-за внезапного расширения канала.

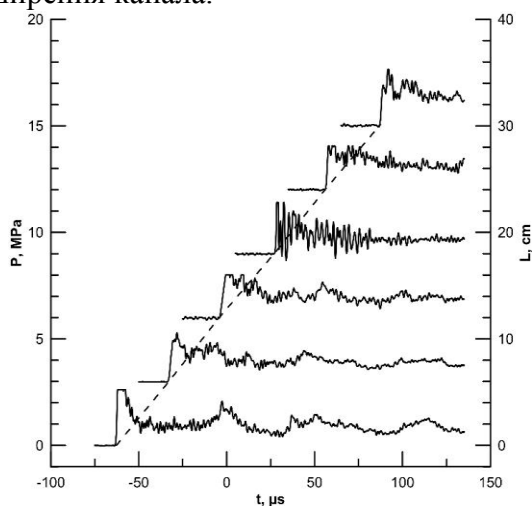


Рис.4. Осциллограммы давления в камере сгорания, $ER = 0.7$, раздельная подача реагентов в камеру.

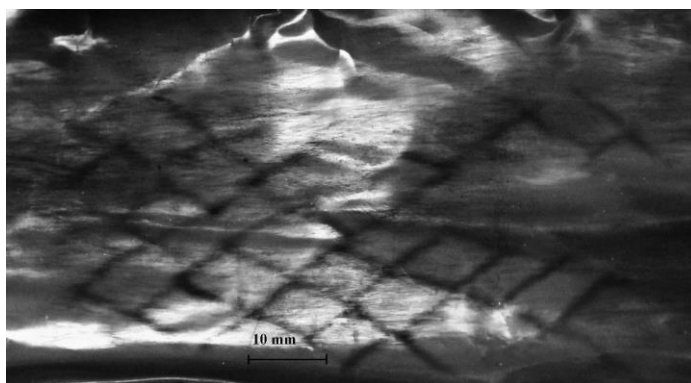


Рис.5. Фотография закопченной фольги, вынутой из измерительной секции. Видна ячеистая структура детонации.

Датчик давления на выходе, расположенный после сужающегося конуса регистрировал ударную волну амплитудой 70 атм.

При прохождении ударной волной сужающегося конуса, её амплитуда может возрасть в несколько раз [22]. В данном случае ударная волна с амплитудой 10-15 атм усилилась в конусе в несколько раз до амплитуды волны Чепмена-Жуге или выше. Это позволило возникнуть пересжатой детонации в конусе. Эту волну мы и наблюдаем на выходе из камеры сгорания.

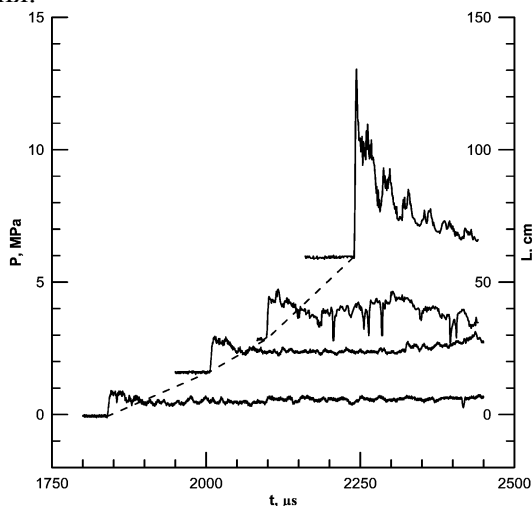


Рис.6. Осциллограммы давления в камере сгорания, $ER = 1.3$, раздельная подача реагентов в камеру, без использования расширяющегося конуса в камере сгорания.

Для камеры с расширяющимся конусом и заранее помешанной смесью при аналогичном $ER=1.35$ распада волны и последующего усиления не происходило. Измерение ширины детонационной ячейки методом закопченной фольги показало значение 6 мм при $ER=1.45$ (рис.7), что свидетельствует о стационарной детонации.

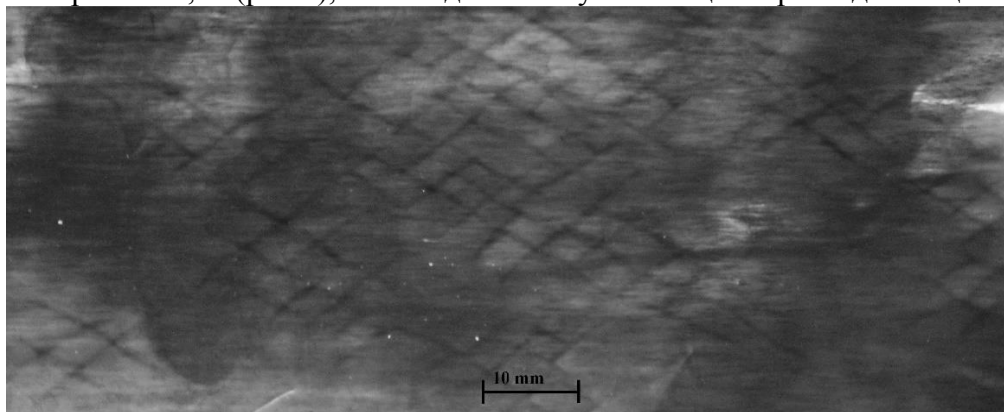


Рис.7. Фотография закопченной фольги, вынутой из измерительной секции. Видна ячеистая структура детонации.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На основе полученных экспериментальных данных можно проанализировать влияние соотношения компонентов смеси на ширину детонационной ячейки и на интенсивность пересжатой волны детонации после прохождения конического сужения. Повышение ширины ячейки при отклонении ER от единицы по сравнению с данными [24] обусловлено тем, что в работах представлены данные для начального давления 1 атм.

На рис.8 представлены зависимости ширины детонационной ячейки от ER .

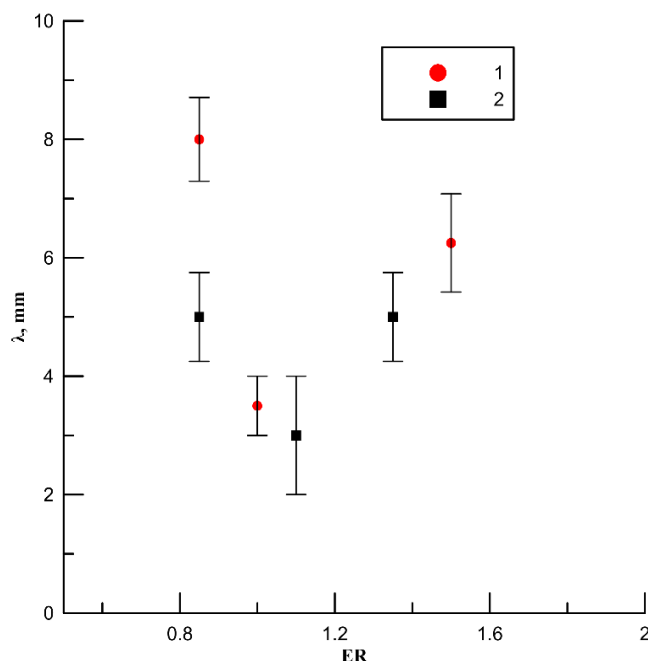


Рис.8. Зависимость ширины детонационной ячейки от ER. 1- экспериментальные данные, полученные в этой работе, 2 - данные из [24].

При движении детонационной волны с шириной ячейки 8 мм по коническому сужению мы наблюдали уменьшение ширины детонационной ячейки до 5 мм. Таким образом, сужающийся канал приводил к дополнительному повышению давления перед фронтом пламени и к снижению ширины детонационной ячейки.

На рис.9 представлена зависимость величины давления на фронте пересжатой волны детонации от ER.

Как и следовало ожидать, максимальная степень повышения давления достигается при коэффициенте ER равным 1.3. Это обусловлено тем, что расслоение достигает предельного максимального значения, при этом не наблюдается существенного ослабления ударной волны. Т.е. движущаяся ударная волна еще способна поджечь дополнительно газ в коническом сужении.

5. ДЕТОНАЦИОННОЕ НАПЫЛЕНИЕ ПОРОШКА

Для того, чтобы осуществить качественное напыление порошка с помощью детонационной волны, необходимо выполнение следующих условий:

1. интенсивность детонационной волны должна быть достаточной для того, чтобы частицы приобрели высокую кинетическую энергию, которой будет достаточно для расплавления этой частицы на подложке;
2. длительность воздействия должна быть кратковременной для того, чтобы избежать длительного воздействия высокой температуры на микрочастицу;
3. детонационная волна должна формироваться в избытке горючего для того, чтобы не происходило окисления микрочастицы за фронтом детонационной волны.

Таким образом, на основе полученных экспериментальных данных, было обнаружено, что оптимальное соотношение между компонентами должно превышать $ER=1$ и составлять 1,4-2,2. При больших значениях ER формирование детонации не происходило в используемой геометрии.

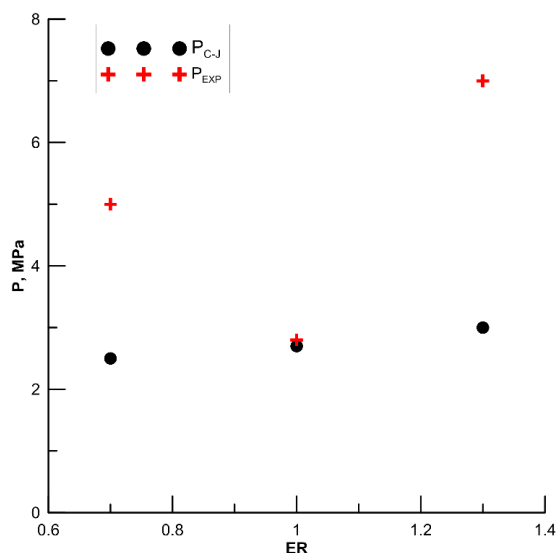


Рис.9. Зависимость давления на фронте пересжатой детонационной волны и степени повышения давления относительно давления Чепмена-Жуге. P_{EXP} - результаты, полученные в данной работе. P_{C-J} результаты расчета из [25].

На рис.10 представлены фотографии результатов воздействия микропорошка железа размером 100 мкм на подложку из стали.

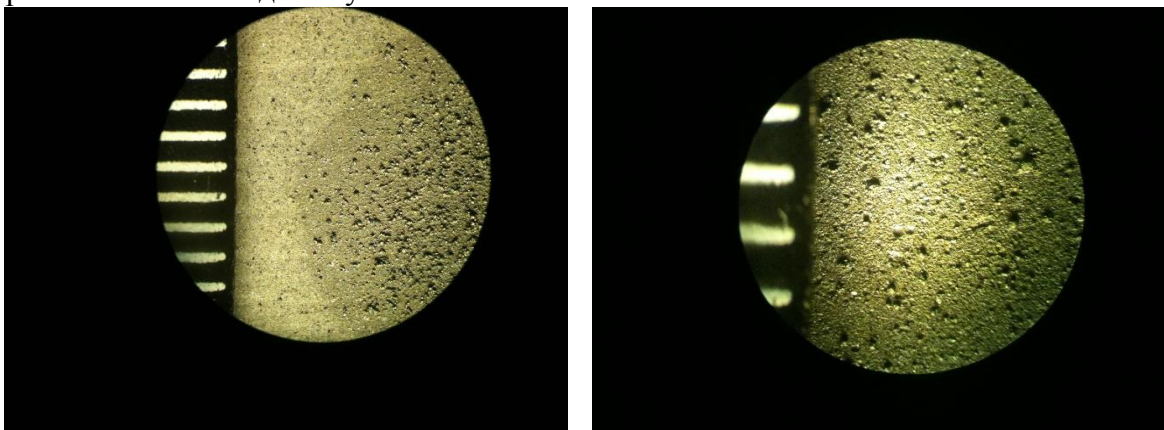


Рис.10. Фотографии результатов испытаний воздействия микропорошка железа (100 мкм) на подложку из стали. Цена шкалы - 1 мм.

Видно, что порошок равномерно покрывает слой подложки, однако заметно характерное образование капель сплавленных частиц порошка размером 0,1 мм.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспериментально изучены параметры детонационных волн, распространяющихся в канале переменного сечения в метано-кислородных смесях.

Определены скорости и давления на фронте детонационной волны в зависимости от состав смеси. Параметры волны соответствовали параметрам стационарной детонации Чепмена-Жуге при соотношении, близком к стехиометрическому.

Определены размеры детонационных ячеек с помощью закопченной фольги, установленной внутри канала. Размер детонационных ячеек составлял для различных смесей от 4 мм до 8 мм.

Показана возможность использования пересжатой детонации для напыления микропорошка на стальную подложку.

ЛИТЕРАТУРА

1. Айвазов Б.В., Зельдович Я.Б. Образование пересжатой детонационной волны в сужающейся трубке // Журн. экспериментальной и теоретической физики. 1947. Т. 17, Вып. 10. С. 889-900.
2. Гавриленко Т.П., Николаев Ю.А., Ульяницкий В.Ю. Использование пересжатой детонации для нанесения покрытий // Физика горения и взрыва. - 2010. - Т. 46, N 3. - С. 125-133
3. Звездин К.А., Голуб В.В., Бакланов Д.И., Тарасенко И.Н., Ленкевич Д.А., Котельников А.Л., Бивол Г.Ю. Устройство сжигания топлива в режиме многоступенчатой детонации. Патент на полезную модель № 147755. 2014.
4. Baklanov D.I., Gvozdeva L.G., Scherbak N.B. Formation of high-speed gas flow at combustion in the regime of multi-step detonation // Gaseous and Heterogeneous Detonations: Science to Applications. Ed. by Roy G.D, Frolov S.M., Kailasanath K., N. Smirnov N.N. - 1999 - P. 141-152.
5. Khasainov B., Presles H.-N., Desbordes D., Demontis P., Vidal P. Detonation diffraction from circular tubes to cones // Shock Waves. - 2005. - V. 14, N 3. - P. 187-192.
6. Bartma F., Schroder K. The Diffraction of a Plane Detonation Wave at a Convex Corner // Combustion and Flame. - 1986. - V. 66. - P. 237-248.
7. Brown C.J., Thomas G.O. Experimental studies of ignition and transition to detonation induced by the reflection and diffraction of shock waves // Shock Waves. - 2000. - V. 10. - P. 23-32.
8. Николаев Ю.А., Васильев А.А., Ульяницкий В.Ю. Газовая детонация и ее применение в технике и технологиях (обзор) // Физика горения и взрыва. - 2003. - Т. 39, № 4. - С.22-54.
9. Akbar R, Kaneshige M.J., Schultz E., Shepherd J.E. Detonations in H₂-N₂O-CH₄-NH₃-O₂-N₂ mixtures // Technical Report FM97-3. - 1997. - Explosion Dynamics Laboratory. - California Institute of Technology.
10. Pantow E.G., Fischer M., Kratzel Th. Decoupling and recoupling of detonation waves associated with sudden expansion // Shock Waves. - 1996. - Volume 6 - Issue 3. - pp 131-137.
11. Bartlmä F., Schröder K. The diffraction of a plane detonation wave at a convex corner // Combustion and Flame. - 1986. - Volume 66. - Issue 3. - Pages 237-248.
12. Губин С.А., Козарко С. М., Михалкин В. Н. Экспериментальное исследование газовой детонации в конических трубах // Физика горения и взрыв - 1982. - №5, С.111-117.
13. Sorin R., Zitoun R., Khasainov B., Desbordes D. Detonation diffraction through different geometries // Shock Waves. - 2009. - Volume 19 - Issue 1. - pp 11-23.
14. Vasil'ev A.A. Diffraction of multifront detonation // Combustion, Explosion and Shock Waves. - 1988. - Volume 24. - Issue 1. - pp 92-99.
15. Khasainov B., Presles H. N., Desbordes D., Demontis P., Vidal P. Detonation diffraction from circular tubes to cones. // Shock Waves. - 2005. - Vol. 14. - No. 3. - pp. 187-192.
16. Polezhaev Yu. V., Seleznev R. K. Numerical study of the processes of resonance emergence in the experimental set-up of a pulse detonation engine // HIGH TEMPERATURE. - 2014. - Volume: 52. - Issue: 2. - Pages: 225-229.
17. Polezhaev Yu. V., Stonik O. G. From deflagration to detonation: Three modes of combustion // HIGH TEMPERATURE. - 2010. - Volume: 48. - Issue: 4. - Pages: 534-540.
18. Frolov S. M. Natural-Gas-Fueled Pulse-Detonation Combustor // journal of propulsion and power. - 2014. - Volume: 30. - Issue: 1. - Pages: 41-46.

19. *Frolov M., Aksenov V. S., Avdeev K. A., Borisov A. A., Gusev P. A., Ivanov V. S., Koval', A. S., Medvedev, S. N., Smetanyuk, V. A., Frolov, F. S.* Thermal tests of a pulse-detonation high-speed burner // russian journal of physical chemistry B. - 2013. - Volume: 7. - Issue: 6. - Pages: 772-776.
20. *Borisov A. A., Koval' A. S., Mailkov A. E., Smetanyuk V. A., Frolov S. M.* Transient Modes of Propagation of the Shock Wave-Reaction Zone Complex in Methane-Air Mixtures // RUSSIAN JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. - 2014. - Volume: 8. - Issue: 2. - Pages: 158-164
21. *Frolov S. M., Shamshin I. O., Medvedev S. N., Dubrovskii A. V.* Initiation of detonation in a tube with a profiled central body // doklady physical chemistry. - 2011. - Volume: 438. - Pages: 114-117. - Part: 2.
22. *Bird G.A.* The effect of wall shape on the degree of reinforcement of a shock wave moving into a converging channel // Journal of Fluid Mechanics. - 1959. - 5. - pp 60-66.
23. *David A. Russell D.A.* Shock-wave strengthening by area convergence // Journal of Fluid Mechanics, - 1967, - 27. - pp 305-314.
24. *Sochet I., Aminallah M., Brossard J.* Detonability of fuel-oxygen and fuel-air mixtures // Shock waves. - 1997. - T. 7. - №. 3. - C. 163-174.
25. *Parra-Santos M. T., Castro-Ruiz F., Mendez-Bueno C.* Numerical simulation of the deflagration to detonation transition //Combustion, Explosion and Shock Waves. - 2005. - T. 41. - №. 2. - C. 215-222

ИССЛЕДОВАНИЕ ГОРЕНИЯ И ИНГИБИРОВАНИЯ БОЛЬШИХ СФЕРИЧЕСКИХ ОБЪЕМОВ ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ ПРИ ИНТЕНСИВНОМ ИНИЦИИРОВАНИИ

Петухов В.А.¹, Азатян В.В.², Бублик Н.П.¹, Гусев П.А.¹, Солнцев О.И.¹

¹ ФГБУН Объединенный институт высоких температур РАН, г.Москва, Россия

² Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения РАН, г.Черноголовка, Россия

РЕЗЮМЕ

Проведены исследования воздействия ингибитора АКМ (17% об. пропилена + 83% об. пропана) на возникновение сферической детонации в околостехиометрической водородно-воздушной среде при ее прямом иницировании заряд от тэна массой 2.7 г (15.5 кДж). Исследования проводились в сферическом объеме 7 м³. Добавление в смесь 1.4 % об. ингибитора приостанавливает развитие детонации. При добавлении 4% об. ингибитора смесь не воспламенялась.

Ключевые слова: детонация, горение, ингибирование, водородно-воздушная смесь, иницирование

ВВЕДЕНИЕ

Повышенный интерес к закономерностям детонации газов и интенсивного горения определяется как запросами практики, так и проблемами теории этого режима горения. Как известно, длительное время было общепринятым считать, что за исключением давлений, в десятки раз ниже атмосферного, горение и взрыв вызваны только прогрессирующим саморазогревом реакционной системы. Роль же цепного механизма реакции в при атмосферном и повышенных давлениях, при которых горение сопровождается значительным саморазогревом, считали несущественной, так что причиной воспламенения и горения считали только саморазогрев (например, [1-5]). Казалось бы, отрицательные результаты попыток ингибирования детонации и детонационно-подобного горения [6,7] при атмосферном давлении являются подтверждением таких представлений. Например, неудача попыток авторов [6,7] ингибировать детонацию в [8] объясняется только с позиций тепловых факторов, а именно тем, что в этих работах малые присадки были слишком малы и, поэтому не изменяли тепловой эффект процесса и коэффициент адиабаты. В работе [4] утверждается, что свойства стационарной детонационной волны не могут изменяться от добавок небольших количеств химически активных веществ. Промотирование горения СО примесями углеводородов автор [4] объясняет крекингом присадки, отвергая роль реакции разветвления в виду ее эндотермичности. Ингибировать детонацию при атмосферном давлении не удавалось также в более поздних работах [9,10].

Лишь при давлении 0.066 атм. в смеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2$, разбавленной вдвое аргоном, было обнаружено, что добавки 5% CF_3Br уменьшают скорость детонации на 5% [11,12]. Область начальных давлений в этих экспериментах соответствует известному полуострову самовоспламенения водорода с кислородом [1] в координатах: начальная температура - начальное давление. В этой области начальных условий роль цепного механизма ранее не отрицалась.

Предотвращение детонации водородно-воздушных смесей любого состава с помощью 2.6% ингибитора в условиях работы прямоточного воздушно-реактивного двигателя осуществлено в работах [13,14]. При этих концентрациях ингибитора процесс переходил в режим дефлаграционного горения. В отсутствии же ингибитора детонация

происходила при содержаниях H_2 от 19 до 60% (об.) в хорошем согласии с литературными данными.

В работах [15,19], с использованием высокоэффективных ингибиторов на примере водородно-воздушных смесей было показано, что при начальном давлении 100 кПа с помощью 1.6-2% ингибитора можно предотвратить взрыв водородно-воздушных смесей при инициировании процесса гексогеном. В этих работах было показано также, что путем варьирования количества ингибитора можно регулировать интенсивность взрыва в условиях кумуляции. В работах [16,17] на примерах смесей водорода и синтез-газа с воздухом показано, что с помощью эффективных ингибиторов при начальных давлениях 100 и 600 кПа можно также разрушить ранее оформившуюся стационарную детонационную волну в трубах. Тем самым в серии исследований [15-17] была показана определяющая роль цепной лавины в процессах горения и взрыва водорода и синтез газа при атмосферном давлении и повышенных давлениях в указанных газовых смесях. Было выяснено, что в режимах взрыва и детонации закономерности горения газов подчиняются кинетическим законам, принципиально отличным от законов простых реакций, приписываемых этим процессам до этого и иногда также сейчас.

В указанных работах, однако, ингибирование взрыва и детонации проводилось в реакторах, имеющих форму цилиндра или конуса. Объем не превышал 0.2 м^3 . Известно, что возникновение взрыва и детонации во многом зависят от формы и объема реакционного пространства. Выяснение закономерностей ингибирования этих процессов в больших объемах представляет большой интерес как для теории этих процессов, так и для практики обеспечения взрывобезопасности.

Целью настоящей работы являлась выяснение возможности подавления с помощью ингибиторов возникновения сферической детонации в водородно-воздушной смеси при инициировании зарядом взрывчатого вещества, энергия которого превышает энергию прямого инициирования детонации в отсутствие ингибитора.

1. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Схема рабочего стенда представлена на рис.1. Газовый заряд объемом 7 м^3 был ограничен сферической тонкой резиновой оболочкой, размещенной в защитной взрывной камере (рис.1).

Для инициирования воспламенения, измерения характеристик движения ударной волны и пламени внутри реакционного объема установлена стальная штанга, представляющая собой прямоугольный короб длиной 1.5м и сечением $80 \times 60 \text{ мм}^2$. Широкие стороны штанги изготовлены из стальных полос толщиной 0,8см, узкие - из полос 0.3см. У конца штанги, направленной к центру реактора, широкие стороны образуют клин. К этому же концу штанги крепится источник инициирования, включающий в себя заряд тэна (тетранитропентаэритрита) массой 2.7 г (15.5 кДж) и тонкую проволочку для его подрыва, взрывающуюся при подаче на нее импульса высокого напряжения (рис.2). Другой конец штанги соединяется со стаканом, на который надевается горловина резиновой оболочки и через который из реакционного объема выводятся провода от датчиков и от источника инициирования, а также осуществляется напуск газов. Стакан закреплен на массивном основании.

На широкой пластине штанги закреплены 4 пары датчиков: датчики давления фирмы РСВ (с резонансной частотой $\geq 500 \text{ кГц}$ и фронтом нарастания сигнала $\sim 1 \text{ мкс}$) и ионизационные датчики (рис. 3). Сигналы датчиков давления через блоки питания и усилители (482A22 или 482A18, производства фирмы РСВ, США) подаются на осциллографы TDC.

Заполнение реакционного объема исследуемым газом производилось с использованием высокоточных расходомеров. В ходе напуска газов в реактор и спустя еще 20 минут после заполнения компоненты перемешивались с помощью вентилятора.

Через 30 мин после отключения вентилятора производили взрыв заряда тэна, помещенного в центре реакционного объема. В работе использовали ингибитор АКМ, представляющий собой смесь 17% пропилена с пропаном [18].

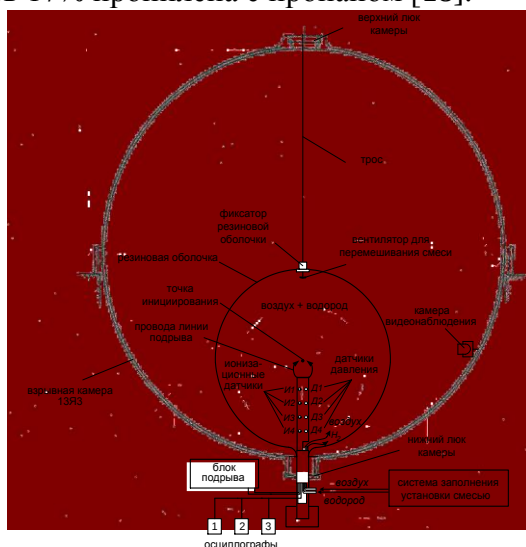


Рис.1. Схема экспериментальной установки.

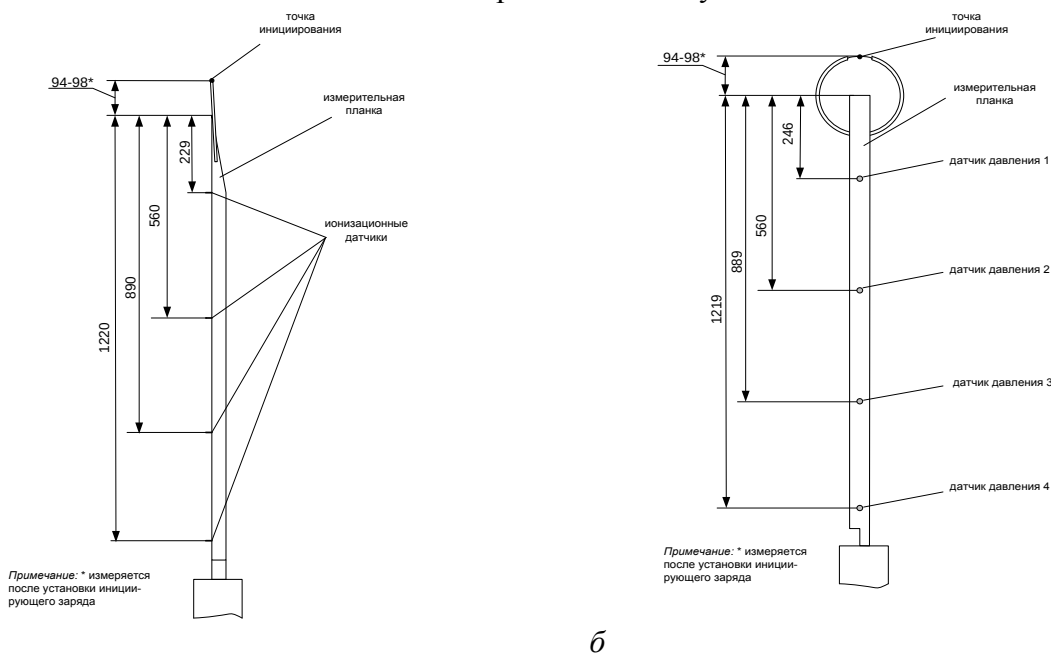


Рис.2. Расположение ионизационных датчиков (а) и датчиков давления (б).

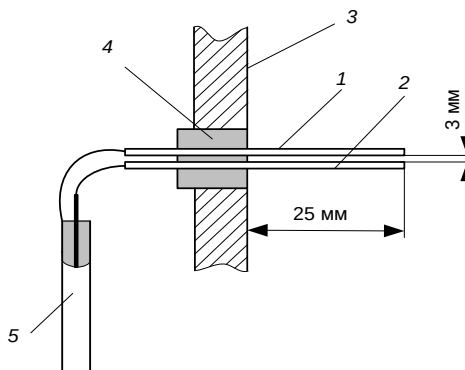


Рис.3. Устройство ионизационных датчиков. 1, 2 - стержневые электроды диаметром 1 мм; 3 - стенка измерительной планки; 4 - изолятор; 5 - подводящий экранированный кабель.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Полученные результаты представлены в таблице. Они показывают, что в отсутствие ингибитора в смеси с 30% H_2 начиная со второго датчика, где взрыв тэна уже не сказывается, рост взрывной волны фактически прекращается.

Скорости же продвижения ударной волны и фронта ионизации после прохождения первых 30см различаются не более чем на 1% и близки к известным из литературы величинам скорости детонационной волны для смеси этого состава [1]. Между 2-м и 3-м, 3-м и 4-м датчиками скорости ударной волны и фронта ионизации практически постоянны ~ 1870 м/с (в пределах погрешности измерений). При этом ударная волна опережает фронт ионизации на 3-4 мкс, что свидетельствует о том, что в реакционном объеме после прохождения второй пары датчиков уже формируется фактически стационарная детонационная волна. Поскольку фронты реакции горения и давления продвигаются практически совместно, то химическая реакция успевает подпитывать ударную волну энергией, необходимой для поддержания стационарной детонации.

Вместе с тем, данные таблицы показывают, что введение ингибитора даже в количестве 1.4% (об) настолько сильно уменьшает интенсивность взрыва газа непосредственно после инициирования, что предотвращается образование детонационной волны. Происходит монотонное уменьшение всех характеристик интенсивности горения, регистрируемые всеми датчиками. Действительно, из таблицы видно, что максимальное давление взрыва даже у первого датчика оказывается уменьшенным более чем втрое по сравнению со взрывом в отсутствие ингибитора и падает до десятых долей атмосферы по ходу продвижения волны. Резко уменьшаются также скорости продвижения фронтов давления и ионизации. При этом фронты давления и ионизации продвигаются с разными скоростями, фронт ионизации все больше отстает от фронта давления по ходу их продвижения. При увеличении содержания ингибитора подавление горения усиливается. При добавках 4,0% и более ингибитора взрыв тэна оказывается не в состоянии вызывать горение: ионизация не регистрируется даже у первого датчика.

Очевидно, что если бы реакция горения протекала в одну стадию, как это было принятым считать ранее, т.е. если бы исходные вещества реагировали только непосредственно между собой, то присадка в количестве 1.4% лишь уменьшила бы скорость процесса в такой же небольшой мере. Наблюдаемое же сильное влияние присадок показывает, что исходные реагенты расходуются именно в реакциях с активными промежуточными продуктами - с атомами и радикалами. Влияние ингибитора вызвано, прежде всего, тем, что он вступает в быстрые реакции с этими активными частицами, прежде всего с атомарным водородом, образуя малоактивные продукты фактически не способные участвовать в цепном процессе горения водорода:



Тем самым цепной путь реакции блокируется, и горение подавляется.

Полученные нами данные изучения детонации при атмосферном и повышенных давлениях показывают, что неудачные попытки ингибировать детонацию при атмосферном давлении в ранее выполненных работах не являются показателем теплового характера взрыва. Данные указанных работ свидетельствуют лишь о неспособности использованных присадок эффективно обрывать реакционные цепи, необходимые для протекания процессов в режим детонации.

Экспериментальные данные исследований [16-19] подтверждают вывод теории неизотермических цепных процессов том, что для предотвращения даже сильного взрыва, переходящего в детонацию, требуется меньше АКМ, чем для разрушения стационарной детонации.

Таблица.

Влияние добавки ингибитора на процесс горения водородно-воздушных смесей при иницировании зарядом тэна 2.7 г

Содержание H_2 в исходной смеси, % (об.)	Добавка ингибитора	Давление во фронте ударных волн*, P_{max} , ата,				Средняя скорость движения фронта давления, м/с				Средняя скорость фронта ионизации, м/с			
		$D1$	$D2$	$D3$	$D4$	$a \rightarrow D1$	$D1 \rightarrow D2$	$D2 \rightarrow D3$	$D3 \rightarrow D4$	$a \rightarrow И1$	$И1 \rightarrow И2$	$И2 \rightarrow И3$	$И3 \rightarrow И4$
30	0	19.67	18.74	23.50	24.58	1657	1768	1867	1870	1622	1761	1875	1854
30	1.4	4.65	2.45	1.56	1.54	13.83	643	498	428	760	103	46	26
30	1.6	4.38	2.26	1.55	3.47	13.83	603	484	423	856	-	-	-
30	2	3.03	2.02	1.423	1.233	1171	538	456	428	470	36	12	6
28	1.55	6.41	2.22	1.90	1.37	1207	676	426	424	815	188	39	25
29	2,5	3,57	1,72	1,42	1,21	1214	538	435	434	449	26	21	-
29	3,25	2,16	1,56	1,34	1,154	1284	478	438	417	38,9	8,7	5	-
29	3,8	2,78	1,548	1,292	1,183	1091	494	430	388	14,6	7,2	-	-
29	4,09	2,54	1,55	1,313	1,161	1086	497	430	398	горения не было			
29	4,2	-	1,52	1,22	1,175	1033	496	421	402	горения не было			

Примечания: *давление во фронте ударных волн определялось как сумма давления, зарегистрированное датчиком давления, и атмосферного (которое принято равным 1 атм); а - точка иницирования.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в настоящей работе установлено, что присадки ингибитора АКМ подавляют горение, взрыв и детонацию водородно-воздушных смесей. Приведенные в настоящей статье результаты совместно с данными [13-18] показывают, что путем ингибирования можно эффективно управлять взрывом и детонацией смесей водородсодержащих соединений с воздухом в реакционных объемах разного объема и разной формы.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Lewis B., Von Elbe G.* Combustion, Explosions and Flame in Gases. - N.Y.-L.: Acad. Press, 1987. - 592 p.
2. *Семенов Н.Н.* О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности. - М.: Изд-во АН СССР, 1958. - 686 с.
3. *Франк-Каменецкий Д.А.* Диффузия и теплопередача в химической кинетике. - М.: Наука, 1987. - 491 с.
4. *Соколик А.С.* Самовоспламенение, пламя и детонация в газах. - М.: Изд-во АН СССР, 1960. - 422 с.
5. *Варнатц Ю., Маас У., Дибба Р.* Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. - М.: Физматлит, 2003. - 351 с.
6. *Ривин М.А., Соколик А.С.* // Журнал физической химии. - 1937. - Т.18. - № 4-6. - С 692.
7. *Ривин М.А.* // Доклады АН СССР. - 1941. - Т.30. - №6. - С.498.
8. *Зельдович Я. Б., Компанеев А.С.* Теория детонации. - М.: Наука, 1958. - 268 с.
9. *Moen I.O., Ward S.A., Lee J.H., Westbrook C.K.* / 20th International Symposium on Combustion. - Pittsburgh. - 1984. - P.1717-1725.

10. *Borisov A.A., Kosenkov V.V., Mailkov A.E. et al.* Effect of Flame Inhibitors on Detonation Characteristics of Fuels // Progress in Astronaut. and Aeronaut. Ser. AIAA. -1993. -V. 153. - P. 312.
11. *Van Tiggelen P.J. n, Lefebvre M.H* / Halon Options Working Conference. - 1998. - P.131.
12. *Nzeyimana E., Van Tiggelen P.J.* // Dynamics of Detonations and Explosions. Progress in Stronautics and Aeronautics. Ser. AIAA. 1991. p.77
13. *Azatyany V.V., Aivazyany R.G., Vedeshkin G.K., Iskra V.A.* / International Symposium Hydrogen 12.- Buenos Aires. - 1998. -P.15.
14. *Azatyany V.V., Wagner G. Gg., Vedeshkin G.K.* // Gaseous and Heterogeneous Detonations. - Moscow. - ENAS Publishers, 1999. - P. 331.
15. *Азатян В.В., Набоко И.М., Петухов В.А. и др.* // Доклады академии наук.- 2004.-Т. 394. - № 1. - С. 61.
16. *Азатян В.В., Бакланов Д.И., Гордополова И.С. и др.* // ДАН. - 2007. - Т. 415.-№. 2. - С. 210 -213.
17. *Азатян В.В., Абрамов С.К., Бакланов Д.И. и др.*// Кинетика и катализ. - 2010. - Т. 51.- № . 4.-С. 492 - 498.
18. *Азатян В.В., Айвазян Р.Г., Калачев В.И. и др.* // Химическая физика. - 1998. -Т.17. -№ 2. -С.117.
19. *Набоко И.М., Бублик Н.П., Гусев П.А., Петухов В.А., Солнцев О.И.* Горение и взрыв водородно-воздушной смеси в условиях, моделирующих элементы объемов загазованных помещений // Химическая физика. - 2009. - Т. 28. - №5. - С. 27-34

РОЛЬ ХИМИЧЕСКИ НЕЙТРАЛЬНЫХ МИКРОЧАСТИЦ В РАЗВИТИИ ГОРЕНИЯ ГАЗОВЗВЕСЕЙ: ОТ ПОДАВЛЕНИЯ ДЕТОНАЦИИ ДО ИМПЛАНТАЦИИ ПРИМЕСИ В ПОДЛОЖКУ

Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Смыгалина А.Е., Яковенко И.С.

ФГБУН Объединённый институт высоких температур РАН, г.Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

На компьютерном эксперименте исследованы особенности динамики инертных микрочастиц в процессе горения газовзвесей с химически активной газовой компонентой от стадии воспламенения до формирования детонационной волны и расширения в пространство продуктов горения. Показано, что микрочастицы с размерами порядка микрона быстро релаксируют к газовому потоку, создаваемому движущимся фронтом пламени, увеличивая теплоёмкость и плотность образующейся газообразной дисперсной смеси. Крупные частицы черпают энергию и импульс от газообразных продуктов горения за фронтом пламени и поэтому слабо влияют на протекание процессов в зоне горения.

Ключевые слова: горение газовзвесей; воспламенение; детонация; имплантация микрочастиц

ВВЕДЕНИЕ

Горение газообразных горючих смесей уже более столетия является темой многочисленных научных исследований. Развитие процесса в этом случае определяется энерговыделением за счёт экзотермических химических реакций во фронте пламени, распространяющемся в пространстве, и взаимодействием фронта пламени с течениями, формирующимися в результате энерговложения в среде. Физика процесса усложняется, когда горение происходит в горючей газовой смеси, содержащей микрочастицы (в газовзвеси). В общем случае включение в горючую газообразную среду микрочастиц изменяет как суммарную энергию, так и суммарный импульс смеси. В случае, когда при нарастании температуры смеси за счёт горения возникает возгорание частиц, резкое увеличение удельной энергии горючей газовой компоненты и газообразных продуктов горения может приводить к тепловому взрыву или прямому инициированию детонации. Наличие в смеси химически нейтральных частиц снижает интенсивность развития всех стадий горения от воспламенения до перехода в детонацию, вплоть до полного гашения пламени. В тоже время передача части энергии и импульса потока увлечённым и ускоренным потоком микрочастицам с плотностью много большей плотности газовой компоненты приводит к локализации этих динамических характеристик в малых объёмах смеси. Это увеличивает интенсивность воздействия гетерогенного потока на твёрдотельные преграды, что повышает эффективность разрушения преград, либо внедрение микрочастиц в подложку. Дополнительным фактором воздействия частиц на динамику газовзвеси является энерговложение в среду за счёт поглощения теплового излучения из зоны горения частицами с дальнейшей передачей части этой энергии газовой компоненте. Последнее не реализуется в смеси без частиц, где длина пробега излучения составляет сотни метров.

В настоящей работе ограничимся случаем химически нейтральных негорючих микрочастиц. Выбранная модель является основой для анализа широкого круга задач горения гетерогенных сред, включая возгорание взрывоопасной смеси распространяющейся в запылённой среде в результате техногенной аварии, горение гетерогенных ракетных топлив, имплантацию микрочастиц на подложку с применением взрывных технологий, высокотемпературный гетерогенный синтез. Проблема состоит в том, что уменьшающее химическую активность горючей газовой смеси охлаждение

зоны горения в результате затрат тепла на нагрев и возможное испарение твердотельных микрочастиц, а также степень ускорения частиц в зоне горения и вне её зависят не только от массовой концентрации частиц, но и от их объёмной концентрации, определяющей суммарную площадь энергообмена между химически активным газом и нейтральными частицами, что создаёт достаточно сложный механизм, определяющий динамику горючей гетерогенной среды. Наиболее чувствительными к взаимодействиям между частицами и газовой средой являются переходные процессы: воспламенение или прямое инициирование детонации от сторонних, импульсами энерговложения, переход медленного горения в детонацию, ускорение частиц при прохождении через них детонационных волн или волн горения. Эти переходные процессы были предметом исследований, результаты которых представлены ниже.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Динамика горения гетерогенного потока описывалась трёхмерной двухскоростной двухтемпературной математической моделью сплошной среды. Рассматривалась динамика микрочастиц при горении в каналах водородно-кислородной или водородно-воздушной смесей. В принятом приближении поток частиц, так же как и поток несущего газа, были представлены в континуальном приближении, в котором динамика частиц определяется уравнениями переноса, подобными уравнениям газодинамики.

Континуальное описание для ансамбля частиц возможно в том случае, когда можно указать геометрический масштаб, который, с одной стороны, пренебрежимо мал по сравнению с характерным масштабом изменения параметров течения, а, с другой стороны, достаточно большой, чтобы содержать количество частиц, обеспечивающее корректное описание их осредненных параметров [1]. Если за L_g обозначить характерный масштаб задачи, а за L масштаб, содержащий количество частиц, обеспечивающее их корректное усреднение, то согласно [1] континуальное описание дисперсной фазы будет корректно, если $L < L_g$, где

$$L = d_p \sqrt[3]{\frac{\pi N_p}{6F}} \quad (1)$$

где F - объёмная концентрация частиц.

К примеру, для частиц диаметром 50мкм и $F=10^{-3}$ масштаб $L \approx 1.9$ мм, а для частиц диаметром 100мкм и $F=10^{-4}$ имеем $L \approx 8$ мм, что уже может быть сопоставимо с характерным масштабом течения. В настоящей работе рассматривались частицы размерами от 0.1мкм до 100мкм с объёмной концентрацией $5 \cdot 10^{-6}$ - $5 \cdot 10^{-5}$, что позволяло считать выбор континуального описания динамики частиц вполне оправданным. При выбранных концентрациях и размерах частиц можно пренебречь взаимодействием частиц друг с другом и из всех сил, действующих на движущиеся в газе частицы, ограничится только стоксовской силой трения. В этом случае уравнения, описывающие динамику континуума частиц приобретают вид [2]

$$\frac{\partial N_p}{\partial t} + \nabla(N_p \vec{u}_p) = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial \vec{u}_p}{\partial t} + (\vec{u}_p \nabla) \vec{u}_p = \vec{F}_{St} \quad (3)$$

$$\frac{\partial T_p}{\partial t} + (\vec{u}_p \nabla) T_p = Q_{gp} \quad (4)$$

где N_p - число частиц в единице объема, u_p - скорость частиц, T_p - температура частиц, r_p - радиус частиц, $c_{p,p}$ - теплоемкость материала частиц, ρ_{p0} - плотность материала частиц. Взаимодействие газовой компоненты с дисперсной фазой реализуется через

источниковый член в уравнении для импульса, который описывает силу сопротивления для частиц, движущихся в потоке несущей газовой фазы. При этом сила сопротивления выбирается как стоксовская сила

$$\vec{F}_{St} = \frac{1}{\tau_{St}} (\vec{u} - \vec{u}_p) ; \quad \tau_{St} = \frac{m_p}{6\pi r_p \mu_g} \quad (5)$$

где m_p - масса частицы, μ_g - молекулярная динамическая вязкость газа. Межфазный теплообмен учитывается в форме источникового члена в правой части уравнения (4)

$$Q_{gp} = \frac{3\kappa Nu}{2r_p^2 c_{p,p} \rho_{p0}} (T_g - T_p) ; \quad \tau_Q = \frac{2r_p^2 c_{p,p} \rho_{p0}}{3\kappa Nu} \quad (6)$$

Где κ - коэффициент молекулярной теплопроводности газа, а Nu - число Нюсельта. В расчетах Nu выбиралось равным 2.0, что с высокой степенью точности согласуется с воспроизводимыми режимами течений.

В основу математической модели динамики горючей газовой компоненты были положены уравнения газодинамики вязкой сжимаемой среды с учетом теплопроводности, многокомпонентной диффузии [3], а так же выделения энергии в зоне реакции за счёт химических превращений. Как и в модели динамики частиц обмен импульсом между твёрдотельной и газовой фазами описывался на основе стоксовской силы (5), а межфазный теплообмен на основе соотношения (7). Коэффициенты вязкости, теплопроводности и диффузии газовой смеси определялись, исходя из известных соотношений кинетической теории газов для многокомпонентных сред, и являлись функциями температуры и состава газовой смеси. Уравнения состояния свежей смеси и продуктов горения (в случае химически активного газа) задавались таблично на основании экспериментальных данных для отдельных компонент смеси. Для описания кинетики горения водорода использовалась хорошо зарекомендовавшая себя редуцированная схема Варнатца. Система уравнений двухскоростной двухтемпературной газодинамики решалась в 2-х и 3-х мерной постановках численно «свободно лагранжево-эйлеровым» методом [4], многократно ранее использованным авторами для численного моделирования процессов горения и давшим результаты, хорошо согласующиеся как с тестовыми решениями, так и с экспериментальными данными [5-8].

2. ДИНАМИКА МИКРОЧАСТИЦ ПРИ ГОРЕНИИ ГАЗОВЗВЕСЕЙ

3.1. Влияние частиц на параметры горения в области фронта пламени

При анализе взаимодействия между частицами и газовым потоком естественным образом выделяются три пространственных области: область продуктов горения, фронт пламени, область свежей горючей смеси перед фронтом пламени. Частицы в области нагретых продуктов горения достаточно быстро приобретают за счёт теплообмена температуру практически равную температуре газовой смеси. При этом в случае относительно малой массовой концентрации частиц (в рассматриваемых здесь задачах эта концентрация лежала в интервале 0.002-0.2) температура за фронтом горения уменьшается, как правило, на 15-20%. При горении газовзвеси в канале динамика частиц определяется течениями, формируемыми в результате расширения продуктов горения. Если по каналу распространяется детонационная волна, то частицы могут достигать сверхзвуковой скорости по отношению к холодной смеси перед фронтом горения.

Во фронте пламени (области резкого падения концентрации горючей компоненты) частица пребывает примерно 10^{-5} - 10^{-4} секунды, и поэтому заметную долю выделяемой в результате экзотермической реакции энергии могут отбирать только малые частицы с диаметром менее 1.0мкм. На рис.1 приведено сравнение основных характеристик водородно-кислородной смеси в области фронта пламени в отсутствии частиц и когда

начальная объёмная концентрация частиц диаметром 1.0мкм в смеси составляет $5 \cdot 10^{-5}$. Видно, что во фронте пламени наличие частиц практически не меняет темп разогрева среды за счёт интенсивно протекающих экзотермических реакций. Однако далее часть энергии разогретых газообразных продуктов горения передаётся частицам, и температура газовой компоненты падает. Заметим при этом, что с падением температуры наблюдается уменьшение остаточной доли водорода в смеси и увеличение доли водяного пара. Парадоксальный факт кажущегося усиления реакции с уменьшением температуры среды объясняется тем, что уменьшение температуры среды в данном случае приводит к торможению протекания обратной реакции $\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2 + \text{O}_2$, что сдвигает состав продуктов горения в сторону водяного пара.

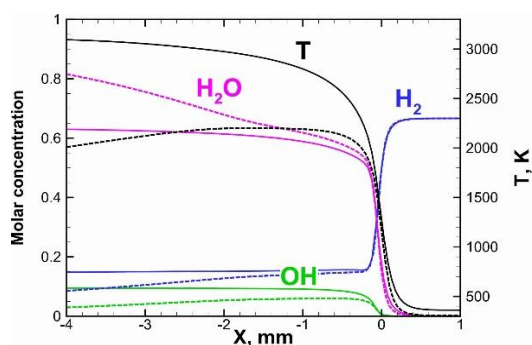


Рис.1. Состав газообразной компоненты в области фронта пламени. Сплошные линии - результаты расчётов без частиц, пунктирные - при наличии в смеси частиц.

3.2 Влияние частиц на воспламенение газозвеси

Ранее при решении задачи об инициировании волн горения локализованными распределенными во времени источниками энергоподвода [9] было выделено три основных временных масштаба, определяющих характер развития воспламенения и установление того или иного режима горения: время подвода энергии (Δt_Q), время воспламенения (τ_{ign}) и характерное акустическое время (τ_{ac}). Анализ показал, что для практики наиболее важными являются следующие сценарии воспламенения:

- 1) воспламенение от короткого энергоёмкого импульса ($\Delta t_Q \leq \tau_{\text{ac}}$ и $\tau_{\text{ign}} \leq \tau_{\text{ac}}$);
- 2) воспламенение от коротких импульсов, несущих малую энергию ($\Delta t_Q \leq \tau_{\text{ac}}$, тогда как $\tau_{\text{ign}} > \tau_{\text{ac}}$ или $\tau_{\text{ign}} \gg \tau_{\text{ac}}$);
- 3) воспламенение от протяженных импульсов энергии ($\Delta t_Q \gg \tau_{\text{ac}}$ и $\tau_{\text{ign}} \leq \Delta t_Q$).

В первом случае режим горения определяется условиями формирования ударной волны и волны реакции в результате теплового взрыва в эпицентре области энергоподвода. В зависимости от параметров ударной волны и волны реакции возможно формирование режима медленного горения за отходящей ударной волной или детонационного режима, определяемого совместным распространением ударной волны и волны реакции в пространстве. При этом вблизи критического значения подводимой энергии, обеспечивающей формирование детонации, возможно наблюдение переходного режима формирования детонации [10], в процессе развития которого волна реакции переходит в детонационную в потоке за отошедшей ударной волной [11].

В случаях (2) и (3) расширение нагретого газа из области энергоподвода на относительно больших временах τ_{ign} обеспечивает выравнивание давления в области горячего пятна и перераспределение тепловой энергии в пространстве. В результате этого в окрестности области энергоподвода формируется градиент температуры. В случае (2) в условиях непрерывного уноса тепловой энергии из области энергоподвода на временах $t >$ или $\gg \Delta t_Q$ воспламенение становится маловероятным. С другой стороны, подвод энергии на этой стадии в случае (3) обеспечивает условия для успешного воспламенения. Воспламенение в данном случае реализуется по механизму Зельдовича формирования спонтанной волны горения на градиенте температуры, и в зависимости от параметров

сформированного градиента может сформироваться как волна горения, так и волна детонации.

В горючих газообразных смесях, засеянных микрочастицами, следует выделить еще два характерных временных масштаба, определяющих инерционность частиц (τ_{st}) и интенсивность теплообмена на поверхности частиц (τ_Q). Для микронных частиц эти времена принимают значения порядка 50 мкс и 500 мкс соответственно. Таким образом, следует оценивать роль таких частиц малой при развитии воспламенения, инициированном короткими энергоёмкими импульсами с длительностью порядка 0.1-1.0 мкс. В этом случае эффект от присутствия в потоке микрочастиц, тем не менее, можно ожидать в области реализации переходных режимов инициирования детонации, непосредственно вызванных энерговложением. С другой стороны, эффекты, связанные с присутствием взвешенных микрочастиц, будут становиться ярче при рассмотрении протяженных импульсов энергоподвода с $\Delta t_Q \sim 100-1000$ мкс. С учетом выше сказанного в рамках настоящего исследования была проведена серия расчетов инициирования детонации в переходном режиме короткими импульсами энергоподвода и инициирования волн горения и детонации протяженными импульсами энергоподвода. Все расчёты проводились для вариантов как с отсутствием микрочастиц, так и с частицами разного диаметра и разной массовой концентрации. Ниже представлены результаты расчетов.

Для выявления эффекта тушения частицами детонации, инициируемой в переходном режиме после короткого энерговложения рассматривалась стехиометрическая водородно-кислородная смесь, при нормальных условиях ($T_0=300\text{K}$, $P_0=1\text{атм}$), $\Delta t_Q=0.1\text{мкс}$. На рис.2а представлены скорости фронтов реакции и ударных волн, генерируемые коротким импульсом энерговложения в зависимости от массовой концентрации частиц $\alpha_p = \rho_p/\rho_g$, а на рис. 2б те же параметры в зависимости от радиуса частиц r_p .

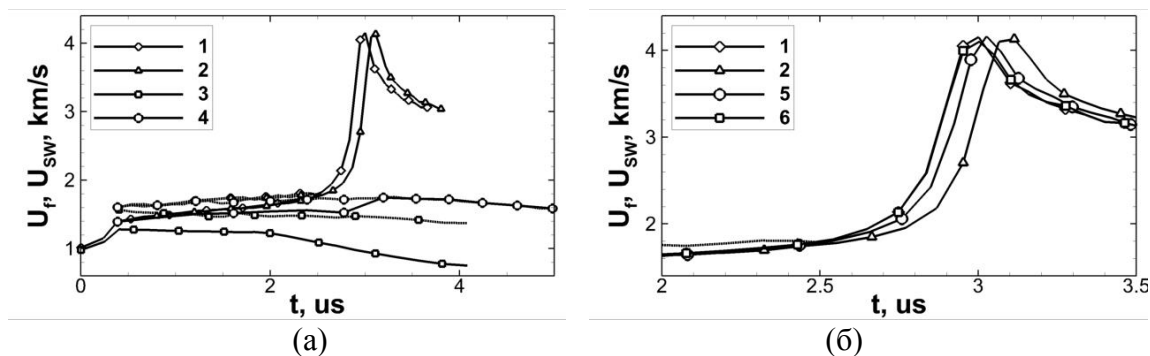


Рис.2. Скорости фронтов реакции и ударных волн, генерируемые коротким импульсом энерговложения в зависимости от массовой концентрации частиц: 1) без частиц, 2) $r_p=1.0\text{мкм}$, $\alpha_p=0.002$, 3) $r_p=1.0\text{мкм}$, $\alpha_p=0.02$, 4) $r_p=1.0\text{мкм}$, $\alpha_p=0.2$, 5) $r_p=0.5\text{мкм}$, $\alpha_p=0.002$, 6) $r_p=10.0\text{мкм}$, $\alpha_p=0.002$. Сплошными кривыми показаны хронограммы скоростей фронта реакции (U_f), штриховыми - ударных волн (U_{sw}).

Из полученных результатов можно видеть, что значительно большую роль в изменении динамики фронта горения играет массовая концентрация частиц нежели их размер. При этом возрастание массовой концентрации частиц приводит к непосредственному быстрому гашению поджига уже при $\alpha_p=0.2$. С другой стороны, наиболее эффективно на рассматриваемый процесс оказывают влияние частицы размеров порядка 1 мкм, тогда как частицы больше 10 мкм не оказывают практически никакого влияния (кривые на 1 и 6 на рис.2б практически совпадают), равно как и более мелкие ($<1\text{мкм}$).

Стоит отметить, что перенос теплового излучения на стадии воспламенения играет чересчур малую роль, т.к. определяется в первую очередь характерными временами теплообмена нагреваемых излучением частиц и окружающего газа. Расчеты с учетом

излучения в одnogрупповом приближении показали незначительное отличие от расчетов без его учета.

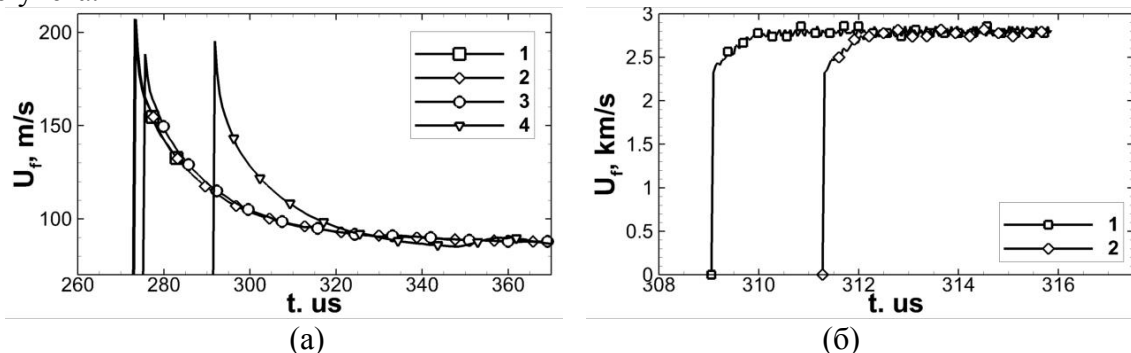


Рис.3. Скорости фронтов реакции при (а) воспламенении от протяженного импульса энергоподвода в зависимости от массовой концентрации частиц: 1) без частиц, 2) $r_p=1.0\mu m$, $\alpha_p=0.002$, 3) $r_p=1.0\mu m$, $\alpha_p=0.02$, 4) $r_p=1.0\mu m$, $\alpha_p=0.2$; и (б) инициировании детонации: 1) без частиц, 2) $r_p=1.0\mu m$, $\alpha_p=0.2$.

Для анализа влияния микрочастиц на развитие воспламенения от протяжённого по времени импульса энергоподвода рассматривалась стехиометрическая водородно-кислородная смесь, при нормальных условиях ($T_0=300K$, $P_0=1atm$), $\tau_{ign}\sim 300\mu s$. Из рис.3а видно, что в рассматриваемых вариантах, как массовая концентрация частиц, так и их размеры хотя и замедляют «вспышку» горючей смеси, однако, практически не влияют на развитие воспламенения на дальнейшей стационарной стадии распространения волны горения от места энерговложения. Аналогичная тенденция имеет место при инициировании детонации идентичным источником энергии в смеси при повышенном начальном давлении ($P_0=10atm$, рис.3б).

3.3. Влияние микрочастиц на переход медленного горения в детонацию при распространении пламени по каналу

Исследуем влияние микрочастиц на переходные процессы при распространении пламени по газовзвеси в 2-х и 3-х мерных каналах. Рассмотрим водородно-кислородную газовзвесь при нормальных начальных условиях. Смесь поджигается у закрытого конца канала, и далее вдоль канала в сторону открытого конца распространяется волна горения. В расчётах задавались частицы различного диаметра и различной объёмной концентрации в начальный момент равномерно распределённые в газе. В работах [11-13] были детально исследованы все стадии распространения пламени в гомогенных (без присутствия частиц) химически высокоактивных смесях, наблюдаемые в лабораторных экспериментах. Динамика фронта пламени на первой стадии определяется расширением продуктов горения непосредственно после поджига вблизи закрытой стенки. При этом фронт пламени искривляется, порождая широкий спектр возмущений. Далее в ходе развития гидродинамически неустойчивого фронта пламени в потоке с устанавливающимся неравномерным распределением массовой скорости по сечению канала, от малых значений в пограничном слое у стенок до максимальных вне пограничных слоев в центре канала, поверхность фронта пламени растет. Это приводит к увеличению суммарного притока свежего горючего к фронту и, тем самым, к увеличению скорости распространения пламени, наблюдаемом на второй стадии процесса. Рост скорости фронта пламени в этом случае можно описать экспоненциальной зависимостью. Рост скорости пламени приводит к формированию слабых ударных волн, которые при экспоненциальном росте скорости фронта образуются вдали от фронта впереди него, аналогично тому, как это происходит при движении ускоряющегося поршня в газовой среде. С развитием процесс переходит в третью стадию, на которой за счет нелинейных факторов структура фронта пламени стабилизируется. На этой стадии волны сжатия образуют ударную волну непосредственно вблизи поверхности фронта, что

обеспечивается субэкспоненциальным (степенным) законом нарастания скорости. Таким образом, в зону горения теперь проникает уже предварительно сжатый и нагретый газ, что при его сгорании резко повышает давление на фронте пламени. Нарастающее давление на фронте пламени в свою очередь усиливает сжатие газа впереди фронта. Таким образом, создается самоподдерживающийся режим усиления пикового давления. На этой стадии скорость распространения пламени превосходит скорость звука в невозмущенной среде. При преодолении пламенем скорости звука впереди фронта формируется сверхзвуковая зона. Возмущения, генерируемые на фронте горения, оказываются локализованы между их источником и звуковой линией. По мере продолжения роста скорости пламени область локализации возмущений сужается. Одновременно усиливаются интенсивность головной ударной волны и пиковое давление на фронте пламени. В результате рост давления на четвертой стадии превосходит экспоненциальный. Преодоление пламенем локальной скорости звука приводит к последней, длящейся примерно 10мкс, стадии процесса формирования детонации на фронте пламени.

В случае, когда газообразная горючая смесь содержит микрочастицы, если их размер достаточно мал, то они подхватываются потоком и концентрируются в области сжатия перед фронтом пламени, размывая эту область и препятствуя росту давления перед фронтом на третьей стадии процесса. При заданном малом размере частиц и достаточно большой их концентрации диссипация энергии и импульса на частицах в зоне перед фронтом пламени делает энергию, выделяемую за счёт химической реакции, недостаточной для достижения фронтом пламени звуковой скорости, что не позволяет сформироваться детонационной волне по механизму, описанному в работах [11-13]. Количественные оценки подавления микрочастицами возникновения детонации в газозвеси можно получить из рис. 4. Из приведённых результатов видно, в частности, что достаточно крупные частицы размером 10-100мкм не успевают быть вовлечёнными в поток перед фронтом пламени, остаются в области продуктов горения и практически не влияют на ускорение пламени и, следовательно, на развитие процесса перехода к детонации. В тоже время частицы с микронными размерами эффективно предотвращают детонацию при объёмных концентрациях от 10^{-5} и более.

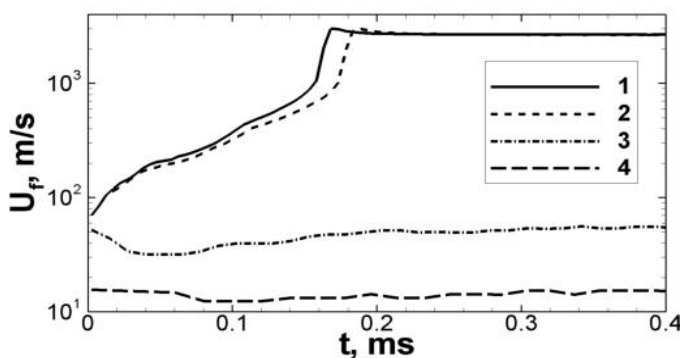


Рис.4. Хронограммы скорости фронта пламени в газозвеси при различных размерах и концентрациях микрочастиц: 1 - без частиц, 2 - $r_p=10.0\text{мкм}$, $\alpha_p=0.1$, 3 - $r_p=1.0\text{мкм}$, $\alpha_p=0.1$, 4 - $r_p=1.0\text{мкм}$, $\alpha_p=1.0$.

3.4. Импламентации в подложку микрочастиц, ускоряемых детонационной волной

Инициированная в канале, заполненном горючей газообразной смесью, детонационная волна, двигаясь к открытому концу канала, создаёт мощный газодинамический поток продуктов горения, который может быть эффективным ускорителем малых частиц, попадающих в него. Это явление можно считать заключительной стадией в рассматриваемой в настоящей работе последовательности динамических процессов, вызванных взаимодействием нейтральных частиц с волной

горения в газозвеси, содержащей газообразный горючий компонент. В настоящее время этот эффект был взят в основу одного из перспективных методов нанесения покрытий из микро- и наночастиц на твердотельную подложку [14, 15]. Частицы, переносимые потоком за фронтом ударной волны, частично оседают на твердотельной подложке, помещенной на заданном расстоянии от среза сопла. В зависимости от импульсных характеристик детонационной волны, от геометрии сопла и мишени, от размера и физико-химических свойств частиц меняется полезный расход частиц (процент частиц, достигших подложку) и распределение частиц на поверхности подложки. В настоящей работе из большого количества факторов, определяющих эффективность имплантации частиц в твердотельную подложку, выделим роль размера частиц в формировании гетерогенного потока. Рассмотрим ускорение частиц размеров от 0.1мкм до 100мкм, вызванное детонацией стехиометрической водородно-воздушной смеси. В качестве критерия для оценки эффективности процесса имплантации частиц будем руководствоваться требованием максимальной концентрации осевших частиц на подложке.

Примем следующую постановку задачи. В начальный момент времени полуоткрытый канал круглого сечения заданного диаметра (2см) заполнен стехиометрической водородно-воздушной смесью; в канал помещены микрочастицы заданного размера (от 0.1 до 100мкм); на расстоянии 1-2 калибров от среза канала расположена твердотельная преграда. Для анализа использовалось два разных задания начального расположения частиц: 1) рассматривались частицы, равномерно распределенные во всем объеме канала от области зажигания детонации до среза сопла; 2) рассматривались частицы, равномерно распределенные вблизи от среза сопла в тонком слое толщиной порядка 2.5% от всей протяженности канала. При компьютерном моделировании ускорения микрочастиц в потоке в постановке с прослеживанием их траекторий, как основной цели исследования, применение континуальной модели представляется нецелесообразным. В данном случае задача решалась в приближении малой массовой концентрации частиц α_p в газозвеси ($\alpha_p \ll 1$), что позволяло использовать приближение слабозаимодействующих частиц, не оказывающих влияние на характеристики потока. Полученные результаты были подтверждены дополнительными расчетами с использованием континуальной модели описания динамики гетерогенной среды. Газодинамика описывалась системой уравнений Навье-Стокса без учёта обратного влияния частиц на динамику потока.

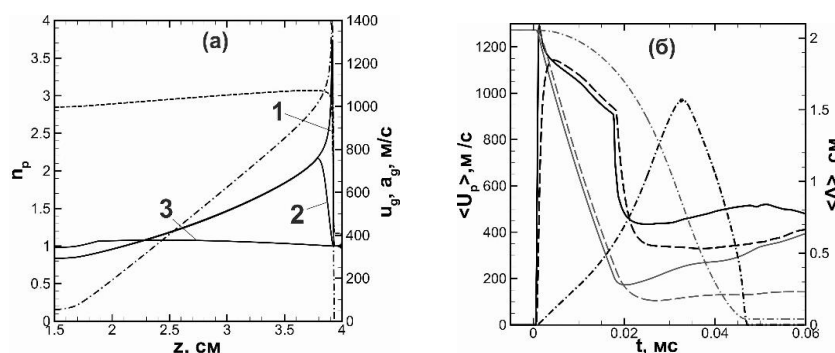


Рис.5. Характеристики потока частиц за детонационной волной. а. - Распределение частиц в канале в потоке за фронтом детонационной волны. На начальный момент времени частицы распределены равномерно в объеме, заполненном горючей смесью. Штриховая линия - профиль скорости звука в потоке за детонационной волной. Штрих-пунктир - массовая скорость в потоке за детонационной волной. Сплошные линии - профили удельной (отнесённой к начальной) концентрации частиц в потоке. Размеры частиц: 1 - 0.1мкм, 2 - 1.0мкм, 3 - 10.0мкм. б. - Хронограммы средней скорости частиц (жирные черные линии) и расстояния центра масс облака частиц от подложки (тонкие серые линии). В начальный момент частицы распределены в слое вблизи среза сопла. Размеры частиц:

сплошные линии - 1.0мкм, штриховые - 10.0мкм, штрих-пунктирные - 100.0мкм.
 $t=0$ мс - момент выхода детонации из канала.

Рассмотрим подробнее динамику развития процесса. Так как инерционность частиц определяется временем релаксации их скорости к скорости газового потока, которое пропорционально плотности и квадрату диаметра частиц $\tau_{st} \sim \rho d^2$, частицы одной плотности, но разного размера вовлекаются в поток на разных участках течения, формируемого детонационной волной. В работе рассмотрена динамика частиц с плотностью $\rho_0 = 1 \text{ г/см}^3$. Результаты численного моделирования показали, что частицы размером в 0.1мкм (100нм) ускоряются непосредственно в зоне химического пика детонационной волны между ударной волной и точкой Чепмена-Жуге. Частицы размером 1мкм ускоряются с некоторым опозданием, двигаясь за точкой Чепмена-Жуге. Частицы размером более 10мкм ускоряются намного позже, в области расширяющихся продуктов горения. Последнее совпадает с данными работ [15-17], где рассматриваются частицы с размерами более нескольких десятков микрон. Таким образом, детонационная волна частицы размером менее 1мкм ускоряет на начальной стадии до сверхзвуковых скоростей, в то же время более крупные частицы движутся за фронтом детонационной волны с дозвуковой скоростью, как это видно из рис.5а. Заметим, что на представленный момент времени частицы с $d=100$ мкм находятся в состоянии покоя. При этом для наиболее малых частиц масса частиц практически не влияет на их скорость в потоке, однако, с ростом размеров частиц, как и следует ожидать, более лёгкие частицы движутся с большей скоростью. На рис.5б показано изменение со временем основных характеристик облаков частиц разного размера. Видно, что полностью подложки достигает только облако частицы с $d=100$ мкм. Представленные на рис.5 результаты позволяют достаточно детально проследить динамику имплантируемых частиц от среза сопла до подложки. Так как движение мелких частиц практически совпадает с движением газовой фазы непосредственно за фронтом ударной волны, отраженная ударная волна почти мгновенно тормозит за своим фронтом подлетающие частицы размером порядка 1мкм и менее, препятствуя их оседанию на подложку. Крупные частицы (размером порядка нескольких десятков микрометров) не успевают ускориться непосредственно за фронтом ударной волны и вовлекаются только в формирующийся за ударной волной поток продуктов детонации. Накопленный этими частицами при движении в потоке импульс позволяет им частично преодолеть возвратные течения газовой компоненты и достаточно равномерно оседать на подложке. Использование частиц промежуточных размеров порядка 10мкм создаёт режимы имплантации, неустойчивые к изменению внешних условий. Так при увеличении расстояния от среза сопла до подложки в струйном течении развиваются сдвиговые неустойчивости и зарождается турбулентность, что может повлиять на развитие процесса имплантации именно частиц такого промежуточного размера. Часть из них может быть вовлечена в вихревое течение и далее выброшено из потока в невозмущенную область, что снижает количество имплантируемых частиц. Отраженные от подложки ударные волны также оказывают воздействие на частицы, искажая их траектории. Как показало численное моделирование, для всех размеров частиц полезный расход выше при изначальном распределении частиц в слое вблизи среза сопла, что используется в конструкции ряда установок детонационно-индуцированной имплантации [16]. При этом в случае ускорения микрочастиц в детонационной волне их полезный расход и равномерность напыления возрастают с ростом размеров микрочастиц. Так частицы диаметра $d_0=100$ мкм (при плотности $\rho_0=1.0 \text{ г/см}^3$) уже не чувствительны к переотраженным волнам в несущем потоке и распределяются по подложке достаточно равномерно. Заметим, что для размера частиц, наиболее часто используемых для имплантации в настоящее время (от нескольких десятков до сотни и более микрон), на транспортируемые детонационной волной частицы газодинамические возмущения несущего потока практически не оказывают заметного влияния. Однако для ускорения и переноса частиц размером порядка и менее 10мкм,

интерес к которым в связи с созданием наноструктурных магнитов и других перспективных материалов в настоящее время возрастает, эти возмущения играют существенную отрицательную роль. В этом случае становится актуальной проблема снижения газодинамических возмущений в зазоре между срезом сопла и подложкой, вызванных отражённой ударной волной. Можно показать, что влияние газодинамических возмущений существенно снижается, а полезный расход увеличивается при специальном подборе пространственной геометрии и пространственной ориентации подложки. Так в дополнительно проведенных расчетах как с вогнутыми, так и с выпуклыми профилями подложки было получено повышение эффективности имплантации мелких частиц размером порядка 10мкм по сравнению с достижимой при нанесении их на плоскую подложку. При отражении ударной волны от профилированной мишени вблизи выпуклых элементов профиля на ранних стадиях наблюдается полное обтекание такого элемента ударной волной. В результате локально отраженная волна несет меньший импульс, что позволяет частицам диаметром около 10мкм достигать поверхности и увеличивает вероятность их оседания вблизи выпуклых элементов профиля поверхности подложки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ результатов математического моделирования процессов горения газовзвесей (с достаточно малой концентрацией частиц) от их поджига до ускорения частиц расширяющимися продуктами горения за детонационной волной показывает принципиальное различие в динамике нейтральных частиц больших (диаметром от 10мкм и выше) и меньших размеров (диаметром от 1мкм и ниже). Более мелкие частицы даже при горении высокоактивных горючих смесей быстро захватываются потоком вблизи фронта пламени, приобретая скорость и температуру газовой компоненты, что создаёт односкоростную и однотемпературную горючую газовзвесь с удельной массой и теплоёмкостью, значительно большими, чем у исходного газообразного горючего. Развитие горения в такой газовзвеси повторяет процессы развития в исходной газовой компоненте, но большая её инертность приводит к торможению за счёт газодинамических факторов развития воспламенения, замедлению развития неустойчивости и ускорения фронта пламени. При этом большая теплоёмкость гипотетической смеси значительно снижает долю выделяемой энергии, переходящую в кинетическую энергию газа, не давая тем самым ускориться пламени до скоростей, необходимых для возбуждения детонации. Крупные же частицы, обладая большей инертностью, не успевают получить достаточную энергию от горючей компоненты в зоне горения, добывая её у продуктов горения вдали от фронта пламени. Таким образом, в движении крупных частиц отсутствует корреляция с особенностями динамики и термодинамики потока вблизи фронта горения. Эти частицы ведут себя по законам близким к законам механики для изолированных твёрдых частиц с заданной энергией и импульсом.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований РАН «Горение и взрыв».

ЛИТЕРАТУРА

1. *Вараксин А.Ю.* Турбулентное течение газов с твёрдыми частицами. М.:Физматлит, 2003. 192с.
2. *Волков К.Н., Емельянов В.Н.* Течение газа с частицами. М.: Физматлит, 2008. 598с.
3. *Нигматулин Р.И.* Динамика многофазных сред. Ч.1. М.: Наука, 1987. 464с.
4. *Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М., Метод крупных частиц в газовой динамике.* М.: Наука, 1982.

5. Ivanov M.F., Kiverin A.D., Liberman M.A. Hydrogen-oxygen flame acceleration antransition to detonation in channels with no-slip walls for a detailed chemical reaction model // *Phys. Rev. E*. 2011. 83. 056313-1-056313-16.
6. Ivanov M.F., Kiverin A.D., Liberman M.A. Flame acceleration and DDT of hydrogeneoxygen gaseous mixtures in channels with no-slip walls // *Intl. Journ. Hydrogen Energy*. 2011. 36. P 7714 - 7727.
7. Ivanov M.F., Kiverin A.D., Liberman M.A., Yakovenko I.S. Hydrogen-Oxygen Flame Acceleration and Deflagration-to-Detonation Transition in Three-dimensional Rectangular Channels with no-slip Walls.// *Intl. Journ. Hydrogen Energy*. 2013. 38. 36. P. 16427-16440.
8. Иванов М.Ф., Киверин А.Д. Влияние состава горючей смеси на развитие неустойчивости фронта пламени // *Химическая Физика*. 2010. Т.29. №2. С. 48 - 54.
9. Kiverin A.D., Kassoy D.R., Ivanov M.F., Liberman M.A. Mechanisms of ignition by transient energy deposition: regimes of combustion waves propagation.//*Physical Review E*, 2013.V.87(3). 033015-1-033015-9.
10. Bach G.G., Knystautas R., Lee J.H. Direct initiation of spherical detonations in gaseous explosive.// *Proc. Combust. Inst*. 1969. V. 12 P. 853-864.
11. Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Клумов Б.А., Фортвов В.Е. От горения и детонации к окислам азота.//*Успехи физ. наук*. 2014. Т.184, №3. С. 247-264.
12. Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Либерман М.А., Фортвов В.Е. Механизм ускорения пламени и переход в детонацию водородно - кислород-ной смеси в канале.// *Доклады Академии наук*. 2010. Т.434. №6. С. 756-759.
13. Liberman M.A., Ivanov M.F., Kiverin A.D., Kuznetsov M.S., Chukalovsky A.A., Rakhimova T.V. Deflagration-to-detonation transition in highly reactive combustible mixtures.//*Acta Astronautica*. 2010. V.67. P. 688-701.
14. Lim N.S., Das S., Park S.Y., Kim M.C., Park C.G., Fabrication and microstructural characterization of nano-structured WC/Co coatings. // *Surface and Coatings Technology*. 2010. V. 205. P.430-435.
15. Николаев Ю.А., Васильев А.А., Ульяницкий В.Ю. Газовая детонация и её применение в технике и технологиях.// *ФГВ*. 2003. V. 39. С.22-54.
16. Гавриленко Т.П., Николаев Ю.А., Ульяницкий В.Ю. Использование пересжатой детонации для нанесения покрытий.// *ФГВ*. 2010. Т.46, №3. С.125-133.
17. Semenov S.Y., Cetegen B.M. Experiments and modeling of the deposition of nano-structured alumina-titania coatings by detonation waves.// *Materials Science and Engineering*. 2002. A335. P.67-81

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕНЕРАЦИИ СВОБОДНЫХ ОГНЕННЫХ ВИХРЕЙ

Вараксин А.Ю.^{1, 2}, Протасов М.В.¹, Ромаш М.Э.¹, Щеголев Н.Л.²

¹ *ФГБУН Объединенный институт высоких температур РАН, г.Москва, Россия*

² *Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, г.Москва, Россия*

РЕЗЮМЕ

Показана возможность физического моделирования свободных концентрированных огненных вихрей без использования принудительной закрутки. Образование вихревых структур происходило при горении таблеток уротропина (гексаметиленetetрамина), располагаемых на подстилающей поверхности (лист алюминия). С использованием фотосъемки получены первые данные, касающиеся особенностей процесса генерации огненных вихрей. Проведены оценки некоторых интегральных параметров получаемых огненных вихревых структур (время жизни, высота, диаметр).

Ключевые слова: огненные вихри; свободные вихри; генерация вихрей

ВВЕДЕНИЕ

Вихревое течение является одной из основных форм движения сплошной среды. В огромном многообразии вихревых потоков отчетливо выделяются концентрированные вихри, широко распространенные в природе (воздушные, водяные смерчи и огненные смерчи, пыльные «дьяволы») и находящие свое применение во многих технических устройствах (вихревые топочные камеры и горелки, центробежные форсунки, циклонные сепараторы, вихревые трубы, различные турбулизаторы) [1-3]. Примеры огненных смерчей приведены на рис.1 и рис.2. Поэтому физическое моделирование концентрированных вихрей в лабораторных условиях является актуальной задачей.

Ограниченные стенками вихревые течения формируют посредством тангенциального соплового подвода среды, использования механических закручивающих устройств [4-7], интенсивного вращения корпусных элементов каналов (вращающихся труб). Генерацию свободных (не ограниченных стенками) концентрированных вихрей (в том числе и огненных) осуществляют, как правило, с использованием вентиляторов и/или путем вращения основания (подстилающей поверхности) экспериментальной установки [8-10]. Получаемые указанными способами стационарные вихревые потоки удобны для детального экспериментального изучения, однако их характеристики могут значительно отличаться от параметров реальных нестационарных вихревых структур, наблюдаемых, например, в земной атмосфере.

Исследование свободных нестационарных концентрированных вихрей осложнено вследствие целого ряда причин - спонтанности образования, пространственно-временной неустойчивости, практической невозможности управления характеристиками и т.д. Указанные выше особенности стали причиной того, что к настоящему времени практически отсутствуют экспериментальные работы, где получены результаты по устойчивости и динамике свободных нестационарных концентрированных вихрей, приемлемые для верификации математических моделей. Исключением являются работы авторов по изучению возможностей генерации и управления поведением свободных нестационарных воздушных вихрей [11-13].

Целью настоящей работы является демонстрация принципиальной возможности генерации свободных концентрированных огненных вихрей в лабораторных условиях без использования механических закручивающих устройств, а также оценка их интегральных параметров.



(а)



(б)

Рис.1. Примеры огненных смерчей: а) огненный смерч (Будапешт, Венгрия, 2011 г.); б) огненный смерч во время лесного пожара в Помосковье (2010 г.). Источник: www.photofile.ru

1. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА И РЕЗУЛЬТАТЫ

Для генерации нестационарных огненных вихрей использовалась простая установка, схема которой показана на рис.2. Она располагалась в комнате с полом 1 площадью 6х6 м², потолком 2 высотой 3.3 м на расстоянии 0.5 м от одной из стен 3. Экспериментальная установка представляла собой стол 4 высотой 0.35 м, имеющий три ножки 5. В качестве горизонтальной поверхности стола 4 выступал лист алюминия (марка Д16АМ) диаметром 1100 мм и толщиной 1.5 мм. Верхняя (подстилающая) поверхность алюминиевого листа была зачернена жаростойкой краской. Перед проведением экспериментов в центральной части подстилающей поверхности размещались таблетки уротропина 6 (гексаметиленetetрамин, химическая формула - $C_6H_{12}N_4$). Масса каждой таблетки - 21 г (диаметр 40 мм). Теплота сгорания уротропина - 30 МДж/кг.

Эксперименты проводились для разного количества горючего (числа таблеток). Первый, второй и третий режимы соответствовали случаям горения одной, семи и девятнадцати таблеток соответственно. Так для режима №3 девятнадцать таблеток располагались в центре подстилающей поверхности, формируя вписанный в окружность (диаметр 300 мм) шестиугольник (рис.3). При проведении эксперимента они поджигались, формируя пламена 7 (рис.2). В процессе горения таблеток наблюдалась генерация огненных вихрей 8 (рис.2), высота которых, как правило, существенно превосходила среднеинтегральную высоту пламени над областью расположения горючего.

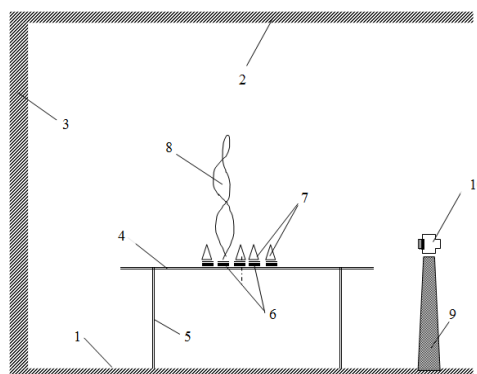


Рис.2. Схема экспериментальной установки для изучения огненных вихрей.



Рис.3. Схема расположения таблеток уротропина (гексаметилентетрамина) на подстилающей поверхности (режим №3).

Фотосъемка процесса горения и генерируемых вихревых структур проводилась с использованием располагаемого на стойке 9 цифрового фотоаппарата 10 (модель Canon SX20, Япония). Измерения температуры воздуха проводились с использованием хромель-алюмелевой термопары.

Описанная простая экспериментальная установка позволяет осуществлять сжигание твердого горючего с выделением контролируемого количества теплоты, а также фотосъемку некоторых особенностей процесса сгорания таблеток и генерации огненных вихрей.

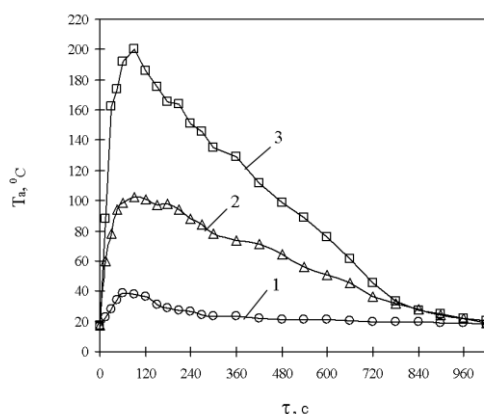


Рис.4. Распределения температуры воздуха: 1 - режим №1; 2 - режим №2; 3 - режим №3.

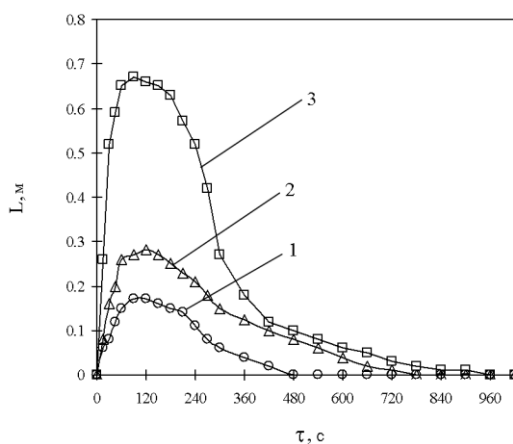


Рис.5. Зависимости высоты пламени над центром подстилающей поверхности: 1 - режим №1; 2 - режим №2; 3 - режим №3.

Зависимости температуры воздуха от времени на расстоянии 1 м от центра подстилающей поверхности и максимальной (над центром поверхности) высоты пламени для разных режимов приведены на рис.4 и рис.5 соответственно.

Сильная зависимость высоты пламени (так же как и температуры воздуха) от времени связана с существенной нестационарностью процесса горения таблеток горючего. Сначала они разгораются - это приводит к росту высоты пламени. Затем следует непродолжительный период относительной стабилизации (высота пламени изменяется слабо) и вскоре начинается достаточно продолжительный период их затухания. Следует заметить, что процесс горения обладает и собственной высокочастотной нестационарностью (неустойчивостью).

Образующиеся (наблюдаемые) вихревые структуры также являются существенно нестационарными и характеризуются относительно небольшими временами жизни и пространственно-временной нестабильностью параметров (высота, диаметр, характерная скорость и др.).

В процессе горения таблеток наблюдалась генерация огненных вихревых структур, высота которых, как правило, значительно (до 2-3 раз) превосходила среднеинтегральную высоту фронта пламени над областью расположения горючего (рис.6). При этом признаком возникновения огненных вихревых структур также являлось появление винтовых траекторий у нагретых частиц продуктов сгорания.

Многократное повторение опытов позволило сделать следующие заключения. Образование огненных вихревых структур наблюдалось лишь при сжигании семи и девятнадцати таблеток горючего, т.е. при работе на режимах №2 и №3. Количество и размеры генерируемых вихрей были значительно больше при работе на режиме №3, который и был выбран в качестве основного.

Фотосъемка производилась в ручном режиме с выдержкой 0.01 с. Покадровый анализ позволяет получать информацию о следующих параметрах процесса генерации огненных вихрей и их интегральных характеристиках: 1) временной диапазон образования огненных вихревых структур; 2) область возникновения огненных вихрей; 3) количество наблюдаемых огненных вихрей за один эксперимент; 4) время жизни огненных вихревых структур; 5) высота огненных вихрей; 6) диаметр огненных вихрей.

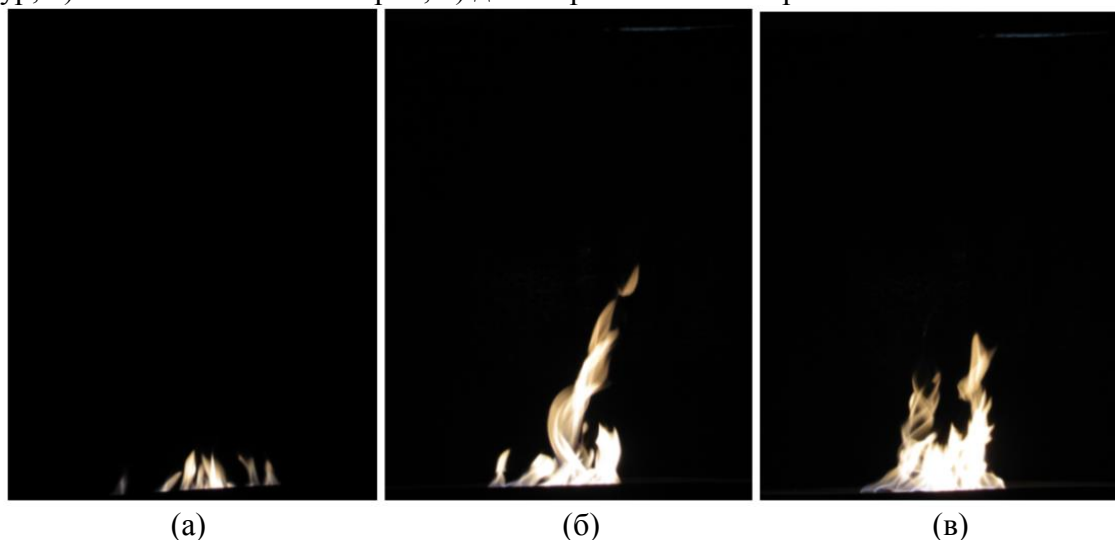


Рис.6. Типичные фотографии (режим №3, размер изображений 840x1100 мм): а) обычное горение уротропина; б) зафиксированный огненный вихрь; в) зафиксированные два огненных вихря.

Многократное проведение экспериментов (режим №3) позволило сделать несколько важных заключений. Первые огненные вихри начинали образовываться через 4 минуты, а самые последние - через 12 минут после поджога таблеток. Генерация огненных вихревых структур происходила как в центре области расположения горючего, так и на ее

периферии. Количество фиксируемых огненных вихрей - до 15 за один эксперимент. Несколько раз в экспериментах наблюдалась практически одновременная генерация сразу двух огненных вихревых структур (см. рис.6в). Время жизни подавляющего большинства генерируемых вихрей составляло от 1 до 5 секунд; наибольшая высота огненных вихрей достигала 0.7 м, а их максимальный диаметр 0.05 м.

Процесс формирования огненного вихря, вероятно, сопровождается заметным радиальным притоком воздуха со всех направлений к основанию основного (центрального) конвективного потока и сопутствующим закручиванием потока относительно вертикальной оси вследствие наличия градиентов скоростей и температур. Поток продуктов сгорания в огненном вихре состоит из комбинации относительно тонких вихревых нитей, вращающихся и взаимодействующих друг с другом.

Таким образом, в работе показана принципиальная возможность физического моделирования огненных вихрей без использования принудительной закрутки. Генерируемые огненные вихревые структуры являются лабораторными аналогами огненных вихрей и смерчей, часто возникающих при лесных пожарах и возгораниях на больших площадях в городских районах при плотной застройке, а также на лесоперерабатывающих и предприятиях.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Показана принципиальная возможность физического моделирования свободных концентрированных огненных вихрей в лабораторных условиях без использования механических закручивающих устройств. Описана простая экспериментальная установка, позволяющая осуществлять генерацию нестационарных огненных вихревых структур путем сжигания твердого горючего (уротропина), располагаемого на металлической подстилающей поверхности. С использованием фотосъемки получены некоторые данные об условиях генерации и интегральных параметрах огненных вихрей.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН «Горение и взрыв» (координатор - академик В.А.Левин).

ЛИТЕРАТУРА

3. *Скорер Р.* Аэрогидродинамика окружающей среды. - М.: Мир, 1980. - 552 с.
4. *Вараксин А.Ю., Ромаш М.Э., Конейцев В.Н.* Торнадо. - М.: Физматлит, 2011. - 344 с.
5. *Наливкин Д.В.* Ураганы, бури и смерчи. Географические особенности и геологическая деятельность. - Л.: Наука, 1969. - 487 с.
6. *Ying S.J., Chang C.C.* Exploratory model study of tornado-like vortex dynamics // J. Atmospheric Sciences. - 1970. - V.27. - №1. - P.3-14.
7. *Wan C.A., Chang C.C.* Measurement of the velocity field in a simulated tornado-like vortex using a three-dimensional velocity probe // J. Atmospheric Sciences. - 1972. - V.29. - №1. - P.116-127.
8. *Ward N.B.* The exploration of certain features of tornado dynamics using laboratory model // J. Atmospheric Sciences. - 1972. - V.29. - №9. - P.1194-1204.
9. *Church C.R., Snow J.T., Agee E.M.* Tornado vortex simulation at Purdue University // Bull. Amer. Meteor. Soc. - 1977. - V.58. - №9. - P.900-908.
10. *Гришин А.М., Голованов А.Н., Суков Я.В.* Физическое моделирование огненных смерчей // ДАН. - 2004. - Т.395. - №2. - С.196-198.
11. *Гришин А.М., Голованов А.Н., Колесников А.А., Строкатов А.А., Цвык Р.Ш.* Экспериментальное исследование тепловых и огненных смерчей // ДАН. - 2005. - Т.400. - №5. - С.618-620.

12. *Haan F.L., Sarkar P.P., Gallus W.A.* Design, construction and performance of a large tornado simulator for wind engineering applications // *Engineering Structures*. - 2008. - V.30. - P.1146-1159.
13. *Varaksin A.Yu., Romash M.E., Kopeitsev V.N.* Tornado-like non-stationary vortices: experimental modelling under laboratory conditions // *Natural Science*. - 2011. - V.3. - №11. - P.907-913.
14. *Varaksin A.Y., Romash M.E., Kopeitsev V.N., Gorbachev M.A.* Experimental study of wall-free non-stationary vortices generation due to air unstable stratification // *Int. J. Heat Mass Transfer*. - 2012. - V.55. - P.6567-6572.
15. *Varaksin A.Y., Romash M.E., Kopeitsev V.N.* Effect of net structures on wall-free non-stationary air heat vortices // *Int. J. Heat Mass Transfer*. - 2013. - V.64. - P.817-828.

К ВОПРОСУ О ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ С УГЛЕВОДОРОДАМИ

Мурамович В.Г.

*ФГБУН Институт проблем транспорта им. Н.С.Соломенко РАН,
г.Санкт-Петербург, Россия*

РЕЗЮМЕ

Исследована теоретически и экспериментально модель взаимодействия переменных электрических полей с молекулами углеводородов. Получены аналитические зависимости, связывающие между собой основные характеристики электрического поля - частоту и напряженность, физические характеристики углеводородов - плотность и диэлектрическую проницаемость и геометрические размеры активной части рабочей камеры, в которой происходит взаимодействие. Приводятся экспериментальные результаты испытаний двигателей внутреннего сгорания на модифицированном топливе.

Ключевые слова: переменное электрическое поле, углеводородное топливо, удельный расход углеводородного топлива, октановое число модифицированного топлива, экологические характеристики двигателей внутреннего сгорания.

ВВЕДЕНИЕ

Процессы сгорания топлива во многом определяются количеством свободных радикалов в нем и их энергетическим состоянием, определяемым реакцией на внешние физические поля: тепловые, магнитные и электрические. Истоки этих подходов уходят в 40-е годы XX-го века, когда А.Г.Гуревич, изучая излучение высокомолекулярных соединений, обнаружил эффекты самопроизвольного изменения числа и состояния радикалов под действием разового, относительно небольшого внешнего воздействия. Радикалы возникают под воздействием на топливо специально подобранного слабого электромагнитного или статического магнитного поля. В результате увеличения количества свободных радикалов в топливовоздушной смеси приводит к более полному сгоранию топлива и, как следствие, к снижению уровня выбросов окиси углерода и углеводородов.

Характерное жидкое топливо для двигателей внутреннего сгорания содержит от сотен до тысяч углеводородных соединений, где среднее количество атомов углерода в молекуле составляет 7-8, а водорода - 10-11. При воздействии электромагнитного импульса на молекулы происходит их деструкция. В результате удастся получить дочерние молекулы с малым содержанием углерода и низкой молекулярной массой, которые обладают более высокой теплотой сгорания. Таким образом, формально появляется возможность уменьшения удельного расхода топлива двигателем. Появление в топливной системе молекулярных комплексов с меньшим числом атомов углерода приводит к тому, что меняется температура воспламенения и характер его горения. В конце XX-го века в печати появилось несколько статей [1-3], где изложены эксперименты по воздействию на углеводороды постоянных и переменных электрических полей и магнитного поля. Основными результатами этих экспериментов являлись увеличение теплоты сгорания топлива, уменьшение его вязкости и температуры вспышки. Так, в частности, на рис.1,2 приводятся данные по приросту теплоты сгорания дизельного и реактивного топлива ТС-1 после воздействия на него сильного постоянного электрического поля, полученные в работе [1].

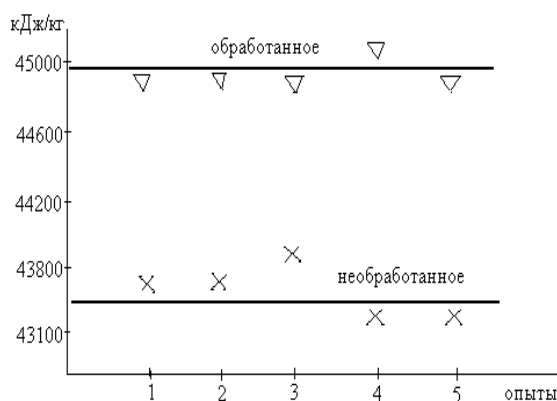


Рис.1. Прирост теплоты сгорания
дизельного топлива.



Рис.2. Прирост теплоты сгорания
Реактивного топлива ТС-1.

В работе [2] исследовалось изменение вязкости мономолекулярных углеводородных жидкостей при воздействии на них сильными переменными электрическими полями. Результаты исследования приводятся на рис.3 и 4.

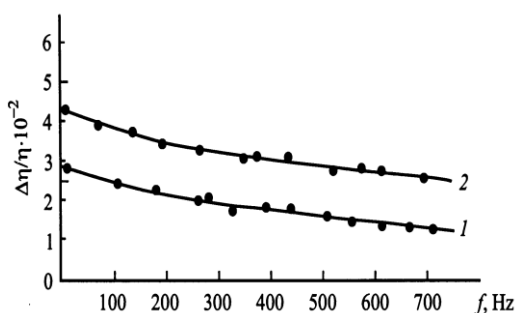


Рис.3. Относительное изменение вязкости
нитробензола от частоты приложенного
переменного напряжения:
- 10, 2 - 20, 3 - 30, 4 - 40 кВ, 5 - 50 кВ.

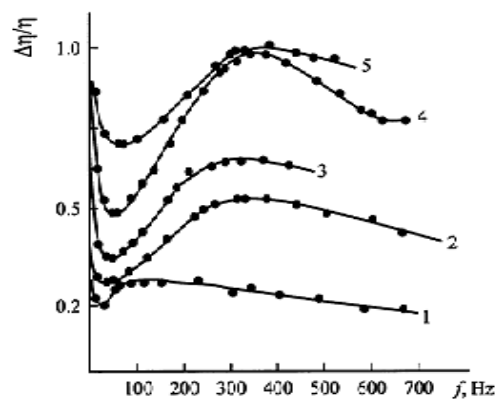


Рис.4. Относительное изменение
вязкости декана от частоты
напряжения: 1 - 20 кВ, 2 - 40 кВ.
- 10, 2 - 20, 3 - 30, 4 - 40 кВ, 5 - 50 кВ.

1. ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ НА УГЛЕВОДОРОДЫ СЛАБЫХ ПЕРЕМЕННЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ

Эти исследования были выполнены в Институте проблем транспорта РАН и включали следующие этапы: сравнительные химические исследования углеводородного топлива до и после взаимодействия со слабым переменным электрическим полем, аналитические исследования и испытания топлива, модифицированного этим полем.

В качестве предметов исследования были использован бензины БР-2, Аи-80 (ГОСТ 2084-77). При исследованиях изменений в структуре молекулярного состава этих бензинов под воздействием переменного электрического поля сравнивался молекулярный состав базовой пробы не обработанного топлива и пробы, обработанной слабым переменным электрическим полем.

Для выполнения лабораторных исследований была изготовлена экспериментальная камера молекулярной модификации топлива (ММТ) для обработки его переменным электрическим полем с геометрическими размерами, показанными на рис. 5 и генератор поля в отдельном блоке. Объем камеры по топливу составлял $1,0 \text{ см}^3$.

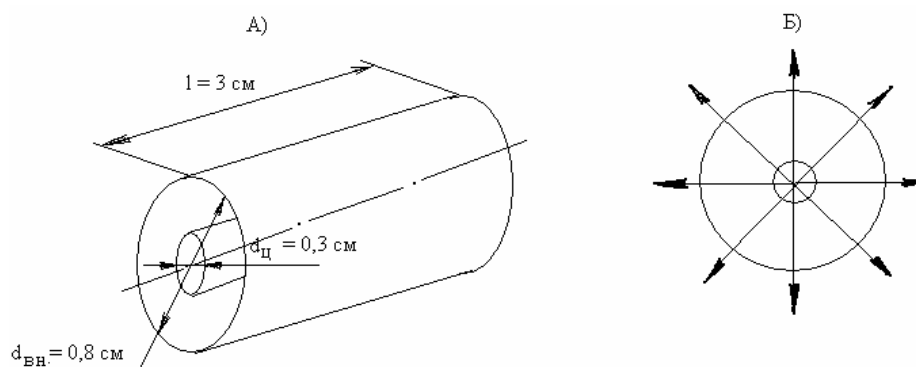


Рис.5. Схема камеры ММТ (А) и силовых линий электрического поля в ней (Б).

Исследования выполнялись хроматомасс-спектрометрическим методом на хроматомасс-спектрографе QP-2010 (Shimadzu). Идентификация компонентов полувolatile органической фракции проводилась с использованием электронных библиотек масс-спектров NIST'02 и NIST'05. Экспозиция проб в слабом переменном электрическом поле составляла 2 секунды. На рис.6 показана кинетика изменения группового состава бензина БР-2. Напряжения на электродах камеры составляло 40 В.

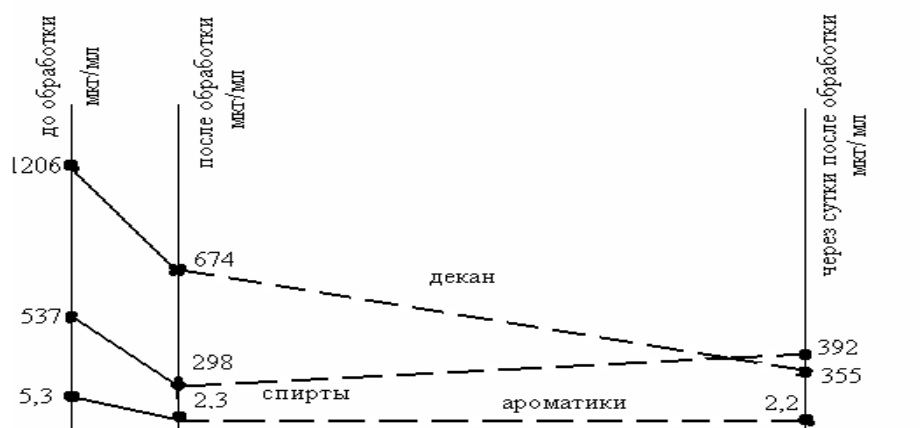


Рис.6. Кинетика изменения молекулярного состава бензина БР-2.

Исследование кинетики деструкции бензина БР-2 показывает, что после воздействия на декан слабого переменного электрического поля, его концентрация уменьшается почти вдвое, а через сутки после воздействия поля - еще почти вдвое. Это означает, что деструкция молекул декана происходит не только под непосредственным влиянием слабого переменного электрического поля, но и после прекращения его действия.

При деструкции молекулы декана $C_{10}H_{22}$ с образованием двух молекул тетрагидрометилфурана C_5H_{10} должны образовываться два свободных атома водорода. Свободный водород может выделяться и при деструкции дочерних продуктов декана - тетрагидрометилфурана. Образование свободного водорода в камере ММТ и перенос его вместе с жидким топливом в камеру сгорания ускоряет химическую реакцию окисления. Она протекает быстрее и полнее, так как наличие радикалов в виде атомарного водорода в зоне горения уменьшает среднее значение энергии активации. Высокая реакционная способность атомарного водорода приводит к тому, что эти центры определяют механизм реакции окисления и ее скорость.

Считая, что молекулярная масса декана составляет 142 единицы, а атомная масса водорода - 1, и на каждую подвергшуюся деструкции молекулу декана может

образоваться 2 атома водорода, то выход водорода при деструкции декана составляет 2/142 или 1,4% по массе от массы подвергшихся деструкции молекул декана.

На рис.7 представлена кинетика изменения группового состава бензина Аи-80, выполненная по той же методике.

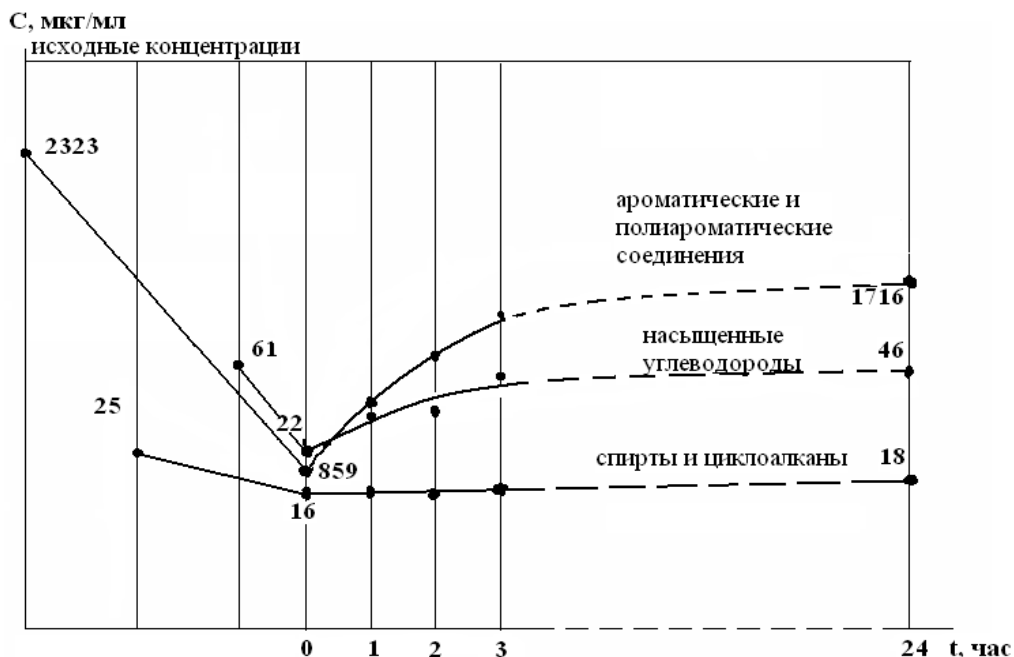


Рис.7. Кинетика изменения структуры химического состава бензина Аи-80.

Хроматографические исследования кинетики изменения группового состава бензина Аи-80 выполнялись через каждый час после воздействия на пробу бензина переменным электрическим полем в течение трех часов и один раз спустя сутки после воздействия поля. На графике рис.7 видно: концентрация насыщенных и ароматических углеводородов под воздействием переменного электрического поля резко снижается и, даже через сутки после прекращения действия электрического поля не достигает первоначального значения. Отметка «0» на графике привязана к завершению хроматографического исследования и хронологически составляет примерно 1 час после прекращения действия электрического поля. После прекращения действия электрического поля происходит некоторая релаксация структуры химического состава бензина Аи-80. Однако, даже через сутки после прекращения воздействия поля, структура его химического состава полностью не восстанавливается, что может свидетельствовать о необратимости преобразований под воздействием слабого переменного электрического поля.

Анализ результатов проведенных исследований по изменению структуры молекулярного состава бензинов слабым электрическим полем показывает, что под воздействием электрического поля в бензине уменьшаются концентрации насыщенных и ароматических углеводородов.

Уменьшение их концентраций должно благоприятно сказываться на такую экологическую характеристику двигателей внутреннего сгорания, как содержание в отработавших газах несгоревших углеводородов (СН) и бензапиренов.

Аналогичные изменения происходят и в более тяжелых углеводородных топливах. При этом изменяются их физические характеристики. Результаты изменений физических характеристик дизельного топлива и мазута приведены в таблицах 1 и 2.

Важно отметить, что новая химическая структура, приобретаемая жидким углеводородным топливом под воздействием переменного электрического поля, устанавливается в течение нескольких часов и сохраняется в течение длительного времени.

Таблица 1.

Изменение физических характеристик дизельного топлива.

№ п.п.	Наименование показателей	Топливо ГОСТ 305-82	Топливо после модификации	Изменение величины, %
1	Влажность, %	следы	следы	0
2	Сера общая, %	0,11	0,13	погрешн.
3	Плотность при 20°C, кг/м ³	837,7	835,7	- 0,25 %
4	Температура вспышки в закрытом тигле, °C	81	72	- 11 %
5	Кинематическая вязкость, сСт	5,27	4,50	- 14,6 %

Таблица 2.

Изменение физических характеристик мазута.

Характеристика	Измеренные значения		
	Мазут до модификации	Мазут после модификации	Изменение величины, %
Влажность W_b , %	8	8	0,0
Вязкость, сСт	17,8	15,8	-12,4
Температура вспышки, °C	190	170	-10,5

Выполненные расчеты показывают: для того, чтобы обеспечить деструкцию половины массы углеводородов (рис.6,7), энергия электрического поля в объеме камеры модификатора должна быть около 360 Вт. Однако такой энергией камера модификатора не обладает. Поэтому следует считать, что воздействие на молекулы электрического поля с одной стороны является средством непосредственной деструкции, с другой стороны механизмом, запускающим процесс деструкции молекул после прекращения действия поля. Подготовительный этап расщепления жидких углеводородных систем на отдельные атомы может заключаться либо в подогреве этой системы, либо воздействии различных физических полей, направленных на получение дополнительной энергии каждым из связанных атомов углеводородной системы, что приводит к уменьшению энергии связи атомов в молекуле.

Одним из перспективных физических методов решения этой задачи является электрическое поле. Имеющиеся экспериментальные данные говорят о следующем:

- изменение физико-химических свойств различных видов углеводородного топлива происходит под действием постоянных и переменных электрических полей, причем воздействие переменных полей оказывается более эффективным;
- в наибольшей степени эффект деструкции молекул под действием переменного электрического поля наблюдается у насыщенных и ароматических углеводородов.
- энергия электрического поля, создаваемая его генератором, мала и недостаточна для деструкции значительного числа молекул углеводородного топлива.

Таким образом, слабое переменное электрическое поле не может деструкции значительное число молекул углеводородов и, тем более, отвечать за их деструкцию после прекращения своего действия. Следовательно, таким механизмом являются цепные химические реакции, открытые академиком Н.Н.Семеновым. При деструкции углеводородных молекул возникают чрезвычайно активные химические радикалы, которые и обеспечивают протекание цепных химических реакций. Кроме того, Академиком Н.Н.Семеновым было доказано, что «активными частицами» цепных химических реакций могут быть и молекулы с возбужденными энергетическими уровнями. Известно, что возбуждение у молекул поступательных и вращательных уровней энергии молекул переводит их в возбужденное состояние на короткое время, измеряемое секундами и минутами, а возбуждение колебательных уровней - на время, измеряемое часами. Поскольку деструкция молекул в проведенных экспериментах длится часами, то можно

сделать вывод: возбуждаются электронные и колебательные уровни молекул. В обоих случаях появляются активные частицы цепных химических реакций. Именно поэтому мощности камеры порядка 10^{-6} Вт достаточно, для создания в ней достаточной концентрации радикалов, чтобы обеспечить деструкцию примерно половины молекул. Это значит, что для модификации углеводородного топлива не нужны большая энергия и частота электрического поля.

Кроме того, анализ работы [2] привел к тому, что частота электрического поля, необходимая для модификации углеводородного топлива зависит от концентрации молекул в нем. Результаты этого анализа приведены на рис.8.

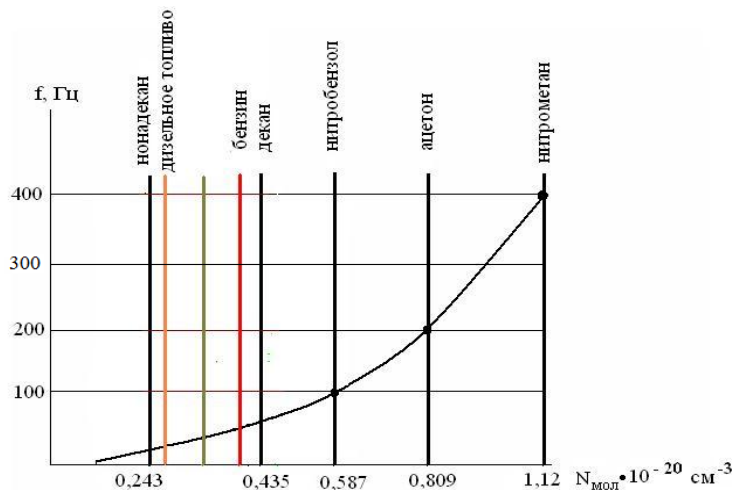


Рис.8. Зависимость частоты электрического поля от молекулярных концентраций углеводородов.

Считая, что камера модификатора является генератором активных частиц, можно рассчитать минимально необходимую для модификации топлива частоту электрического поля при соответствующих значениях амплитуды поля, физических характеристиках углеводородов и геометрии камеры.

В конечном виде эта зависимость для цилиндрической камеры с коаксиальными электродами имеют вид

$$f_{\text{эф}} = (w/k_0) N_{\text{Ав}} E_{\text{возб}} G \rho \ln(R_{\text{н}}/R_{\text{вн}}) / MU^2 \pi \epsilon_a S \ell^2,$$

где: w - скорость генерации активных частиц, k_0 - скорость гибели активных частиц, $N_{\text{Ав}}$ - число Авогадро, $E_{\text{возб}}$ - энергия возбужденного уровня молекул, G - объемный расход топлива, ρ - плотность топлива, $R_{\text{н}}$ и $R_{\text{вн}}$ - радиус наружного и внутреннего электродов, M - усредненная молекулярная масса топлива, U - амплитуда напряжения на электродах, ϵ_a - абсолютная диэлектрическая проницаемость топлива, S - площадь проходного сечения камеры, ℓ - длина электродов.

В результате были рассчитаны и изготовлены камера модификации и генератор электрического поля, которые были испытаны в лаборатории, сертифицированной на испытания моторных топлив, Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

На рис.9 показано устройство модификации топлива для двигателя мощностью до 330 кВт.



Рис.9. Устройство модификации моторного топлива.

Мощность, потребляемая устройством от источника питания, составляет менее 5 Вт. На рис.10 показаны удельные расходы бензина на двигателе ВАЗ-2111 при использовании бензина Аи-95 - верхняя линия и модифицированного бензина - нижняя линия [4].

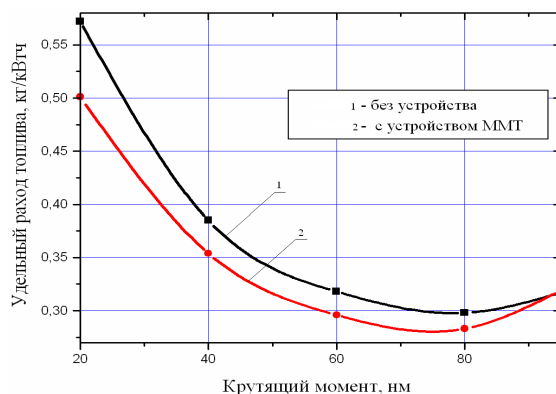


Рис.10.Изменение удельного расхода топлива при работе двигателя ВАЗ-2111 при работе на модифицированном бензине Аи-95 при частоте вращения 2000 об/мин.

В таблице 3 приводятся усредненные по всем режимам испытаний данные об экономических и экологических характеристиках этого двигателя [4].

Таблица 3.

Усредненные эффекты (%), при использовании модификатора топлива на впрысковом двигателе ВАЗ-2111, полученные при цикле длительных испытаний.

	Усредненные эффекты, % относительно базы				
	Расход топлива	СО	СН	NOx	Мощность
Начало испытаний	- 6,03	- 7,97	- 10,85	+ 4,02	+ 0,4
После 80 часового цикла	- 8,11	- 11,57	- 15,70	+ 7,61	+ 2,03

При этих испытаниях было исследовательским методом определено изменение октанового числа бензина Аи-95. Результаты измерения дали следующие результаты:

- ОЧИ образца бензина АИ-95 - 93,2 единицы
- ОЧИ образца модифицированного бензина Аи-95 - 92,3 единицы.

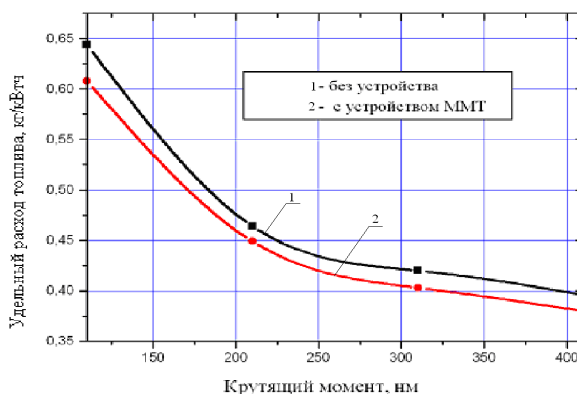


Рис.11. Изменение удельного расхода топлива двигателя ЯМЗ-238 при работе на модифицированном дизельном топливе по нагрузочной характеристике 1400 об/мин.

На рис.11 показаны удельные расходы дизельного топлива на двигателе ЯМЗ-238: дизельного топлива по ГОСТ-305-82 - верхняя линия и модифицированного дизельного топлива - нижняя линия [4].

В таблице 4 приводятся усредненные по всем режимам испытаний данные об экономических и экологических характеристиках этого двигателя [4].

Таблица 4.

Усредненные эффекты (%), при использовании модификатора топлива на дизельном двигателе ЯМЗ-235.

	Усредненные эффекты, % относительно базы					
	Расход топлива	Эффек. к.п.д.	СО	СН	Nox	Дымность
С устройством МТ	- 6,2	+ 6,2	- 5,4	- 6,8	+ 5,3	- 24,0

Необходимо отметить, что измерения теплоты сгорания модифицированного дизельного топлива не выполнялись. Поэтому в расчет КПД было заложено табличное значение теплоты сгорания дизельного топлива. Истинное значение механического КПД всех двигателей, на которых выполнялись стендовые испытания, должно несколько повышаться за счет очистки от нагара и загрязнений деталей цилиндра - поршневой группы и, как результат, увеличения компрессии двигателей. Последнее иллюстрируется рис.12, на котором приведены фотографии свечей зажигания контрольного и испытуемого двигателей ВА3-2111 после длительных (80-ти часовых) испытаний.



Рис.12. Отложения на свечах контрольного (слева) и испытуемого (справа) двигателей ВА3-2111 после 80 часов испытаний.

Кроме того, было произведено точное взвешивание деталей двигателей, которое подтвердило тенденцию к уменьшению износа цилиндра - поршневой группы, клапанов и подшипников двигателя [4].

Таблица 5.

Изменение параметров работы дизельгенератора 6ЧНСП-18/22.

Измеряемые параметры		В штатном режиме эксплуатации ДГ			При включенном ММТ		
		Нагрузка (кВт)			Нагрузка (кВт)		
		45	75	100	45	75	100
Время измерений	начало	10,15	11,00	11,40	15,40	14,30	15,15
	конец	10,55	11,35	12,00	16,00	14,50	15,35
Показания расходомера	начало	67,5	82,8	101,0	158,0	129,0	145,0
	конец	81,5	98,8	113,0	164,0	137,0	155,0
Расход топлива (л/ч)		21,0	27,4	36,0	18,0	24,0	30,0
Уменьшение расхода топлива %					14,	12,4	16,7

Кроме стендовых были выполнены эксплуатационные испытания судового дизельгенератора 6ЧРСП-18/22. Результаты этих испытаний приведены в таблице 5.

Из данных таблицы 5 следует: удельный расход дизельного топлива по ГОСТ 305-82 при нагрузках, указанных в таблице составил 0,390; 0,306 и 0,302 кг/кВт·час, а при его модификации электрическим полем, 0,334; 0,273 и 0,251 кг/кВт·час соответственно.

Этот результат подтверждается индикаторными диаграммами двигателя, приведенными на рис. 13 - работа дизельгенератора на топливе по ГОСТ 305-82, и на рис. 14 - работа дизельгенератора на молекулярно модифицированном дизельном топливе. Диаграммы сняты на мощности 75 кВт.

Выводы по анализу индикаторных диаграмм:

1. Из сравнения индикаторных диаграмм видно, что при использовании устройства молекулярной модификации дизельного топлива увеличиваются максимальное давление в цилиндре с 68,1 бара до 70,2 бара и среднее индикаторное давление с 3,48 бара до 4,39 бара, что и обеспечивает увеличение индикаторной мощности цилиндра с 12,7 кВт до 15 кВт. Совершенно очевидно, что повышение давлений цикла при меньшей подаче топлива может объясняться только увеличением теплоты его сгорания.

2. Задержка самовоспламенения $\tau_i = \alpha - \varphi_{Pc'}$ уменьшилась на всех исследуемых режимах. В штатном режиме эксплуатации она составляла $\tau_i = 11,7 - 8,2 = 3,5$ ПКВ, а при работе с ММТ $\tau_i = 9,8 - 7,3 = 2,5$ ПКВ, что характеризует увеличение цетанового числа дизельного топлива.

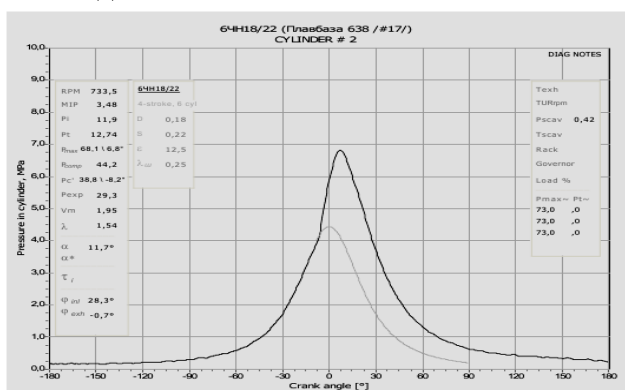


Рис.13. Индикаторная диаграмма дизеля без модификатора топлива.

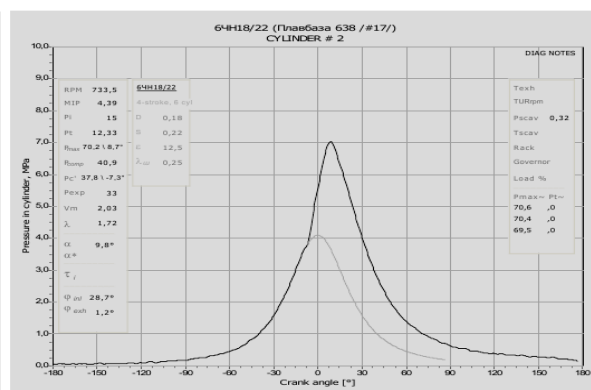


Рис.14. Индикаторная диаграмма дизеля с модификатором топлива.

Для оценки эффективности работы модификатора топлива на тяжелом топливе были проведены сравнительные испытания обжиговой печи Оленегорского горнообогатительного комбината и на котельных установках ДКВр-10/13.

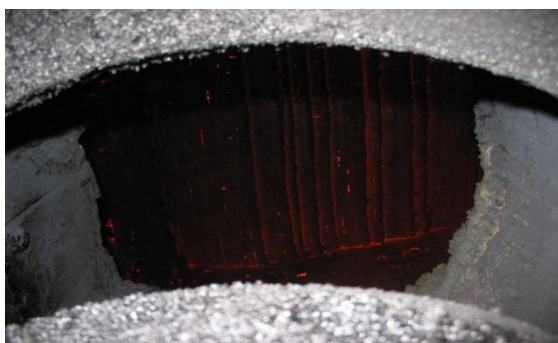


Рис.15. Горение битумных отложений после остановки печи.



Рис.16. Печь, работавшая с модификатором после остановки.

На рис.15 показана фотография остановленной обжиговой печи, работавшей без модификатора. Фотография на рис.16. сделана сразу после остановки печи, работавшей с модификатором топлива. Видно, что процесса догорания битумных отложений нет, так как нет самих отложений.

Основные характеристики мазутного котла ДКВр-10/13, на котором испытывалось устройство МТ, приведены в таблице 6.

Таблица 6.

Изменение показателей работы котла ДКВр-10/13 после включения модификатора.

Показатели работы котла		В штатной работы котла	При включенном модификаторе	Изменение показателей, %
1		2	3	4
Удельный расход мазута		114,5	93,06	-18,7
1		2	3	4
Токсичные дымовые газы за котлом на 1 Гкал выработан.тепла	CO, ppm	20	13	- 35
	NOx, ppm	30,76	22,85	-25,7
	SO ₂ , ppm	181,3	135,5	-25,3
Удельный расход электроэнергии тягодутьевыми машинами на 1 Гкал выработанного тепла, кВт/Гкал		7,2	6,2	-13,9

Работа на модифицированном мазуте приводит к изменению структуры и химического состава сажи, откладывающейся в котлах. При проведении испытаний на котельной установке ДКВр-10/13 производился осмотр поверхностей нагрева котла. В частности, в актах осмотра отмечается, что при применении модификаторов топлива:

- отсутствует шлакообразование амбразур и защитных стенок боковых экранов;
- отложения сажи на трубной системе топки отсутствуют или незначительны;
- отложения сажи на трубах конвективной части составляют не более 1 - 1,5 мм, в то время как при работе котла без модификаторов количество отложений на порядок больше;
- характер отложений на трубах - рассыпчатые, легко отделяемые, отложений серы под слоем сажи не обнаружено;
- отложения сажи в зольниках малы;
- на ребристых трубах экономайзера имеются отложения сажи, но они имеют просветы, чего не наблюдается при работе котла без модификаторов;
- цвет сажи, отобранной в газоходе после экономайзера, изменился с черного на серый после 30 суток работы котла с модификатором, что свидетельствует о более полном выгорании углерода.

Общий объем сажевых отложений уменьшился с 5 м³ до 0,5 м³ при работе котла с модификаторами.

В газоходе после экономайзера взяты пробы сажевых отложений, из которых были приготовлены препараты для анализа. Препараты изучались на рентгеновском дифрактометре ДРОН-6 с CoKa монохроматическим излучением с шагом съемки 0,05 градуса и фиксацией в точке 1,5 сек. Обработка данных осуществлялась с помощью пакета программ PDWin-4. Идентификация фаз проводилась по международной картотеке JCPDS. Результаты идентификации представлены в таблице 7.

Результаты анализа сажевых отложений.

Характеристики сажевых отложений на поверхностях нагрева котельного агрегата при сжигании тяжелых мазутов.		
Название вещества	В штатном режиме эксплуатации котла	При эксплуатации котла с МТ
Бурый железняк	$\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$	$\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$
Гриналит	$\text{FeSi}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	$\text{FeSi}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$
Сложные соединения минеральных солей Na и K	$(\text{Na};\text{K})6(\text{Mn};\text{Fe})3\text{Si}_3\text{O}_{21} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	$(\text{Na};\text{K})6(\text{Mn};\text{Fe})3\text{Si}_3\text{O}_{21} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$
Соли ванадиевой кислоты	$(\text{Na};\text{K})_x\text{V}_x\text{V}_6-x\text{O}_{15}$	$(\text{Na};\text{K})_x\text{V}_x\text{V}_6-x\text{O}_{15}$
Феррованадий		FeV_2O_4
Нахколит (карбонат натрия (сода))		NaHCO_3
Алюмосиликат-неозан	$\text{Na}_8\text{AlSi}_6\text{O}_{24}(\text{SO}_4) \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	Отсутствуют
Алюмосиликат-диксит	$\text{AlSi}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	
Гидрооксид алюминия-бемит	AlOOH	

Анализ данных таблицы 7 показывает, что применение модификаторов в системе подачи топлива приводит к значительным изменениям качества сажевых отложений, а именно:

1. Основную массу сажевых отложений при работе котла без модификаторов составляют алюмосиликаты, которые плотно закрепляются на поверхностях нагрева.

При работе с модификаторами алюмосиликаты выгорают полностью и в сажевых отложениях отсутствуют.

2. В сажевых отложениях при работе с модификаторами отмечено образование карбоната натрия (NaHCO_3) и соединений ванадия, таких как феррованадий (FeV_2O_4) и монокристаллические нанопроволоки на основе $\text{NaV}_6\text{O}_{15}$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследовано взаимодействие молекул углеводородов со слабыми переменными электрическими полями. Получено аналитическое выражение, связывающее основные характеристики электрического поля с физическими характеристиками углеводородов и геометрическими характеристиками камеры обработки. Испытания модификаторов углеводородного топлива слабыми переменными электрическими полями показали высокую эффективность разработанных модификаторов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Герловин И.Л. Основы единой теории всех взаимодействий в веществе. Л., Энергоатомиздат, 1990, 431 с.
2. Остапенко А.А. Электровязкостный эффект в переменном электрическом поле. Журнал технической физики, 2000, том 70, вып. 8.
3. Александров А.Б., Александров Б.Л., Хари В.А. Подготовка жидких углеводородных топлив к процессу горения воздействием электромагнитного поля. Труды Кубанского государственного аграрного университета. Выпуск № 10, 2008 г.
4. Шабанов А.Ю. Проведение длительных моторных испытаний устройства «Молекулярный модификатор топлива. / А.Ю.Шабанов, А.Б.Зайцев // Отчет по НИР

ФГОУ «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет». -
2011. № государственной регистрации 140301101.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ИМПУЛЬСНОГО РАЗРЯДА И РАБОТЫ УСТРОЙСТВА ПОДЖИГА И СТАБИЛИЗАЦИИ ГОРЕНИЯ «ПОРИСТОГО» КЕРОСИНА

¹Великодный В.Ю., ¹Дыренков А.В., ²Левин Ю.К.,
²Садовин М.А., ²Попов В.В.

¹МОУ Московский физико – технический институт (технический университет),
г.Долгопрудный, Россия

²ФГБУН Институт прикладной механики Российской академии наук (ИПРИМ РАН),
г.Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

Исследована работа нового устройства поджига и стабилизации горения диспергированных «пористых» топлив на основе керосина в высокоскоростном потоке при использовании высоковольтного импульсного электрического разряда резонансного типа [1]. Этот вид устройств предназначен для поджига и стабилизации пламени основного топливно – воздушного потока в перспективных ПВРД, ГПВРД при числах Маха в камере сгорания $M_1 = 1,5 - 2$, так как температура воздуха, поступающего из воздухозаборника при $3 < M_0 < 6$ в набегающем потоке, недостаточна для гарантированного поджига и стабильного горения топлива – керосина [2,3]. А возможности разгонных ВРД (их к.п.д. при $M_0 > 3$) при старте с земной поверхности резко снижаются.

Ранее в [4] исследовался поджиг керосина и спирта в сверхзвуковом потоке, где была предложена схема с высоковольтным разрядом импульсного типа. Был получен эффект резкого снижения времени задержки воспламенения в $10^2 - 10^3$ по сравнению с поджигом в отраженной ударной волне в равновесии см. [5,6].

Это дало толчок к дальнейшей модернизации электрической схемы с настройкой на резонанс (в электрическую схему введен резонансный контур [1]) и применению новых технологий и технических решений (нанотехнологии – добавки присадок графена и нанотрубок [7,8], «пористое» топливо [4,9], кольца Рашига, широко используемые в химической промышленности [1,10,11]). В результате, дополнительно в 2 -3 раза было снижено время задержки воспламенения по сравнению с [4], улучшены характеристики поджига, стабилизации горения, однородности факела. Снижены энергетические затраты на распыление, увеличен расход окислителя.

Настройка на резонанс генератора высоковольтных импульсов позволила дополнительно увеличить надежность поджига и стабилизацию пламени при высоких скоростях топливо – воздушной смеси за счет резкого увеличения напряжения в пиках по сравнению с номинальным.

ВВЕДЕНИЕ

При разработке перспективных ПВРД, ГПВРД приходится решать ряд сложных научно-технических задач как фундаментального, так и прикладного характера. Одной из задач является увеличение вероятности поджига и стабильности горения сверхзвуковой струи композитного топлива, снижение времени задержки воспламенения с целью уменьшения массо – габаритных характеристик двигательной установки. Появившиеся новые принципы, технологии, эффекты, оборудование, материалы поставили новые задачи фундаментального характера в экспериментальном и теоретическом планах, дали возможность широкого маневра в реализации новых технических решений. Следует отметить, что задача поджига и стимуляции горения сверхзвукового потока топливно – воздушной смеси имеет комплексный характер. Она связана с подготовкой топливно – воздушной смеси - созданием так называемого композитного топлива [1,7-9] путем барботирования, перемешивания, кавитация, ударно-волновая обработка, введения активизирующих присадок и разбавителей. Этот комплекс функций возложен на

модернизированное устройство для распыления и поджига композитного топлива см. рис.1 и ([1] – более подробная схема).

В данной работе мы подробнее остановимся на результирующей функции указанного устройства – обеспечении надежного поджига и стабильного горения высокоскоростной струи композитного топлива.

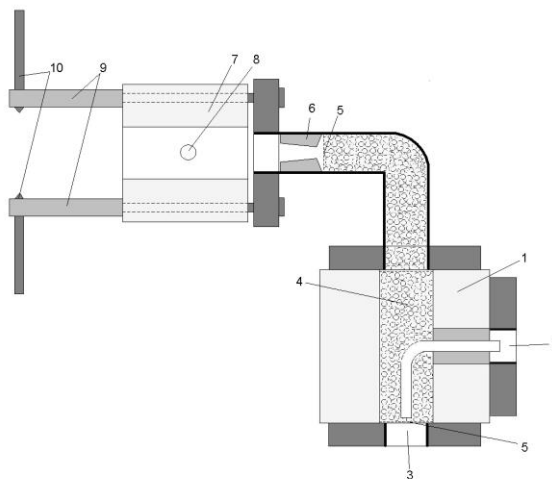


Рис.1. Принципиальная схема модернизированного устройства для распыления и поджига композитного топлива, где использованы обозначения: 1.барботер, 2. вход для керосина, 3. вход для воздуха, 4. кольца Рашига, 5. разделительную сетку, 6. сопло Лавалья, 7. камера смешения, 8. посадочное место для инжектора, 9. высоковольтные изоляторы, 10. разрядные электроды с подводящими проводами

Поджиг топливно воздушной струи происходит на выходе камеры смешения 7 (рис.1). Между камерой смешения 7 и фланцем из фторопласта, к которому крепится сопло Лавалья 6 имеется зазор 5 мм для дополнительно подсоса воздуха. Через отверстие 8 инжекционным перпендикулярно потоку из сопла Лавалья 6 насосом подается газодисперсная смесь топлива, воздуха и добавок наночастиц, или других компонентов. Смесь готовится в сосудах оборудованных высокоскоростными мешалками. Вначале пузырьковая среда разгоняется в сопле Лавалья до чисел Маха $M \sim 2-2,5$ на выходе из сопла. Газодисперсный поток из – за эффекта сжимаемости пузырьковой (пористой) смеси быстро «взрывным» образом расширяется и пузырьковый («пористый») режим переходит в газо капельный. При истечении в режиме перерасширения струи образуется виский скачек в виде диска Маха [12]. Поэтому производится дробление капель за счет ударноволновой обработки за счет сдвиговых напряжений [13,14]. Далее струя тормозится и в районе электродов она уже дозвуковая. Дополнительной особенностью течения, которую надо учитывать при расчетах и проектировании установок является то, что скорость звука в дисперсных средах может быть существенно ниже, чем жидкости и газе, кроме того необходимо учитывать особенности «газодинамики» дисперсной среды [15]. Более подробно конструкционные особенности комплектующих и работа отдельных узлов установки изложены в [16]. Далее газодисперсный поток поступает в разрядный промежуток и поджигается высоковольтным импульсным разрядом резонансного типа. Это позволяет получать напряжение в пиках в 1,5 раза большего номинального. При этом, естественно, возникают задачи кинетики испарения, кинетики горения сложных углеводородных топлив. Подробно эта тема изложена в работах [5,6,17,18]. Это целое направление экспериментальных и теоретических исследований по определению констант скоростей реакций, выявлению кинетических механизмов. При исследовании горения таких сложных топлив как керосин используются кинетические схемы, включающие 1500

реакций [5,6,17]. Отметим в связи с этим, что температура в районе зон поджига и синего пламени не высокая 770-850⁰К [19]. Согласно теоретическим расчетам и эксперименту это дает времена задержки воспламенения порядка нескольких секунд (см. [5,6,18]). Однако в присутствии разряда картина может резко меняться [4,18]. Времена задержки воспламенения могут быть на два – три порядка меньше чем расчетные и в эксперименте (поджиг за отраженной волной). Экспериментально это подтверждено в [4,7,8].

1. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОДЖИГА УГЛЕВОДОРОДНЫХ ТОПЛИВ ВЫСОКОВОЛЬТНЫМ ИМПУЛЬСНЫМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ РАЗРЯДОМ

Ранее эффекты подобного рода [4,7,8] моделировались относительно простой цепной реакцией – горение водорода (реакция включает 52 элементарных стадии - схема Болча см. [20,21]). Конечно, эта модель далека от идеальной, так как современные схемы горения керосина включают более 1500 реакций. Однако при таком количестве процессов очень трудно понять физику и выявить определяющий механизм. Тем более, что окончательной теории этого процесса нет и полезны простые модели. Рассматривается инициирование горения водорода в воздухе ударной волной в ионной плазме [20,22,23]. В результате прохождения ударной волны в такой плазме образуются высокотемпературные электроны со значительным отрывом электронной температуры от температуры компонентов с высокой массой (молекул, атомов, кластеров, наночастиц) [20,22,23]. Присутствуют заряженные наночастицы, микрочастицы, имеются ударные волны в результате пробоев. Аналогичные явления присутствуют в высоковольтном импульсном электрическом разряде.

Из анализа вольт-амперных характеристик импульсного разряда (см. [4,16,24] и данная работа ниже), возникающего в высокоскоростном потоке, и оценки времен релаксации электронов можно сделать вывод, что такие электроны существуют во время начального резкого подъема напряжения. Частота повторения импульсов лежит в пределах 200-400 Гц с высокой скважностью [4,16,24] и данная работа при этом энергия, вкладываемая в поток существенно меньше энергии потока (даже без горения).

На рисунке 2 представлено изменение приведенной температуры электронов $\frac{T_e - 1}{T_2 - 1}$

во фронте ударной волны [20,22,23]. Из рисунка видно, что электроны сжимаются практически адиабатически. Температура электронов в точке максимума превосходит равновесную за фронтом в 35 раз [20]. Реально, как следует из рис. 2, максимальная температура электронов $\sim 18000^0$ К. В этом проявляется эффект газодинамической кумуляции энергии на “макроуровне”. Равновесная температура смеси за фронтом ударной волны при $M=3.1$ $T_{eq}=820$ К.

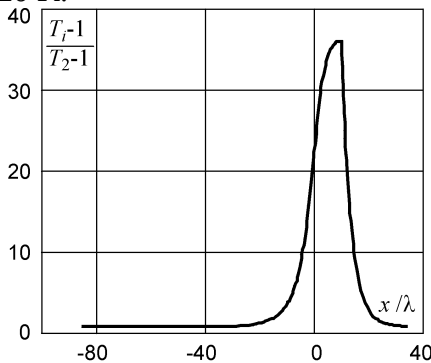


Рис.2. Изменение относительной парциальной температуры электронов в зоне поступательной неравновесности во фронте ударной волны, x – координата фронта, λ – длина свободного пробега

В [20] качестве модели реакционной смеси и газа носителя рассматривается смесь из O_2 , H_2 , N_2 при соотношении концентраций $N_{O_2} : N_{H_2} : N_{N_2} = 1 : 2 : 5$ соответственно. Давление в набегающем потоке $P_\infty = 1$ атм. Процесс инициирования происходит при постоянном объеме. Число Маха ударной волны $M_\infty = 3.1$. Это соответствует равновесной температуре смеси за фронтом $T = 820K$. Подчеркнем еще раз, что для расчетов взята кинетическая схема, состоящая из 52 реакций (Болч, см. [21]). Исследовалось влияние на процесс инициирования цепной реакции $H_2 + O_2$ электронно - возбужденных состояний O_2 ($a^1\Delta_g$; $b^1\Sigma_g^+$; $A^3\Sigma_u^+$), нарабатываемых во фронте ударной волны (за счет возбуждения электронным ударом), и продуктов диссоциации O_2 . Далее для сокращения записи электронно - возбужденные состояния ($a^1\Delta_g$; $b^1\Sigma_g^+$; $A^3\Sigma_u^+$) будем обозначать а; b; А соответственно. Также рассчитывался выход $\gamma_O = 0,6\%$ О - продуктов диссоциации O_2 при попадании электрона на разлетный терм (где γ_O - отношении концентрации атомов кислорода к концентрации молекул кислорода в набегающем потоке). Для расчета выхода γ_i электронно - возбужденных состояний а; b; А имеется соотношение [20]:

$$\gamma_i = 0.5\gamma_O \frac{p_i}{p_{O_2}} \frac{f_i}{f_{O_2}} \sqrt{\frac{T_{evi}}{T_{evO_2}}} \frac{\exp\left(-\frac{E_i}{kT_{evi}}\right)}{\exp\left(-\frac{E_{O_2}}{kT_{evO_2}}\right)} \quad (1.1)$$

где p_i и p_{O_2} - стерические факторы; f_i и f_{O_2} - параметры, характеризующие полуширину в графике для температуры электронов (см. рис. 2); E_i, E_{O_2} - энергии возбуждения и диссоциации O_2 ; T_{evi} - соответствующая величине E_i для случаев а и b (по терминологии, введенной ранее), для остальных случаев T_{evi} равна максимальной величине T_e , приведенной на рис. 2. Как иллюстрация, на рис. 3, 4 приведена часть результатов расчетов времени задержки воспламенения [20].

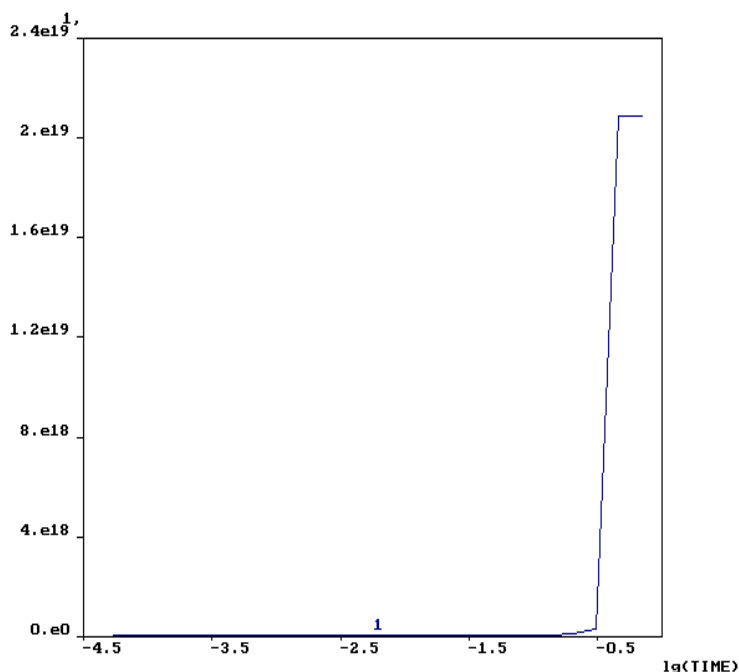


Рис.3. Изменение концентрации n_{H_2O} ($1/\text{см}^3$) от логарифма времени t (сек) при отсутствии возбужденных состояний и продуктов диссоциации

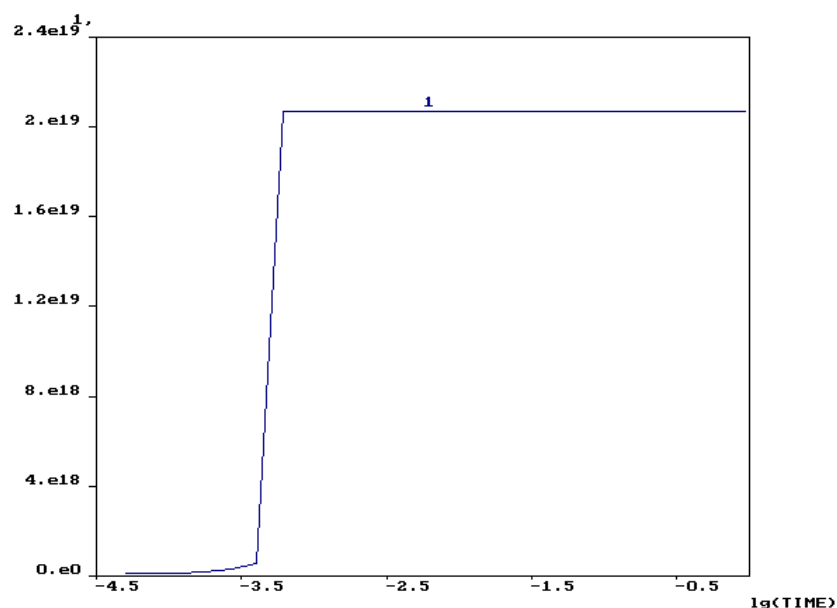


Рис.4. Изменение концентрации n_{H_2O} ($1/\text{см}^3$) от логарифма времени t (сек) при наличии только возбужденного состояния b

Для сравнения приведем результаты расчетов, времени задержки воспламенения - t :

- 1) реакция без радикалов и возбужденных состояний - $10^{-0,5}$ сек;
- 2) атомы кислорода - 10^{-1} сек.;
- 3) состояние A - $10^{-2,5}$ сек. ; состояние b- $10^{-3,5}$ сек.; состояние a - $10^{-3,6}$ сек.

В результате для состояний b,a имеем снижение времени задержки воспламенения модельной реакции на два - три порядка по сравнению с 1), что лежит в рамках идей и результатов [4,7,8,16,18,24]. Отметим в связи с этим результатом, что влияние атомов кислорода, несмотря на их относительно большое количество $\gamma_O = 0,6\%$, менее значительно, чем возбужденных метастабильных состояний b,a. Конечно, в расчетах не учитывались тушение метастабильных возбужденных состояний на молекулах N_2 , и вся релаксационная кинетика. Но проведенное моделирование открывает путь, чтобы снять противоречие между теоретическими расчетами и экспериментом см. [18].

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАБОТЫ УСТРОЙСТВА ПОДЖИГА И СТАБИЛИЗАЦИИ ГОРЕНИЯ КЕРОСИНА (УГЛЕВОДОРОДНЫХ ТОПЛИВ) В ВЫСОКОСКОРОСТНОМ ПОТОКЕ

В отсутствии движущейся среды между электродами разряд вырождается в электрическую дугу - плазма равновесная (см. [16,24]).

При движении среды между электродами ситуация принципиально меняется. При обновлении среды происходит охлаждение и деионизация дугового столба, вследствие чего дуга погасает. Наличие жидкой фазы еще более усиливает этот процесс. Поскольку напряжение на промежутке превышает пробивное, разряд не прекращается, а переходит из дугового в «канально-частотный». Т.е. разряд представляет собой пробой по одному тонкому каналу, который вспыхивает и гаснет, после чего зажигается вновь, но уже в другом месте. Это создает эффект объемности в среднем по времени. Внешний вид и осциллограмма представлены на рисунках 5, 6 и 7:

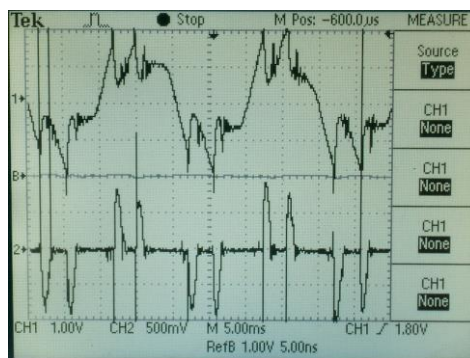


Рис.5. Осциллограмма разряда в движущемся воздухе

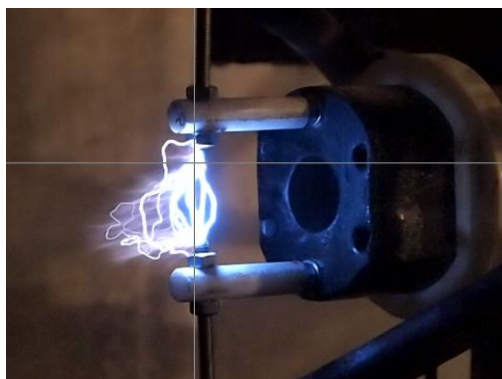


Рис.6. Внешний вид разряда частота кадра
0.07 сек

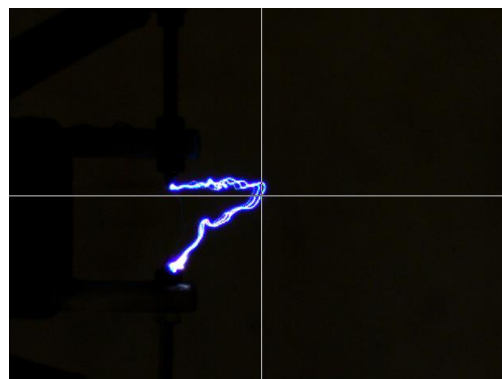


Рис.7. Одиночный канал разряда, частота
кадра 0,004 сек

Как видно из осциллограммы, большую часть времени ток не идет (рис.5). Ток протекает импульсами, по два за полупериод сетевого напряжения. Таким образом, при частоте питающей сети 50 Гц частота вспышек разряда составляет 200 каналов в секунду. Это обеспечивает его квазиобъемность и, соответственно способность генерировать радикалы по всему свечению струи. На рис.6 видны отдельные каналы разряда и светящееся пламя рекомбинирующих радикалов.

При пропускании через разряд керосино-воздушной среды под действием высокой температуры разряда и активных радикалов, возбужденных атомов и молекул происходит воспламенение струи. Возрастает общая температура и проводимость потока, появляются проводящие частицы углерода. (Они могут предварительно присутствовать в керосине как присадка в виде наночастиц [7,8]). Это существенно меняет картину разряда. Яркая выраженность каналов исчезает, разряд становится диффузионным и, как бы, сливается с пламенем и не отличается от него. Возникает эффект «горящих электродов», который усиливается создаваемыми ими завихрениями.

На рис.8 представлена осциллограмма тока и напряжения разряда к движущейся керосино-воздушной среде:

Из осциллограммы видно уменьшение амплитуды импульсов тока и увеличение их длительности. Некоторые из импульсов перекрываются. Также присутствуют высокочастотные скачки тока, которые отсутствуют в разряде в движущемся воздухе без керосина. По-видимому, это объясняется множественными пробоями на проводящих частицах сажи в пламени (модель «горячих очагов»). Это может объяснить эффект уменьшения времени задержки воспламенения наряду со свободными радикалами. Этот эффект усиливается при добавлении проводящих наночастиц в топливо [7,8]. На рис.9 представлен характерный кадр разряда в пламени:

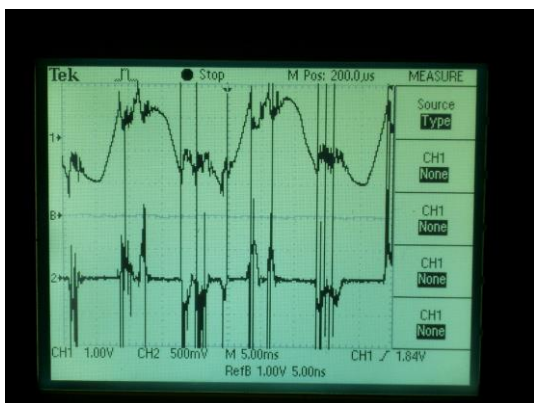


Рис.8 Осциллограмма разряда в керосино-воздушной среде

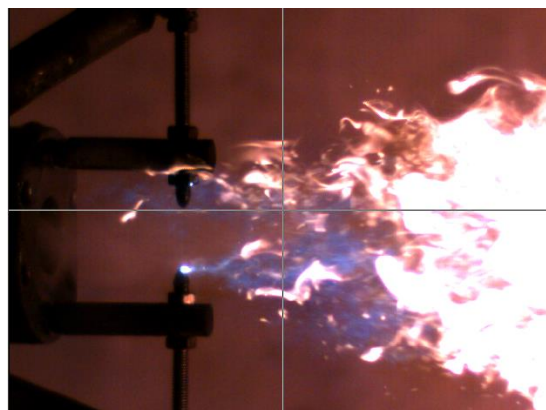


Рис.9 Разряд в пламени, скорость потока в районе электродов 15 м/сек. (кадр кинограммы)

Процесс снимался высокоскоростной камерой со скоростью 250 кадров в секунду и выдержкой 1/5000 сек. Из рисунка виден плавный переход разряда в пламя. Пробой между электродами отсутствует, от них исходят два языка пламени, представляющие собой разряд в керосино-воздушной среде. Экспериментально открыт эффект слияния пламени и разряда. Собственно, пламя и разряд сливаются. Разряд представлен, в виде синей размытой пелены (рис. 9).

3. МЕТОДИКА ИЗМЕРЕНИЯ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПЛАМЕНИ

В ходе проведения эксперимента отрабатывались методики измерения спектральных характеристик пламени.

Используемый малогабаритный дифракционный спектрометр (разработка Института спектроскопии РАН, г. Троицк) позволял путем нескольких оперативных перенастроек производить регистрацию спектров с записью их на персональный компьютер в диапазоне длин волн от 220 до 885 нм [25] при спектральном разрешении до 0.2 им и времени интегрирования каждого участка спектра менее 1 с. Чувствительность аппаратуры позволяла с высоким отношением сигнал/шум регистрировать колебательно-вращательные полосы радикала C_2 и других радикалов, линии атомарного кислорода, линии H_α , H_γ водорода и др

На рис.10 приведен спектр излучения пламени бутановой горелки (калибровочная спектрограмма). Полученные спектры для пламени установки и лабораторной горелки приведены на рис. 11-12.

Общий вывод из расшифровок полученных спектров состоял в том, что при инъекции высокодисперсной газо-жидкостной струи барботированного топлива в зону разряда в ней, аналогично [25], возникали свободные радикалы C_2 , CH в стимулированном разрядом пламени. Это говорит о возможности использования данного разряда для сокращения зоны задержки воспламенения и стабилизации пламени. В дальнейшем целесообразно провести дополнительно измерения линий излучения метастабильных электронно возбужденных состояний O_2 .

В экспериментах [25] по виду спектров указывалось на глубокую переработку исходного пропана и активной наработке участвующих в реакциях атомов. Аналогичные выводы позволяют сделать и наши эксперименты по горению струи дисперсного топлива, поджигаемой высоковольтным разрядом резонансного типа. Следует отметить более активное протекание процессов в нашем эксперименте с учетом существенно более высокого напряжения (10-30 кВ). Энергии разряда хватало даже на повышение объема зоны стимулирования поджига и горения.

Как уже отмечалось, присутствие свободных радикалов в пламени, образованного данным разрядом, подтверждается спектральным анализом. Анализ проводился в сравнении с обычным керосиновым пламенем. Он, действительно, показал повышенное содержание радикалов CH и C_2 в стимулированном разрядом пламени. Это говорит о возможности использования данного разряда для сокращения зоны задержки воспламенения и стабилизации пламени. Конечно, в рамках пункта 2 надо провести дополнительно измерения линий излучения метастабильных электронно возбужденных состояний O_2 .

По форме спектра можно судить о высоком содержании частиц сажи, которые излучают как серое тело. Но, в отличие от излучения лабораторной горелки просматриваются линии излучения CH и C_2 (430 и 510 нм). Из этого можно судить об образовании радикалов в результате плазменного инициирования горения.

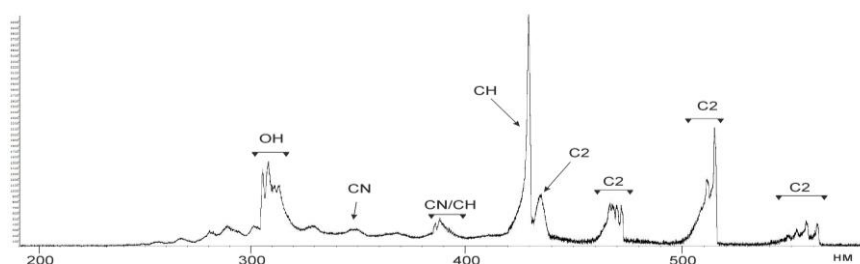


Рис.10. Спектр излучения пламени бутановой горелки (калибровочная спектрограмма)

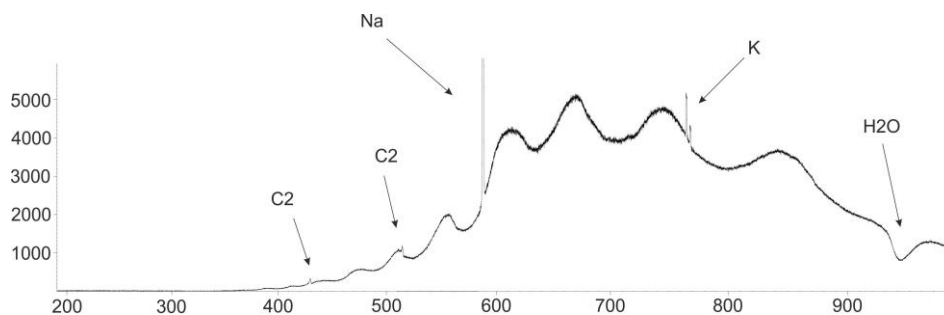


Рис.11. Спектр излучения пламени на установке

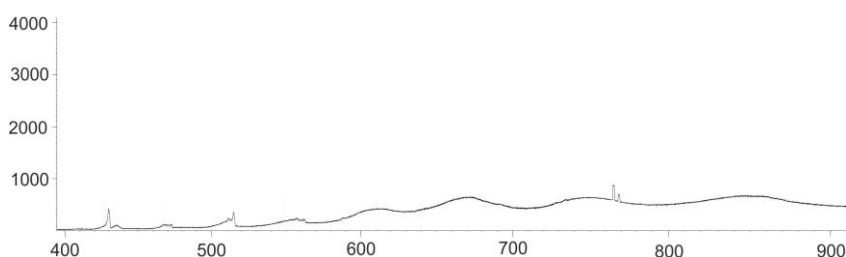


Рис.12. Спектр излучения пламени при сгорании керосина на лабораторной горелке

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Исследованы процессы поджига и стабилизации горения пористого керосина с присадками наночастиц и без них с использованием высоковольтного импульсного разряда резонансного типа. Показана высокая эффективность этого вида разряда на снижение времени задержки воспламенения по сравнению с поджигом в отраженной ударной волне. Дополнительно показана высокая эффективность влияния малых добавок наночастиц на процессы поджига и стабилизации горения.

2. Проведены исследования характеристик импульсного высоковольтного разряда и его взаимодействия с топливно - воздушным потоком. Вследствие этих исследований выявлено, что разряд и пламя составляют единое целое, то есть сливаются зона синего пламени и разрядная область.

3. Проведены предварительные исследования спектральных характеристик пламени. Обнаружено в зоне синего пламени высокое содержание радикалов при наличии электрического разряда, что косвенно экспериментально подтверждает выдвинутую нами и другими исследователями концепцию теоретического описания процесса поджига.

4. На основе моделирования процесса поджига водорода в воздухе при наработке возбужденных частиц электронным ударом, предпринимается попытка объяснения эффекта существенного снижения времени индукции в 10^2 - 10^3 раз при поджиге углеводородных топлив импульсным высоковольтным разрядом по сравнению с поджигом в отраженной ударной волне.

5.

Работа поддержана Грантом РФФИ 15-08-99673 А. и Программой фундаментальных исследований Президиума РАН «Горение и взрыв» на период 2012-2014 гг.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Великодный В. Ю., Дыренков А.В., Попов В.В., Яновский Ю.Г.* «Система смешения и поджига композитного топлива». Патент на полезную модель. 2013. №2013136887/(055524) от 07.08.2013 г. Оpubл. 2014.
1. *Ананьев А.В.* Исследование пространственных двухфазных высокоскоростных потоков в камере сгорания// Автореферат на соискание ученой степени к.ф.-м.н. М.:2011г.
2. *Великодный В.Ю., Воротилин В.П., Еремеев А.В., Никитенко Л.К., Тимофеев И.Б., Д. Ван Ви, Яновский Ю.Г.* Микропузырьковые технологии в проблеме создания широкодиапазонного гиперзвукового прямоточного воздушно-реактивного двигателя// Сборник Трудов Конф. «Современные проблемы механики гетерогенных сред», М., ИПРИМ РАН, т. II, с. 167-180, 2005.
3. *Bituvin V.A., Vrlkodnyi V. Yu., Tolkunov B. N., Bukov A.A., Dyrenkov A.V., Popov V.V.* Experimental study of the ignition of liquid hydrocarbon fuels and stabilization of their combustion by an arc discharge// Plasma Physics Reports. 2012. Vol. 38, N 18, p. 1073-1077.
4. *Старик А.М., Титова Н.С., Торохов С.А.* Кинетика окисления и горения сложных углеводородных топлив: авиационный керосин.// ФГВ. 2013. Т. 49. №4. С.12-30.
5. *Старик А.М., Титова Н.С., Торохов С.А.* Кинетика окисления и горения сложных углеводородных топлив: авиационный керосин.// ФГВ. 2011. Т. 47. №2. С.3-22.
6. *Yanovsky Yu. G., Nikitina E. A., Nikitin S. M., Karnet Yu. N., Velikodnyi V. Yu.* Quantum – mechanical simulation and some experimental assessment of thermodynamics and mechanics of combustion of suspension hydrocarbon media with nanosized hydrocarbon additives.// Nanomechanics Science and Technology by Interactional Journal/ 2013. 4(2),1-22.
7. *Великодный В.Ю., Дыренков В.А., Яновский Ю.Г.* Топливная композиция. Заявка на патент. № 2013123454(034555) от 20.05.2013. Оpubл. 2014.
8. *Яновский Ю.Г., Великодный В.Ю., Тимофеев И.Б., Левин Ю.К.* Устройство для сжигания топлива. Патент на изобретение №2227870 от 27.04.2004.
9. *Струминский В.В., Заичко Н.Д., Алексеев А.М., Олевский В.М., Семенов В.П., Матюшенко В.Х., Завелов Е.Д., Ефименко С.Н., Сухорученко С.Ю., Вакк Э.Г.* //А.с. 1136830 СССР, МПК⁴ В 01 D 53/20. Регулярная насадка для контактных аппаратов / - N 3677353; заявл. 15.12.83; опубл. 30.01.85. - Бюл. N 4. - 3 с.

10. *Левин Ю.К., Полотнюк О.-В.Я., Яновский Ю.Г.*// Установка для насыщения воды озоном Патент на изобретение. №2214370 от 20.10.2003.
11. *Алемасов В.Е., Дрегалин А.Ф., Тишин А.П.* Теория ракетных двигателей. М.: Машиностроение. Под. Редакцией академика Глушко В.П. 1980.535 с.
12. *Великодный В.Ю., Быков А.А.* Структура ударной волны в пузырьковой и пористой жидкости// Физико – химическая кинетика в газовой динамике. 2010, № 10, www.chemphys.edu.ru/pdf/2010-10-26-001.pdf
13. *Яновский Ю.Г., Великодный В. Ю., Дыренков А.В., Крикунова А.И., Кьянгван О., Попов В.В.* ОТЧЕТ ЗА 2014 г. о ходе выполнения Программы ОЭ-14 ОЭММПУ РАН Проект: «Ударноволновые и акустические процессы в гетерогенных средах» Отчет годовой. 2014 г., ИПРИМ РАН, Москва 2014. 54с.
14. *Циклаури Г.В., Данилин В.С., Селезнев.Л.И.* Адиабатные двухфазные течения. М.: Атомиздат 1973. 444 с.
15. *Яновский Ю.Г., Великодный В. Ю., Гусева М.А., Дыренков А.В., Попов В.В., Садовин М.А.* ОТЧЕТ ЗА 2012 г. о ходе выполнения Программы «Горение и взрыв» Проект: «Исследование процессов горения, «пористого топлива» стимулированного электрическими разрядами при наличии активирующих присадок», ИПРИМ РАН , 2012. Москва. 19 с.
16. *Curran H.J., Gaffuri P., Pitz W.J., West-brook C.K.* A comprehensive modeling study of n- heptane oxidation//Combust. Flame. 1998. V.114. p. 149-177.
17. *Битюрин В.А., Филимонова Е.А.* О влиянии разряда на многостадийное воспламенение//XXXVII Международная (Звенигородская) конференция по физике плазмы и УТС. 2010. (Тезисы докладов). 1С.
18. *Щетинков Е.С.* Физика горения газов: М., Наука. 1965. 739 С.
19. *Битюрин В.А., Великодный В. Ю.* ОТЧЕТ о ходе выполнения научно-исследовательской работы «Электродинамические эффекты и инициирование высокопороговых физико-химических превращений при распространении ударных волн в слабоионизированной плазме с заряженными наночастицами (кластерами)». ИВТ РАН 2003 г. 43 с.
20. *Baulch D.L. et. el .* Summary Table of Evaluated Kinetic Data for Combustion Modeling:supplement 1//Combustion and flme. 1994. Vol.98. Pp. 59-79.
21. *J.T.Lineberry, V.Yu.Velikodny, V.A.Bityurin,* Influence of Charged Nano-Particles on Shock Wave Structure. Chain Reaction Initiation in Shock Wave Front in Cluster Ionic Plasma // AIAA 2001-0638, 39th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 8-11 January 2001, Reno, Nevada, 6p.
22. *Великодный В.Ю., Битюрин В.А.* Распространение и структура фронта ударной волны в ионной плазме при наличии отрицательно заряженных наночастиц (кластеров, пылинок) // Прикладная физика. 2002. № 5. С. 90 – 98.
23. *Яновский Ю.Г., Великодный В. Ю., Гусева М.А., Дыренков А.В., Попов В.В., Садовин М.А.* ОТЧЕТ ЗА 2014 г. о ходе выполнения Программы «Горение и взрыв» Проект: «Исследование процессов горения, «пористого топлива» стимулированного электрическими разрядами при наличии активирующих присадок», ИПРИМ РАН, 2014. Москва. 54 с.
24. *Иванов В.В. и др.* Спектроскопические исследования продольного разряда в сверхзвуковом потоке воздуха при инъекции пропана в зону разряда // Теплофизика высоких температур, 2008, т.46, №1 с.7-14.

ВЛИЯНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ ПРИСАДОК НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОДЖИГА И ГОРЕНИЯ КОМПОЗИТНОГО ТОПЛИВА

¹Великодный В.Ю., ¹Дыренков А.В., ²Левин Ю.К.,
²Попов В.В., ²Яновский Ю.Г.

¹МОУ Московский физико – технический институт (технический университет),
г.Долгопрудный, Россия

²ФГБУН Институт прикладной механики Российской академии наук (ИПРИМ РАН),
г.Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

Экспериментально исследованы характеристики жидких углеводородных топлив с присадками наночастиц в части устойчивости их поджига и стабилизации горения при стимулирующем воздействии высоковольтного импульсного электрического разряда резонансного типа. Показана высокая эффективность воздействия малых добавок наночастиц (графена, нанотрубок) на процессы поджига и стабилизации горения. Заметно – в несколько раз (1,5-3 раза) сокращается время задержки воспламенения по сравнению с поджигом импульсным высоковольтным разрядом, который в свою очередь дает снижение времени задержки воспламенения $10^2 - 10^3$ раз по сравнению с аналогами. Процесс горения керосина с наноразмерными присадками приобретает устойчивый характер, факел пламени более однородный.

ВВЕДЕНИЕ

Известны различные способы модификации углеводородных топлив с целью повышения их рабочих характеристик. В известном патенте [1] в композитное топливо для твердотопливных двигателей космических ракет с полиуретановым связующим, добавляют перхлоратом аммония и алюминий. Это позволяет уменьшить колебания тяги и отложение окиси алюминия в задней части двигателя.

Согласно другому техническому решению [2] в жидкое топливо вводят наноразмерную присадку на основе галогенпроизводных фуллеренов в количестве 0,0001-0,5 мас.%; и после обработки в кавитаторе получают композицию жидкого топлива.

В другом известном патенте [3] осуществляют предварительное диспергирование каталитической присадки дисперсностью 1-50 нм посредством обработки смеси в роторно-гидравлическом смесителе в промежуточной жидкой среде, например, воде, подаваемой затем в углеводородное топливо, последовательно обрабатывают топливно-водяную смесь в роторно-гидравлическом смесителе и в ультразвуковом смесителе проходного типа, с образованием однородной эмульсии с размерами частиц воды в пределах 100-800 нм, при этом в качестве каталитической присадки используют нанопорошки металлов, окислов металлов или солей. Получаемый при этом технический результат состоит в снижении расхода углеводородных топлив на 15-20% и снижение экологического ущерба за счет повышения полноты сгорания.

В связи с успехами нанотехнологий наметилось целое направление по модернизации твердых и жидких топлив для ракетной и авиационной техники с использованием порошка алюминия разной дисперсности [4-6, 7,8]. Алюминий используется как добавка к углеводородным топливам [4-6] и как основной компонент топлив [7,8]. При использовании алюминия в качестве присадки или добавки снижается расход основного компонента топлива, повышается удельный импульс, снижается в 1,5-2 время задержки воспламенения [5]. Использование нанопорошка, порошка алюминия, как основного компонента топлива (лед+алюминий) открывает дополнительные возможности его использования в авиационной и ракетной технике [7,8] и в качестве возобновляемого топлива в энергетике и народном хозяйстве [9,10].

Таким образом, уровень современной техники и научно – технические разработки последнего десятилетия имеют определенные успешные результаты, направленные на повышение

эксплуатационных характеристик углеродных, в том числе, жидких, топлив, разработки принципиально новых видов топлив.

Решаемая нами задача также состоит в повышении характеристик углеродных жидких топлив – увеличении вероятности поджига и стабильности горения сверхзвуковой струи композитного топлива. Высочайшая динамичность горящей среды существенно затрудняет поджиг и горение из-за эффекта «сдувания пламени». Поэтому кроме введения присадок (наночастиц, графена, нанотрубок) для поджига и стимуляции горения использовался высоковольтный импульсный разряд [11] и импульсный разряд резонансного типа [12], которые дают возможность снижать время задержки воспламенения на порядки по сравнению с аналогами. Дополнительно используются новые процессы и технологические приемы барботирование топлив, «активированное пористое топливо» [13-15]. Все научные и технологические разработки в совокупности дали значительные эффекты в улучшении характеристик топлив по широкому спектру их применений в авиационной, ракетной технике, энергетике.

1. ПОЛУЧЕНИЕ МОДЕРНИЗИРОВАННЫХ ПОРИСТЫХ КОМПОЗИТНЫХ ТОПЛИВ

Основная идея использовать наночастицы (графен, нанотрубки) в качестве присадок к углеводородным топливам или пористым топливам на основе керосина состоит в использовании их развитой поверхности и малости размеров. При использовании в процессе поджига электрического разряда часть электронов, вследствие их большой подвижности оседает на наночастицах. Наночастицы имеют массу, которая существенно больше, массы молекул и положительных ионов, поэтому в условиях высокоскоростного потока легкие частицы «уносятся» возникает локальное разделение заряда, что сопровождается многочисленными локальными пробоями [16]. Дополнительно возникает свечение в виде коронного разряда, это видно на кинокадрах в виде множества светящихся точек. Это обусловлено малостью наночастиц и не скомпенсированным зарядом. Все это в совокупности создает дополнительно эффект квазиобъемности поджига. Причем данный эффект работает на достаточном удалении от электродов и при отсутствии пробоя (частота 200- 400 Гц).

В «пористое» топливо на основе керосина (см. [17 -23]) добавлялись различные присадки из наночастиц (графена, нанотрубок) с целью исследования их влияния на характеристики горения, процессы поджига и стабилизации пламени (так называемых «модернизированных пористых» - композитных топлив). Модернизированное топлива: 1) авиационный керосин 100 г + графен 0,5 г; 2) авиационный керосин 100 г + нанотрубки 0,5 г.

Углеродные нанотрубки были получены каталитическим пиролизом ацетилена на нанокластерах железа или кобальта в матрице из оксида алюминия. Нанотрубки имеют структуру переплетенных клубков диаметром более 2 мкм со средним внешним диаметром ~20-30нм (см. [19,22,23]).

Графен получен химическим способом, заключающимся в окислении слоев графита с последующим восстановлением и получением нанометровых слоев углеродного продукта. Частицы графена имеют слоистую структуру с размером зерен ~400 нм (см. [19,22, 23]).

На рис.1 представлены исходные образцы элементов композитного топлива нанотрубки (в двух сосудах слева) - и графен - справа.

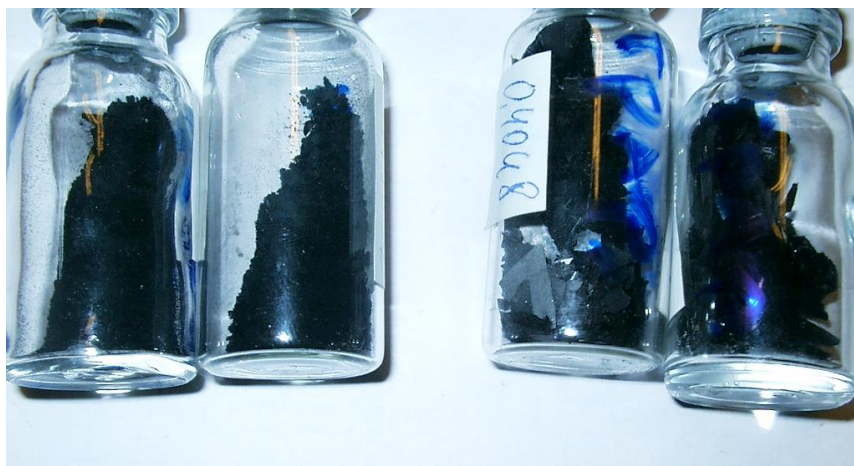


Рис.1. Образцы элементов (составляющих) композитного топлива - нанотрубки (в двух сосудах слева) и графен – справа

Перед испытанием производится предварительное дробление исходного материала (рис.1), смешение авиационного керосина и наночастиц или его части с последующей обработкой в ультразвуковой ванне. Так как обработка в ультразвуковой ванне оказалась не эффективной (часть добавок из нанокomпонентов выпадала в осадок), то стенд дополнительно был оборудован комплексом с высокоскоростными мешалками - 3000 об/мин. [12,23].

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ВОСПЛАМЕНЕНИЯ И ГОРЕНИЯ «ПОРИСТЫХ» КОМПОЗИТНЫХ ТОПЛИВ НА ОСНОВЕ КЕРОСИНА

Для исследований процессов поджига и стабилизации пламени, характеристик пламени использовалась скоростная кинокамера (высокоскоростная цифровая регистрация быстротекущих процессов камерой FASTCAM SA4 производитель: Photron, made in Japan, model: 500K-C2). Характеристики разряда снимались двухканальным осциллографом Tektronix TDS 220, при этом использовались высоковольтный делитель напряжения и токовый пробник. Кроме того, снимались расходно – напорные характеристики системы подачи топлива и воздуха.

Наблюдение за процессом воспламенения и горения проводилось с помощью высокоскоростной камеры с частотой 250 кадр/сек и выдержкой 1/5000 сек на кадр. Для сравнения исследовалось воспламенение «чистого пористого» керосина (см.[15]) в модернизированном устройстве барботирования и поджига [12] и его смеси с присадками наночастиц (графена, нанотрубок) [17-23].

Отметим, что в процессе исследований конструкция камеры смешения (камеры сгорания) немного менялась, это обусловлено проблемами моделирования (влияние стенок), проблемами наблюдения и особенностей высоковольтного разряда (помутнение стенок и пробои по корпусу). Эти проблемы были решены с помощью специальной конструкции системы поджига сверхзвуковой струи композитного топлива (рис.2) с вынесением разрядного промежутка за камеру смешения. Поэтому далее для разных конструкций системы поджига будут приводиться результаты испытаний без добавок и с добавками в одинаковых условиях (давление сжатого воздуха в ресивере, расход топлива). Все эти приемы использовались для удобства наблюдения и исследования физических и физико - химических процессов поджига и горения топливно – воздушной смеси и электрического разряда. Отметим, что эти проблемы связаны с исследованиями в фундаментальном научном плане (процессом визуального наблюдения, и с помощью кино и фото аппаратуры) и к технологическим задачам имеют косвенное отношение. Хотя

взаимодействие высоковольтного разряда и стенок камеры сгорания не маловажная технологическая и научно - технологическая задача.

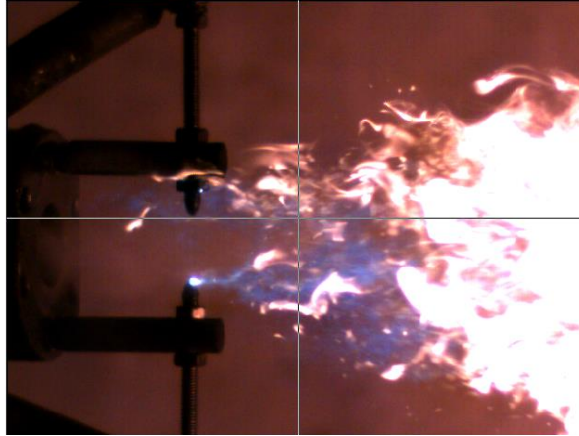


Рис.2. Конструкция системы поджига сверхзвуковой струи композитного топлива с выносом электродов, для исследования электрического разряда, его взаимодействия с топливно – воздушной струей в данном случае «пористый» керосин (без присадок и добавок)

Сравнительные испытания конструкции системы поджига с учетом влияния стенок камеры смешения (сгорания)

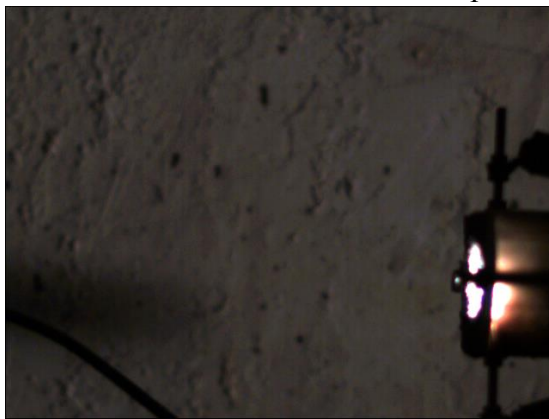


Рис.3. Разряд без подачи воздуха



Рис.4. Разряд в потоке воздуха. Давление в ресивере 4 атм. Скорость потока 15 м/с



Рис.5. Горение «чистого» барботированного – пористого керосина. Скорость потока 15 м/с при выходе из камеры смешения. Время задержки воспламенения 2,5 мс

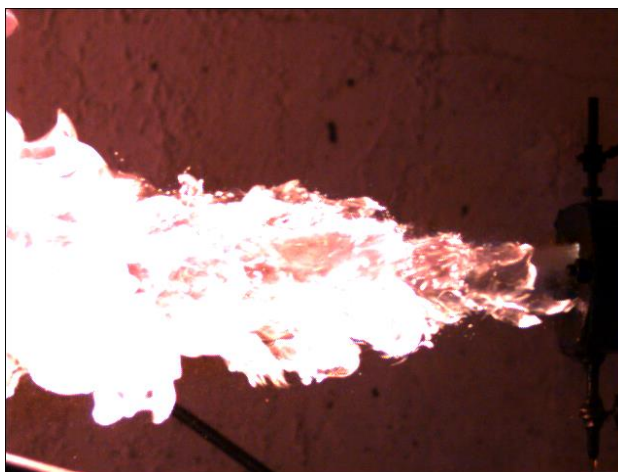


Рис.6. Горение керосина барботированного – пористого с присадками графена. Скорость потока 15 м/с при выходе из камеры смешения. Время задержки воспламенения 1,0 мс

На рис. 4 вида вытянутая пелена синего факела разряда. Существование этого факела в относительно большом объеме обеспечивает надежный поджиг и горение керосина как без добавок, так и с добавками согласно критерию Франк –Каменецкого (см. [24]). На рисунках 3-6 конструкция камеры смешения (горения) одинакова, давление воздуха в ресивере 4 атм., расход топлива одинаков Рис.5,6. Из сравнения рисунков 5-6 можно однозначно сказать, что добавка присадок наночастиц в «пористый» керосин дополнительно улучшает результат по времени задержки воспламенения в 2,5 – 3 раза. Отметим, что и для «чистого пористого» керосина с поджигом объемным разрядом (см. рис.5) время задержки приблизительно на два - три порядка меньше, чем при поджиге в отраженной ударной волне (см. [25]). Последнее подтверждает, полученный ранее эффект и выводы [11,26,27].

Таким из визуального сравнения рис.5-6 явно видно, что для смеси керосина с наночастицами время задержки воспламенения меньше, горение более стабильно, пламя более однородно. Это дает основание полагать, что с присадками наночастиц полнота сгорания будет выше, что в свою очередь, приводит увеличению суммарного теплового эффекта реакции из – за снижения непроизводительных потерь. Теоретически этот вывод обоснован в работе [17].

Для объяснения эффекта снижения времени задержки воспламенения за счет добавки наночастиц в топливо нами предложена модель «горячих очагов», в рамках развития [16,28]. Сущность этой модели состоит в том, что электроны, получаемые в разряде, вследствие их высокой подвижности оседают на наночастицах, имеющих большую удельную поверхность. Кроме того, в высокоскоростном потоке топливо воздушной смеси из – за большого различия в массах положительных ионов и отрицательно заряженных наночастиц возникает существенное разделение зарядов [16,28]. Вследствие этих факторов и малости размеров наночастиц реализуются многочисленные локальные пробой (из – за больших напряженностей электрического поля), дополнительно появляются радикалы, возбужденные частицы и заряженные частицы. Все эти факторы, в совокупности, дополнительно увеличивают совокупный объем, в котором реализуется поджиг топливо воздушной смеси. Это обеспечивает стабильное горение и поджиг.

На рис.7,8,9 представлено горение «пористого» керосина – рис.7, «пористого» керосина с присадками нанотрубок – рис.8, «пористого» керосина с присадками графена – рис.9 [29,30]. Давление воздуха в ресивере 3,5 атм. – тонина распыления хуже, чем в результатах, представленных на рис.5,6. там давление выше 4 атм., в барботирующем устройстве используются кольца Рашига (см. [12]) . Электроды см. рис.7-

9 находятся в глубине камеры смешения. В барботирующем устройстве рис.7-9 используется мембрана из пористого титана см. [15,31].

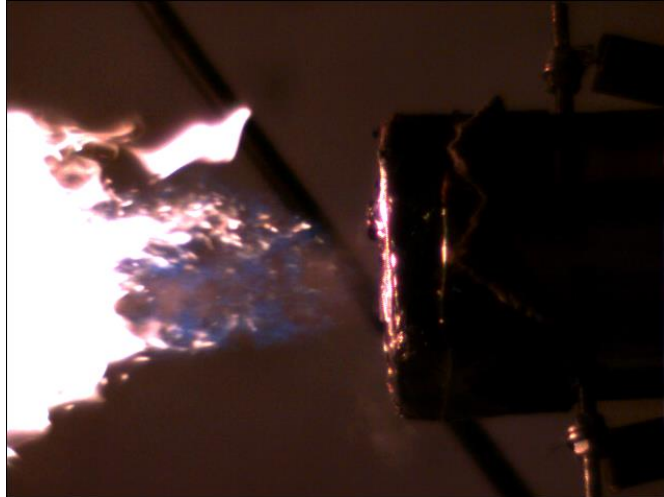


Рис.7. Горение «пористого» керосина, время задержки воспламенения $\tau = 2 \cdot 10^{-2}$ сек

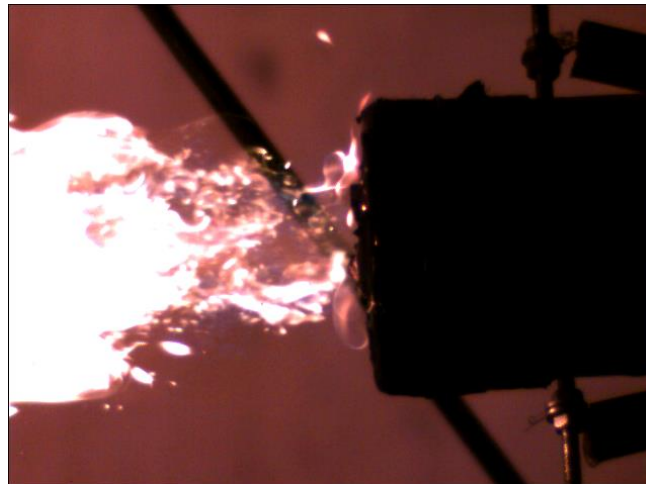


Рис.8. Горение «пористого» керосина с присадками нанотрубок, время задержки воспламенения $\tau = 10^{-2}$ сек



Рис.9. Горение «пористого» керосина с присадками гоафена, время задержки воспламенения $\tau = 1,3 \cdot 10^{-2}$ сек

Рис.7-9 приведены, как возможная иллюстрация «модели горячих очагов». На рис7 светящихся точечных образований гораздо меньше, чем на рис.8,9. Кроме того важным

фактором, является повторяемость эффекта использования добавок наночастиц (графена, нанотрубок) на снижение времени задержки воспламенения, хотя конструкция системы распыления и камеры смешения другая чем на рис. 5,6. Хотя вследствие недостатков более ранней конструкции эффективность процесса ниже, даже с добавками наноприсадок.

Добавки обеих видов наночастиц (графена и нанотрубок) дают приблизительно одинаково хорошие результаты. Выбор того или иного варианта на практике, возможно, будет обусловлен экономическими факторами.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные экспериментальные исследования отвечают запросам реальной практики при создании техники двойного назначения и разработке гиперзвуковых летательных аппаратов, в которых используется в качестве окислителя воздух из окружающей среды. Одной из нерешенных проблем в области создания широкодиапазонного прямоточного (гиперзвукового) воздушно-реактивного двигателя (ПВРД, ГПВРД) всегда было обеспечение надежного поджига и устойчивого горения при числах Маха в набегающем потоке $3 < M < 6$ с использованием керосина в качестве основного компонента топлива. Полученные в данной работе результаты обеспечивают определенный прогресс в данной области, показав возможность реального решения проблемы путем ввода в небольших количествах наноразмерных присадок к жидкому углеводородному топливу. Важную роль в решении проблемы сыграло применение специальной системы объемного поджига с использованием импульсного высоковольтного резонансного разряда. Применение новых технических решений в процессах барботирования и распыления топлива.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Бланшар Элен (Fr) и др.* Способ получения твердого композитного алюминизированного топлива и твердое композитное алюминизированное топливо // Патент RU 2535224 от 10.08.2013
2. *Житницкий А.Л.* Топливная композиция, способ ее производства и присадка для жидкого топлива // Патент RU 2478693 Опубликовано: 10.04.2013
3. *Анисимова З.В.* Способ оптимизации горения жидких углеводородных топлив // Патент RU 2299232 (2006.01) Опубликовано: 20.05.2007
4. *Старик А.М., Савельев А.М., Кулешов П.С., Тумова Н.С.* Нанокomпонентная энергетическая добавка в жидкое углеводородное топливо. // Патент. РФ. №2529035. 27.09.2014 г.
5. *Tepper F., Kaledin L.* Nano Aluminum as a Combustion Accelerant for Kerosene in Air Breathing Systems // 39th AIAA Aerospace Science Meeting, Jan 10, 2001. - Reno, 2001.
6. *Bityurin V.A., Velikodnyi V. Yu., Dyrenkov A.V., Popov V.V.* Experimental Studying of Combustion and Ignition Kerosene with Additives of Aluminum and Water // 13 - th International Workshop on Magneto-Plasma Aerodynamics. Moscow. 2014. P. 268-285.
7. *Risha G. A., Conner T. L., Yetter R. A., Yang V., Wood T.D., Pfeil M.A., Pourpoint T.L., Son S.F.* Aluminum-Ice (ALICE) Propellants FOR Hydrogen Generation and Propulsion // AIAA. 2009-4877.
8. *Wood T.D., Pfeil M.A., Pourpoint T.L., Son S.F., Tsohas J.* Feasibility Study and Demonstration of an Aluminum and Ice Solid Propellant // Int/ Journal of Aerospace Engineering. 2012/ Article ID 874076. 11 p.
9. *Шейндлин А.Е., Жук Л.З.* Алюмоводородная энергетика // Вестник РАН. 2010, том. 80, №3.

10. Битюрин В. А. , Великодный В.Ю., Дыренков А.В., Попов В.В. ОТЧЕТ ЗА 2013 г. о ходе выполнения Программы РАН «Фундаментальные проблемы магнитоплазменной аэродинамики» Проект: «Экспериментальные исследования процессов поджига топлив с использованием алюминия» ОИВТ РАН, Москва. 2014 г. 43 с.
11. Bityurin V.A., Velikodnyi V. Yu., Tolkunov B. N., Bukov A.A., Dyrenkov A.V., Popov V.V. Experimental study of the ignition of liquid hydrocarbon fuels and stabilization of their combustion by an arc discharge// Plasma Physics Reports. 2012. Vol. 38, N 18, p. 1073-1077.
13. Великодный В. Ю., Дыренков А.В., Попов В.В., Яновский Ю.Г. «Установка для смещения и поджига композитного топлива». Патент на полезную модель. №144951 от 10.09.2014 г.
14. Струминский В.В., Матюшенко В.Х., Базаров В.Г., Валиев Х.Х., Романчева Е.В. //А.с. 1625518 СССР, МПК⁵ B01 J 19/30. Насадочная колонна для контактных аппаратов / заявитель Сектор механики неоднородных сред АН СССР, Московский авиационный ин-т им. С. Орджоникидзе. - N 3885631; заявл. 07.03.85; опубл. 07.02.91. - Бюл. N 5. - 2 с.
15. Яновский Ю.Г., Великодный В.Ю., Тимофеев И.Б., Левин Ю.К. Устройство для сжигания топлива. Патент на изобретение №2227870 от 27.04.2004.
16. Великодный В.Ю., Воротилин В.П., Еремеев А.В., Никитенко Л.К., Тимофеев И.Б., Д. Ван Ви, Яновский Ю.Г. Микропузырьковые технологии в проблеме создания широкодиапазонного гиперзвукового прямоточного воздушно-реактивного двигателя.// Сборник Трудов Конф. «Современные проблемы механики гетерогенных сред», М., ИПРИМ РАН, т. II, с. 167-180, 2005.
17. Великодный В.Ю., Битюрин В.А. Распространение и структура фронта ударной волны в ионной плазме при наличии отрицательно заряженных наночастиц (кластеров, пылинок) // Прикладная физика. 2002. № 5. С. 90 – 98.
18. Yanovsky Yu. G., Nikitina E. A., Nikitin S. M., Karnet Yu. N., Velikodnyi V. Yu. Quantum – mechanical simulation and some experimental assessment of thermodynamics and mechanics of combustion of suspension hydrocarbon media with nanosized hydrocarbon additives.// Nanomechanics Science and Technology by Interactional Journal/ 2013. 4(2), 1-22.
19. Великодный В.Ю., Дыренков В.А., Яновский Ю.Г. Топливная композиция. Заявка на патент. № 2013123454 (034555) от 20.05.2013. Опубл. 2014. №2531146.
20. Великодный В.Ю., Гусева М.А., Дыренков А.В., Попов В.В., Садовин М.А., Семенов П.Е., Яновский Ю.Г. Исследование процессов поджига и стабилизации пламени керосино-воздушной смеси объемным электрическим разрядом//Механика и наномеханика структурно – сложных и гетерогенных сред. (успехи, проблемы перспективы). Тезисы докладов. Всероссийская конференция, приуроченная к 20-летию ИПРИМ РАН. Москва. 04-ноября - 9 декабря 2012 г. Тезисы.
21. Великодный В.Ю., Дыренков А.В., Садовин М.А., Попов В.В., Яновский Ю.Г. Экспериментальное исследование характеристик разряда в горящей керосино – воздушной среде//Всероссийская школа молодых ученых «Волны и вихри в сложных средах» , 2012 г., Москва, 03-05 декабря. Тезисы.
22. Великодный В.Ю., Дыренков А.В., Садовин М.А., Попов В.В., Яновский Ю.Г. Исследование электрического разряда в горящей керосино – воздушной среде//55 Конференция МФТИ, 2012 г., Москва, 25 ноября Тезисы.
23. Яновский Ю.Г., Великодный В. Ю., Гусева М.А., Дыренков А.В., Попов В.В., Садовин М.А. Отчет за 2012 г. о ходе выполнения Программы «Горение и взрыв» Проект: «Исследование процессов горения, «пористого топлива» стимулированного электрическими разрядами при наличии активирующих присадок», ИПРИМ РАН , 2012. Москва. 19 с.

24. Яновский Ю.Г., Великодный В. Ю., Гусева М.А., Дыренков А.В., Попов В.В., Садовин М.А. ОТЧЕТ ЗА 2014 г. о ходе выполнения Программы «Горение и взрыв» Проект: «Исследование процессов горения, «пористого топлива» стимулированного электрическими разрядами при наличии активирующих присадок», ИПРИМ РАН , 2014. Москва. 54 с.
25. Баум Ф.А., Орленко Л.П., Станюкович К.П., Челышев В.П., Шехтер Б.И. Физика взрыва. М.: Наука. 1975. 704 С.
26. Старик А.М., Титова Н.С., Торохов С.А. Кинетика окисления и горения сложных углеводородных топлив: авиационный керосин.// ФГВ. 2013. Т. 49. №4. С.12-30.
27. Битюрин В.А., Быков А.А., Великодный В.Ю., Дыренков А.В., Попов В.В., Толкунов Б.Н. Экспериментальное исследование процессов поджига и стабилизации горения жидких углеводородных топлив электрическим дуговым разрядом //Прикладная физика. 2011. №4. с.36-41.
28. Битюрин В.А., Филимонова Е.А. О влиянии разряда на многостадийное воспламенение//XXXVII Международная (Звенигородская) конференция по физике плазмы и УТС. 2010. (Тезисы докладов). 1С.
29. Битюрин В.А., Великодный В.Ю. ОТЧЕТ о ходе выполнения научно-исследовательской работы «Электродинамические эффекты и инициирование высокопороговых физико-химических превращений при распространении ударных волн в слабоионизированной плазме с заряженными наночастицами (кластерами)». ИВТ РАН 2003 г. 43 с.
30. Васильев Ю.В., Великодный В.Ю., Гузун С.Ю., Дыренков А.В., Крикунова А.И., Попов В.В., Яновский Ю.Г. Влияние добавок наночастиц на задержку воспламенения и стабилизацию пламени керосина в электрическом разряде// Международная (Звенигородская) конференция XXXIX по физике плазмы и управляемому термоядерному синтезу (г. Звенигород, 6-11 февраля 2012 г). Тезисы.
31. Васильев Ю.В., Великодный В.Ю., Воротилин В.П., Гузун С.Ю., Дыренков А.В., Крикунова А.И., Попов В.В., Яновский Ю.Г. Отчет за 2009 – 2011 г. Итоговый, о ходе выполнения Программы РАН «Горение и детонация» Проект: Экспериментальное и теоретическое исследование горения «пористого» топлива, в том числе, и при наличии активирующих присадок». ИПРИМ РАН, Москва. 2011г. 23 С.
32. Бушманов Е.А., Великодный В.Ю., Воротилин В.П., Яновский Ю.Г., Тимофеев И.Б., Д. Ван Ви. О возможности улучшения характеристик активированного пористого топлива при использовании ионизации в диэлектрическом кавитаторе.// Прикладная физика. 2003. № 5, с.49-55.

**Проблемы прочности гетерогенных
материалов, наноструктурированных
композитов, адаптивных материалов
и конструкций**

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ НЕЛИНЕЙНОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ И ПРОГРЕССИРУЮЩЕГО РАЗРУШЕНИЯ СЛОИСТЫХ КОМПОЗИТНЫХ ОБОЛОЧЕК ВРАЩЕНИЯ ПРИ НЕОСЕСИММЕТРИЧНЫХ ИМПУЛЬСНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ

Абросимов Н.А., Елесин А.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
г.Нижний Новгород, Россия*

РЕЗЮМЕ

Рассматривается методика численного исследования динамического деформирования композитных оболочек вращения, ориентированная на решение задач оценки их предельной деформируемости и прочности в зависимости от интенсивности нагружения. Численный метод решения сформулированной начально-краевой задачи основывается на явной вариационно-разностной схеме. Приведены результаты численного анализа неосесимметричного деформирования и разрушения слоистых композитных цилиндрических оболочек при взрывном нагружении различной интенсивности.

Ключевые слова: композитные материалы, оболочки вращения, критерий разрушения, численное моделирование, импульсное нагружение.

ВВЕДЕНИЕ

Композитные материалы благодаря высокой способности к поглощению энергии широко используются в защитных конструкциях, подверженных действию высокоинтенсивных динамических нагрузок. Основным силовым элементом защитных конструкций являются оболочки вращения, что обуславливает значительный интерес к вопросам их динамического поведения при импульсных воздействиях различной интенсивности.

Условно можно выделить два подхода расчетов на прочность слоистых композитных материалов и элементов конструкций. В первом подходе материал считается разрушенным, если произошло разрушение хотя бы одного элементарного слоя [1]. Однако разрушение отдельных элементарных слоев композита, как правило, приводит лишь к перераспределению напряжений между слоями, а многослойный пакет продолжает оказывать сопротивление дальнейшему деформированию. Во втором подходе допускается локальное разрушение элементарных слоев в пакете многослойного композита, что позволяет существенно повысить значение предельной несущей способности слоистого композита. Деформирование материала после разрушения первого слоя описывается в рамках моделей деградации упругих характеристик материала двух типов. В моделях первого типа считается, что разрушение поврежденных слоев происходит мгновенно и обнуляются все жесткостные характеристики материала независимо от характера (моды) разрушения. В моделях второго типа обнуление жесткостных характеристик осуществляется в зависимости от соответствующей моды разрушения [2].

Анализ результатов напряженно-деформированного состояния и прочности композитных материалов и конструкций [3] позволяет сделать вывод об актуальности изучения динамической реакции и прочности импульсно нагруженных слоистых композитных оболочек вращения, поскольку они являются основным элементом силовых корпусов взрывозащитных контейнеров и камер [4].

Цель данной работы - разработка методики численного моделирования процесса прогрессирующего разрушения слоистых композитных оболочек вращения, нагруженных импульсом внутреннего давления различной интенсивности.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И МЕТОД РЕШЕНИЯ

Рассматривается оболочка вращения, образованная перекрестной укладкой однонаправленного композитного материала. Отнесем оболочку к ортогональной криволинейной системе координат $\alpha_i (i = \overline{1,3})$, совпадающей с линиями главных кривизн и внешней нормалью к внутренней поверхности оболочки. Коэффициенты Ламе и главные кривизны равны $H_1 = A_1 z_1, H_2 = A_2 z_2, H_3 = 1$, где

$$z_1 = (1 + k_1 \alpha_3), z_2 = (1 + k_2 \alpha_3), A_1, A_2, k_1 = \frac{1}{R_1}, k_2 = \frac{1}{R_2}.$$

Энергетически согласованная система уравнений движения прикладной теории оболочек выводится из условия минимизации функционала полной энергии оболочки, который для оболочки вращения, нагруженной импульсом внутреннего давления, запишется в виде

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

где

$$(N_{11}, N_{12}, M_{11}, M_{12}, Q_{13}) = \int_0^h (\sigma_{11}, \sigma_{12}, \alpha_3 \sigma_{11}, \alpha_3 \sigma_{12}, \sigma_{13}) z_2 d\alpha_3 \quad (1 \rightarrow 2),$$

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

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

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

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

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

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

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

$u_i(\alpha_1, \alpha_2, t)$ - перемещения точек внутренней поверхности в направлениях осей $\alpha_i (i = \overline{1,3})$, $\varphi_j (j = \overline{1,2})$ - углы поворота нормали к внутренней поверхности, $\sigma_{ij}, \varepsilon_{ij}$ - компоненты тензоров напряжений и деформаций, $q_i, p_i (i = \overline{1,3})$ - нагрузки по направлениям координатных осей α_i ; S - область интегрирования на внутренней поверхности оболочки; $A_j, B_j (j = \overline{1,2})$ - коэффициенты первой квадратичной формы внутренней и внешней поверхностей; Γ_i^0 - граничные линии области S ; N_{ij}^0, M_{ij}^0 - усилия и моменты, приложенные к соответствующим граничным линиям, ρ - плотность материала оболочки.

Компоненты нелинейного тензора деформаций прикладной теории оболочек вращения можно представить в виде

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

где

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11} &= \frac{1}{A_1} \frac{\partial u_1}{\partial \alpha_1} + \frac{u_2}{A_1 A_2} \frac{\partial A_1}{\partial \alpha_2} + k_1 u_3, \quad (1 \leftrightarrow 2) \\ \chi_{11} &= \frac{1}{A_1} \frac{\partial \varphi_1}{\partial \alpha_1} + \frac{\varphi_2}{A_1 A_2} \frac{\partial A_1}{\partial \alpha_2}, \quad (1 \leftrightarrow 2) \\ \varepsilon_{12} &= \frac{1}{A_1} \frac{\partial u_2}{\partial \alpha_1} - \frac{u_1}{A_1 A_2} \frac{\partial A_1}{\partial \alpha_2}, \quad (1 \leftrightarrow 2) \\ \chi_{12} &= \frac{1}{A_1} \frac{\partial \varphi_2}{\partial \alpha_1} - \frac{\varphi_1}{A_1 A_2} \frac{\partial A_1}{\partial \alpha_2}, \quad (1 \leftrightarrow 2) \\ \varepsilon_{13} &= \frac{1}{A_1} \frac{\partial u_3}{\partial \alpha_1} - k_1 u_1, \quad (1 \leftrightarrow 2). \end{aligned} \quad (3)$$

Физические соотношения элементарного слоя с учетом гипотез прикладной теории оболочек запишутся в виде

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= A_{11} e_{11} + A_{12} e_{22} \\ \sigma_{22} &= A_{21} e_{11} + A_{22} e_{22} \\ \sigma_{12} &= A_{33} e_{12} \\ \sigma_{13} &= A_{44} e_{13} \\ \sigma_{23} &= A_{55} e_{23} \end{aligned} \quad (4)$$

где A_{mn} являются ступенчато изменяющиеся функции переменной α_3 , которые вычисляются через модули упругости и коэффициенты Пуассона элементарного слоя однонаправленного композитного материала.

Кроме того, допускается локальное разрушение элементарных слоев в пакете многослойного композита. В результате разрушения отдельных элементарных слоев композита происходит перераспределение напряжений между слоями, а многослойный пакет продолжает оказывать сопротивление дальнейшему деформированию.

Модель деградации жесткостных характеристик многослойного пакета формулируется на базе критерия Хоффмана [5] для связующего

$$f(\sigma_{ij}, F_{ij}) = C_1 \sigma_{22}^2 + C_2 \sigma_{11}^2 + C_3 (\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + C_5 \sigma_{22} + C_6 \sigma_{11} + C_7 \sigma_{23}^2 + C_8 \sigma_{13}^2 + C_9 \sigma_{12}^2 = 1,$$

$$C_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{F_{22}^P F_{22}^C} - \frac{1}{F_{11}^P F_{11}^C} \right), C_2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{F_{11}^P F_{11}^C} - \frac{1}{F_{22}^P F_{22}^C} \right), C_3 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{F_{11}^P F_{11}^C} + \frac{1}{F_{22}^P F_{22}^C} \right),$$

$$C_5 = \frac{1}{F_{22}^P} - \frac{1}{F_{22}^C}, C_6 = \frac{1}{F_{11}^P} - \frac{1}{F_{11}^C}, C_7 = \frac{1}{F_{23}^2}, C_8 = \frac{1}{F_{13}^2}, C_9 = \frac{1}{F_{12}^2}.$$

и критерия максимальных напряжений для волокон, вычисленных в осях ортотропии слоя. Здесь F_{ij}^P, F_{2ij}^C - пределы прочности при растяжении и сжатии. В процессе деформирования и трещинообразования связующего предполагается жесткое сцепление между соседними слоями.

В зависимости от знака объемной деформации и моделей разрушения связующего и волокон модули упругости монослоя с трещинами принимают одно из возможных значений, приведенных в табл. 1.

Таблица 1.

Схема редуцирования модулей упругости слоя

Характер разрушения	Текущее значение объемной деформации	E_{11}	E_{22}	G_{12}	G_{13}	G_{23}
$\sigma_{11} > F_{11}^P$		0	0	0	0	0
$ \sigma_{11} > F_{11}^C$	$e_{11} + e_{22} > 0$	0	0	0	0	0
	$e_{11} + e_{22} < 0$	E_{11}^0	E_{22}^0	0	0	0
$f(\sigma_{ij}, F_{ij}) \geq 1$	$e_{11} + e_{22} > 0$	E_{11}^0	E_{22}'	G_{12}'	G_{13}'	G_{23}'
	$e_{11} + e_{22} < 0$	E_{11}^0	E_{22}^0	G_{12}'	G_{13}'	G_{23}'

Здесь $E_{22}' = \left| \frac{e_{22}^{\max}}{F_{22}^P} + \frac{(v_{12})^2}{E_{11}^0} \right|^{-1}$, $G_{ij}' = \left| \frac{e_{ij}^T}{F_{ij}} \right|$, $E_{11}^0, E_{22}^0, G_{12}^0, G_{13}^0, G_{23}^0$ - значения модулей упругости

и модулей сдвига в начальном неповрежденном состоянии, v_{ij} - коэффициенты Пуассона, e_{ij}^T - текущее значения деформации, $e_{ij}^{\max}$ - максимальные значения деформаций за предысторию деформирования.

Будем считать, что исчерпание несущей способности оболочки происходит в момент обнуления в каком-либо поперечном сечении всех жесткостных характеристик.

Подставляя в соотношения (4) выражения для деформаций (2), (3) и интегрируя их по толщине можно представить усилия и моменты через обобщенные деформационные характеристики $\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{12}, \varepsilon_{21}, \varepsilon_{13}, \varepsilon_{23}, \chi_{11}, \chi_{22}, \chi_{12}, \chi_{21}$ в виде[6].

$$\begin{aligned} N_{11} &= B_{11} \bar{\varepsilon}_{11} + B_{12} \bar{\varepsilon}_{22} + C_{11} \chi_{11} + C_{12} \chi_{22}, \\ N_{12} &= B_{33}^{11} \bar{\varepsilon}_{12} + B_{33}^{12} \bar{\varepsilon}_{21} + C_{33}^{11} \chi_{12} + C_{33}^{12} \chi_{21}, \\ M_{11} &= C_{11} \bar{\varepsilon}_{11} + C_{12} \bar{\varepsilon}_{22} + D_{11} \chi_{11} + D_{12} \chi_{22}, \\ M_{12} &= C_{33}^{11} \bar{\varepsilon}_{12} + C_{33}^{12} \bar{\varepsilon}_{21} + D_{33}^{11} \chi_{12} + D_{33}^{12} \chi_{21}, \\ Q_{13} &= K_1 (\varepsilon_{13} + \varphi_1), \end{aligned} \quad (1 \leftrightarrow 2) \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned}
\bar{\varepsilon}_{11} &= \varepsilon_{11} + \varepsilon_{13}^2 / 2; \quad \bar{\varepsilon}_{12} = \varepsilon_{12} + \varepsilon_{13}\varepsilon_{23} / 2, \\
B_{jj} &= I_{jj}^{(0)}, \quad B_{12} = B_{21} = J_{12}^{(0)}, \quad C_{jj} = I_{jj}^{(1)}, \quad C_{12} = C_{21} = J_{12}^{(1)} \\
B_{33}^{jj} &= I_{33,jj}^{(0)}, \quad B_{33}^{12} = B_{33}^{21} = J_{33}^{(0)}, \quad C_{33}^{jj} = I_{33,jj}^{(1)}, \quad C_{33}^{12} = C_{33}^{21} = J_{33}^{(1)}, \\
D_{jj} &= I_{jj}^{(2)}, \quad D_{12} = D_{21} = J_{12}^{(2)}, \quad D_{33}^{jj} = I_{33,jj}^{(2)}, \quad D_{33}^{12} = D_{33}^{21} = J_{33}^{(2)} \\
K_j &= h^2 \left[\sum_{\kappa=1}^K \frac{H_j^{(\kappa)} h_\kappa}{A_{j+3,j+3}^{(\kappa)}} \right]^{-1}, \quad H_1^{(\kappa)} = \frac{(1 + \bar{h}_\kappa k_1)}{(1 + \bar{h}_\kappa k_2)}, \quad (1 \leftrightarrow 2) \quad (j=1,2) \\
h_\kappa &= z_\kappa - z_{\kappa-1}, \quad \bar{h}_\kappa = (z_\kappa + z_{\kappa-1}) / 2, \\
I_{11}^{(i)} &= \frac{1}{i+1} \sum_{\kappa=1}^K A_{11}^{(\kappa)} H_2^{(\kappa)} (z_\kappa^{i+1} - z_{\kappa-1}^{i+1}), \quad (i=0,1,2) \quad (1 \leftrightarrow 2) \\
I_{33,11}^{(i)} &= \frac{1}{i+1} \sum_{\kappa=1}^K A_{33}^{(\kappa)} H_2^{(\kappa)} (z_\kappa^{i+1} - z_{\kappa-1}^{i+1}), \\
J_{12}^{(i)} &= \frac{1}{i+1} \sum_{\kappa=1}^K A_{12}^{(\kappa)} (z_\kappa^{i+1} - z_{\kappa-1}^{i+1}), \\
J_{33}^{(i)} &= \frac{1}{i+1} \sum_{\kappa=1}^K A_{33}^{(\kappa)} (z_\kappa^{i+1} - z_{\kappa-1}^{i+1}), \quad (i=0,1,2)
\end{aligned}$$

$A_{ij}^{(\kappa)}$ -эффективные жесткостные характеристики элементарного слоя, которые вычисляются через модули упругости и коэффициенты Пуассона; z_κ — координаты слоев, отсчитываемые от внутренней поверхности оболочки.

Минимизация функционала полной энергии оболочки (1) позволяет получить систему уравнений движения

$$\begin{aligned}
L_1(N) + N_{13}^* k_1 A_1 A_2 + F_1 &= A_1 A_2 (\bar{B}_{11} \ddot{u}_1 + \bar{B}_{12} \ddot{\varphi}_1), \\
L_2(N) + N_{23}^* k_2 A_1 A_2 + F_2 &= A_1 A_2 (\bar{B}_{11} \ddot{u}_2 + \bar{B}_{12} \ddot{\varphi}_2), \\
\frac{\partial(A_2 N_{13}^*)}{\partial \alpha_1} + \frac{\partial(A_1 N_{23}^*)}{\partial \alpha_2} - A_1 A_2 (N_{11} k_1 + N_{22} k_2) + F_3 &= A_1 A_2 \bar{B}_{11} \ddot{u}_3, \\
L_1(M) - Q_{13} A_1 A_2 + M_1 &= A_1 A_2 (\bar{B}_{22} \ddot{\varphi}_1 + \bar{B}_{21} \ddot{u}_1), \\
L_2(M) - Q_{23} A_1 A_2 + M_2 &= A_1 A_2 (\bar{B}_{22} \ddot{\varphi}_2 + \bar{B}_{21} \ddot{u}_2), \\
L_1(K) = \frac{\partial(A_2 K_{11})}{\partial \alpha_1} - K_{22} \frac{\partial A_2}{\partial \alpha_1} + \frac{\partial(A_1 K_{21})}{\partial \alpha_2} + K_{12} \frac{\partial A_1}{\partial \alpha_2}, & \quad (1 \leftrightarrow 2)
\end{aligned} \tag{6}$$

естественные граничные условия

$$\begin{aligned}
N_{11} &= N_{11}^0; \quad N_{12} = N_{12}^0; \quad N_{13}^* = Q_{13}^0; \quad M_{11} = M_{11}^0; \\
M_{12} &= M_{12}^0 \quad (1 \leftrightarrow 2).
\end{aligned} \tag{7}$$

Дополняя соотношения (2)-(4), (7), (8), (13), (14) необходимым числом начальных условий

$$\begin{aligned}
u_i(\alpha_1, \alpha_2, 0) &= u_i^0(\alpha_1, \alpha_2); \quad \varphi_i(\alpha_1, \alpha_2, 0) = \varphi_i^0(\alpha_1, \alpha_2); \\
\dot{u}_i(\alpha_1, \alpha_2, 0) &= \dot{u}_i^0(\alpha_1, \alpha_2); \quad \dot{\varphi}_i(\alpha_1, \alpha_2, 0) = \dot{\varphi}_i^0(\alpha_1, \alpha_2), \quad (i = \overline{1,3}; j = 1,2)
\end{aligned} \tag{8}$$

получим полную систему уравнений для анализа нелинейных волновых процессов деформации и послойного разрушения оболочек вращения, полученных перекрестной намоткой однонаправленного композитного материала.

Численный метод решения сформулированной задачи основывается на явной вариационно-разностной схеме [7].

2. РЕЗУЛЬТАТЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ

Предварительно была проведена верификация рассматриваемой методики путем сравнения численных расчетов с экспериментальными данными [8] по однократному нагружению изнутри цилиндрической оболочки импульсом давления, вызванным подрывом в ее геометрическом центре заряда взрывчатого вещества (ВВ) массой m . В расчетах импульс давления задавался с помощью эмпирической зависимости:

$$P_3(\alpha_1, t) = \begin{cases} 0,35mq/l^3 \text{ нпу } t \leq 0,35l/\sqrt{q} \\ 0 \text{ нпу } t > 0,35l/\sqrt{q} \end{cases}$$

где $q = 4,77 \cdot 10^6$ Дж/кг - теплотворная способность ВВ; l - расстояние от центра заряда до точки внутренней поверхности оболочки. Оболочка получена укладкой десяти слоев тканевого композитного материала.

Оболочка имела следующие геометрические размеры: радиус внутренней поверхности $R=0,1$ м, толщину $h=0,005$ м, длину $L = 2,4R$.

Жесткостные и прочностные характеристики тканевого композитного материала были равны: $E_{11}=33,0$ ГПа, $E_{22}=19,0$ ГПа, $\nu_{12}=0,21$, $G_{12}=5,1$ ГПа, $G_{13}=3,73$ ГПа, $G_{23}=3,69$ ГПа, $\rho=1900$ кг/м³, $F_{11}^P=0,6$ ГПа, $F_{11}^C=0,451$ ГПа, $F_{22}^P=0,4$ ГПа, $F_{22}^C=0,327$ ГПа, $F_{12}=0,092$ ГПа, $F_{23}=0,058$ ГПа, $F_{13}=0,057$ ГПа.

В таблице 2 представлены результаты сравнения численных расчетов с экспериментальными данными по максимальным значениям кольцевой деформации e_{22}^* в центральном сечении не разрушившейся оболочки и периода радиальных колебаний T , полученные для массы заряда $m=0,01$ кг. Здесь в числителе приведены экспериментальные значения, а в знаменателе - численные.

Таблица. 2.

Результаты сравнения численных расчетов
с экспериментальными данными

$e_{22}^*, \%$	$T \cdot 10^{-6}, \text{с}$
$\frac{\approx 1,0}{0,85}$	$\frac{200}{170}$

Наблюдается достаточно хорошее совпадение результатов, как по амплитуде, так и по периоду колебаний. При этом погрешность экспериментальных испытаний [8] достигала 10%.

При нагружении оболочки зарядом массой $m=0,025$ кг наблюдается разрушение оболочки, как при численном моделировании, так и экспериментальном испытании. Иллюстрация осесимметричного процесса разрушения представлена на рис.1,2.

На рис.1 показаны деформированные конфигурации оболочки, начиная с момента времени разрушения связующего и заканчивая моментом, предшествующим разделению оболочки на две части. На рис.2 показано развитие зон разрушения по толщине пакета слоев в центральном сечении оболочки. Светлый фон соответствуют зоне, в которой отсутствуют разрушения, в зоне закрашенной серым фоном наблюдается разрушение матрицы, в зоне черного фона наступает разрушение волокон.

Видно, что разрушение оболочки начинается с растрескивания связующего в центральной зоне оболочки. Этот процесс зарождается на внутренней поверхности оболочки, а затем кольцевая трещина распространяется до внешней поверхности и образуется сквозная трещина по всему пакету, что в итоге приводит к разрыву оболочки по плоскости симметрии на две части. При численном моделировании наблюдается более

раннее начало процесса разрушения при меньших уровнях максимальных окружных деформаций по сравнению с экспериментальными результатами, что, по-видимому, связано с отсутствием достоверных данных по полному комплексу прочностных характеристик материала и несовершенством реализованного механизма разрушения. При этом следует отметить, что описанный сценарий численного моделирования процесса послойного разрушения композитных цилиндрических оболочек удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными [8].

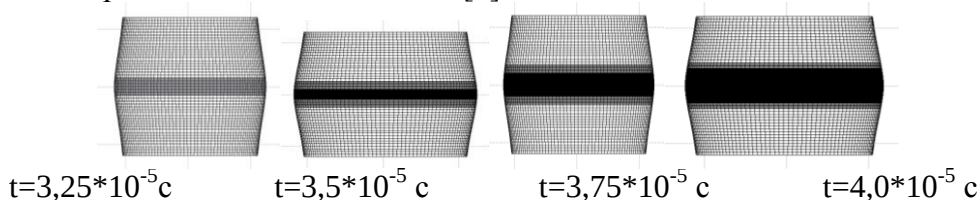


Рис.1.

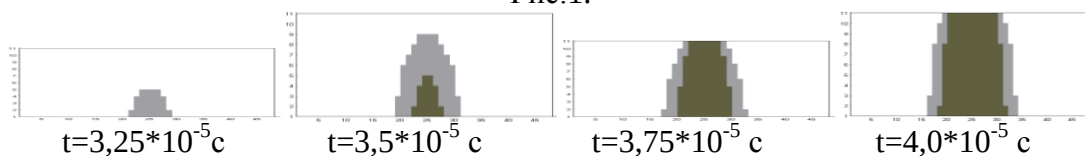


Рис.2.

Следует также заметить, что наряду с осесимметричным характером разрушения оболочек в экспериментальных исследованиях были зафиксированы случаи локального неосесимметричного разрушения оболочек в зоне центрального сечения, что может быть связано с одной стороны с возможными дефектами изготовления оболочки, а с другой - неосесимметричным расположением заряда.

Результаты численного моделирования неосесимметричного деформирования и разрушения цилиндрической оболочки обусловленного неосесимметричным расположением заряда массой $m=0,025$ кг приведены на рис.3-6. При этом исследовалось влияние величины смещения заряда по радиусу цилиндра.

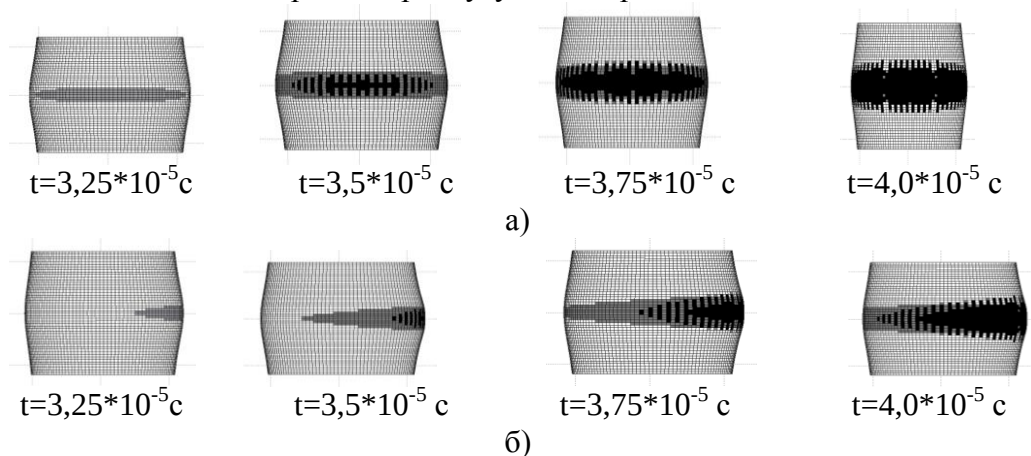


Рис.3.

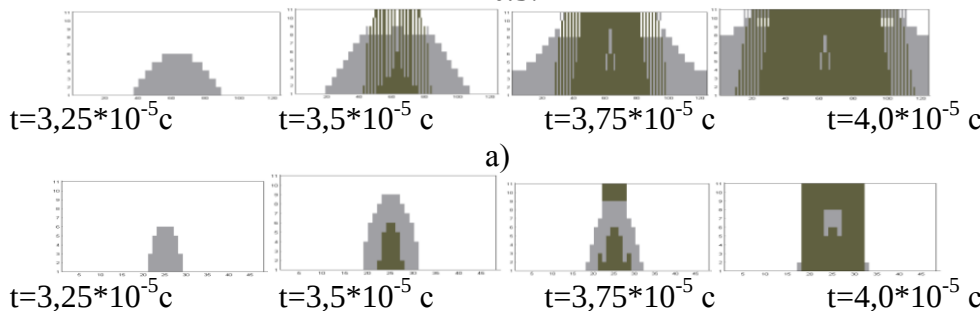
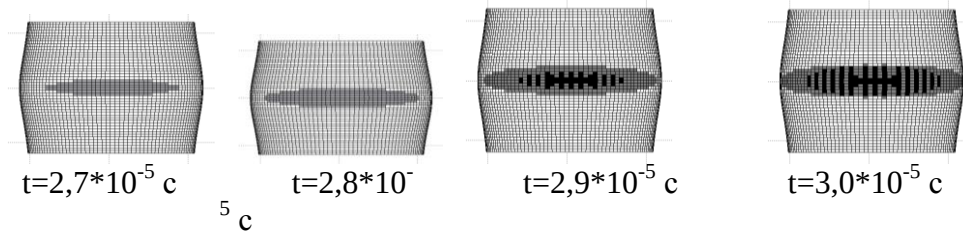
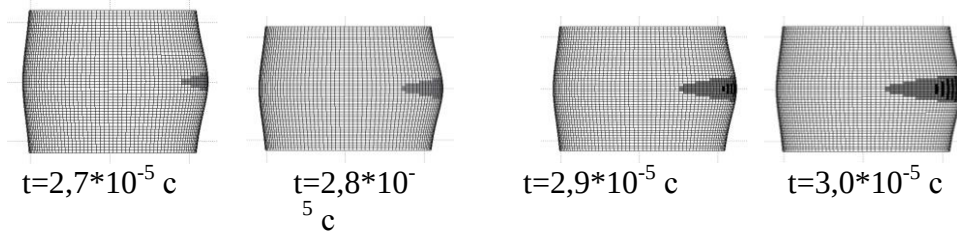


Рис.4.

На рис.3 представлены деформированные конфигурации оболочки при смещении заряда вдоль ее радиуса на 5%, зафиксированные в момент начала разрушения связующего и до момента, предшествующему финишному разрушению. На деформированных конфигурациях показаны зоны разрушения внутреннего слоя оболочки (оболочка показана в двух проекциях: со стороны наиболее близкой к центру заряда («в анфас») рис. 3.а и стороны, повернутой на 90° относительно первой («в профиль») рис. 3.б. На рис. 4 показан процесс распространения зоны разрушения по толщине пакета слоев в центральном сечении по окружной координате (рис. 4.а) и вдоль образующей оболочки (Рис. 4.б). На рис. 5, 6 представлены аналогичные результаты при смещении заряда на 10% вдоль радиуса оболочки.

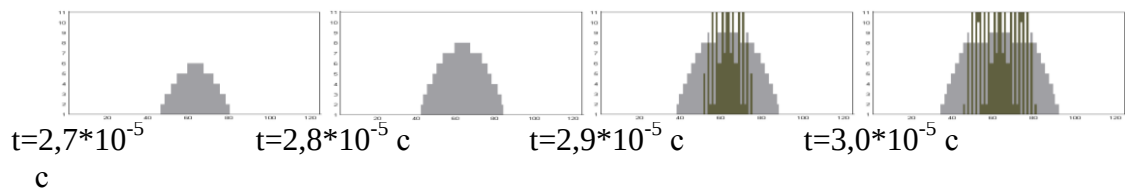


а)

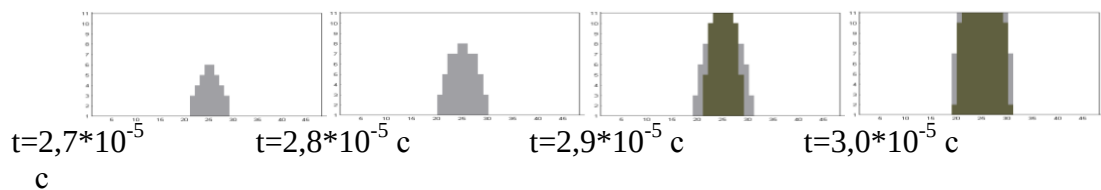


б)

Рис.5.



а)



б)

Рис.6.

Из приведенных результатов следует, что при неосесимметричном нагружении финишное разрушение наступает раньше по сравнению с осесимметричным, а скорость распространения зоны разрушения связующего уменьшается с увеличением величины смещения заряда.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенная расчетная модель позволяет с удовлетворительной точностью описывать процесс послойного разрушения композитных цилиндрических оболочек при неосесимметричных импульсных воздействиях.

Работа выполнена при частичном финансировании по Программе государственной поддержки ведущих научных школ РФ (грант НШ-2843.2012.8), РФФИ (грант 13-08-00742) и Минобрнауки РФ (гранты №02.В.49.21.0003 и №2014/1342226).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Богданович А.Е.* Нелинейные задачи динамики цилиндрических композитных оболочек. - Рига: Зинатне, 1987. - 295 с.
2. *Эллул Б., Камиллери Д., Беттс Дж.* Анализ прогрессирующего разрушения пластин из волокнисто-армированных композитов, подверженных изгибу из плоскости // *Механика композитных материалов.* - 2013. - Т. 49, № 6. - С. 911-932.
3. *Летихин П.П., Ромащенко В.А.* Методы и результаты анализа напряженно-деформированного состояния и прочности многослойных толстостенных анизотропных цилиндров при динамическом нагружении (обзор). Сообщение 2. теоретические методы // *Проблемы прочности.* 2013. № 2. С. 31-45.
4. *Федоренко А.Г., Сырунин М.А., Иванова А.Г.* Критерии выбора композитных материалов для оболочечных конструкций, локализирующих взрыв (обзор) // *ФГВ.* 2005. Т.41. №5. С.3-13.
5. *Браутман Л., Крок Р.* Композиционные материалы. Том 2: Механика композиционных материалов. М.: Мир, 1978. - 568 с.
6. *Васильев В.В.* Механика конструкций из композиционных материалов. М.: Машиностроение, 1988. - 272 с.
7. *Абросимов Н.А., Елесин А.В.* Численный анализ влияния структуры армирования на динамическое поведение композитных цилиндрических оболочек при взрывном нагружении // *Проблемы прочности и пластичности: Межвузовский сборник.* Вып. 74. - Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского госуниверситета, 2012. С. 78-83.
8. *Федоренко А.Г., Цыпкин В.И., Иванова А.Г., Русак В.Н., Заикин С.Н.* Особенности динамического деформирования и разрушения цилиндрических стеклопластиковых оболочек при внутреннем импульсном нагружении // *Механика композитных материалов.* 1983. - № 1. С. 90-94.

ОЦЕНКА МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ГИПЕРУПРУГИХ КОМПОЗИТОВ С МАЛЫМИ ДОБАВКАМИ ДИСПЕРСНЫХ НАПОЛНИТЕЛЕЙ

Власов А.Н., Волков-Богородский Д.Б., Яновский Ю.Г., Корнев Ю.В., Карнет Ю.Н.

ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г.Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

Статья посвящена оценке эффективных механических (деформационных и прочностных) характеристик гиперупругих полимерных нано- и микронаполненных композитов с учётом контактного слоя, размеры которого определяются структурой поверхности наполнителя. Идентификация свойств этой поверхности осуществлялась методами фрактального анализа, что позволило на основе экспериментальных данных вычислить фрактальные размерности поверхности наполнителя. Применяемый метод определения эффективных механических характеристик гиперупругого композита основан на решении ряда периодических задач на ячейке с включением. Эти задачи решались численно-аналитическими методами в объёмной постановке с использованием программного комплекса UWay, разработанного на основе объектно-ориентированного подхода в программировании метода конечных элементов в реализации его аналитико-численной модификации, именуемой блочным аналитико-численным методом. При решении задачи определения эффективных механических характеристик использовались представленные в статье результаты экспериментальных исследований структуры (в том числе контактной поверхности) и свойств наполнителя, матрицы и контактного слоя, полученные в ИПРИМ РАН.

Ключевые слова: многофазные среды; гиперупругие материалы; метод асимптотического усреднения уравнений с быстроосциллирующими коэффициентами; аналитические и численные методы решения задачи на ячейке периодичности; эффективные механические свойства структурно-неоднородных материалов.

В работе исследуются эффективные механические свойства композитных материалов на основе гиперупругой полимерной матрицы и дисперсного наполнителя, имеющего размеры, которые могут относиться к разным масштабным уровням - к микронному, субмикронному или наноразмерному. Следует отметить, что субмикронный и наноразмерный масштаб наполнителя обычно характеризуется наличием развитого межфазного слоя, который может приводить к эффекту аномального усиления жесткостных характеристик композитных материалов [1,2], что необходимо учитывать при использовании аналитических и численных методов оценки их эффективных характеристик.

В настоящей работе развивается параметрический метод асимптотического усреднения [3-5] в его аналитико-численном представлении для нелинейных уравнений теории упругости с быстроосциллирующими коэффициентами, соответствующими структурно-неоднородным материалам с геометрически нелинейной матрицей и упругим наполнителем, имеющим внутреннюю микроструктуру, обусловленную наличием периодической системы включений с промежуточным межфазным слоем. Метод асимптотического усреднения является обоснованным и адекватным методом для моделирования физических процессов в структурно-неоднородных средах как с периодической [3,4], так и с произвольной нерегулярной структурой [5]. В работе [6] традиционная схема метода асимптотического усреднения была несколько модифицирована и сформулирована для физически нелинейных уравнений термоупругости за счет расширенной трактовки функций быстрых переменных в параметрическом пространстве. Эта схема применяется в настоящей работе к геометрически нелинейным материалам.

В отличие от традиционного подхода к методу асимптотического усреднения, помимо двух типов переменных - быстрых и медленных - при асимптотическом анализе уравнений вводится еще дополнительный набор параметров, соответствующий нелинейным зависимостям свойств материала от напряжений, температуры и деформаций. Соответственно функции быстрых переменных рассматриваются в параметрическом пространстве. В результате эффективные характеристики структурно-неоднородного материала имеют нелинейную диаграмму состояния, для расчета которой требуется эффективный метод решения задачи на ячейке периодичности при множественном варьировании дополнительного набора параметров.

Основным уравнением в методе асимптотического усреднения является задача на ячейке периодичности для функций быстрых переменных первого порядка. Она определяет как эффективные характеристики композитного материала, так и внутренние микронапряжения в окрестности включений, которые очень важно знать и контролировать при эксплуатации изделий из гиперупругого композита. Специфика метода асимптотического усреднения для геометрически нелинейных материалов заключается в необходимости решать задачу на ячейке с включениями для такого же геометрически нелинейного материала, но с периодическими условиями "скачка".

Для определения модуля Юнга решается задача об одноосном однородном растяжении ячейки с включением при периодических условиях в ортогональном направлении; а при вычислении модуля сдвига решается задача о напряженно-деформированном состоянии при двухосном состоянии "чистого сдвига" (растяжение/сжатие) при условии периодичности в ортогональном растяжению направлении. Для решения этих задач здесь применяется метод конечных элементов, реализованный в программном комплексе UWay [7,8]. Особенностью этого комплекса является ориентация на решение нелинейных задач и объектно-ориентированный подход к программированию алгоритмов. Это позволяет наращивать в программе такие модели поведения материалов и такую стратегию конечно-элементных расчётов, которые максимально учитывают специфику решаемых задач. В частности, в программе UWay развивается конечно-элементный подход для решения геометрически нелинейных задач.

Масштабные эффекты, обусловленные наличием межфазного слоя, моделируются непосредственно, путём введения в модель промежуточного межфазного сферического слоя для включений сферической геометрической формы (рис.1). Параметры межфазного слоя варьируются в соответствии с размерами включений на основе экспериментальных данных. В работе [2] на основе метода асимптотического усреднения для классической модели упругого материала со сферическими включениями и изменяющимся в зависимости от размера включений межфазным слоем был смоделирован масштабный эффект локального усиления жесткостных характеристик композитного материала, хорошо согласующийся с экспериментальными данными.

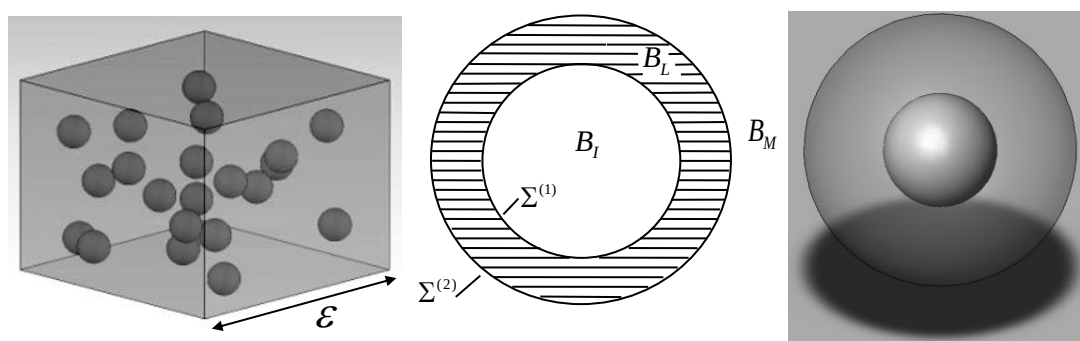


Рис.1. Типовой представительный элемент периодической структуры.

В качестве несжимаемой матрицы композита рассматриваются гиперупругие эластомерные материалы, которые описываются в главных осях тензора деформаций

потенциалом упругой энергии U , зависящем от элементарных относительных удлинений $\delta_i = (dx'_i - dx_i)/dx_i$, или первых двух инвариантов тензора деформаций: $I_1 = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2$, $I_2 = \lambda_1^{-2} + \lambda_2^{-2} + \lambda_3^{-2}$, где $\lambda_i = 1 + \delta_i$. В литературе предлагается много различных формул для потенциала U [9], в настоящей работе мы ограничиваемся наиболее употребительным потенциалом Муни-Ривлина

$$U = C_1(I_1 - 3) + C_2(I_2 - 3), \quad (1)$$

с коэффициентами $C_1 = 0.3313 \text{ MPa}$, $C_2 = 0.4435 \text{ MPa}$, соответствующими материалу Дуотан (Duothan QA965) [10]. Зависимость потенциала энергии и диаграммы напряжений от относительного удлинения δ_3 при одноосном растяжении представлены на рис. 2.

Наполнитель матрицы состоит из частиц минерала шунгит, описываемого в рамках изотропной упругой модели, модуль Юнга у которого $E = 1.5 \text{ GPa}$, а коэффициентом Пуассона $\nu = 0.3$. Далее рассматриваются три варианта объёмного наполнения c_0 эластомерных композитных материалов: с малой долей включений $c_0 = 0.017$, $c_0 = 0.025$ и значительной долей включений $c_0 = 0.4$.

Согласно методике параметрического метода асимптотического усреднения [11, 12] эффективные матрицы, задающие тензор жёсткости $\hat{A}_{ij} = \{\hat{c}_{ijkl}\}$ ($\hat{c}_{ijkl}$ - компоненты эффективного тензора жёсткости; $i, j, k, l = 1, 2, 3$), определяются как среднее по периоду от напряжений, порождаемых функциями быстрых переменных $N_i(\xi, \Delta_i)$, зависящими от относительных удлинений $\Delta_i = \Delta l_i / l_i$ ячейки периодичности, на которой ведётся расчёт функций быстрых переменных. Специфика больших деформаций заключается в том, что эти функции надо рассчитывать на ячейке с переменным периодом, зависящем от приложенной нагрузки.

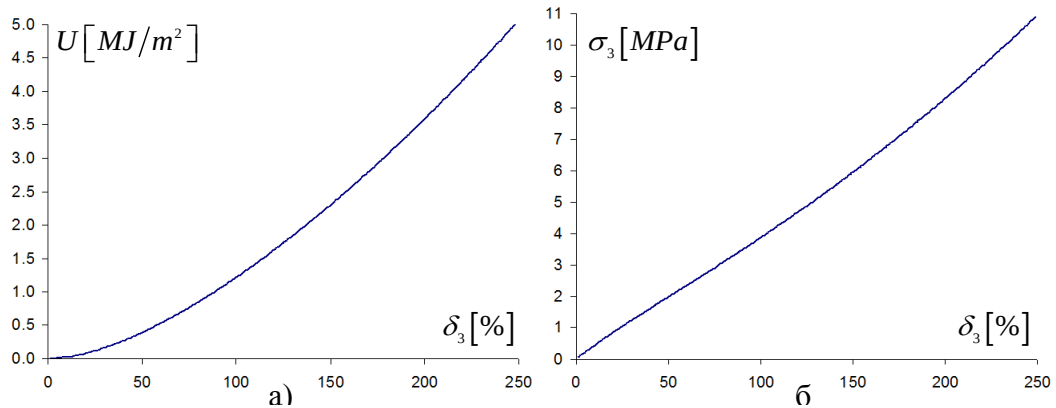


Рис.2. Модель эластомерного материала; а) упругий потенциал Муни-Ривлина; б) диаграмма напряжений при одноосном растяжении.

Анализируя задачу на ячейке для симметрично расположенных включений сферической формы, приходим к выводу, что для определения модуля Юнга необходимо решать задачу об одноосном растяжении ячейки из несжимаемого материала с включением при сохранении параллельности боковых граней, и в качестве расчетной области можно взять 1/8 часть ячейки. Аналогично, для определения модуля сдвига необходимо решать задачу на 1/8 части ячейки при деформациях чистого сдвига, сохраняющих объем каждого элементарного кубика в главных осях деформации.

Чтобы обеспечить необходимое условие параллельности граней в первой задаче, расчетная область была нами расширена до 7 ячеек в направлении осей x , y , ортогональных направлению одноосного растяжения z , и на крайних боковых гранях

условие периодичности было заменено условием отсутствия поверхностных сил. Однако все необходимые данные для вычисления эффективного модуля берутся из центральной ячейки. Соответствующие расчётные схемы представлены на рис.3,4.

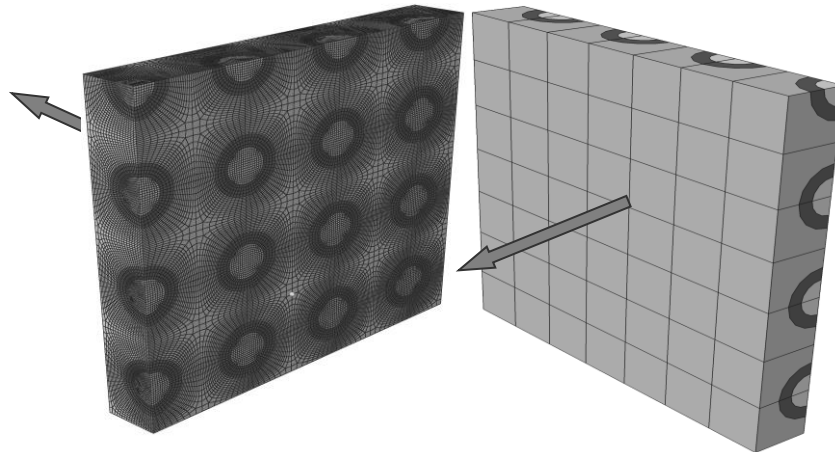


Рис.3. Расчётная схема для вычисления эффективного модуля Юнга.

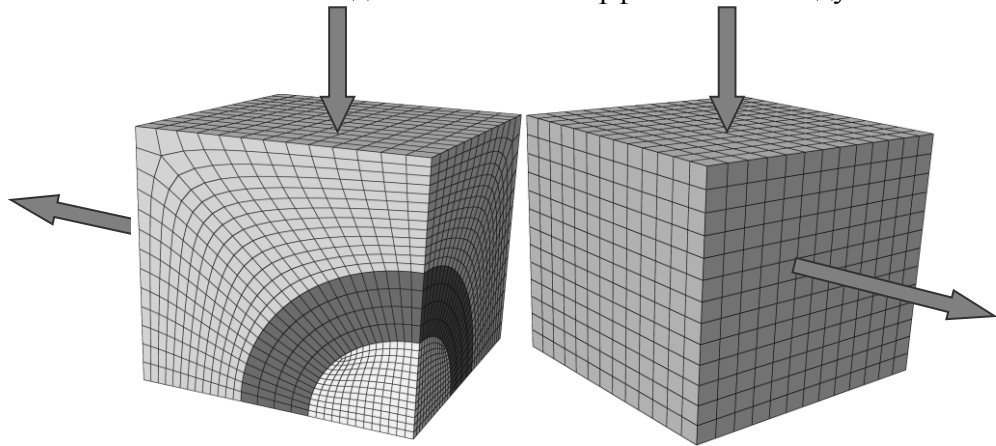


Рис.4. Расчётная схема для вычисления эффективного модуля сдвига.

В соответствии с изложенной схемой были проведены расчёты эффективного модуля Юнга $\hat{E}$, эффективного модуля сдвига $\hat{G}$, упругой энергии деформирования ячейки U и средних растягивающих напряжений $\hat{\sigma}_3$ в зависимости от относительного удлинения ячейки Δ_1 для трёх значений объёмной концентрации включений $c_0 = 0.017$, $c_0 = 0.025$ и $c_0 = 0.4$. Результаты расчётов представлены на рис.5-9.

На рис.5 представлен эффективный модуль Юнга в модели без межфазного слоя при малой $c_0 = 0.017$ и большой $c_0 = 0.4$ доле включений. Расчёт выполнялся до момента отрыва материала матрицы от включения в критической точке максимальной концентрации напряжений (в вершине сферического сегмента на оси z). Для малой доли включений этот момент наступал значительно позже, нежели для большой доли включений. При малой доле это соответствовало относительному удлинению $\Delta_3 = 2.5$, а для большой – $\Delta_3 = 0.41$.

На рис.6,7 представлен потенциал упругой энергии $\hat{U}$, представляющий собой среднюю энергию по ячейке в зависимости от относительного удлинения Δ_3 , и диаграмма компоненты напряжений $\hat{\sigma}_3$ при одноосном растяжении, представляющая собой среднее напряжение по ячейке. Эти величины соответствуют характеристикам U и σ_3 на рис.2, вычисленным на основе потенциала Муни-Ривлина для материала матрицы Дуотан. На рис.6 объёмная доля включений равна $c_0 = 0.017$ и кривые близки к кривым на рис.2,

что объясняется незначительным влиянием включений. На рис.7 объёмная доля включений значительна и равна $c_0 = 0.4$, наблюдается значительное количественное расхождение с соответствующими графиками рис.2, что говорит о существенном усилении материала.

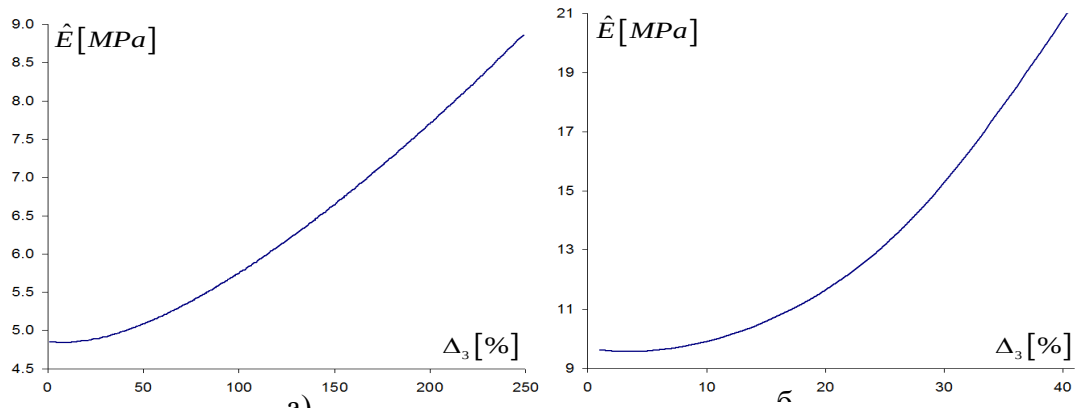


Рис.5. Эффективный модуль Юнга в модели без межфазного слоя. а) $c_0 = 0.017$; б) $c_0 = 0.4$.

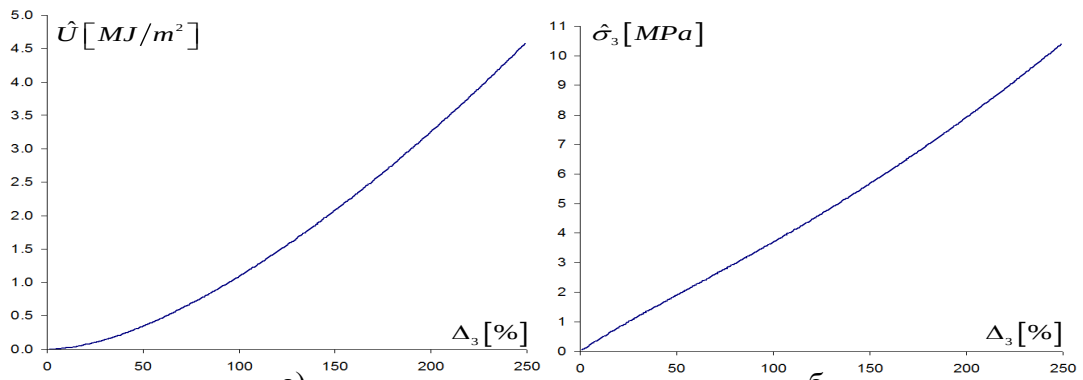


Рис.6. Потенциал упругой энергии (а) и диаграмма напряжений (б) в модели без межфазного слоя при малой объёмной доле включений $c_0 = 0.017$.

На рис.8 представлены результаты расчётов эффективного модуля Юнга и модуля сдвига композитного материала с учётом упругого изотропного межфазного слоя в зависимости от относительного удлинения Δ_3 . Модуль Юнга межфазного слоя принимался равным $E = 1.0 \text{ GPa}$, а коэффициент Пуассона $\nu = 0.3$. Доля включений составляла $c_0 = 0.025$, а относительная ширина межфазного слоя по отношению к размеру включений $l/R = 0.689$.

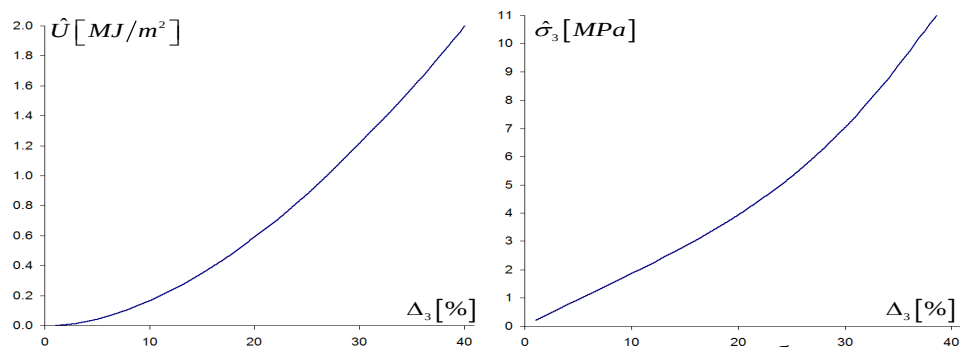


Рис.7. Потенциал упругой энергии (а) и диаграмма напряжений (б) в модели без межфазного слоя при значительной объёмной доле включений $c_0 = 0.4$.

На рис.9 для такого композита представлено распределение внутренних микронапряжений в ячейке в условиях одноосного растяжения.

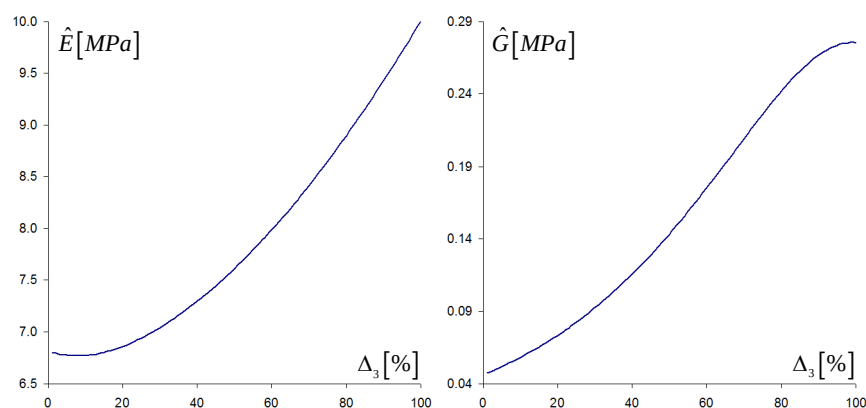


Рис.8. Эффективный модуль Юнга и сдвига в модели с межфазным слоем.

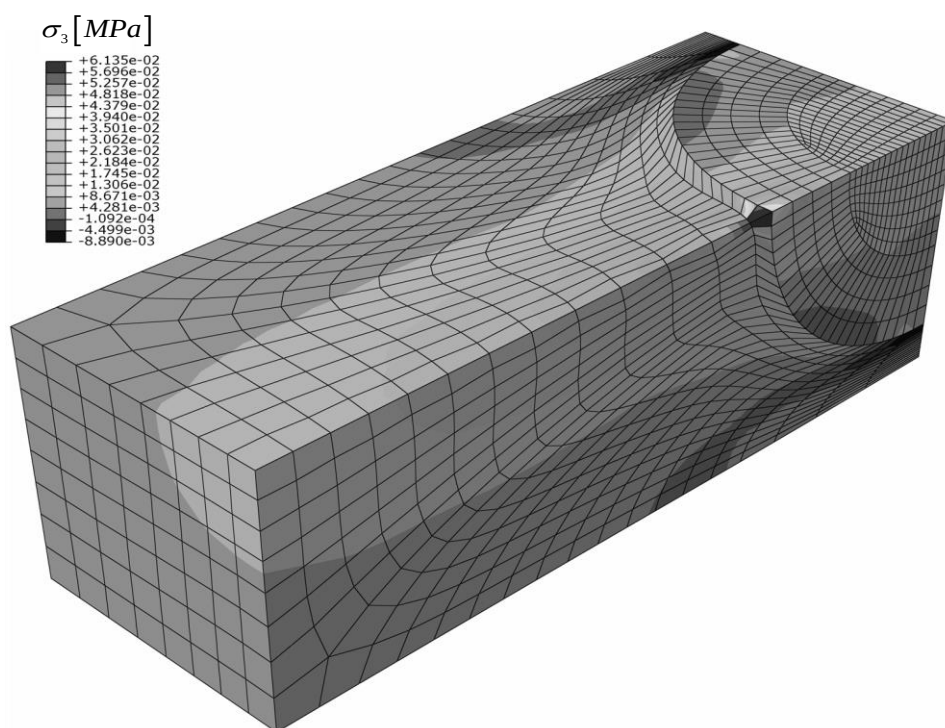


Рис.9. Распределение напряжений в ячейке с включением и межфазным слоем.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлен вариант развиваемого параметрического метода асимптотического усреднения в его аналитико-численном представлении для уравнений теории упругости с быстроосциллирующими коэффициентами, которые описывают процессы геометрически нелинейного деформирования структурно-неоднородных гиперупругих материалов, имеющих внутреннюю микроструктуру, обусловленную наличием периодической системы включений с возможным промежуточным межфазным слоем. На основе этого метода с использованием экспериментальных данных по структуре и механическим свойствам межфазного слоя, разработана численная схема оценки механических характеристик гиперупругих композитов с дисперсными наполнителями разного масштабного уровня. В рамках этой схемы возможен учёт неклассических масштабных эффектов, таких как аномальное усиление жесткостных свойств эластомерных композитов с наполнителем наноразмерного уровня. Приводятся

численные результаты для гиперупругого композита, образованного сочетанием эластомерного материала Дуотан и дисперсного наполнителя на основе минерала шунгит.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ № 01-14-0457.

ЛИТЕРАТУРА

1. Козлов Г.В., Яновский Ю.Г., Карнет Ю.Н. Структура и свойства дисперсно-наполненных полимерных композитов. Фрактальный анализ. М.: Альянстрасантом. 2008. 363с.
2. Власов А.Н., Волков-Богородский Д.Б., Яновский Ю.Г. Влияние размера включений на механические свойства эластомерных композитов. // Доклады Академии Наук. - 2012. Т. 443, № 4. С. 435-437.
3. Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П. Осреднение процессов в периодических средах. М.: Наука. 1984. 352с.
4. Победря Б.Е. Механика композиционных материалов. - М.: Изд-во МГУ. 1984. 336с.
5. Власов А.Н., Мерзляков В.П. Усреднение деформационных и прочностных свойств в механике скальных пород. М.: Изд-во Ассоциации строительных вузов. 2009. 208с.
6. Власов А.Н., Волков-Богородский Д.Б. Параметрический метод асимптотического усреднения для нелинейных уравнений термоупругости // Механика композиционных материалов и конструкций. 2014. № 4. С. 491-507.
7. Власов А.Н., Потапов В.Н., Яновский Ю.Г. Объектно-ориентированное программирование метода конечных элементов для задач механики неоднородных сред. Часть 1. Идеология объектно-ориентированного подхода и его приложение к методу конечных элементов. // Механика композиционных материалов и конструкций. - 1996. Т.2, № 1. С. 94-109.
8. Власов А.Н., Волков-Богородский Д.Б., Мнушкин М.Г. Программный комплекс «UWay». Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. Федеральная служба по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам. № 2011611833, 28 февраля, 2011 г.
9. Гамлицкий Ю.А., Мудрук В.И., Швачич М.В. Упругий потенциал наполненных резин. // Каучук и резина. - 2002. № 3. С. 29-39.
10. Коробейников С.Н., В.Д. Кургузов В.Д., А.Ю. Ларичкин А.Ю., А.А. Олейников А.А. Компьютерное моделирование деформирования эластомеров. // Известия Алтайского государственного университета. Серия: Управление, вычислительная техника и информатика - 2014. 1-1(81). С. 165-169.
11. Власов А.Н., Волков-Богородский Д.Б. Параметрический метод асимптотического усреднения для нелинейных уравнений термоупругости с быстроосциллирующими коэффициентами. // Сборник трудов 2-ой Всероссийской конференции «Механика наноструктурированных материалов и систем». Москва, 17 - 19 декабря 2013 г. - М.: ИПРИМ РАН, 2013. Т. 3. -С. 52-68.
12. Власов А.Н., Волков-Богородский Д.Б. Параметрический метод асимптотического усреднения для нелинейных уравнений термоупругости. // Механика композиционных материалов и конструкций. 2014, т. 20, № 4, с. 491-507.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПРОФИЛЕЙ В КОМПОЗИТНЫХ ПРЕГРАДАХ ПРИ ПОВЕРХНОСТНОМ ПОГЛОЩЕНИИ ЭНЕРГИИ

Квитов С.В., Николаев Д.Н., Острик А.В., Терновой В.Я.

ФГБУН Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка, Россия

РЕЗЮМЕ

Работа направлена на создание и апробацию расчетно-экспериментальных методов определения температурных профилей в многослойных композитных пакетах тонкостенных конструкций при поверхностном поглощении потоков энергии различной физической природы. В экспериментальных исследованиях нагрев осуществляется воздействием потоков монохроматического излучения ближнего инфракрасного диапазона с $\lambda=1,06\pm0,02\text{мкм}$. Приводятся экспериментальные данные по измерениям нестационарных температурных профилей в материалах с низкой теплопроводностью (стеклопластике и германии).

Ключевые слова: монохроматическое излучение, поверхностное поглощение, теплопроводность, физико-химические превращения, измерение температуры, термопары, пирометрия, численное моделирование.

ВВЕДЕНИЕ

Тонкостенные композитные конструкции ракетно-космической техники в процессе своей эксплуатации подвергаются тепловому действию потоков энергии различной физической природы [1-5], часть из которых поглощается вблизи поверхности с последующим перераспределением тепловой энергии теплопроводностью внутрь конструкции. При экспериментальных исследованиях последствий теплового действия потоков энергии поверхностного поглощения (ПЭПП) на композитные конструкции в качестве средства нагрева может быть использовано монохроматическое излучение оптического диапазона. Для лабораторных исследований удобными источниками излучения оказываются иттербиевые волоконные лазеры ближнего инфракрасного диапазона с мощностью в непрерывном режиме генерации в несколько киловатт.

Отметим, что помимо экспериментального моделирования теплового действия ПЭПП на конструкции, важной и до конца нерешенной является задача экспериментального подтверждения достоверности расчетных результатов, получаемых численными методами на основе имеющихся физико-математических моделей [1,6-10] теплового действия монохроматического излучения (МИ) на композитные материалы (КМ). Основными причинами, сдерживающими ее решение, оказываются многообразие и сложность физико-химических процессов (ФХП), протекающих в КМ при нестационарном высокотемпературном нагреве (для композитов высокими принято считать температуры, превышающие температуру деструкции связующего [2]), а также отсутствие надежной и полной информации об температурных зависимостях теплофизических свойств, коэффициентов поверхностного поглощения и скоростей теплового разрушения для большинства современных защитных покрытий и теплоизолирующих материалов.

При тепловом действии ПЭПП в режимах теплопроводности и развитого испарения основным параметром, определяющим прочность многослойных конструкций, является уровень прогрева его несущего слоя. Однако на современном этапе отсутствует достаточно надежная методика измерения нестационарных температурных профилей в КМ, поскольку измерение температур в них обладает рядом особенностей. В частности, на точность измерений могут оказать влияние: инерционность применяемых термопар, их искажающее действие на окружающее температурное поле и качество контакта

с материалом, температура которого измеряется. Возможность пренебречь этим влиянием требует расчетно-экспериментального обоснования.

1. ДВУМЕРНАЯ ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ ТЕПЛОВОГО ДЕЙСТВИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ

Взаимодействие МИ с КМ может вызвать различные ФХП, набор которых меняется при переходе от одного достаточно узкого класса материалов к другому [1,6-10]. Так как теплофизические свойства связующего и наполнителя КМ в большинстве случаев отличаются друг от друга, то и характер их теплового разрушения будет существенно различным. Поэтому математическая модель должна учитывать структуру материала. Такой моделью, в частности, является модель слоистого композита [8], где имеются два источника слоистости: физический (наполнитель и связующее слоя КМ являются разнородными подслоями, имеющими свой характер разрушения; однородный материал расслаивается на подслои при переходе его части в другое фазовое состояние) и конструкционный (пакеты преграды состоят из разнородных материалов - слоев).

Уравнение переноса энергии твердой фазы с учетом ФХП для каждого слоя материала записывается в цилиндрической системе координат в виде [1,8,10] (здесь и, как правило, индекс слоя опускается)

$$\rho_s c_s(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_\Sigma(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_\Sigma(T) r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + G_g c_g \frac{\partial T}{\partial x} + Q_{RI}(x, r, t) + Q_{PCT}(T), \quad (1)$$

где $T(t, x, r)$ - температура твердой фазы слоя и протекающих по нему газообразных продуктов (предполагается, что длительность импульса - велика, а скорость течения газов - мала для установления теплового равновесия между каркасом и истекающими продуктами ФХП); ρ_s, c_s - эффективные плотности и теплоемкости слоев; λ_Σ - суммарный коэффициент молекулярного и радиационного (внутри пор твердой фазы) переноса тепла; G_g, c_g - величина массового потока и теплоемкость газообразных продуктов; Q_{RI} - часть энергии МИ, поглощаемая объемно (для ряда КМ в области ближнего инфракрасного МИ имеются окна прозрачности); Q_{PCT} - приток (сток) тепла, обусловленный ФХП.

Массовый поток газов G_g в (1), обусловленный разложением связующего, вычисляется приближенно, исходя из предположения, что через каждое сечение слоя протекает с малой скоростью вся масса газа, образовавшаяся до этого сечения в глубине материала. Приток (сток) тепла внутри материала в результате ФХП Q_{PCT} определяется суммарным тепловым эффектом соответствующих превращений.

Для множества уравнений (1) задавались описанные далее начальные и граничные условия (для каждого подслоя).

В качестве начальных условий берется температурный профиль до облучения (в нашем случае $T|_{t=0} = T_0$, T_0 - начальная температура).

На облучаемой поверхности (граница с ФХП, движущаяся со скоростью $D=D(T)$)

$$\lambda_\Sigma \frac{\partial T}{\partial x} = A(T) q_{RI}(t, r) + q_c(t, r) - (1 - \Pi) \varepsilon \sigma_B T^4 - \rho_s D(T) \left[\Delta H_{PCT} + \frac{(D+u)^2 - D^2}{2} \right], \quad (2)$$

где $\Delta H_{PCT} = E_g + P_g v_g - H_s$ - разность удельных энтальпий конденсата и газообразных продуктов ФХП (P_g, E_g, v_g - давление, удельные внутренняя энергия и объем газа, соответственно); u - скорость газообразных продуктов; q_{RI} - плотность мощности излучения, поглощаемого поверхностно на границе; q_c - конвективный тепловой поток (при наличии обдува поверхности); ε - интегральный коэффициент излучения; σ_B - постоянная в законе Стефана-Больцмана; $\Pi = 1 - \rho_s(t)/\rho_s(0)$ - пористость материала. Дополнительно необходимо задание скорости поверхности ФХП $D = D(T)$, как функции ее температуры. Отметим, что также в качестве второго варианта граничного условия при отсутствии информации о скорости теплового разрушения может быть задана

температура ФХП T_{PCT} , которая и принимается за температуру облучаемой поверхности по ее достижению $T = T_{\text{PCT}}$.

На внутренней границе (условия теплового контакта между слоями i и $i+1$)

$$T_i = T_{i+1}, \quad \lambda_{\Sigma, i+1} \partial T_{i+1} / \partial x = \lambda_{\Sigma, i} \partial T_i / \partial x. \quad (3)$$

На тыльной границе (отсутствие потока)

$$\partial T / \partial x = 0. \quad (4)$$

На границе образца (R-радиус образца)

$$T|_{r=R} = T_0. \quad (5)$$

На оси образца

$$\partial T / \partial r|_{r=0} = 0. \quad (6)$$

При формулировке математической модели теплового действия (1)-(6) перераспределение энергии газообразными продуктами и тепловой унос (граничное условие на облучаемой поверхности (2)) рассматриваются в квазиодномерном приближении, поскольку градиенты температуры по x много больше, чем по r (вследствие плавности пространственного распределения потока по поверхности и малости толщины пакета по сравнению с его остальными размерами), а поверхность разрушения материала предполагается достаточно полой.

Отметим, что эти предположения соответствуют условиям проведения экспериментальных исследований.

Численный метод решения. Сформулированная задача решается методом конечных разностей по неявной схеме [11]. Однако применительно к рассматриваемой задаче получение численного решения осложняется тем, что граничные условия заданы на движущихся поверхностях ФХП, положение которых заранее неизвестны и определяются в ходе расчета температурного поля. Поэтому заменой переменных достигается неподвижность границ каждого слоя, которые отображаются на отрезках $[0,1]$ по координате x , т.е. делается преобразование координат

$$x = \frac{x_i(t, r) + (x_r(t, r) - x_i(t, r))\tilde{x}}{\delta(t, r)}, \quad \delta(t, r) = x_r(t, r) - x_i(t, r), \quad \tilde{x} \in [0,1] \quad (7)$$

В новых переменных уравнение (1) записывается в виде (здесь и далее волна над x опускается, т.к. старая переменная x уже не используется)

$$\rho_s c_s(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \{\rho_s c_s(T)[(1-x)V_l + xV_r] + G_g c_g\} \frac{\partial T}{\partial \delta x} + (1 + \xi^2(r, x)) \frac{\partial}{\partial^2 \delta x} \left(\lambda_z(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \\ + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_z(T) r \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \xi(r, x) \frac{\partial}{\partial \delta x} \left(\lambda_z(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_z(T) r \xi(r, x) \frac{\partial T}{\partial \delta x} \right) + Q_{RI}(x, r, t) + Q_{PCT}(T), \quad (8)$$

где V_l, V_r - скорости границ слоя, а безразмерная функция

$$\xi(t, r, x) = (1-x) \partial x_l / \partial r + x \partial x_r / \partial r \quad (9)$$

характеризует искажение расчетной сетки при уносе и мала при полой поверхности теплового разрушения. Соответственно и слагаемые в (8), содержащие $\xi(t, r, x)$ в качестве множителя, носят поправочный характер и при численном решении могут уточняться посредством итерационного процесса.

Для численного решения уравнения (8) с граничными условиями, также записанными в новых переменных, применяется метод расщепления по пространственным переменным. На первом шаге численно решается одномерное (присутствует только производная по x) уравнение

$$\rho_s c_s(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \{\rho_s c_s(T)[(1-x)V_l + xV_r] + G_g c_g\} \frac{\partial T}{\partial \delta x} + (1 + \xi^2(r, x)) \frac{\partial}{\partial^2 \delta x} \left(\lambda_z(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + Q_{RI}(x, r, t) + Q_{PCT}(T), \quad (10)$$

на втором по r

$$\rho_s c_s(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_s(T) r \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \xi(r, x) \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_s(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_s(T) r \xi(r, x) \frac{\partial T}{\partial x} \right). \quad (11)$$

Как уже отмечалось, нерасщепляющиеся смешанные производные в (11) малы, поскольку содержат в качестве множителя безразмерную функцию $\xi(t, r, x)$ и вычисляются итерационно.

Одномерные задачи с соответствующими граничными условиями решаются конечно-разностным методом по неявным схемам с весами. Получающаяся система алгебраических уравнений линеаризуется методом Ньютона и затем решается посредством одномерных прогонок по соответствующим координатам.

Для дополнительного контроля устойчивости и точности расчета в процессе вычислений проверялось выполнение закона сохранения энергии. Кроме того, для проверки правильности численного алгоритма и программ, реализующих модель нагрева и теплового разрушения композитных материалов, проводилось тестирование на ряде задач, имеющих аналитическое решение [12]. Во всех рассмотренных тестовых задачах отклонение численного решения от аналитического не превышало 0,1 %.

Базы данных.

Данные для исследования теплового действия МИ в объектно-ориентированной базе данных [13] представляют собой коэффициенты аппроксимаций для зависимостей от температуры следующих теплофизических и оптических характеристик:

- теплопроводности $\lambda(T)$ [Вт/(см град)];
- объемной теплоемкости, $\rho(T) c(T)$ [Дж/см³];
- удельных энтальпий H_s [Дж/г];
- скоростей ФХП $D(T)$ [см/с];
- интегральные коэффициенты излучения (степень черноты) $\varepsilon = \varepsilon(T)$
- коэффициента поглощения $A(\lambda, T)$ (для различных длин волн МИ)

Коэффициенты аппроксимаций получают средствами системы управления базы данных следующим образом. Таблично заданные функциональные зависимости от температуры разбиваются на характерные области, в каждой из которых они аппроксимируются соответствующими для этих зависимостей и выбранных областей аналитическими функциями (во многих случаях выбор аппроксимирующих функций основывается на физических соображениях). Коэффициенты аппроксимации определяются методом наименьших квадратов численно с помощью ЭВМ-программы поиска минимума функции многих переменных, входящей в известную библиотеку FORTRAN - программ "NAG". Использование лишь коэффициентов аппроксимации существенно сокращает объем оперативной памяти ЭВМ и увеличивает быстродействие при расчетах.

2. МЕТОДИКА ИЗМЕРЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ТЕМПЕРАТУР В КМ

Датчики и схема измерения температуры. Методика разрабатывалась для проведения измерений нестационарных температурных профилей в диапазоне $T=20 - 700^\circ\text{C}$ (критическими для деформационно-прочностных свойств КМ являются температуры выше характерных температур деструкции связующего - $300-400^\circ\text{C}$ [2].) в течение сотен секунд при длительностях воздействия ПЭПП на КМ 0.1 - 10с.

В требуемом для измерений диапазоне типичными датчиками являются термосопротивления и термопары, характеристики которых приведены для сравнения в таблице 1. Из таблицы следует, что термопары работоспособны в более широком интервале температур и обладают достаточно малым временем срабатывания. При этом защищенные быстрые термопары, используемые с блоком частотного

кодирования сигнала позволяют создавать достаточно компактную и надежную систему регистрации профилей температуры с временным разрешением 70 мс в температурном диапазоне 200 - 1300 °С. Простота схемы включения и наличие изолированных датчиков привело нас к выбору в качестве средств измерения температуры внутри пакета КМ термопар. Использовались следующие термопары:

- тип 901250/33-1043 фирмы JUMO ТХА(К) - измеренная в эксперименте с регистрацией температуры расплавленного олова при быстром вводе в ванну термопары постоянная времени не более 70 мс (рис. 1А);
- собственного производства типа ТХА(К) - измеренная в аналогичном эксперименте постоянная времени не более 800 мс (рис. 1В).

Таблица 1.

Сравнительные характеристики датчиков температуры.

	Платиновое термометр сопротивления	Термопара хромель-алюмель (тип К)
Датчик	Платиновый чип- резистор, пленка	Спай хромель-алюмель
Температурный диапазон	-200 °С - +650 °С	-200 °С - +1150 °С
Точность	0.1 °С - 1 °С	0.5 °С - 5 °С
Долговременная стабильность @ 100 °С	0.05 °С/год	Не хуже 1 °С/год
Сигнал	Изменение сопротивления 0.00385 Ом/Ом/°С	Термоэлектродвижущая сила от 10 мкВ/°С до 40 мкВ/°С
Линейность	Хорошая	Близкая к линейной
Требуемое внешнее воздействие	Постоянное напряжение или ток	Не требуется
Время отклика	1-50 секунд	0.1- 10 секунд
Чувствительность к электрическим помехам	Нечувствителен	Чувствителен; требует тепловой компенсации холодного спая
Влияние подводящих проводов	Велико, требует 3 и 4 контактной схемы включения	Не влияют до короткого замыкания. Нужна тепловая стабилизация внешних проводов
Стоимость	Низкая	Низкая-средняя

Часть схемы установки, предназначенная для измерения температуры образцов с помощью термоэлектрических преобразователей (термопар) приведена на рис.2. Измерительная схема состоит из блока термопар (1), кроссировочного устройства (2) (в дальнейшем - КУ) FM-8TC, модуля ввода-вывода SM-MIO (3), контроллера SMART2 (4) и сервера (5).

Устройство кроссировочное FM-8TC [14] совместно с модулем ввода-вывода SM-MIO [15] (оба производства фирмы РТСофт) предназначено для построения каналов измерения напряжения (температуры) от термоэлектрических преобразователей (термопар) в составе программируемого логического контроллера SMART2 (фирма Kontron) [16] для систем измерения и контроля, управления и регулирования, сбора и обработки информации в различных отраслях промышленности. Кроссировочное устройство обеспечивает:

- преобразование напряжения от термоэлектрических преобразователей в частотно-модулированный сигнал по 8-ми гальванически изолированным друг от друга каналам;

- преобразование величины сопротивления термоэлектрического преобразователя сопротивления в частотно-модулированный сигнал по каналу, используемому для компенсации температуры холодного спая (в дальнейшем - канал КХС);
- использование встроенного или выносного термоэлектрического преобразователя сопротивления для канала КХС;
- передачу частотных сигналов в модуль SM-MIO для дальнейшей обработки.

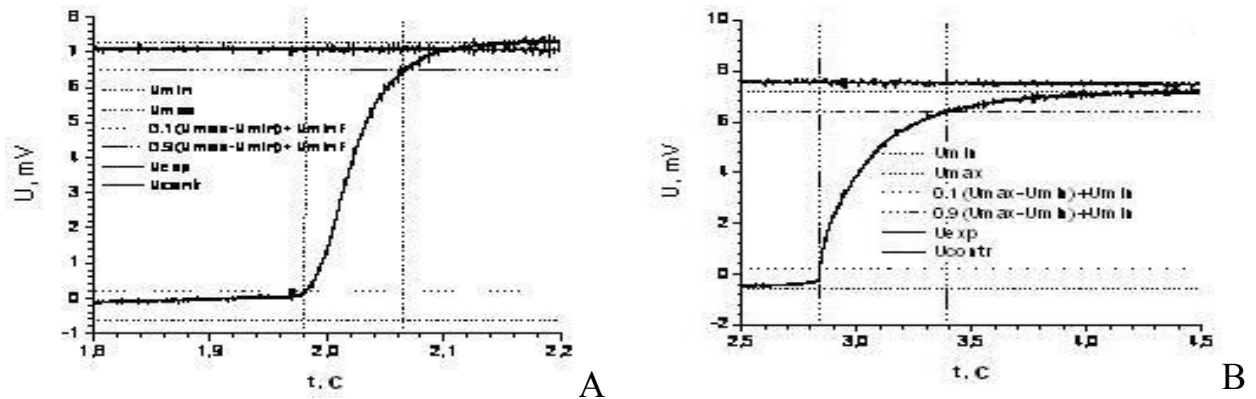


Рис.1. Экспериментальные сигналы при проверке скоростных характеристик использованных термопар. А - переходная характеристика ТХА фирмы JUMO; В - переходная характеристика самодельной ТХА

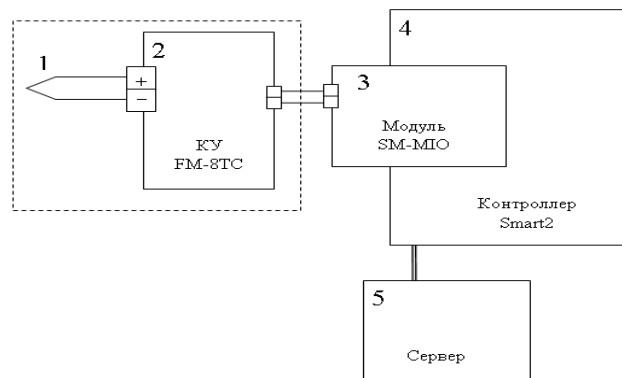


Рис.2. Схема измерения температуры образца с помощью термопар (приведен один канал).

Измерительный тракт функционирует следующим образом:

- напряжение с термопар и канала КХС поступает на вход КУ; в КУ производится преобразование входного напряжения в вы
- ходной частотно-модулированный сигнал и его передача в модуль SM-MIO;
- модуль SM-MIO производит измерение частоты полученного сигнала и его пересчет в напряжение, в соответствии с заложенными в КУ коэффициентами;
- контроллер SMART2 циклически производит опрос модуля SM-MIO и сохраняет полученные напряжения (с меткой времени опроса) на встроенный носитель и, кроме того, передает их по сети Ethernet на подключенный сервер для контроля;
- дальнейшая цифровая обработка данных производится на сервере.

Результирующая температура получается по стандартной процедуре обработки данных от термопар с учетом температуры полученной с канала КХС.

Источник МИ. Для создания потоков МИ удобным оказывается использование

мощных иттербиевых волоконных лазеров фирмы НТО IPG Photonics. Мощность МИ на длине волны около 1.07мкм достигает в непрерывном режиме 2кВт при диаметре транспортного сечения 8-10 мм на половине максимума интенсивности Гауссова профиля.

В работе был использован лазер фирмы IPG Photonics YLR-150/1500-QCW-MM-AC-Y11 (далее YLR-150/1500) с длиной волны 1070.64 нм при ширине спектра 9 нм с максимальной средней мощностью в непрерывном и импульсном режиме 271 Вт и 1610 Вт. Система управления позволяет предварительно устанавливать уровень мощности в диапазоне от 10 до 100% независимо от режима. Малые времена включения и выключения лазера - 32 и 21 мкс - позволяют легко контролировать энергию воздействия для импульсов длительностью от 10 мс и больше. Нестабильность выходной мощности составляет 1%, что также обеспечивает комфортные условия для получения теплофизической информации.

Оптическое излучение лазера YLR-150/1500 было использовано нами без его фокусирующей системы. Профиль плотности мощности оптического излучения приведен на рис.3. Диаметр сечения на полувысоте от максимума мощности излучения - около 3 мм. Неравномерность интенсивности МИ при диаметре более 0,6 мм вызывает необходимость двухмерных расчетов тепловой задачи при моделировании эксперимента.

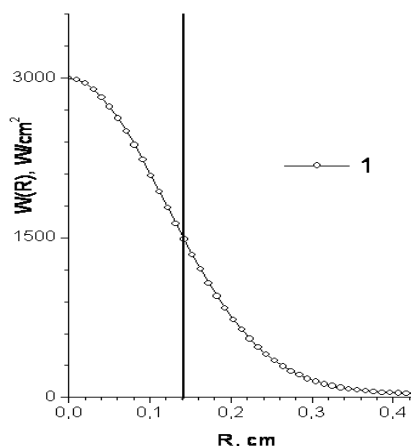


Рис.3. Поперечное распределение интенсивности излучения лазера YLR-150/1500 при мощности 1,61 кВт (линия 1). Линией отмечена граница области наблюдения оптическим пирометром.

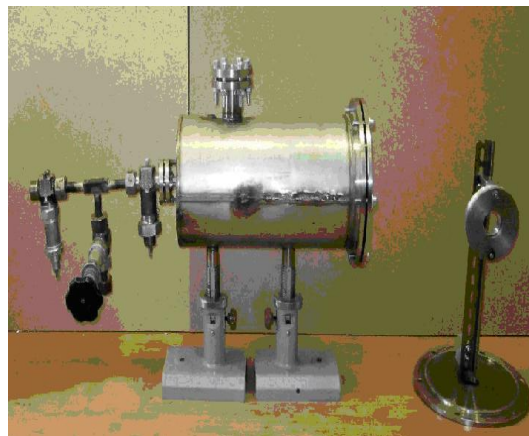


Рис.4. Вакуумируемая камера и блок крепления образца.

Вакуумируемая камера и размещение измерительных узлов. Эксперименты проводились в условиях форвакуума. Вакуумируемая камера представляла собой цилиндрический сосуд (рис.4). На одном из его круглых днищ располагался ввод вакуумной системы, а другое съемное днище служило опорой для системы крепления образца, узла крепления диафрагмированного кварц-полимерного световода и блока обработки сигнала термопар.

На цилиндрической поверхности внизу располагаются две опоры, а сверху - узел крепления иллюминатора системы ввода оптического излучения (рис.4,5). Камера жестко крепилась на оптическом столе (рис.5) и юстировкой его образец располагался горизонтально с совмещением центра образца с центром воздействующего лазерного пучка. Образцы фиксировались на двух сменных опорах, что позволяло проводить одновременно измерения параметров одного образца и подготовку следующего - фиксирование его в обойме и подсоединение термопар к образцу (рис.6).

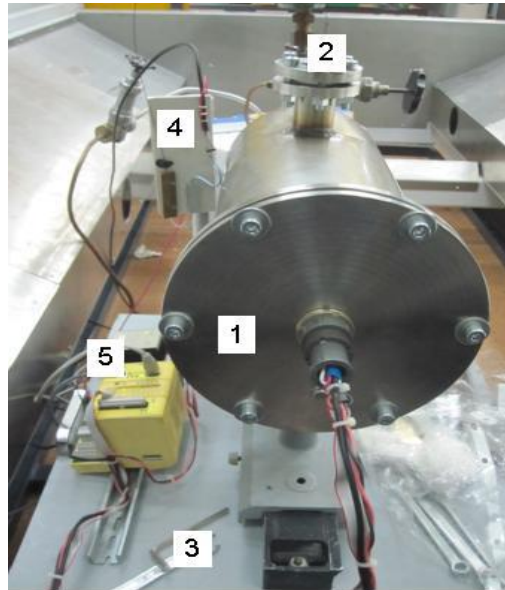


Рис.5. Детали систем измерения температуры и экспериментального стенда: 1 - съемное днище; 2 - фланец с иллюминатором; 3 - установочный стол; 4 - узел ввода в камеру диафрагмируемого световода; 5 - блок обработки сигналов термопар.

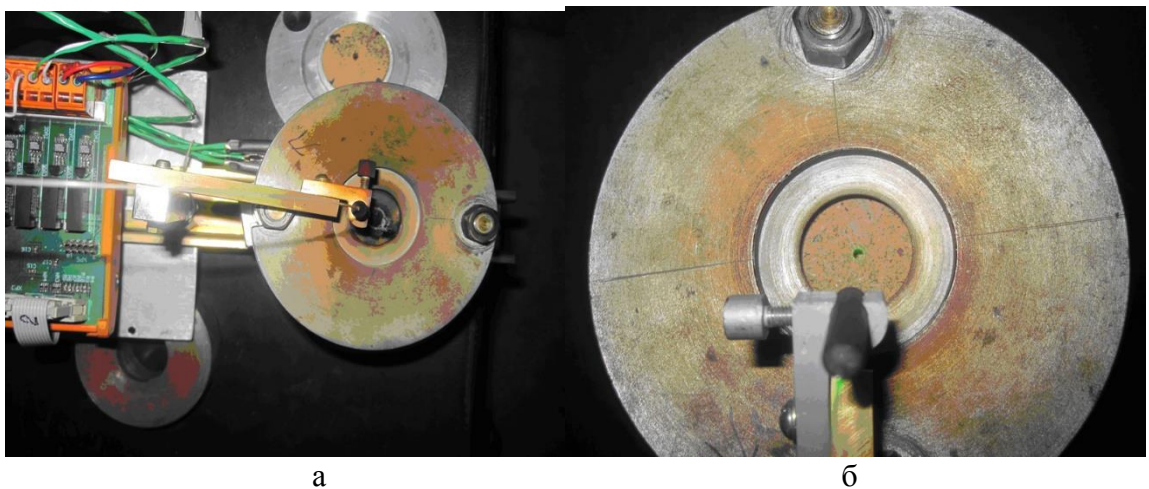


Рис.6. Блок крепления образца, диафрагмированного оптического волокна, термопар после воздействия МИ (а); юстировка пирометра на центр образца с помощью МИ с $\lambda = 532$ нм (б).

Удалось добиться точности установки образцов около 1 мм относительно центра. Система юстировки лазера после установки луча на центр образца фиксировалась и для каждой опоры в дальнейшем использовались индивидуальные параметры установки луча.

3. ИЗМЕРЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ОБЛУЧАЕМОЙ ПОВЕРХНОСТИ КМ

Для измерения температуры облучаемой поверхности использовался одноканальный оптический пирометр с оптоволоконной передачей теплового оптического излучения от образца.

Монохроматическое излучение лазера отсекалось кремниевым и СЗС-23 фильтрами. Излучение в диапазоне длин волн 1100-1700 нм регистрировалось InGaAs PIN фотодиодом ДФД1000ТО (www.dilas.ru).

Кривая спектральной чувствительности пирометра определяемая параметрами фильтров и фотоприемника приведена на рис.7.

Калибровка пирометра проводилась с использованием вольфрамовой ленточной лампы СИРШ-8.5-200-1 при температуре вольфрама 2700 К.

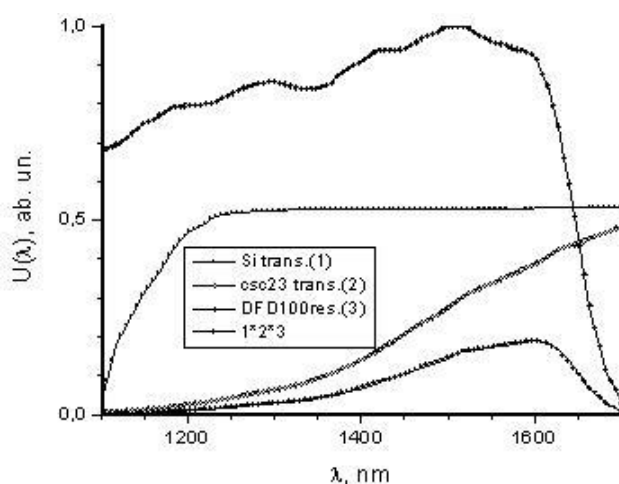


Рис.7. Спектральные кривые пропускания кремния (1), СЗС-23 фильтра (2), кривая чувствительности диода (3) и результирующая кривая чувствительности пирометра.

Тепловое излучение образца с площади ограниченной окружностью с радиусом 1.4 мм принималось торцом диафрагмированного оптического кварц-полимерного многомодового волокна диаметром 400 мкм. Как было показано ранее (рис.3), вклад энергии МИ на границе области регистрации падает до 50% пиковых значений. Это обстоятельство заставляет рассмотреть связь наблюдаемой в эксперименте температуры с величиной ее значения в месте действия максимума МИ.

Была рассмотрена модель материала с постоянной теплоемкостью и постоянной глубиной поглощения энергии МИ без учета теплообмена с соседними слоями. Вид спектральной чувствительности пирометра приводит к экспоненциальной аппроксимации зависимости регистрируемого сигнала от обратной температуры черного тела: $U(T) = 12195 \cdot \exp(-9750/T)$; $U(2700)_w = 1$.

Рассчитав величину регистрируемого пирометром сигнала при различных температурах в максимуме интенсивности воздействия ($T_{\max. \text{ pike}}$), были определены температуры, регистрируемые в эксперименте (T_{exp}) в рамках модели (рис.8). Линейная связь этих температур в области 1200-3000К позволяет проверить применимость модели к реальным экспериментальным данным. Видно, что разность температур увеличивается с 200 К при $T_{\text{exp}} = 1000$ К до 800 К при $T_{\text{exp}} = 2500$ К.

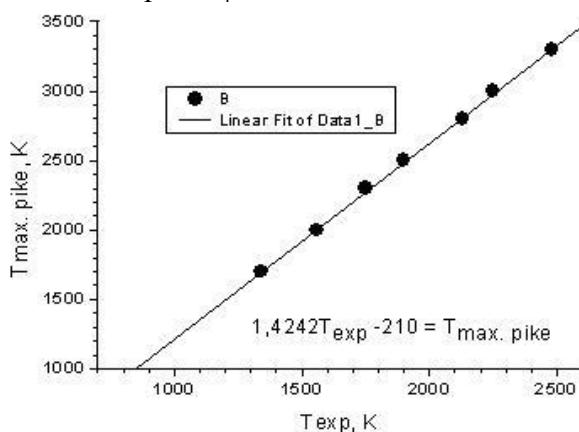


Рис.8. Связь температуры, регистрируемой пирометром с максимальной температурой по модели.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Эксперименты были выполнены с образцами германия и стеклопластика. Германий в интервале длин волн МИ (1.05-1.09мкм) отражает около 50% падающего излучения и его коэффициент поглощения $\alpha = 6 \pm 0.3 \cdot 10^{+5} \text{ 1/см}$ (www.virginiasemi.com).

Интерес к изучению его теплофизических свойств определяется его применением в качестве оконного материала для оптики инфракрасного диапазона.

Было испытано два образца в виде дисков. Параметры углублений и расположение термопар относительно центра воздействия МИ показаны на рис.9

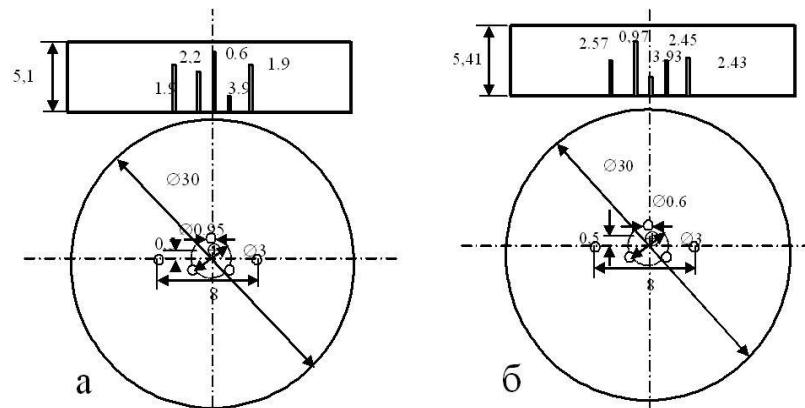


Рис.9. Расположение термопар в образцах германия относительно положения центра воздействия МИ (значок $\oplus$).

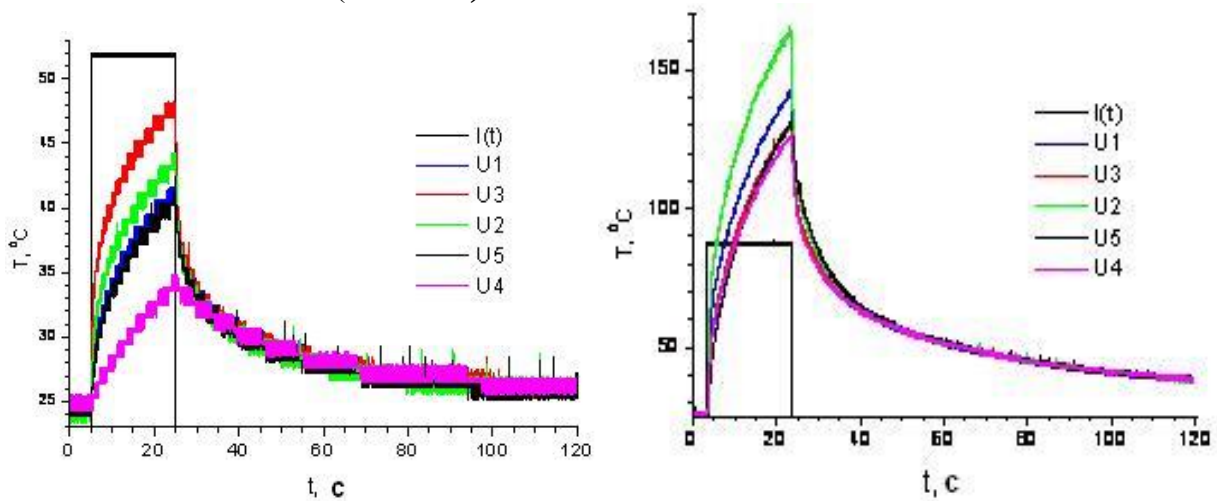


Рис.10. Профили температуры в германии.

На первый образец воздействовали последовательно импульсами МИ мощностью 25Вт, 60Вт, 125Вт, 270Вт в течении 5 секунд и затем мощностью 270 Вт в течении 20 секунд. Экспериментальные записи термопарами профилей температуры в образце в последнем случае приведены на рис.10а. На этом рисунке показан профиль тока ($I(t)$), характеризующий интенсивность МИ и температуры на термопарах U1 - U5, соответствующие их расположению слева направо на рис.9а. Нагрев образца в местах расположения термопар - не более 10-25 градусов. Запаздывание его начала относительно начала действия МИ не более 0.5с. Через 5-10 секунд после окончания действия МИ остывания образца протекает однородно. Максимальное изменение температуры на термопаре U3 в первой серии опытов с точностью 0,5 градуса составили 2, 4, 8, 16, 23.7 градусов соответственно. На поверхности образца, обращенной к лазеру не было обнаружено изменений структуры.

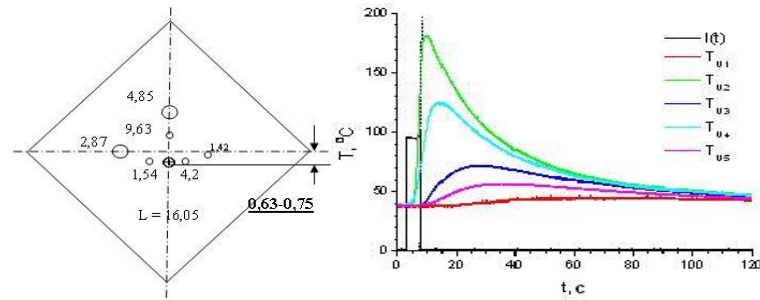


Рис.11. Расположение термопар в образцах стеклопластика относительно положения центра воздействия МИ (значок $\oplus$) и профили регистрируемых температур на термопарах, пронумерованных последовательно слева направо

Второй образец наряду с нагревом в режиме постоянной моды в течении последовательно 5 и 20 секунд был подвергнут действию МИ в импульсном режиме максимальной мощности в течении 20 секунд. Максимальный нагрев в первых двух импульсах составил 16.1 и 26.1 градус. Запись роста температуры при воздействии МИ в импульсной моде представлена на рис.10б.

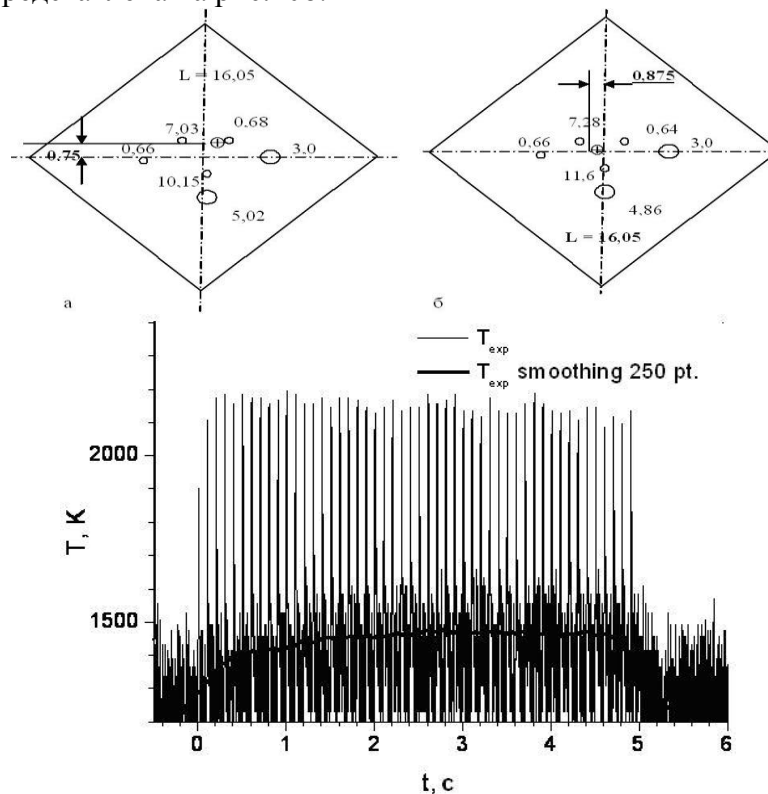


Рис.12. Профиль температуры облучаемой поверхности стеклопластика при мощности МИ в максимуме 3 кВт/см^2 . Толстой сплошной линией показан профиль усредненной температуры.

Были выполнены эксперименты с пятью образцами стеклопластика. Первый образец, показанный на рис.11а, подвергался воздействию МИ в течении 5 секунд с мощностью лазера 25 Вт, 60 Вт, 125 Вт, 270 Вт, далее 20 секунд мощностью 270 Вт в постоянном режиме включения и 5 секунд максимальной мощности в импульсном режиме включения с длительностью импульса 10 мс и интервалом 0.1 с. Измеренные профили температур представлены на рис. 11б. Величина максимального нагрева термопары отстоящей на 1,54 мм от первоначального положения поверхности воздействия МИ составила 16, 31, 50, 63, 143, и 142 градуса с точностью определения ± 1 градуса.

Временной профиль температуры облучаемой поверхности для последнего воздействия приведен на рис. 12. Толстой сплошной линией показан профиль усредненной температуры. Воспользовавшись графиком на рис. 8, находим, что температура в месте действия максимума МИ по модели - около 1900 К, что находится в интервале температур плавления кварца (1873-1998 К). Температура в пике T_{exp} превышает температуру кипения кварца - 2503К - и в рамках модели соответствует 2900 К.

В двух следующих экспериментах образцы подвергались воздействию лишь в импульсном режиме в течении 5 секунд. Их параметры и профили регистрируемых температур приведены на рис.13. при мощности МИ в максимуме 3кВт/см².

Проведено измерение потерь массы при воздействии импульсного МИ максимальной мощности длительностью 5 и 20 секунд (40 мг и 120 мг, соответственно).

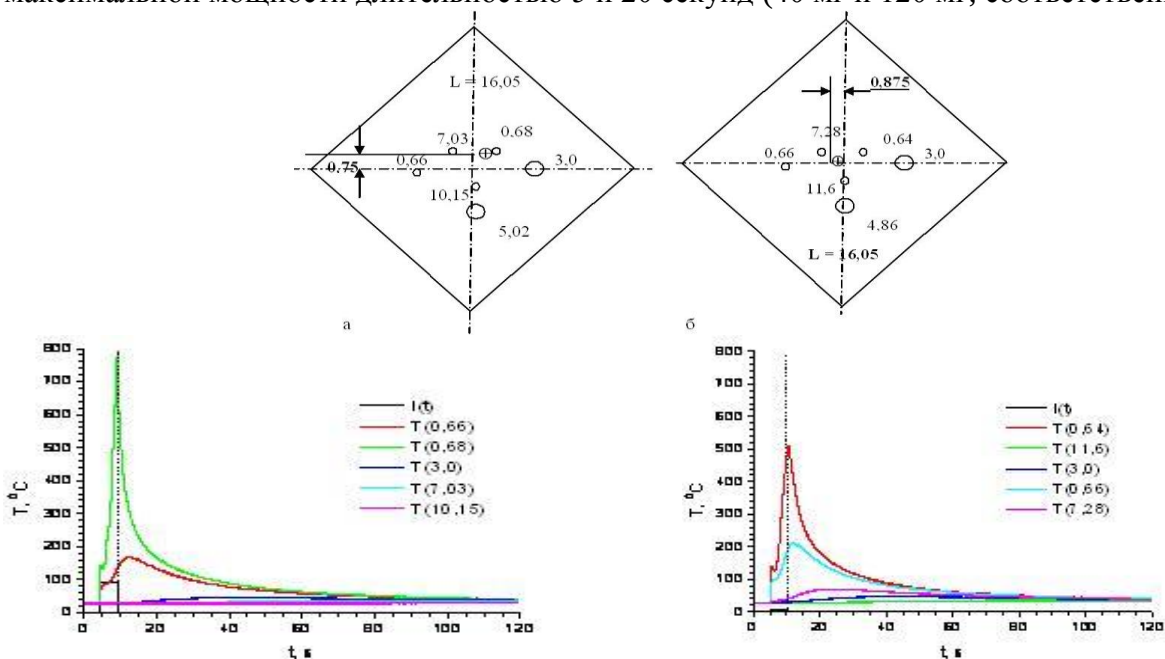


Рис.13. Испытанные образцы стеклопластика и зарегистрированные профили температуры: а- образец 2, б - образец 3.

ЛИТЕРАТУРА

1. Панкратов Б.М., Полежаев Ю.В., Рудько А.К. Взаимодействие материалов с газовыми потоками. -М.: «Машиностроение», 1975. 224с.
2. Димитриенко Ю.И. Механика КМ при высоких температурах. М.: Машиностроение. 1977. 368с.
3. Airborne lasers target missiles. Optics and Photonics News, 6, N 3, 11. 1995.
4. Бойко В.И., Скворцов В.А., Фортков В.Е., Шаманин И.В. Взаимодействие импульсных пучков заряженных частиц с веществом. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003.
5. Физика ядерного взрыва: В 5 т. Том 2. Действие взрыва. - М.: Физматлит, 2010. 620с.
6. Бункин Ф.В., Кириченко Н.А., Лукьянчук Б.С. Термохимическое действие лазерного излучения. Успехи физических наук, том 138, вып. 1, 1982.
7. Шабуня С.И., Гусев В.С., Мойсеенко Л.Г. и др. Математическая модель исследования процессов взаимодействия радиационного теплового потока с композиционными материалами. Преп. №3, Института им. Лыкова, АН БССР, Минск, 1985.
8. Острик А.В., Слободчиков С.С. Математическая модель разрушения композитных оболочек высокого давления под действием лучистых потоков энергии //Мат. моделирование. 1995 т.7, № 10, с. 33-46,.
9. Горшков А.Г., Дергачев А.А. Воздействие высокоинтенсивного потока энергии на

элементы конструкций из КМ // Механика композитных материалов и конструкций. 1996. Т. 2, №1. С. 51-68.

10. Тепловые, гидродинамические и плазменные эффекты при взаимодействии лазерного излучения с веществом /Под ред. *Захарова Н.С., Урлина В.Д., Шенцева Н.И.*-Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2004.-426с.
11. *Годунов С.К., Рябенький В.С.* Разностные схемы. Введение в теорию. Изд.2, 1977.-440 с.
12. *Лыков А.В.* Теория теплопроводности. -М.: Машиностроение. 1984.-264с.
13. *Острик А.В.* Проблемно-ориентированная реляционная база данных «Барс» //Вопросы оборонной техники, научно-технический сборник, серия 15, 2014. Вып. 3(174). С. 17-23.
14. Устройство кроссировочное FM-8ТС. Руководство по эксплуатации. ЗАО РТСофт. 2003 15с. <http://www.rtsoft.ru>
15. Модуль SM-MIO. Руководство по эксплуатации. ЗАО РТСофт. 2003 14с.
16. SMART2. Micro PLC and Real-Time Computer for Industrial Applications ID 19342, Rev. 0200. Kontron. 1999. <http://www.kontron.com>

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОГО МОМЕНТА ИНЕРЦИИ ПОПЕРЕЧНОГО СЕЧЕНИЯ СТЕРЖНЯ ИЗ НАНОСТРУКТУРНОГО ТИТАНОВОГО СПЛАВА ВТ6

Хакимов А.Г.

*ФГБУН Институт механики им. Р.Р. Мавлютова Уфимского научного центра РАН,
г.Уфа, Россия*

РЕЗЮМЕ

Предложена модель наноструктурного титанового сплава, полученного равноканальным угловым прессованием (РКУП) в несколько проходов заготовки через пересекающиеся каналы, отличающаяся тем, что в материале при этом образуются не микро, а «нанотрещины», которые приводят к уменьшению момента инерции поперечного сечения заготовки относительно оси. Отношения эффективного момента инерции поперечного сечения стержня к моменту инерции поперечного сечения заготовки без трещин относительно оси, определенные по разным частотам колебаний, отличаются незначительно и они меньше единицы.

Ключевые слова: момент инерции поперечного сечения; наноструктурный титановый сплав ВТ6; собственная частота; нанотрещина.

ВВЕДЕНИЕ

Изучению динамики стержней, балок, пластин с трещинами посвящены работы [1-16]. В [1-3] дается обзор исследований по продольным, крутильным и изгибным колебаниям стержней и балок с трещинами, причем большое внимание уделяется диагностике повреждений. Этому вопросу посвящена также книга [4]. Ограничимся указанием на литературу по изгибным колебаниям балок.

В [1-3] и в других работах трещина моделируется пружиной с жесткостью на растяжение-сжатие и поворот. Влияние трещины в сварном шве на динамическое поведение консольной балки рассматривается в работе [5]. В [6] представлен интегральный признак идентификации дефектов в элементах стержневых конструкций, позволяющий определять не только их наличие и местоположение, но и степень поврежденности. Метод конечных элементов используется для анализа изгибных колебаний не вращающегося ротора с открытыми трещинами в [7].

Динамическое поведение вибрирующей системы с закрывающейся трещиной изучается в статье [8]. Другой цикл исследований [9-11] посвящен изгибным колебаниям балок, имеющих поперечные надрезы, моделирующие вмятины, местную коррозию, раскрытую трещину. При этом определялись размеры и местонахождение локальных неоднородностей по изменениям собственных частот в объектах конечных размеров.

Здесь предлагается модель наноструктурного титанового сплава, полученного РКУП в несколько проходов заготовки через пересекающиеся каналы, отличающаяся тем, что в материале при РКУП образуются не микро, а нанотрещины, которые приводят к уменьшению момента инерции поперечного сечения заготовки относительно оси.

1. МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОТРЕЩИН

Как было отмечено выше нанотрещины приводят к уменьшению момента инерции поперечного сечения заготовки относительно оси. Назовем его эффективным моментом инерции поперечного сечения J_e , который определяем в виде

$$J_e = J - \sum_{k=1}^{\infty} J_k \delta(x - x_k),$$

где $\delta(x - x_k)$ - дельта-функция, J - момент инерции поперечного сечения заготовки без трещин относительно оси, x - продольная координата, J_k , x_k - уменьшение момента инерции поперечного сечения и координата k -ой нанотрещины.

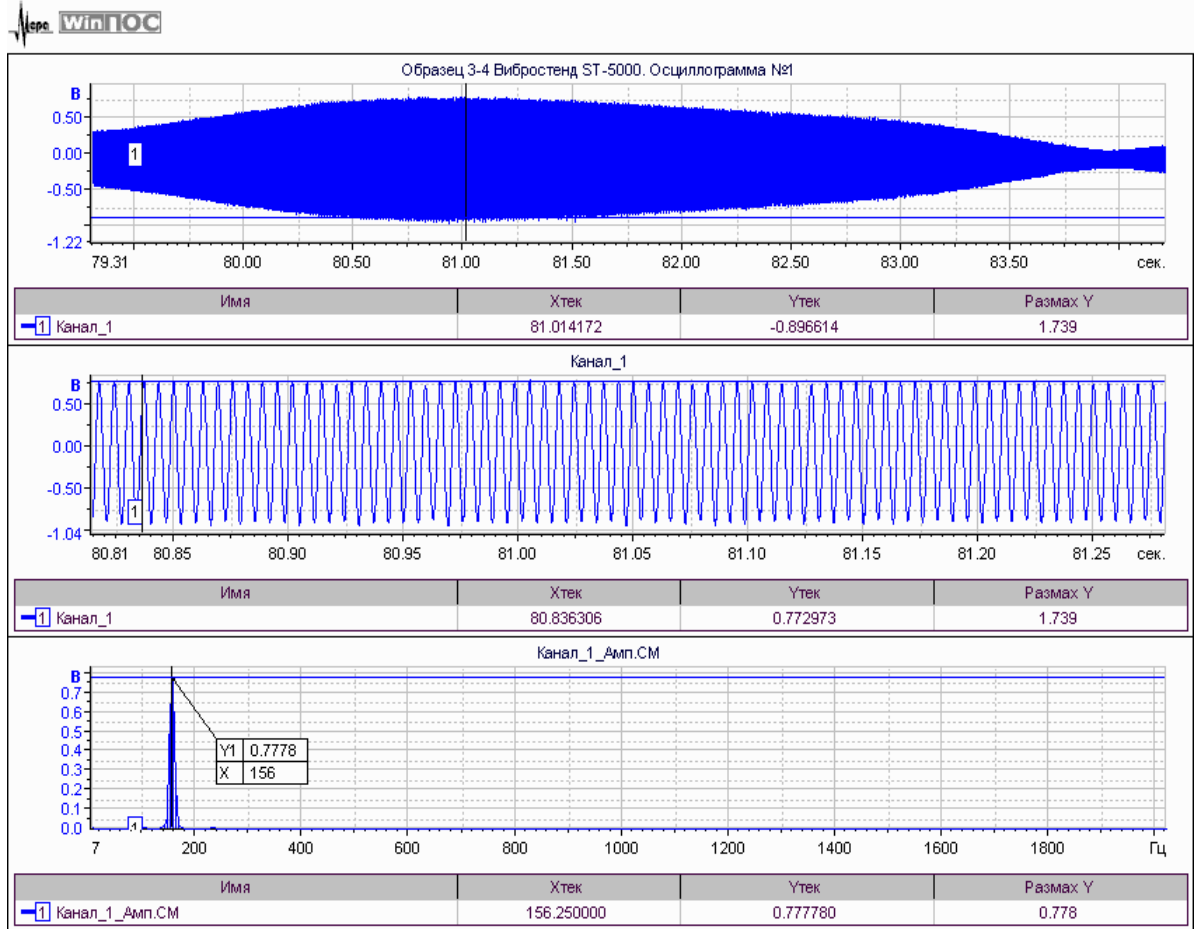


Рис.1.Осциллограмма для низшей частоты изгибных колебаний образца.

Уравнение, определяющее форму изгибных колебаний балки, имеет вид

$$\frac{\partial^4 w}{\partial x^4} = \lambda^4 w, \quad \lambda^4 = \sqrt[4]{\frac{m_l \omega^2}{EJ_e}}, \quad m_l = \rho \pi R^2, \quad J = \frac{\pi R^4}{4}, \quad (1)$$

где m_l - масса единицы длины стержня, R - радиус стержня, ω - частота, E, ρ - модуль упругости, плотность, w - прогиб стержня.

Частотное уравнение для изгибных колебаний консольно закрепленного стержня записывается как [12]

$$\cos(\lambda^* L) \operatorname{ch}(\lambda^* L) = -1. \quad (2)$$

где L - длина стержня.

Решение частотного уравнения (2) проведено для образца из наноструктурного титана для следующих данных: $E = 1.1510^{11}$ Па, $\rho = 4450$ кг/м³, длина стержня $L = 150$ мм, диаметр стержня 5.7 мм, скорость звука $a = 4408.9$ м/с, $J = 51.817$ мм⁴, $F = 25.518$ мм². Эффективный момент инерции поперечного сечения стержня, определенный из уравнения (2) с учетом соотношений (1) по первой экспериментальной частоте 156.25 Гц (рис. 1) равен $J_e = 38.975$ мм⁴ ($m = J_e/J = 0.752$), по второй - 979.17 Гц - равен $J_e = 38.970$ мм⁴ ($m = 0.752$), по третьей - 2687.50 Гц - равен $J_e = 37.444$ мм⁴ ($m = 0.723$). Отсюда видно, что отношения эффективного момента инерции поперечного сечения стержня к моменту инерции поперечного сечения заготовки без трещин относительно оси, определенные

по разным частотам колебаний, отличаются незначительно и они меньше единицы. Автор выражает благодарность С.А. Богдановичу за проведенные эксперименты.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена модель наноструктурного титанового сплава, полученного равноканальным угловым прессованием в несколько проходов заготовки через пересекающиеся каналы, отличающаяся тем, что в материале при этом образуются не микро, а нанотрещины, которые приводят к уменьшению момента инерции поперечного сечения заготовки относительно оси. Отношения эффективного момента инерции поперечного сечения стержня к моменту инерции поперечного сечения заготовки без трещин относительно оси, определенные по разным частотам колебаний, отличаются незначительно и они меньше единицы.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Gladwell G.M.L.* Inverse problems in vibration. - Dordrecht; Boston; London: Kluwer Academic Publishers. 2004. (Русский перевод: Глэдвелл Г.М.Л. Обратные задачи теории колебаний. - М.; Ижевск:НИИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2008. - 608 с.)
2. *Бовсуновский А.П., Бовсуновский О.А.* Использование нелинейных резонансов для диагностики закрывающихся трещин в стержневых системах // Проблемы прочности. - 2010. - № 3. - С.125-141.
3. *Балицкий Ф.Я., Иванова Н.А., Соколова А.Г., Хомяков Е.И.* Вибро-акустическая диагностика зарождающихся дефектов. - М.:Наука. 1984. - 120 с.
4. *Chondros T.G., Dimarogonas A.D.* Identification of cracks in welded joints of complex structures // Journal of Sound and Vibration. - 1980. - V. 69(4). - P. 531-538.
5. *Акопьян В.А., Черпаков А.В., Рожков Е.В., Соловьев А.Н.* Интегральный диагностический признак идентификации повреждений в элементах стержневых конструкций // Контроль. Диагностика. - 2012. - № 7. - С.50-56.
6. *Guangming Dong and Jin Chen.* Vibration analysis and crack identification of a rotor with open cracks // Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, - 201. - Vol. 28. - No. 1. - P.171-182.
7. *Bovsunovsky A.P., Surace C.* Considerations regarding superharmonic vibrations of a cracked beam and the variation in damping caused by the presence of the crack // Journal of Sound and Vibration. - 2005. - V. 288. -P.865-886.
8. *Tsyfansky S.L., Beresnevich V.I.* Detection of fatigue cracks in flexible geometrically non-linear bars by vibration monitoring // Journal of Sound and Vibration. - 1998. - V. 213(1). - P.159-168.
9. *Shevtsov S., Akopyan V., Rozskov E.* Damage identification in the rod-like structure on the basis of Timoshenko beam model // Proc. of the 5-th Intern. Symp. on Defect and Material Mechanics. Sevilla, - 2011. - P.92 - 98.
10. *Mazanoglu K., Sabuncu M.* Flexural vibration of non-uniform beams having double-edge breathing cracks // Journal of Sound and Vibration. - 2010. - T. 329. - № 20. - С.4181-4191.
11. *Sinha J. K., Friswell M. I., Edwards S.* Simplified models for the location of cracks in beam structures using measured vibration data//J. Sound Vibrat. - 2002. - V. 251. - N 1. - P.13-38.
12. Прочность, устойчивость, колебания. Справочник в трех томах. Том 3. Под ред. *И.А. Биргера и Я.Г. Пановко.* - М: Машиностроение. 1968. - 567 с.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФОРМЫ НЕДЕФОРМИРОВАННОЙ РЕССОРЫ

Федоров В.В., Хакимов А.Г.

*ФГБУН Институт механики им. Р.Р. Мавлютова Уфимского научного центра РАН,
г.Уфа, Россия*

РЕЗЮМЕ

Определена форма недеформированной рессоры равного сопротивления изгибу, которая под действием сосредоточенной силы становится прямолинейной. Получено, что недеформированная рессора, изогнутая по дуге окружности, под действием сосредоточенной силы становится прямолинейной в следующем случае: толщина рессоры прямоугольного сечения при постоянной ширине должна изменяться по кубической параболе, диаметр рессоры круглого поперечного сечения должен изменяться по параболе в четвертой степени.

Ключевые слова: рессора; форма; нелинейный изгиб.

ВВЕДЕНИЕ

В упругих элементах приборов, например, в управляемом прижимном устройстве рессора под действием сосредоточенной силы должна быть прямолинейной [1].

1. РЕССОРА, ИЗОГНУТАЯ ПО ДУГЕ ОКРУЖНОСТИ

Рассматривается рессора, имеющая в недеформированном состоянии форму дуги окружности с радиусом R_n , которая под действием нагрузки P_{max} становится прямолинейной (рис. 1).

Уравнение упругой линии гибкой рессоры имеет вид

$$EJ \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{R_n} \right) = M, \quad (1)$$

где E - модуль упругости, J - момент инерции поперечного сечения рессоры, R - радиус кривизны упругой линии рессоры в деформированном состоянии, M - изгибающий момент. В деформированном состоянии рессора под действием силы P_{max} становится прямолинейной и изгибающий момент равен

$$M = -P_{max}x, \quad (2)$$

где x - координата сечения деформированного прямолинейного стержня, $1/R = 0$, так как для прямолинейной рессоры $R = \infty$. Уравнение (1) с учетом (2) принимает вид

$$EJ = P_{max} R_n x,$$

из которого видно, что изгибная жесткость EJ по длине рессоры должна изменяться по линейному закону. Если выполнить рессору с прямоугольным поперечным сечением $b \times y$, при $b = \text{const}$, то получим

$$x = \frac{Eby^3}{12P_{max}R_n}, \quad J = \frac{by^3}{12},$$

откуда

$$x = a_1 y^3, \quad a_1 = \frac{Eb}{12P_{max}R_n}.$$

Отсюда видно, что зависимость между координатой x и высотой сечения y имеет вид кубической параболы. Пусть при $x = l$, $y = h$, где l - длина рессоры, h - высота поперечного сечения.

Для рессоры круглого поперечного сечения зависимость между координатой x и диаметром d имеет следующий вид

$$x = a_2 d^4, \quad a_2 = \frac{\pi E}{64 P_{\max} R_H}.$$

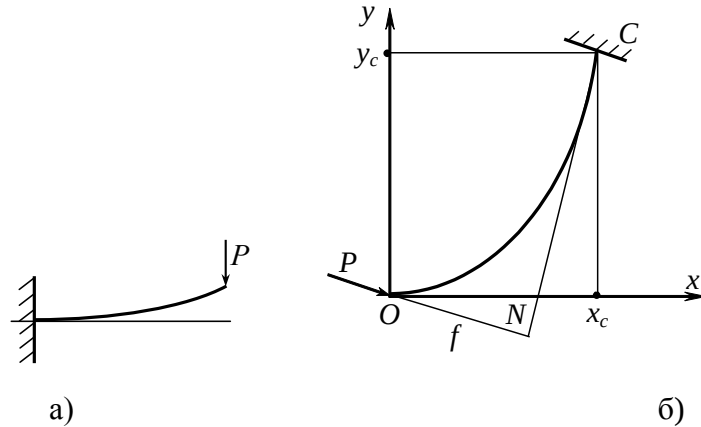


Рис.1. а) расчетная схема; б) к определению прогиба.

Радиус недеформированной рессоры, ее прогиб f и максимальное напряжение $\sigma_{\max}$ определяются по формулам

$$R_H = \frac{E b h^3}{12 P_{\max} l}, \quad f = R_H \left(1 - \cos \frac{l}{R_H} \right), \quad \sigma_{\max} = E \frac{h}{2 R_H}.$$

2. ФОРМА НЕДЕФОРМИРОВАННОЙ РЕССОРЫ РАВНОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ ИЗГИБУ

Определим форму недеформированной рессоры равного сопротивления изгибу, которая под действием силы $P_{\max}$ становится прямолинейной. Толщина рессоры h изменяется по закону

$$s = \frac{l h^2}{h_0^2},$$

где s - дуговая координата средней линии рессоры. Изгибная жесткость рессоры EJ равна

$$EJ = \frac{E b}{12} \cdot \left(\frac{s}{l} \right)^{3/2}. \quad (3)$$

Изгибающий момент M определяется по формуле

$$M = - P_{\max} s, \quad (4)$$

Для деформированной прямолинейной рессоры $1/R = 0$, поэтому уравнение (1) с учетом соотношений (3), (4) приводится к виду

$$\frac{1}{R_H} = \frac{12 P_{\max} l}{E b h_0^3} \cdot \sqrt{\frac{s}{l}}.$$

Система уравнений для определения формы недеформированной рессоры записывается

$$\frac{d\theta_H}{ds} = \sqrt{\frac{s}{l}}, \quad \frac{dx_H}{ds} = \cos \theta_H, \quad \frac{dy_H}{ds} = \sin \theta_H, \quad (5)$$

где θ_H , x_H , y_H - угол между осью x и касательной к упругой линии рессоры, координаты x , y для недеформированной рессоры.

Решение системы уравнений (5) имеет вид

$$\theta_H = a\sqrt{\frac{s}{l}}, a = \frac{24P_{\max}l^2}{Eb h_0^3}, \frac{x_H}{l} = \frac{2}{a^2}(\cos \theta_H - 1) + \frac{2}{a} \cdot \frac{s}{l} \sin \theta_H, \quad (6)$$

$$\frac{y_H}{l} = \frac{2}{a^2} \sin \theta_H - \frac{2}{a} \cdot \frac{s}{l} \cos \theta_H,$$

Под действием силы $P_{\max}$ рессоры примет вид прямой CN . Для определения прогиба f запишем уравнение касательной CN к упругой линии недеформированной рессоры в точке C (рис. 1,б)

$$y = y_c + (x - x_c) \operatorname{tg} a.$$

Уравнение перпендикуляра ON к CN записывается

$$y = -x \cdot \operatorname{ctg} a. \quad (7)$$

Из уравнений (6), (7) находим

$$x_N = \frac{x_c \cdot \operatorname{tg} a - y_c}{\operatorname{tg} a + \operatorname{ctg} a}, \quad y_N = -x_N \operatorname{ctg} a.$$

Прогиб f рессоры определяется

$$f = x_N \sin a.$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Определена форма недеформированной рессоры равного сопротивления изгибу, которая под действием сосредоточенной силы становится прямолинейной. Получено, что недеформированная рессора, изогнутая по дуге окружности, под действием сосредоточенной силы становится прямолинейной в следующем случае: толщина рессоры прямоугольного сечения при постоянной ширине должна изменяться по кубической параболе, диаметр рессоры круглого поперечного сечения должен изменяться по параболе в четвертой степени.

ЛИТЕРАТУРА

Пархиловский И.Г. Автомобильные листовые рессоры. - М.: Машиностроение, 1978. - 226с.

РАСЧЕТ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ТЕРМОУПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ЛОКАЛЬНОГО ВЫСОКОКОНЦЕНТРИРОВАННОГО ИСТОЧНИКА ТЕПЛА

Веремейчик А.И., Гарбачевский В.В., Сазонов М.И., Хвисевич В.М., Цыганов Д.Л.

Брестский государственный технический университет, г.Брест, Беларусь

РЕЗЮМЕ

Полученные результаты нестационарного температурного и структурного анализа пуансонов. Полученные результаты могут быть непосредственно использованы для определения оптимальных режимов технологических процессов при поверхностном упрочнении металлоизделий с помощью высококонцентрированных источников нагрева.

Ключевые слова: нестационарные термоупругие напряжения; пуансон.

ВВЕДЕНИЕ

С созданием электронно-лучевой, лазерной, плазменной технологий начали развиваться методы, основанные на использовании локальных высококонцентрированных источников нагрева [1-5], в результате чего были разработаны технологические процессы упрочнения изделий, получившие в настоящее время широкое применение. Требуемое качество деталей достигается путем изменения физико-механических свойств поверхностного слоя при воздействии на материал высокотемпературного источника тепла. В данном случае уменьшается применение дорогостоящих материалов, на порядок увеличивается износостойкость и долговечность изнашиваемых деталей. Особенностью таких процессов является отсутствие коробления деталей. Воздействие потока энергии на упрочняемые участки можно осуществлять как перемещением локального источника тепла, так и самой обрабатываемой детали, а это дает возможность автоматизировать технологические процессы и управлять ими.

В данной статье рассматривается моделирование процесса поверхностной плазменной закалки рабочей зоны пуансона с определением оптимальных режимов этого процесса, обеспечивающих высокую поверхностную прочность с сохранением структуры его внутренней части.

1. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

В производственных условиях при использовании установок для пробивки отверстий в крепежных деталях различного назначения толщиной 4 мм, изготовленных из стали 20, применяют цилиндрические и прямоугольные пуансоны из стали 12ХМ (рис.1). Высокохромистая сталь Х12М обладает высокой износостойкостью и глубокой прокаливаемостью. Ее широко применяют для изготовления крупных инструментов сложной формы: вырубных, отрезных, чеканочных штампов повышенной точности, штампов для выдавливания, накатных роликов и др. Эти стали близки к быстрорежущим: по структуре после отжига относятся к ледебуритному классу, после нормализации к мартенситному. Их высокая износостойкость обуславливается большим количеством карбидов $(\text{CrFe})_7\text{C}_3$. При нагреве выше температур перлитного превращения (800 - 820 °С) вторичные карбиды растворяются и аустенит насыщается хромом. После закалки карбиды сохраняются в структуре закаленной стали [1]. Структура и свойства высокохромистой стали в сильной степени зависит от температуры закалки, т.к. с ее повышением увеличивается растворимость карбидов, концентрация углерода и хрома в аустените [2]. В связи с этим выбор оптимальной температуры закалки стали Х12М существенно влияет на свойства стали после окончательной термической обработки.

На практике пуансоны упрочнялись с помощью объемной закалки до величины твердости 55-60 HRC. Во время эксплуатации эти детали подвергаются интенсивному механическому изнашиванию вследствие воздействия динамических ударных нагрузок, и их ресурс составляет около трех тысяч пробивок. Визуальные обследования отработанных пуансонов показали, что происходил не только интенсивный износ их режущих частей, но и искривление цилиндрических пуансонов (иногда с разрушением) (рис.1), а также выламывание металла из режущей части прямоугольных пуансонов.



Рис.1. Характер износа пуансонов.

Такой характер разрушения присущ деталям упрочненных объемной закалкой и обусловлен возникновением в металле значительных механических напряжений и охрупчивания стали вследствие неоднородной их закалки. При этом интенсивное изменение геометрических размеров связано или с недостаточной интенсивностью материала, или с абразивным воздействием материала заготовки, или с усталостным выкрашиванием.

Для улучшения прочностных характеристик поверхностного слоя рабочей зоны пуансона предложено с помощью движущейся плазменной дуги дополнительно закалить его рабочую поверхность [4]. При этом необходимо оценить влияние параметров плазменной дуги на поверхность образцов, оптимизировать эти параметры, определить влияние параметров упрочнения на физико-механические свойства и износостойкость поверхностного слоя, изучить теплофизические процессы, происходящие в стали в результате воздействия плазменной дуги, исследовать микрогеометрию поверхностного слоя в зависимости от параметров процесса.

Для процесса поверхностного плазменного упрочнения рабочей зоны цилиндрических пуансонов для пробивки отверстий, изготовленных из стали X12M, применялся плазмотрон с высокой удельной мощностью. В качестве плазмообразующего газа использовался аргон. В плазмотроне было применено обжимающее сопло с диаметром отверстия 1,2 мм. Струя плазмы шириной около 3 мм направлялась на торцы пуансонов, которые были обжаты двумя пластинами из меди М0 высотой 6 мм и толщиной 4 мм каждая для их интенсивного охлаждения, и собраны в обойму. Расстояние между соседними пуансонами принималось равным 15 мм. При равномерном движении плазмотрона производится закалка их торцов путем интенсивного нагрева. Схема пуансона и разработанного приспособления приведена на рис.2.

Сначала плазмотрон перемещается относительно пуансонов вдоль их торцевых поверхностей. Затем с помощью специального устройства пуансоны поворачиваются на 90^0 , и движение плазмотрона повторяется. Таким образом достигается закалка торца и режущей кромки. Плазменная закалка производилась при токах дуги $I = 5 - 30$ А. Скорость перемещения плазмотрона варьировалась от 5 до 25 мм/с. В результате проведенных экспериментов и статистической обработки их результатов были определены оптимальные параметры процесса поверхностного упрочнения: скорость перемещения плазмотрона $V = 10 - 13$ мм/с, ток дуги $I = 27$ А, расход защитного газа $Q = 2 - 2,5$ л/мин. Эти параметры зависят от расстояния плазмотрона до поверхности торцов пуансонов.

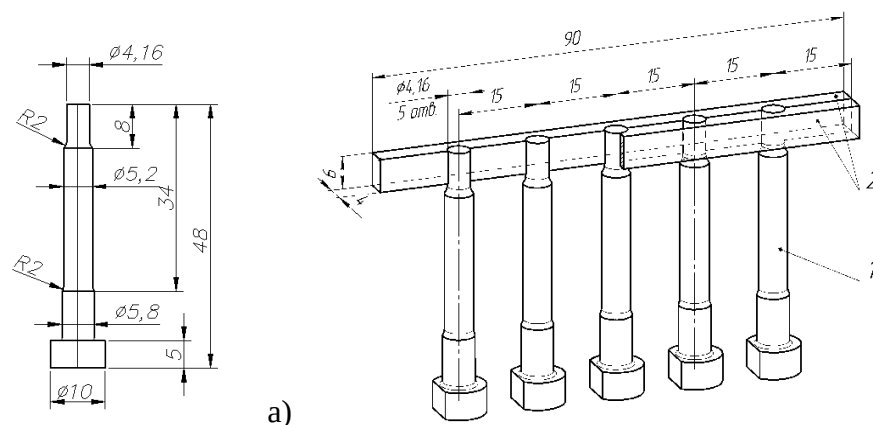


Рис.2. Схема пуансона (а) и приспособление для интенсивного теплоотвода (б).
1 - пуансон; 2 – обоймы.

2. ОБСУЖДЕНИЕ

Проведено исследование нестационарных температурных полей, напряжений и перемещений при поверхностной закалке, выполненное с применением конечно-элементного комплекса ANSYS [6,7]. Следует отметить, что основой термического анализа в пакете ANSYS является уравнение теплового баланса, которое получается из закона сохранения энергии. Конечно-элементное решение заключается в определении значений узловых температур и напряжений, на основе которых вычисляются остальные необходимые величины.

В ходе проведения вычислительного эксперимента разработана трехмерная модель пуансона и приспособления для теплоотвода, конечно-элементная модель которых приведена на рис.3.

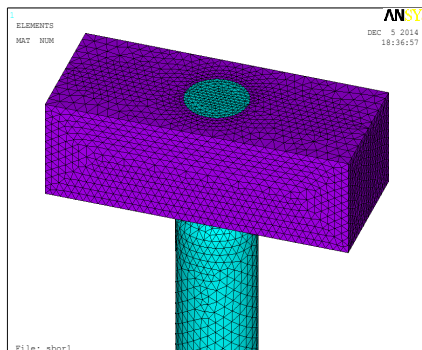


Рис.3. Конечно-элементная модель части приспособления для интенсивного теплоотвода рабочей зоны.

При решении нестационарной температурной задачи использовался предназначенный для анализа переходных процессов восьмиузловой термический конечный элемент SOLID70 (Brick 8node), который имеет одну степень свободы (температура в каждом узле), при структурном анализе - восьмиузловой конечный элемент SOLID185 (Brick 8node). В соответствии со скоростью движения плазменной струи к узлам дискретной модели пуансона пошагово последовательно прикладывалась температурная нагрузка в виде конвекции с учетом того, что температура плазменной струи в центре составляет порядка 20000 °С. Выбор режимов нагружения проводился согласно [1-3]. Максимальная температура поверхности торца пуансона при таком способе закалки должна быть на 3...7 % меньше температуры плавления стали. Конвекция задавалась также и на всех ненагруженных поверхностях модели. Так как тепловой поток распределяется по ширине пятна нагрева по закону, близкому к кривой вероятности Гаусса [2], то на торцевой поверхности, по которой движется плазменная струя,

коэффициент конвекции задавался переменным по ширине пятна нагрева, также соответствующим нормальному распределению. Его значение выбиралось с учетом того, что максимальная температура в зоне контакта пятна нагрева с закаливаемой поверхностью составляла 1300-1370 °С.

На рис.4 приведено распределение температуры на закаливаемой поверхности пуансона при нахождении центра пятна нагрева на оси его симметрии.

Некоторые характеристики процесса нагрева и расчетной модели приведены в таблице 1.

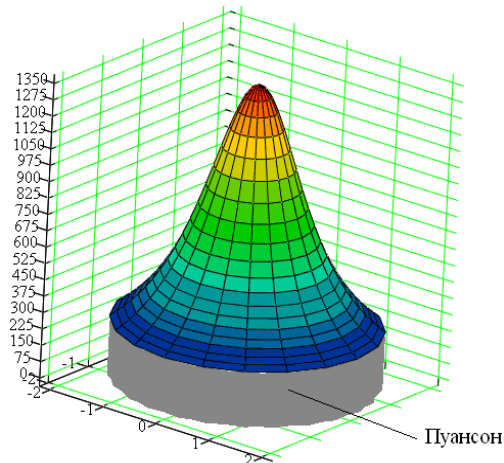


Рис.4. Распределение температуры по торцу пуансона.

Таблица 1.

Характеристики процесса температурного нагрева и расчетной модели

Скорость движения плазмотрона V, мм/с	Время движения t, с	Коэффициент конвекции в центре пятна нагрева, Вт/(К·м ²)	Коэффициент конвекции на боковой поверхности, Вт/(К·м ²)	Начальная температура T ₀ , °С	Температура в центре пятна нагрева на торце пуансона, °С
10	0,716	7000	20	20	1315
12	0,6	7300			1346
15	0,48	7700			1372

Увеличение температуры в центре пятна нагрева при увеличении скорости движения плазмотрона объясняется увеличенным коэффициентом конвекции, что на практике достигается регулированием режимов закалки и расстояния от сопла до нагреваемой поверхности.

Удельная теплоемкость стали принималась зависящей от температуры и при температурах 0...1300 °С находилась в интервале $c_{ст} = 400...600$ Дж/(кг·К), для меди ввиду температур до 400 °С принималась постоянной [8,9].

Равномерное движение плазмотрона проводилось с различными скоростями. Время движения t рассчитывалось в зависимости от скорости движения плазмотрона с учетом диаметра торцевой части пуансона.

Используемые в расчетах характеристики материалов пуансона и обойм приведены в таблице 2 .

После каждого шага нагружения проводился расчет температурных полей, результаты которого записывались в LS-файлы. Затем выполнялось совместное решение по определенному количеству LS-файлов, соответствующее 20 шагам нагружения. В результате проведения расчета определены поля температур, напряжений и перемещений для различных скоростей движения пятна нагрева в различные моменты

времени.

Таблица 2.

Характеристики материала пуансона и обойм

Материал	Коэффициент теплопроводности λ , Вт/(К·м)	Модуль упругости E , Па	Коэффициент Пуассона ν	Удельная теплоемкость c , Дж/(кг·К)
Сталь X12M	50	$2 \cdot 10^{11}$	0,28	400...600
Медь M0	387	$1,28 \cdot 10^{11}$	0,35	385

На рис.5 представлено типичное распределение температурных полей на рабочей зоне пуансона и в медных обоймах в различные моменты времени для скорости движения пятна нагрева $V=12$ мм/с.

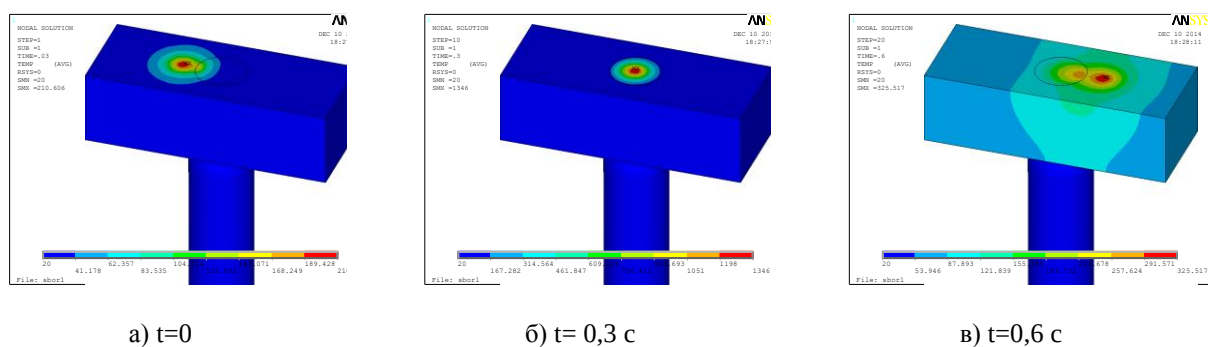


Рис.5. Некоторые результаты температурного анализа.

Анализ полученных результатов показывает, что благодаря высокому коэффициенту теплопроводности меди после прохождения центром пятна нагрева внешнего контура пуансона для исследованных скоростей движения температура на торце рабочей зоны не превышает 350°C . Это свидетельствует о высокой скорости охлаждения пуансона. Известно [10], что температура тела уменьшается экспоненциально по мере охлаждения, приближаясь к температуре окружающей среды и удовлетворяя экспоненциальной зависимости, следующей из закона охлаждения Ньютона. Скорость охлаждения зависит от коэффициента теплопроводности λ : чем он больше, тем выше скорость охлаждения. Так как коэффициент теплопроводности используемой меди более чем в 7,5 раз превышает коэффициент теплопроводности стали, то в процессе движения плазмотрона происходит быстрый теплоотвод в медную обойму, и пуансон быстро остывает. Благодаря высоким скоростям охлаждения обеспечивается одновременность мартенситного превращения по всему контуру охлаждаемой детали, что уменьшает или даже полностью исключает появление закалочных трещин.

Кроме того, установлено, что наибольшую температуру имеют точки на торце в момент прохождения пятном нагрева центра торцевой поверхности.

Исследовано распределение температурных полей по глубине диаметрального сечения пуансона, вдоль которого перемещается источник нагрева. На рис.6 приведены типичные распределения температурных полей для различных моментов времени и скоростей движения плазмотрона.

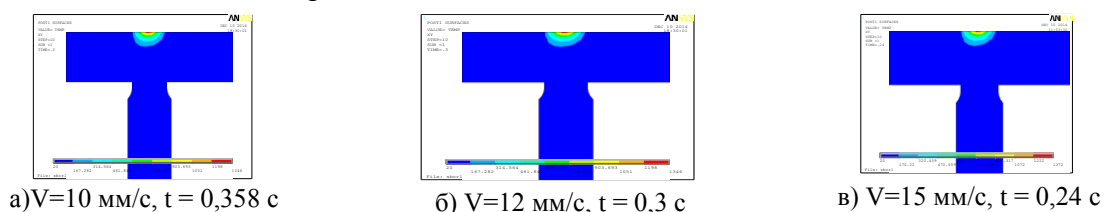


Рис.6. Распределение температурных полей в продольном сечении приспособления вдоль линии движения пятна нагрева.

Проведено исследование напряженно-деформированного состояния пуансона при различных скоростях движения плазмотрона, коэффициентах конвекции, токах дуги, расходах аргона. При решении задачи термоупругости пуансон закреплялся по нижней торцевой и нижним боковым поверхностям.

На рис.7 приведены результаты определения напряжений и перемещений в пуансоне и медных обоймах при воздействии струи плазмы для различных скоростей ее движения. Ток дуги при этом составлял $I = 27$ А при расходе защитного газа $Q = 2,5$ л/мин.

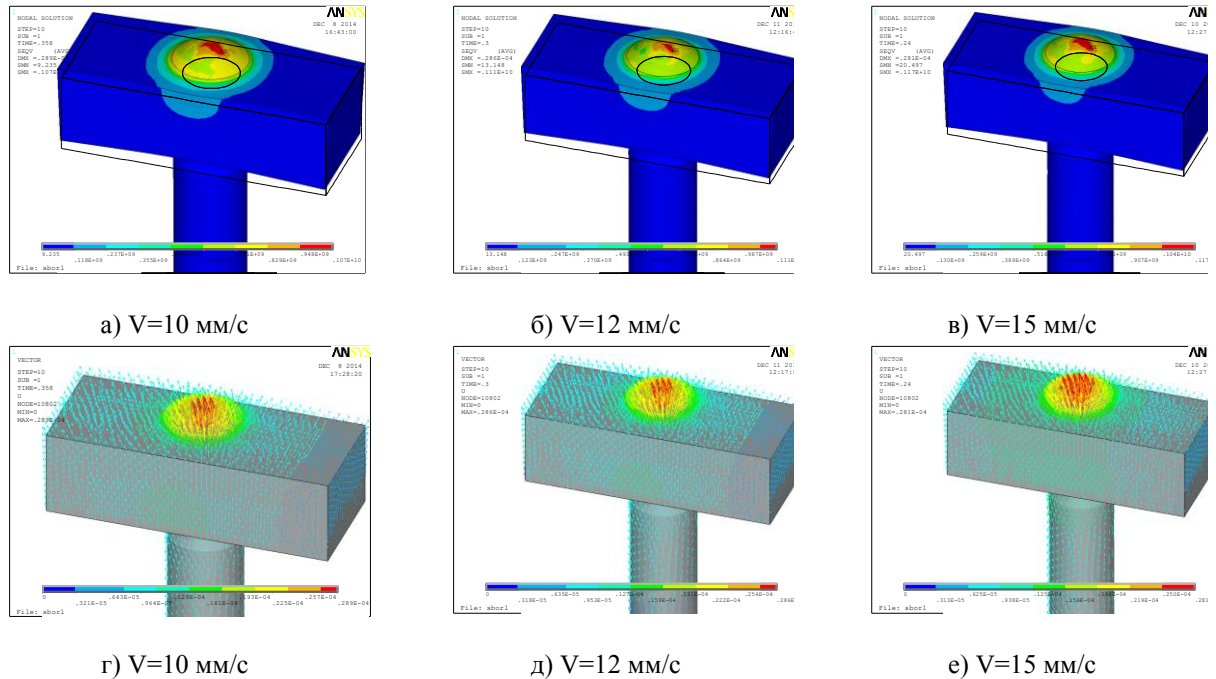


Рис.7. Зависимость эквивалентных напряжений по Мизесу (а, б, в) и распределение векторных полей перемещений (г, д, е) в средней точке рабочего торца пуансона от скорости движения теплового источника в момент прохождения им центра торца пуансона

Проведено сравнение результатов расчета температурных полей, напряжений и перемещений при различных скоростях движения плазмотрона. Для обработки результатов использовался вычислительный комплекс Mathcad 15. Типичные зависимости приведены на рис.8.

Исследовано влияние тепловых и механических характеристик материала обойм на температурные поля, напряжения и перемещения в упрочняемом пуансоне. Также установлено, что увеличение числа интервалов разбиения времени незначительно влияет на точность получаемых результатов, а лишь увеличивает затраты машинного времени на их обработку и требует более широкого использования ресурсов компьютера.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные результаты нестационарного температурного и структурного анализа пуансонов могут быть непосредственно использованы для определения оптимальных режимов технологических процессов при поверхностном упрочнении металлоизделий с помощью высококонцентрированных источников нагрева, а также оценить прочностные свойства изделий и обеспечить повышение эксплуатационных свойств.

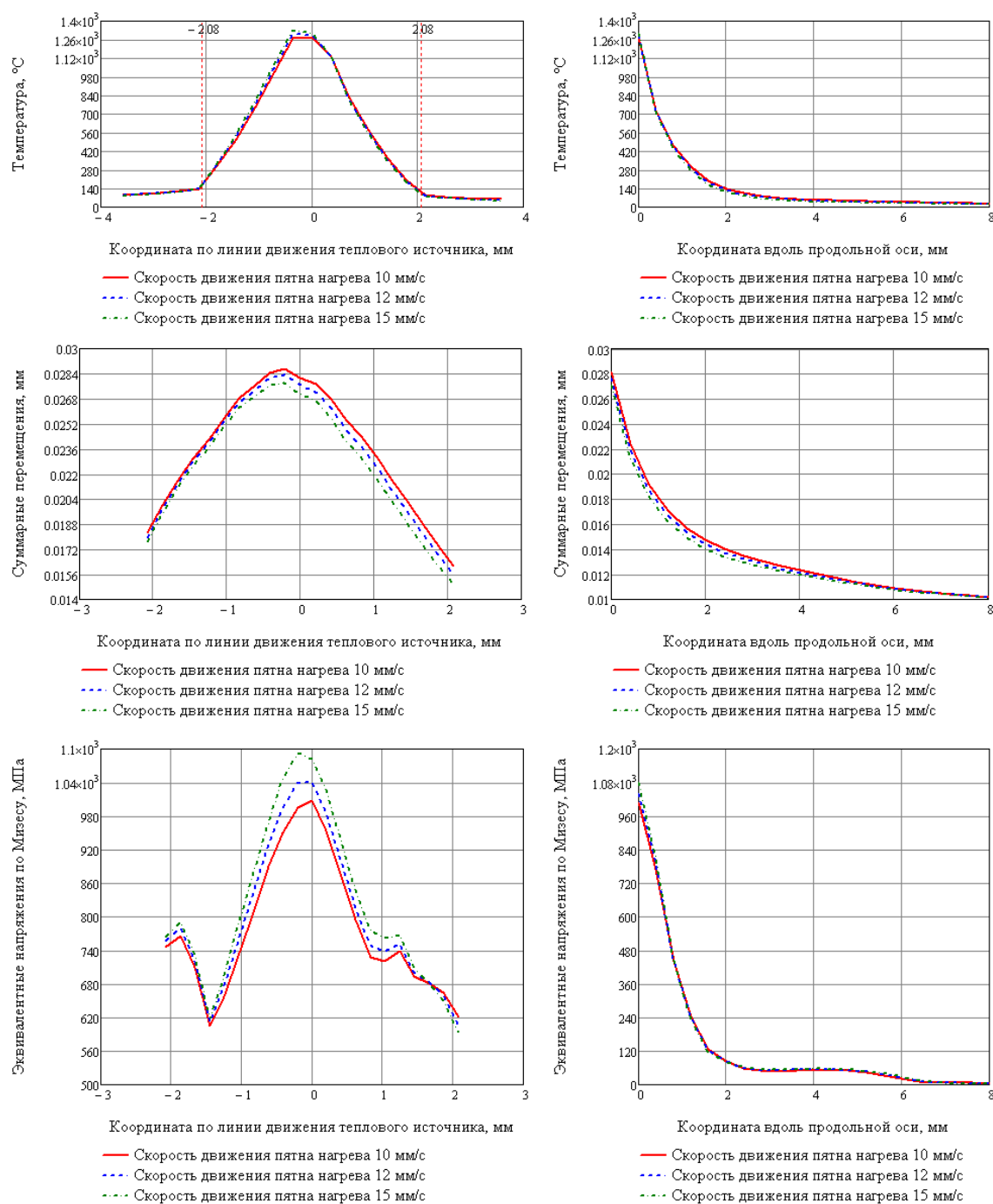


Рис.8. Сравнение напряженно-деформированного состояния для различных скоростей движения плазмотрона

ЛИТЕРАТУРА

1. *Спиридонов Н.В., Кобяков О.С., Куприянов И.Л.* Плазменные и лазерные методы упрочнения деталей машин. - Мн.: Высшая школа, 1988. - 155 с.
2. *Рыкалин Н.Н., Углов А.Л., Зуев И.В., Кокора А.Н.* Лазерная и электронно-лучевая обработка материалов. Справочник. - М.: Машиностроение, 1985. - 496 с.
3. *Кундас С.П.* Компьютерное моделирование процессов термической обработки сталей: монография. - Мн.: Бестпринт, 2005. - 313 с.
4. *Сазонов М.И., Хвиевич В.М., Батрак В.В., Веремейчик А.И.* Установка для поверхностного упрочнения деталей и инструмента // Создание новых и совершенствование действующих технологий и оборудования нанесения

гальванических и их замещающих покрытий: материалы 3-го Республиканского науч.-техн семинара, Минск, 5-6 декабря 2013 г.: / Белорус. гос. технолог. ун-т; редкол: И.М. Жарский [и др.]. - Минск: БГТУ, 2013. - С.116-119.

5. *Веремейчик А.И., Сазонов М.И., Хвисевич В.М., Якушевич С.* Особенности поверхностного плазменного упрочнения // *Materialy VII Międzynarodowej naukowo-praktycznej konferencji «Perspektywiczne opracowania są nauka i technikami - 2011».* Volume 56. Techniczne nauki: Przemysł. Nauka i studia. - С.102 - 106.
6. *Каплун А.Б., Морозов Е.М., Олферьева М.А.* ANSYS в руках инженера: Практическое руководство. - М., Едиториал УРСС, 2003. - 272 с.
7. *Чигарев А. В., Кравчук А. С., Смоляк.* ANSYS для инженеров. - М.: Машиностроение. - 2004. - 466 с.
8. Таблицы физических величин. Справочник / Под ред. И.К. Кикоина // М.: Атомиздат, 1976. - 1008 с.
9. http://thermalinfo.ru/publ/tverdye_veshhestva/metally_i_splavy/
<http://www.math24.ru/newtons-law-of-cooling.html>

ИЗМЕНЕНИЯ МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПЛЕНОК И МЕМБРАН В ЖИДКОЙ СРЕДЕ

Якупов С.Н.¹, Валиев Х.Х.², Харисламова Л.У.¹

¹ *ФГБУН Институт механики и машиностроения Казанского научного центра РАН, г.Казань, Россия*

² *ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г.Москва, Россия*

РЕЗЮМЕ

Получают распространение тонкие пленки, мембраны и их композиции, обладающие уникальными свойствами. Такие объекты, взаимодействуя с жидкой средой, могут существенно изменить свои механические характеристики.

На базе двумерного подхода выполнены экспериментально-теоретические исследования по изучению изменения механических свойств композиционной системы «полимерная пленка - картон» и микропористых капроновых мембран при взаимодействии с жидкой средой.

Ключевые слова: Пленки, капроновые мембраны, поры, композиция «полимерная пленка-картон», прогиб, механические характеристики, экспериментально-теоретический метод

ВВЕДЕНИЕ

Среди тонкостенных элементов конструкций, сочетающих легкость с высокой прочностью, особо выделяются пленочные и мембранные элементы, которые могут иметь различную сложную структуру. Пленки и мембраны позволяют решать множество различных проблем, поэтому находят широкое применение во всех отраслях производства и жизнедеятельности [1,2].

При экспериментальном исследовании механических характеристик пленок и мембран традиционным стандартным способом одноосного испытания на растяжение образцов [3,4], вырезанных из полотна в виде полосок, получается разброс результатов испытаний [5]. Для исследования сложных структур, в том числе образцов порами, также малоэффективны инденторные методы, предложенные, в частности, Оливером - Фарром [6]. Поэтому для исследования приведенных характеристик жесткости пленок и мембран сложной структурой рекомендуется использовать экспериментально-теоретический метод [7-13].

В процессе эксплуатации пленки и мембраны могут работать в контакте с различными жидкостями. Взаимодействие с жидкостью может привести к существенному изменению механических характеристик материала пленки, пленочной композиции, мембран. Некоторые вопросы по данной теме рассмотрены в [14]. Ниже представлены результаты исследований изменения механических характеристик пленок и мембран в жидкой среде на базе двумерного подхода [7-13].

1. ХАРАКТЕРИСТИКИ КОМПОЗИЦИОННЫХ ПЛЕНОК В ЖИДКОЙ СРЕДЕ

Ниже приведены некоторые результаты исследования композиционных пленок общей толщиной 0,25 мм. Композиция состоит из полимерной тонкой пленки и картонной основы. Такие композиции широко используются, например, как рекламные рулонные материалы. Рассмотрены изменения механических свойств композиций, находившихся в контакте с водой в течение 1, 10 и 20 минут.

Зависимость высоты подъема купола H от давления P приведена на рис.1, а зависимость «интенсивность напряжений σ_i - деформаций ε_i » - на рис.2.

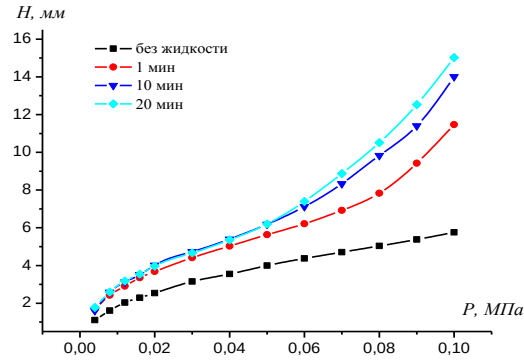


Рис.1. Зависимость « $H - P$ ».

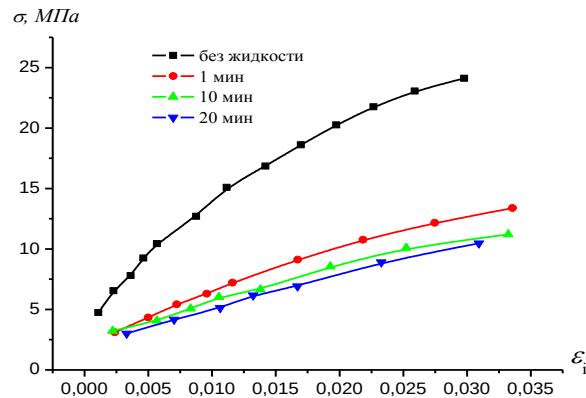


Рис. 2 – Зависимость « $\sigma_i - \epsilon_i$ »

Как видно из рис.1 и 2, взаимодействие пленочной композиции с жидкостью существенно снижает характеристики композиции. При этом уже в течение первой минуты взаимодействия происходит существенное снижение механических характеристик, а свойства образцов, выдержанных в воде в течение 10 и 20 минут, существенно не отличаются.

2. ХАРАКТЕРИСТИКИ МИКРОПОРИСТОЙ КАПРОНОВОЙ МЕМБРАНЫ В ЖИДКОЙ СРЕДЕ

Ниже приведены некоторые результаты исследования механических характеристик капроновых мембран толщиной 0,2 мм со средним диаметром микропор 0,2 мкм (фирма «ХИМИФИЛ»). Такие мембраны используются, например, для переноса жидких сред - биологически активных соединений [14].



Рис.3. Фрагмент из процесса.

Были подготовлены несколько комплектов образцов из двух слоев капроновых мембран толщиной каждого слоя 0,2 мм. На экспериментальном этапе при исследовании каждого комплекта образцов использовалась тонкая полимерная подложка толщиной 0,08 мм. Изображения образцов в процессе испытаний приведены рис.3. Экспериментальные данные для неувлажненных комплектов образцов представлены в таблице 1.

Таблица 1.

Экспериментальные данные P и H				
	Образцы без жидкости - неувлажненные мембраны			
$P, \text{кг/см}^2$	H_1	H_2	H_3	$H_{\text{ср}}$
0,027	2,47	2,22	-	2,42
0,037	2,90	2,69	-	2,76
0,057	3,52	3,32	3,35	3,39
0,067	3,78	3,62	3,58	3,66
0,080	4,09	3,91	4,01	4,01
0,087	4,28	4,09	4,13	4,17
0,090	4,34	4,17	4,19	4,23
0,100	4,65	4,46	4,38	4,49

С целью изучения влияния влажности на механические характеристики капроновых мембран с порами 0,2 мкм были также выполнены экспериментальные исследования образцов из двух слоев мембран толщиной каждого слоя 0,2 мм, которые в течение 25 минут выдерживались в обычной воде при комнатной температуре.

На экспериментальном этапе, как и при исследовании не увлажненных мембран, использовалась полимерная подложка толщиной 0,08 мм. Экспериментальные данные представлены в таблице 2.

Таблица 2

Экспериментальные данные P и H				
	Образцы с жидкостью - увлажненные мембраны			
$P, \text{кг/см}^2$	H_1	H_2	H_3	$H_{\text{ср}}$
0,027	5,56	5,32	5,08	5,32
0,037	6,16	6,15	5,73	6,01
0,057	7,51	7,67	6,86	7,35
0,067	8,23	8,30	7,34	7,96
0,080	9,08	9,21	8,16	8,82
0,087	9,66	9,76	8,70	9,37
0,090	9,82	9,96	9,01	9,59
0,100	10,60	10,42	9,60	10,21

На рис.4 приведена зависимость прогиба H от давления P , построенная по усредненным данным (таблицы 1 и 2) для рассмотренных образцов.

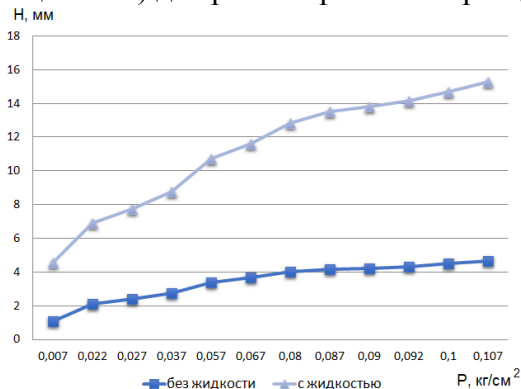


Рис.4. Зависимость « $H - P$ ».

Как видно из рис.4 прогибы образцов H при одинаковых давлениях P , для увлажненных образцов существенно выше, чем для неувлажненных образцов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведены экспериментальные исследования по изучению изменения механических свойств композиционной системы «полимерная пленка - картон» и микропористых капроновых мембран при взаимодействии с жидкой средой.

Для пленочной композиции «полимерная пленка - картон» установлена, что в течение первой минуты взаимодействия происходит существенное снижение механических характеристик, а свойства образцов, выдержанных в жидкости более длительное время, существенно не отличаются между собой.

Деформативность микропористых капроновых мембран при взаимодействии в течение 25 минут с жидкой средой существенно выше по сравнению с неувлажненными образцами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Якупов Н.М., Якупов С.Н. Методы расчета пленочных элементов конструкций: Учебное пособие. Казань, КГАСУ, 2007. 117 с.
2. Якупов Н.М., Якупов С.Н. Пленки неоднородной структуры // Строительная механика инженерных конструкций и сооружений. №1. 2009. С.60-70.
3. ГОСТ 14236-81. Пленки полимерные. Метод испытания на растяжение.
4. ГОСТ 29088-91. Материалы полимерные ячеистые эластичные. Определение условной прочности и относительного удлинения при разрыве.
6. Куприянов В.Н. Пленочно - тканевые материалы для строительных конструкций. Казань: КИСИ, 1989. 94 с.
7. Oliver W., Pharr G.J. Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 473, 57 (1997).
8. Якупов Н.М., Галимов Н.К., Леонтьев А.А. Экспериментально-теоретический метод исследования прочности полимерных пленок // Механика композиционных материалов и конструкций. 2000. Т.6, № 2. С.238-243.
9. Якупов Н.М., Нургалиев А.Р., Якупов С.Н. Методика испытаний пленок и мембран в условиях равномерно распределенного поверхностного давления // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2008. Т.74, №11. С.54-56.
10. Якупов Н.М., Нуруллин Р.Г., Якупов С.Н. Методология исследования механических характеристик тонких пленок и нанопленок // Вестник машиностроения. 2009. №6. С.44-47.
11. Галимов Н.К., Якупов Н.М., Якупов С.Н. Экспериментально-теоретический метод определения механических характеристик сферических пленок и мембран со сложной структурой // МТТ №3, 2011. С.58-66.
12. Якупов Н.М., Нуруллин Р.Г., Галимов Н.К., Галявиев Ш.Ш. Способ определения прочностных свойств пленочных материалов: Патент РФ № 2184361 на изобретение.
13. Якупов Н.М., Нуруллин Р.Г., Нургалиев А.Р., Якупов С.Н. Способ определения прочностных свойств тонкослойных материалов: Патент РФ №2310184 на изобретение.
14. Якупов Н.М., Куприянов В.Н., Нуруллин Р.Г., Якупов С.Н. Способ определения прочностных свойств тончайших пленок и нанопленок и устройство для его осуществления: Патент РФ №2387973 на изобретение.
15. Валиев Х.Х., Науменко В.Ю., Снегирева Н.С. Связь характеристик структуры поверхности гетерогенных систем с физико-механическими свойствами и скоростью

перемещения в них наночастиц // Механика наноструктурированных материалов и систем. Сб. тр. 2-й Всероссийская конференция (17-19 декабря 2013 г., Москва). Т.3, М., 2013. С.6-14.

ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ КЛЕЕВОЙ КОМПОЗИЦИИ ДЛЯ АВИАЦИОННЫХ КОНСТРУКЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ ПУТЕМ ЕЕ МОДИФИКАЦИИ НАНОМАТЕРИАЛАМИ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДА

Корнев Ю.В.¹, Вермель В.Д.², Титов С.А.², Никитина Е.А.¹, Бойко О.В.¹,
Чиркунова С.В.¹

¹ ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия

² «ФГУП» Центральный аэрогидродинамический институт им. проф. Н.Е. Жуковского,
г. Жуковский, Россия

РЕЗЮМЕ

Проведено компьютерное моделирование свойств наномодифицированной клеевой композиции (НМК) на основе эпоксидной смолы ЭД-20 перспективными добавками наноматериалов. Результаты моделирования показывают, что наиболее эффективной по повышению механических сдвиговых показателей, при взаимодействии с эпоксидной матрицей добавкой, являются открытые углеродные нанотрубки. Согласно результатам испытаний методом наноиндентирования введение углеродных нанотрубок в клеевые композиции приводит к увеличению их упругих свойств в целом на (20-25)%. Применение НМК в болтовых соединениях приводит к повышению прочности на 18.0%, усталостной долговечности не менее чем в 4 раза.

Ключевые слова: Моделирование, композиционные материалы, наномодифицированная клеевая композиция, нанотрубки, наноиндентирование, прочность, болтовые соединения.

ВВЕДЕНИЕ

Полимерные композиционные материалы (ПКМ) находят все более широкое применение в изделиях авиационной техники. Это обусловлено тем, что использование легких и прочных ПКМ должно привести к уменьшению веса конструкций и, как следствие, к получению ряда других преимуществ по сравнению с конструкциями из традиционных более тяжелых металлических материалов. Однако достижение этих преимуществ ПКМ в реальных конструкциях наряду с другими факторами ограничивается необходимостью проведения размерной механической обработки, изготовлением проемов и отверстий для размещения закладных металлических элементов и крепежа в узлах соединений деталей.

При механической обработке на кромках и обработанной поверхности образуются дефекты типа микротрещин, ворсистости, сколов связующего, расслоений (рис.1). Эти дефекты при сочетании с концентраторами напряжений в виде отверстий и вырезов приводят к уменьшению прочности и усталостной долговечности деталей из ПКМ.

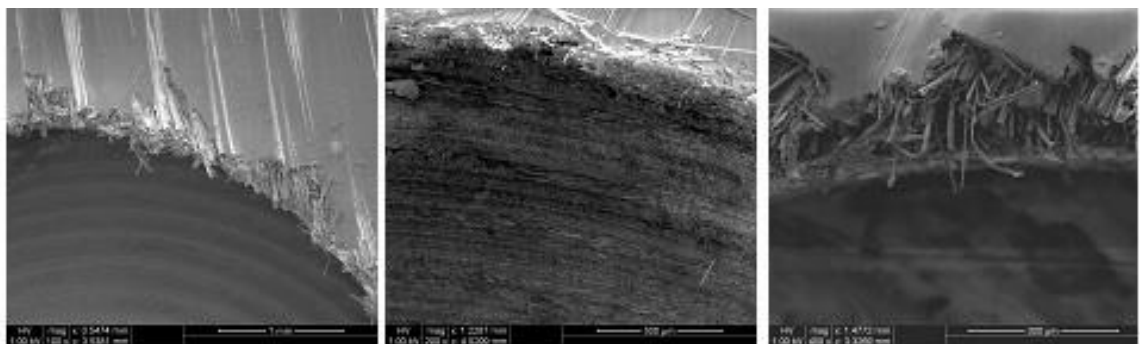


Рис.1. Дефекты на кромках деталей из ПКМ, возникающие при механической обработке - фрезеровании и сверлении.

Принимая во внимание приведённые выше последствия механической обработки в деталях из полимерных композиционных материалов, можно минимизировать снижение прочности детали следующими способами:

- во-первых, это уменьшить разрушения кромок за счет подбора инструмента и режимов;

- во-вторых, разработать клеевую композицию холодного отверждения, имеющую высокую прочность на растяжение, сжатие и сдвиг, например, на основе существующего клея холодного отверждения с диспергированными нанокуглеродными волокнами

для использования при установке крепежа.

Последнее позволяет исключить, за счет заполнения клеевой композицией, зазоры между отверстием и крепежным элементом, тем самым уменьшается концентрация контактных и растягивающих напряжений на контуре отверстия в многоточечных соединениях и включить в работу при приложении нагрузки все крепежные элементы одновременно.

1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНОГО МОДИФИЦИРУЮЩЕГО НАНОМАТЕРИАЛА

Для повышения механических характеристик (прочность, вязкость) клеевой композиции в настоящей работе осуществляли её модификацию углеродными наноматериалами. Модификация заключается в добавлении малых концентраций наноматериалов в стандартную клеевую композицию, что, теоретически [1-3], за счёт взаимодействия между нанонаполнителем и полимерной матрицей может повысить прочность клеевого соединения, и в перспективе усталостную долговечность деталей из ПКМ. Для выбора оптимального типа наноматериалов для применения в клеевой композиции нами проводилось моделирование взаимодействия смолы ЭД-20 с рядом углеродных наноматериалов.

Известно, что правильный подбор наполнителя позволяет изменять физико-химические свойства эпоксидных клеев и повышать механическую прочность и стабильность склеенных конструкций. В нашем случае исследовались механизмы взаимодействия эпоксидной матрицы с поверхностью частиц различных наполнителей (аморфного углерода $(\text{CH})_{170}$, фуллерена C_{240} и углеродных нанотрубок (УНТ) различного строения). Энергетические и прочностные характеристики межфазных слоев наполненных эпоксидных клеев исследовались в вычислительном эксперименте в рамках кластерного метода и подхода микроскопической координаты трения, реализованных в оригинальном пакете квантово-механических программ NDDO/sp-sp_d [Оригинальный пакет квантово-механических программ NDDO/sp-sp_d, ИПРИМ РАН, Свидетельство о государственной регистрации № 2009614949 от 10.09.2009, реализованный в параллельном режиме расчета].

На основе оптимизированных структур молекулы олигомера ЭД-20, моделирующей фрагмент эпоксидной цепи, и кластеров, моделирующих частицы наполнителей, были построены и оптимизированы геометрии соответствующих адсорбционных комплексов. Их структуры представлены на рис. 2.

Для каждого рассмотренного адсорбционного комплекса рассчитывалась энергия связывания $E_{\text{связ}}$, рассчитанная на одну мономерную единицу эпоксидного клея и максимальная сила сдвигового трения $F_{\text{сдв\_MAX}}$ как градиент полной энергии системы по выбранной координате трения. Результаты расчетов представлены в Таблице 1.

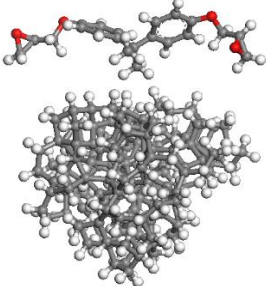
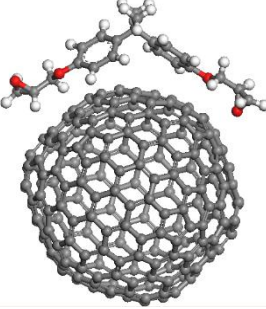
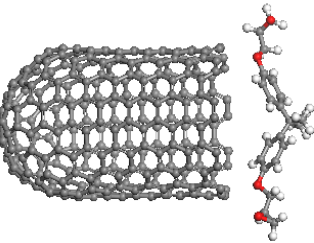
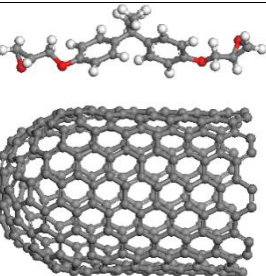
Адсорбционный комплекс	Оптимизированная структура комплекса
ЭД-20 + углеродная частица СН170	
ЭД-20 + фуллерен С240	
ЭД-20 + углеродная трубка C288, (9,9) адсорбция по открытому концу трубки	
ЭД-20 + углеродная трубка C288, (9,9) адсорбция по длинной стороне трубки	

Рис.2. Оптимизированные структуры адсорбционных комплексов молекулы олигомера ЭД-20, моделирующего фрагмент эпоксидной цепи, и кластеров, моделирующих частицы наполнителей.

Представленные результаты моделирования показывают, что, наиболее эффективным наполнителем из исследованных на данный момент углеродных структур, повышающим механические сдвиговые показатели клеевой композиции, являются открытые углеродные нанотрубки. Для них частицы наполнителя удерживаются фрагментами эпоксидных цепей как водородными, так и Ван-дер-Ваальсовыми дисперсионными силами. Взаимодействие фрагментов эпоксидных цепей с боковыми стенками углеродных нанотрубок слабее, чем с открытыми концами поэтому, по возможности, надо стремиться к открытию концов трубок перед наполнением эпоксидных клеев, а также, по возможности, необходимо использовать короткие трубки, чтобы увеличить долю открытых концов на удельное содержание наполнителя в эпоксидном клее. По энергии взаимодействия и силе сдвигового трения, боковые поверхности углеродных нанотрубок, практически, имеют

те же показатели межфазных слоев, что и другие рассмотренные ароматические системы, например, фуллерен C_{240} , углеродная частица $(CH)_{170}$. Углеродные гидрофобные частицы также не показывают высоких механических показателей. Они могут считаться неактивными наполнителями. Таким образом, открытые углеродные нанотрубки перспективно использовать в качестве наполнителей эпоксидных клеев.

Таблица 1.

Геометрические, энергетические и механические характеристики (данные КМ моделирования), полученные для адсорбционных эпоксидного олигомера ЭД-20 и кластеров, моделирующих частицы наполнителя

Адсорбционный комплекс	R, Å	$E_{\text{связ.}}$, ккал/моль	$F_{\text{сдв. макс.}}$, ккал/моль*Å
ЭД-20+углеродная частица $(CH)_{170}$	2.7	-14.2	19.2
ЭД-20+фуллерен C_{240}	2.8	-13.8	18.8
ЭД-20+углеродная трубка C_{288} , (9,9) адсорбция по открытому концу трубки	2.5	-23.5	26.8
ЭД-20+углеродная трубка C_{288} , (9,9) адсорбция по длинной стороне трубки	2.7	-15.4	22.7

2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОМОДИФИЦИРОВАННОЙ КЛЕЕВОЙ КОМПОЗИЦИИ

Для заживления дефектов и упрочнения зон концентрации напряжений специалистами ФГУП «ЦАГИ» совместно с ООО НПФ «Техполиком» и Тамбовским государственным техническим университетом разработана наномодифицированная клеевая композиция (НМК), в которой в основу клея конструкционного назначения введены наночастицы углеродного наноматериала «Таунит» (2% по массе [4]), представляющие собой нанотрубки. Характеристики этого наноматериала приведены в таблице 2.

Таблица 2.

Характеристики наноматериала «Таунит»

Характеристика	Значение
Наружный диаметр наночастиц, нм	15-40
Внутренний диаметр, нм	5-8
Длина, мкм	2 и более
Общий объем примесей, %, в т.ч. аморфный углерод	до 1,5, 0,3-0,5
Насыпная плотность, г/см ³	0,4-0,6
Удельная геометрическая поверхность, м ² /г	120 и более
Термостабильность, °C	до 700
Средний объем пор, см ³ /г	0,22
Средний размер пор, Å	70

Как показали результаты компьютерного моделирования, введение углеродных нанотрубок и углеродных материалов в клеевую композицию должно, повлиять и на механические характеристики данной композиции. В связи с этим, целью на данном этапе работы явилось изучение механических характеристик отверждённых клеевых композиций исходной и наномодифицированной методом наноиндентирования. Таким образом, в дальнейшем, оценивая механические свойства клеевых композиций и клеевых соединений, можно будет установить влияние адгезионной и когезионной составляющей на механические свойства клеевого соединения, при добавлении различных наноматериалов.

Для исследования свойств материалов методом наноиндентирования в настоящей работе применялся измерительный комплекс NanoTest 600 (Micro Materials Ltd., Англия), позволяющий определять механические свойства широкого спектра материалов и покрытий в нано- и микромасштабе. Он позволяет определять на образцах и покрытиях толщиной от 20 нм следующие характеристики: твёрдость и приведённый модуль упругости в зависимости от глубины индентирования, адгезию тонких пленок, проводить скретч-тест, оценивать износостойкость поверхности и ряд других свойств.

Суть метода наноиндентирования заключается во внедрении геометрически и физически аттестованной пирамиды (пирамида Берковича с углом при вершине 65,3° и радиусом закругления 200 нм) в материал и определении с высокой точностью зависимости «нагрузка - глубина» индентирования [5,6]. При расчёте приведённого модуля упругости применялась модель Оливера-Фарра, в соответствии с которой обрабатывалась часть зависимости нагрузка-глубина индентирования на цикле разгрузки. Для нивелирования возможного эффекта ползучести полимерной композиции в ходе эксперимента осуществлялась задержка при максимальной нагрузке. Также выбирались определённые области индентирования с целью уменьшения влияния шероховатости поверхности на определение механических свойств образцов. Результаты экспериментов представлены в табл. 3.

Таблица 3.

Механические характеристики клеевых композиций, полученные на измерительном комплексе NanoTest 600 методом наноиндентирования, для исходного образца и образца с углеродными нанотрубками (2% масс)

Образец	Образец 1 (ИСХ)		Образец 2 (УНТ)	
Нагрузка	0,2 мН		0,2 мН	
Параметр	Значение	±, %	Значение	±, %
Максимальная глубина индентирования (внедрение), нм	223,4	10,7	193,0	6,3
Пластическое внедрение, нм	187,2	12,4	160,0	7,3
Твёрдость, МПа	208,9	19,5	273,7	13,0
Приведённый модуль упругости, ГПа	3,6	14,9	4,6	16,0
Упругое восстановление	0,20	12,5	0,21	15,9
Податливость контакта, нм/мН	240,3	7,5	220,3	13,0
Пластическая работа (рассеянная в образце энергия), нДж	0,017	28,8	0,016	9,8
Упругая работа (работа при разгрузке), нДж	0,007	6,3	0,006	10,6

Представленные экспериментальные данные говорят о том, что введение углеродных нанотрубок в клеевые композиции даже в малых концентрациях (2% масс.) приводит

к увеличению их упругих свойств. Особенно это проявляется при малых нагрузках (0,2 мН): полученный приведённый модуль упругости составляет 3,6 ГПа - для исходной композиции и 4,6 ГПа для композиции с углеродными нанотрубками.

Также увеличивается твёрдость для образцов с нанотрубками (исходный - 208 МПа, с нанотрубками - 273 МПа при 0,2 мН). Следует также отметить значительный разброс полученных показателей в эксперименте по наноиндентированию, что, видимо, связано с особенностями подготовки образцов клеевой композиции.

3. ОПРЕДЕЛЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КЛЕЕВЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Наряду с определением механических свойств наномодифицированной клеевой композиции, проводилось исследование механических свойств клеевых соединений.

Для проведения испытаний были изготовлены образцы клеевых соединений элементов из алюминиевого сплава и образцы клеевых соединений элементов из стеклопластика и титанового сплава. Схема и фотоизображения образцов показаны соответственно на рис.3 и рис.4.

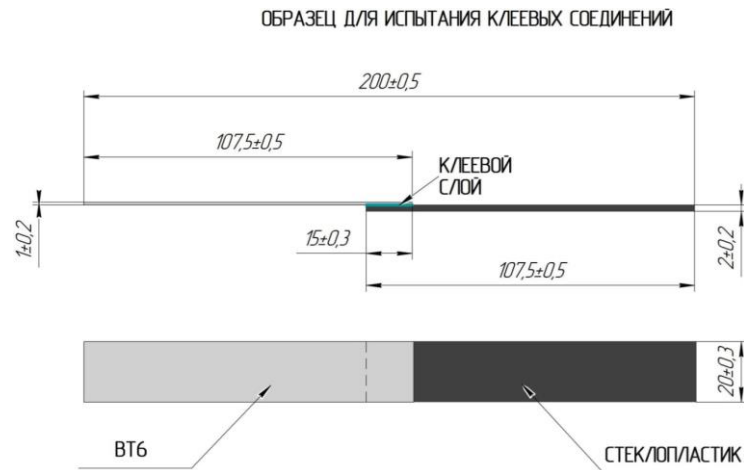


Рис.3. Схема образца для испытания клеевого соединения элементов из стеклопластика и титанового сплава.



Рис.4. Фотоизображение образцов для испытаний клеевого соединения элементов из стеклопластика и титанового сплава.

Результаты испытаний (табл. 4) образцов клеевых соединений элементов из алюминиевого сплава, показали существенное (до 26%) увеличение минимального значения предела прочности наномодифицированного клеевого соединения по сравнению с пределом прочности исходного клеевого соединения. Прочность клеевого соединения практически постоянна при концентрации наночастиц в клее 1 и 2 %. При концентрации наночастиц, равной 1%, коэффициент вариации предела прочности при сдвиге клеевого соединения имеет наименьшее значение (5,3 %). Повышение прочности клеевого соединения за счет наночастиц происходит без уменьшения предельных деформаций клеевого слоя, т. е. охрупчивания клеевого слоя в проведенных экспериментах не наблюдается.

Результаты испытаний на прочность при сдвиге образцов клеевых соединений элементов из стеклопластика и титанового сплава ВТ-6 при использовании НМК с концентрацией углеродного наноматериала «Таунит» 0 и 2 %. показаны в таблице 4. По полученным данным видно, что за счет наноклеевой композиции минимальное значение предела прочности клеевого соединения при сдвиге увеличивается на 25%, а среднее значение - на 17 %.

Таблица 4.

Результаты испытаний на прочность при сдвиге образцов клеевого соединения с концентрацией углеродного наноматериала «Таунит» 0 и 2 %. (Материал образца стеклопластик-титановый сплав ВТ6, скорость растяжения образцов при испытаниях 10 мм/мин)

Концентрация наночастиц, %	Предел прочности		Предел прочности	
	Среднее значение, Н/ мм ²	Увеличение за счет наночастиц, %	Минимальное значение Н/ мм ²	Увеличение за счет наночастиц, %
0	20,23	-	18,34	-
2	23,68	17	22,95	25

4. ПРИМЕНЕНИЕ НАНОМОДИФИЦИРОВАННОЙ КЛЕЕВОЙ КОМПОЗИЦИИ

Разработанная специалистами ФГУП «ЦАГИ» совместно с ООО НПФ «ТехПоликом» и Тамбовским государственным техническим университетом наномодифицированная клеевая композиция (НМК) была применена для исследования возможностей упрочнения штифтовых соединений деталей из углепластика, имитирующих болтовые соединения. В процессе их проведения было установлено, что при изготовлении отверстия в образце из полимерного композиционного материала появляются дефекты на поверхности и кромках отверстия (рис. 1).

Наряду с появлением дефектов так же возникают зазоры между болтом и отверстием. В многорядных болтовых соединениях, зазоры между болтами и отверстиями приводят

к неоднородной загрузке болтов, следствием которой может стать нерасчетное, преждевременное разрушение. Известно [7,8], наличие зазора между болтом и отверстием также приводит к концентрации контактных и растягивающих напряжений на контуре отверстия (рис.5). Поэтому использование НМК в болтовых соединениях для устранения дефектов на кромках в отверстиях и заполнения зазоров между болтом и отверстием должно приводить к увеличению прочности и усталостной долговечности соединений.

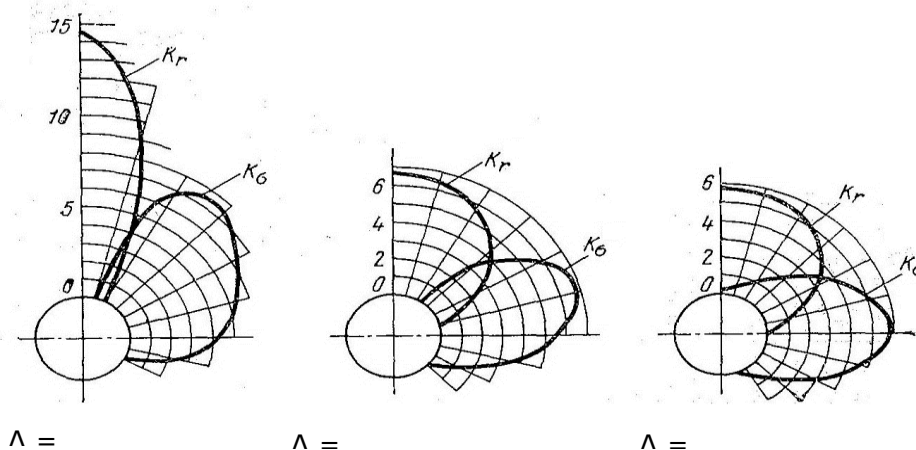


Рис.5. Зависимость коэффициентов концентрации контактных (k_f) и растягивающих (k_s) напряжений на контуре отверстия от величины относительного зазора Δ между отверстием и болтом в болтовом соединении.

Были проведены испытания на прочность при растяжении, а также на ресурс образцов из углепластика шириной 30 мм (рис.6) с нагруженным штифтом при различных видах укладки волокон в углепластике: с продольной укладкой и комбинированной при сочетании продольной укладки с укладками под углом 45° и 90° . Для ряда образцов зазоры между штифтом и отверстием заполнялись НМК.

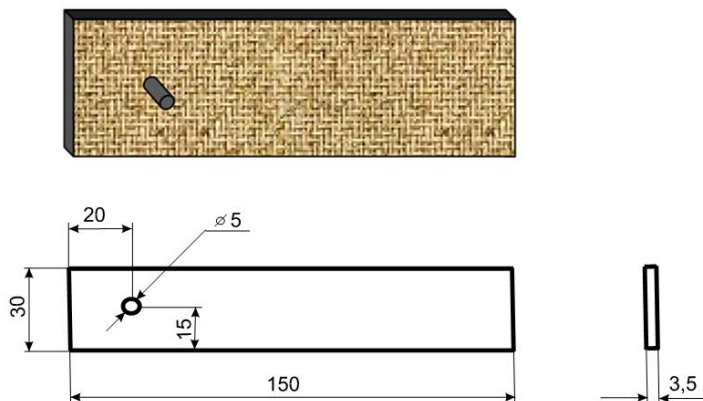


Рис.6. Образец из углепластика со штифтом.

Результаты испытаний (табл.5-6) показали, что при применении наномодифицированной клеевой композиции прочность при разрушении образцов из углепластика увеличивается. Для образцов с продольной укладкой волокон 0° (100%) увеличение составило $\sim 50,0\%$, а для образцов с комбинированной укладкой волокон: продольной 0° (25 и $60,0\%$), и под углом 45° (50 и $32,5\%$) и под углом 90° (25 и 7.5%) от 18.0 до 20.5% .

Таблица 5.

Значения разрушающих скалывающих напряжений, полученных при испытании на прочность образцов штифтовых соединений (ширина образца $b=30$ мм, диаметр отверстия $d=5,56$ мм) с продольной укладкой волокон в углепластике при установке штифта в отверстие без НМК и с применением НМК

Партия. Ориентация укладки и относительный объем волокон (в %)	Без НМК				С применением НМК			
	№ образца	$P_{\text{разр,}}$ кг	$\tau_{\text{ск}}$ кг/мм ²	Среднее	№ образца	$P_{\text{разр,}}$ кг	$\tau_{\text{ск}}$ кг/мм ²	Среднее
				$\tau_{\text{ск,}}$ кг/мм ²				$\tau_{\text{ск,}}$ кг/мм ²
D75.15.1.1. $0^\circ \times 45^\circ \times 90^\circ$ 100 x 0 x 0	1.1С	417	6,69	7.15	1.1СНК	641	11,31	11,2 (увеличение на 56,6%)
					1.2СНК	651	11,28	
	1.2С	451	7,61		1.3СНК	636	10,98	

Усталостная долговечность образцов соединений со сложной укладкой волокон, при применении клеевой композиции, увеличилась не менее чем в 4 раза. Сравнение производилось по минимальному значению усталостной долговечности упрочненных образцов с максимальным значением усталостной долговечности исходных образцов.

Таблица 6.

Значения разрушающих напряжений смятия, полученных при испытании на прочность образцов штифтовых соединений (ширина образца $b=30$ мм, диаметр отверстия $d = 5,56$ мм), изготовленных с применением сочетания продольной укладки волокон (25 и 61,5%), укладки их под углом 45^0 (50 и 30,8%) и укладки под углом 90^0 (25 и 7,7%) в углепластике при установке штифта в отверстие исходных и с применением НМК

Партия. Ориентация укладки и относительный объем волокон (в %)	Без НМК				С применением НМК			
	№ образца	$R_{\text{разр}}$, кг	$\sigma_{\text{см}}$ кг/мм ²	Среднее	№ образца	$R_{\text{разр}}$, кг	$\sigma_{\text{см}}$ кг/мм ²	Среднее
				$\sigma_{\text{см}}$, кг/мм ²				$\sigma_{\text{см}}$, кг/мм ²
D75.15.3.1. $0^0 \times 45^0 \times 90^0$ 25 x 50 x 25	3.1C	1148	62,49	61,1	2.1СНК	1264	72,76	72,53 (увеличение на 18,7%)
	3.2C	1097	59,72		2.2СНК	1268	72,3	
					2.3СНК	1290	72,63	
D75.15.5.1. $0^0 \times 45^0 \times 90^0$ 61,5x30,8x7,7	5.1C	1034	48,14	49,01	5.1СНК	1160	59,72	59,04 (увеличение на 20,5%)
	5.2C	1052	49,88		5.2СНК	1108	56,37	

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ, проект № 14-01-00457 А.

ВЫВОДЫ

1. Результаты компьютерного моделирования показали, что наиболее эффективной по повышению механических сдвиговых показателей, при взаимодействии с эпоксидной матрицей добавкой, являются открытые углеродные нанотрубки. Для них частицы наполнителя удерживаются фрагментами эпоксидных цепей как водородными, так и Ван-дер-Ваальсовыми, дисперсионными силами. Таким образом, открытые углеродные нанотрубки перспективно использовать в качестве наполнителей эпоксидных клеев.
2. Экспериментальным путем определена рациональная концентрация наномодифицирующих добавок в полимерном связующем, которое составляет (1-2)%.
3. Согласно результатам испытаний методом наноиндентирования введение углеродных нанотрубок в клеевые композиции приводит к увеличению их упругих свойств в целом на (20-25)%. Полученные приведённые модули упругости 3,6 ГПа - для исходной композиции, 4,6 - для композиции с добавлением углеродных нанотрубок при нагрузке 0,2 мН.
4. В ходе проведенных испытаний методом наноиндентирования установлено, что твёрдость для образцов исходной композиции - 208 МПа, с добавлением углеродных нанотрубок, - 273 МПа при нагрузке 0,2 мН.
5. Применение НМК в болтовых соединениях приводит к повышению прочности на 18.0%, усталостной долговечности не менее чем в 4 раза.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Farzana Hussain, Mehdi Hojjati, Masami Okamoto and Russell E. Gorga.* Review article: Polymer-matrix Nanocomposites, Processing, Manufacturing, and Application., Journal of Composite Materials 2006; 40; 1511.

2. Yanovsky Y.G., Yumashev O.B., Kornev Y.V., Karnet Y.N., Kozlov G.V. Some prospects for the use of carbon nanotubes as functional additives in elastomer composites International Journal of Nanomechanics Science and Technology. 2011. Т. 2. № 3. С. 185-203.
3. Kornev Y.V., Yanovskii Y.G., Boiko O.V., Chirkunova S.V. Guseva M.A. The effect of carbon nanotubes on the properties of elastomeric materials filled with the mineral shungite // International Polymer Science and Technology. 2013. Т. 40. № 2. Р. 29-32.
4. Вермель В.Д., Доценко А.М., Смирнов Р.А., Титов С.А., Яблонский И.С., Аниховская Л.И., Кладова Л.С., Ткачев А.Г., Слепов С.К., Мележик А.В. Об исследовании оптимального содержания наночастиц в клеевых соединениях // Механика и наномеханика структурно-сложных и гетерогенных сред. Успехи, проблемы, перспективы. Сборник трудов Всероссийской конференции, приуроченной к 20-летию ИПРИМ РАН. Москва, 30 ноября - 2 декабря 2009 г. – М.: Альянстрасантом. - 2010. С. 72-77.
5. Anthony C. Fisher-Cripps “Nanoindentation”, Springer-Verlag, New York, 2002, 197 p.
6. Oliver W. C., Pharr G. M. // Journal of Materials Research, 1992, V. 7, № 6, p. 1564-1583.
7. Сухарев И.П. Прочность шарнирных узлов машин. Машиностроение, М., 1977, 168 с.
8. Доценко А.М. Аналитическое описание распределения напряжений в образце типа проушины при нагружении ее отверстия через болт, установленный с упругим натягом. Авиационная промышленность. № 12, 1990, С.10-13, ДСП.

ОСОБЕННОСТИ ПРОЦЕССА ГОРЯЧЕГО ИЗОСТАТИЧЕСКОГО ПРЕССОВАНИЯ ТЕЛ БОЛЬШИХ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ РАЗМЕРОВ В УСЛОВИЯХ НЕОДНОРОДНОГО НЕСТАЦИОНАРНОГО ТЕМПЕРАТУРНОГО ПОЛЯ

Хомяков Е.И.¹, Бочков А.В.², Головешкин В.А.^{2,3}, Зазовский Л.М.², Козырев Ю.М.²,
Пономарев А.В.²

¹ Синертех, США

² Московский государственный университет приборостроения и информатики, г.Москва,
Россия

³ ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г.Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

При исследовании поведения порошковых материалов в условиях неоднородного температурного поля существенны следующие два момента: коэффициент теплопроводности значительно возрастает с ростом относительной плотности; предел текучести существенно уменьшается с ростом температуры. Исследование процесса горячего изостатического прессования (ГИП) тел больших геометрических размеров показывает, что неоднородное нестационарное температурное поле существенно влияет на конечную форму изделия.

Ключевые слова: порошковый материал, горячее изостатическое прессование, условие Грина, неоднородное нестационарное температурное поле.

ВВЕДЕНИЕ

Современное производство требует все больше материалов и конструкций с повышенными эксплуатационными характеристиками. Одним из методов получения таковых является порошковая металлургия, использующая в качестве исходного сырья металлический порошок.

Одним из методов порошковой металлургии является горячее изостатическое прессование (ГИП), основанное на компактировании порошкового материала под воздействием высоких давлений (порядка 1000 атм.) и температур (порядка 1000°C). В капсулу определенной формы помещается порошковый материал и закладные элементы (образующие полости в готовом изделии), после чего из нее откачивается воздух. Далее капсула помещается в газостат, где под воздействием газа (аргон) осуществляется процесс ГИП. На последнем этапе с готового изделия химическим или механическим путем удаляется капсула и закладные элементы.

Основной проблемой математического моделирования процесса ГИП создание такой начальной геометрии изделия, чтобы по окончании процесса форма конечного изделия удовлетворяла нужной геометрии с достаточно высокой степенью точности, что обусловлено трудностями последующей обработки из-за высоких прочностных свойств изделия и высокой стоимостью порошкового материала.

При моделировании поведения тел больших геометрических размеров, а эта задача стала актуальной в последнее время, дополнительно возникла проблема учета влияния неоднородного нестационарного температурного поля.

Причинами данной проблемы являются: зависимость коэффициента теплопроводности порошкового материала от плотности; зависимость предела текучести от температуры. Качественно их влияние можно объяснить следующим образом - при повышении температуры происходит уменьшение предела текучести, что приводит к уплотнению материала вблизи границ. Это, в свою очередь, увеличивает коэффициент теплопроводности, что приводит к росту температуры. В итоге, мы наблюдаем аналог движения фронта уплотнения материала. Впервые существование подобного фронта было

показано в работе [1]. Отдельные аспекты поведения порошковых материалов в условия неоднородного нестационарного температурного поля исследовались в [2-4].

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Математическая постановка задачи моделирования поведения порошкового материала в процессе горячего изостатического прессования включает следующее.

Уравнение равновесия

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad (1)$$

где σ_{ij} - тензор напряжений.

ГИП - достаточно медленный процесс, поэтому ускорениями в уравнениях движения пренебрегаем.

Связь тензора напряжений с тензором скоростей деформаций определяется уравнением поверхности текучести

$$\Phi(\sigma_{ij}) = 0 \quad (2)$$

и законом течения

$$\varepsilon_{ij} = \omega \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{ij}} \quad (3)$$

где ε_{ij} - тензор скоростей деформации.

Как правило, при моделировании процесса ГИП уравнение (2) принимается в форме Грина [5,6]

$$\frac{\sigma^2}{f_2^2} + \frac{S^2}{f_1^2} = Y^2 \quad (4)$$

где $\sigma = \sigma_{ii}/3$ - среднее напряжение; $S^2 = \frac{3}{2}(\sigma_{ij} - \sigma \delta_{ij})(\sigma_{ij} - \sigma \delta_{ij})$; f_1 и f_2 - экспериментально определяемые функции относительной плотности ρ , Y - предел текучести монолита порошкового материала, являющийся экспериментально определяемой функцией температуры.

Для описания характера изменения температуры используется уравнение теплопроводности

$$C\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div} \lambda \text{grad} T - C\rho \bar{U} \text{grad} T \quad (5)$$

где C - теплоемкость единицы объема монолита; ρ - относительная плотность; $\bar{U}$ - скорость; $\lambda = \lambda(\rho, T)$ - коэффициент теплопроводности порошкового материала.

Обычно $\lambda(\rho, T)$ представляется в виде $\lambda(\rho, T) = \lambda_1(T)\lambda(\rho)$, где $\lambda_1(T)$ - коэффициент теплопроводности монолита, определяемый как функция температуры, а $\lambda(\rho)$ - множитель, отражающий зависимость коэффициента теплопроводности порошкового материала от относительной плотности ($0 < \lambda(\rho) < 1$).

При исследовании влияния неоднородного нестационарного температурного поля на процесс ГИП необходимо иметь в виду следующие соображения.

1. Функция $\lambda(\rho)$ является малой при начальной насыпной плотности порошка ρ_0 (0,6 - 0,7), и равна 1 при $\rho = 1$. $\lambda(\rho)$ в ходе процесса ГИП изменяется примерно на 2 порядка и быстро возрастает с ростом плотности ρ .

2. Предел текучести $Y(T)$ в диапазоне температур, характерных для процесса ГИП ($20^\circ\text{C} - 1000^\circ\text{C}$), уменьшается примерно на 2 порядка.

Чтобы качественно понять суть проблемы, рассмотрим простейшую задачу - одномерный процесс прессования порошкового слоя.

Постановка задачи.

В области $0 < x < \infty$ имеется порошковый слой с начальной относительной плотностью ρ_0 и температурой T_0 . На границе слоя ($x = 0$) приложено внешнее давление P и температура T_1 . Исследуем характер деформации такого слоя.

Поскольку задача одномерная, то из уравнения (1) следует

$$\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} = 0; \quad \sigma_x = -P \quad (6)$$

В силу одномерного характера процесса деформации

$$\varepsilon_x = \varepsilon_z = 0 \quad (7)$$

Уравнение поверхности текучести (4) примет вид

$$\frac{(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z)^2}{9f_2^2} + \frac{1}{6f_1^2} \left[(2\sigma_x - \sigma_y - \sigma_z)^2 + (2\sigma_y - \sigma_x - \sigma_z)^2 + (2\sigma_z - \sigma_x - \sigma_y)^2 \right] = Y^2 \quad (8)$$

Согласно (3, 7, 8) имеем

$$\begin{aligned} \left(\frac{2}{9f_2^2} - \frac{1}{f_1^2} \right) \sigma_x + \left(\frac{2}{9f_2^2} + \frac{2}{f_1^2} \right) \sigma_y + \left(\frac{2}{9f_2^2} - \frac{1}{f_1^2} \right) \sigma_z &= 0 \\ \left(\frac{2}{9f_2^2} - \frac{1}{f_1^2} \right) \sigma_x + \left(\frac{2}{9f_2^2} - \frac{1}{f_1^2} \right) \sigma_y + \left(\frac{2}{9f_2^2} + \frac{2}{f_1^2} \right) \sigma_z &= 0 \end{aligned} \quad (9)$$

Согласно (9)

$$\sigma_y = \sigma_z = \frac{9f_2^2 - 2f_1^2}{2f_2^2 + 4f_1^2} \sigma_x \quad (10)$$

Тогда уравнение (8), с учетом (7), примет вид

$$\sigma_x^2 = Y^2 \frac{9f_2^2 + 4f_1^2}{9} \quad (11)$$

Поскольку $\sigma_x = -P$ - заданная величина, Y - известная функция температуры, f_1 и f_2 - известные функции относительной плотности ρ , то соотношение (8), при известной температуре, определяет плотность порошкового материала.

Обратим внимание на то, что если $P^2 < Y^2 \frac{9f_2^2(\rho_0) + 4f_1^2(\rho_0)}{9}$, то материал остается недеформированным, и его плотность равна начальной насыпной плотности ρ_0 .

Предположим, что давление P и температура T_1 таковы, что

$$P^2 < Y(T_0)^2 \frac{9f_2^2(\rho_0) + 4f_1^2(\rho_0)}{9}$$

$$P^2 > Y(T_1)^2 \frac{9f_2^2(\rho_0) + 4f_1^2(\rho_0)}{9}$$

то есть холодный материал не уплотняется при заданном давлении, а нагретый уплотняется.

Отметим, что $Y(T)$ - монотонно убывающая функция с ростом температуры, а $9f_2^2(\rho) + 4f_1^2(\rho)$ - монотонно возрастающая функция относительной плотности.

Введем температуру $T_u \in [T_0; T_1]$ из условия $\rho^2 = Y^2(T_u) \frac{9f_2^2(\rho_0) + 4f_1^2(\rho_0)}{9}$, которая будет определять начало уплотнения при заданном давлении.

Соотношение (8) позволяет определить ρ как функцию температуры $\rho = g(T)$, где $g(T) = \rho_0$ при $T < T_u$, а при $T > T_u$ относительная плотность определяется из решения относительно ρ уравнения:

$$\rho^2 = Y(T)^2 \frac{9f_2^2(\rho) + 4f_1^2(\rho)}{9} \quad (12)$$

Таким образом, деформированное состояние слоя полностью определяется решением уравнения теплопроводности (5).

Запишем уравнение (5) в Лагранжевой системе координат, заменив x на z - где Z начальное положение точки.

Из закона сохранения массы следует

$$\rho dx = \rho_0 dz$$

(13)

Тогда координаты x на z связаны соотношением

$$\rho(x-z) = \int_x^\infty (\rho - \rho_0) dx \quad (14)$$

Уравнение (5) в Лагранжевой системе координат примет вид

$$C\rho_0 \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\rho}{\rho_0} \lambda_1(T) \lambda(\rho) \right) \frac{\partial T}{\partial z} \quad (15)$$

Для качественного анализа примем $\lambda_1(T) = \lambda_0 = \text{const}$. Тогда, в силу того, что $\rho = g(T)$, уравнение (15) примет вид

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda_0}{C\rho_0^2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\Psi(T) \right) \frac{\partial T}{\partial z} \quad (16)$$

где $\Psi(T) = g(T) \lambda[g(T)]$.

Уравнение (16) с начальным условием $T = T_0$, при $t = 0$, и граничным условием $T = T_1$ при $z = 0$, определяет решение задачи.

Решение (16) будем искать в виде

$$S = \frac{z}{\sqrt{\frac{\lambda_0}{C\rho_0^2} t}} \quad T = T(S), \text{ где} \quad (17)$$

Согласно (16, 17), для T получаем дифференциальное уравнение

$$-\frac{z}{2} \frac{\partial T}{\partial S} = \frac{\partial}{\partial S} \left(\Psi(T) \frac{\partial T}{\partial S} \right) \quad (18)$$

с условиями $T(0) = T_1$ и $T(\infty) = T_0$.

Пусть $T(S_u) = T_u$, тогда можно утверждать, что в порошковом слое существует

граница $Z_u = S_u \sqrt{\frac{\lambda_0}{C\rho_0^2} t}$. При этом для $Z > Z_u$ материал остается недеформированным.

Перенося полученный вывод для изделий больших геометрических размеров, можно сделать следующий качественный вывод. На начальном этапе процесса ГИП в порошковом материале деформируется слой, граничащий с капсулой. Деформация в этом слое носит одномерный характер в направлении, перпендикулярном поверхности капсулы. То есть формируется фронт уплотнения. Область, прилегающая к фронту, характеризуется значительными градиентами плотности. Вдали от фронта материал остается недеформированным. Как было указано ранее, теоретическое обоснование существования такого фронта дано в работе [1].

Наиболее явно влияние такого фронта проявляется, когда тела больших геометрических размеров имеют существенно различные размеры в разных направлениях.

Ниже приведен пример расчета длинного цилиндра. Для того чтобы более явно показать этот эффект, расчет приводится без капсулы.

Зависимость коэффициента теплопроводности от плотности принималась в виде

$$\lambda(\rho) = \lambda_0 * \left(\frac{\rho - \rho_0}{1 - \rho_0} \right)^{1,46 * (1 - \rho_0)}$$

Законы изменения температуры и внешнего давления приведены на рис.1.

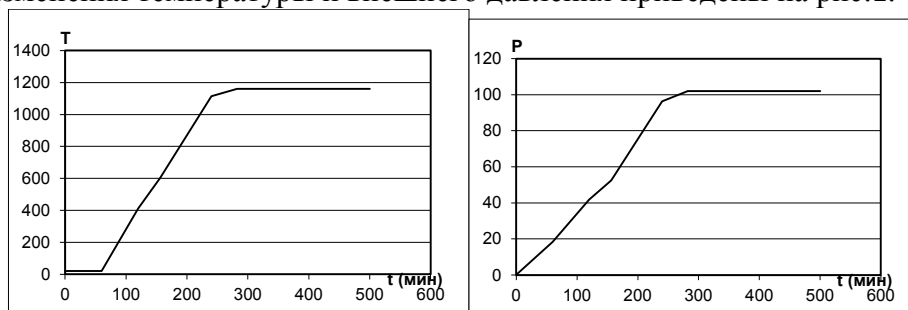


Рис.1. Графики изменения внешней температуры (°C) и давления (МПа)

Характер изменения пределов текучести в зависимости от температуры представлен на рис.2.

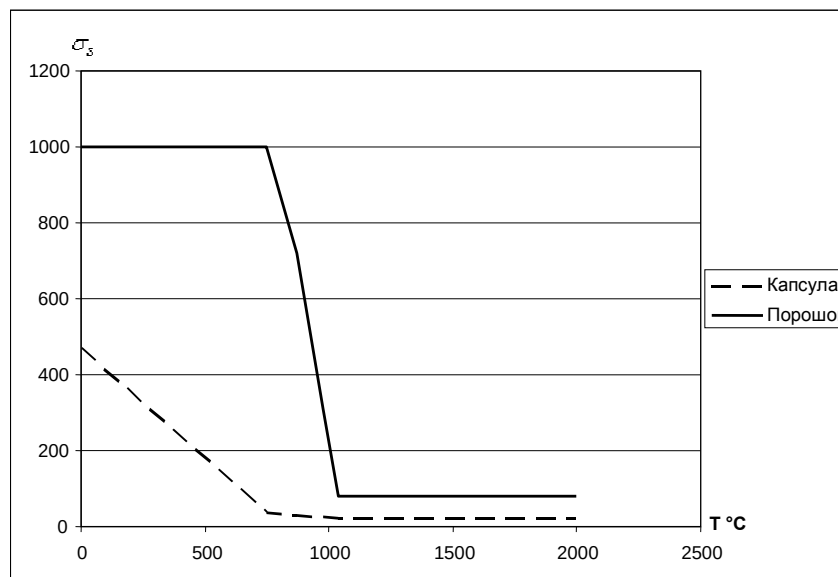


Рис.2. График изменения предела текучести капсулы и порошкового материала (МПа).

Значения экспериментальных функций f_1 и f_2 приведены в таблице 1.

Результаты расчета представлены на рис.3.

В приведенном случае усадки (отношение начальных размеров к конечным) по радиусу и по высоте получились равными соответственно 1,154 и 1,115. В случае однородного температурного поля усадки были бы равны. Разница в 4% обусловлена

влиянием нестационарного неоднородного температурного поля. Это влияние сказалось в том, что на начальном этапе процесса деформировался слой, прилегающий к границе, и фронт уплотнения распространялся перпендикулярно границе капсулы.

Таблица 1.

Экспериментальные функции f_1 и f_2		
Плотность ρ	f_1	f_2
0,63	0,0036	0,054
0,656	0,0071	0,093
0,701	0,12	0,124
0,8	0,47	0,305
0,88	0,66	0,48
0,982	0,86	1,221
0,995	0,95	3

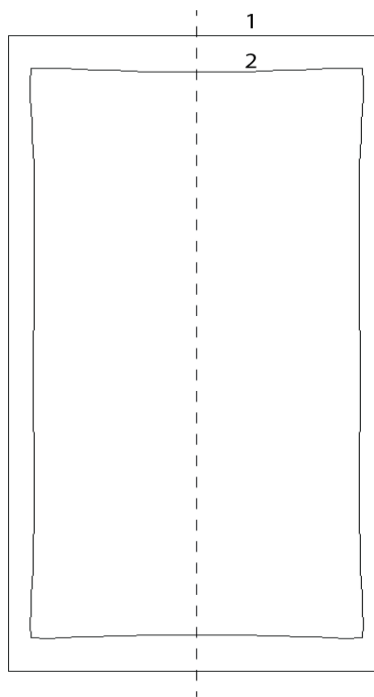


Рис.3. Исходная геометрия (1) и результаты расчета (2).

Отметим так же появление менисков на границе. Обычно появление менисков является следствием влияния капсулы на процесс деформации.

Данный расчет показывает, что уплотнившийся на начальном этапе процесса порошковый слой, начинает вести себя по отношению к еще недеформированному материалу, так же как и капсула.

Проведено сравнение результатов расчета с экспериментальными данными, полученными при изготовлении конкретного образца [4]. Параметры процесса и свойства материалы были те же, что и представленные ранее.

На рис.4-7 приводятся соответствующие чертежи половины продольного сечения трубы. Соответствующие размеры указаны в метрах.

Из приведенных рисунков видно, что моделирование процесса ГИП с учетом влияния существенной зависимости коэффициента теплопроводности от плотности, а предела текучести от температуры, позволяет осуществить гораздо более точный расчет формы конечного изделия. Причина существенного улучшения точности вызвана тем,

что проведенный расчет выявил одномерный характер деформации на начальном этапе процесса

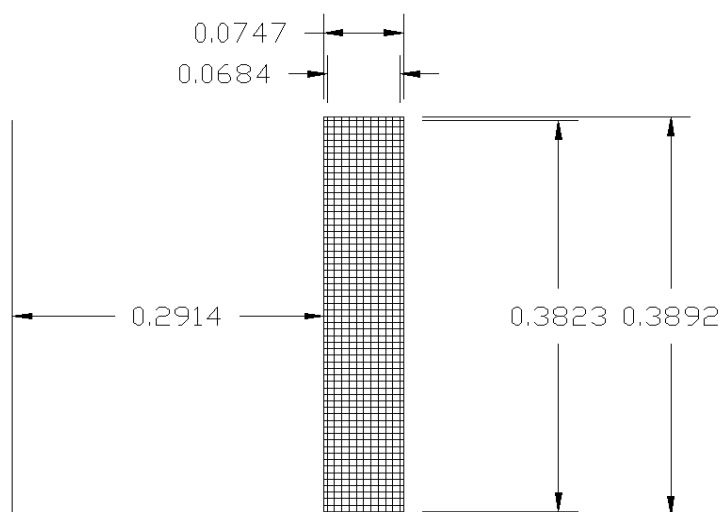


Рис.4. Исходная геометрия.

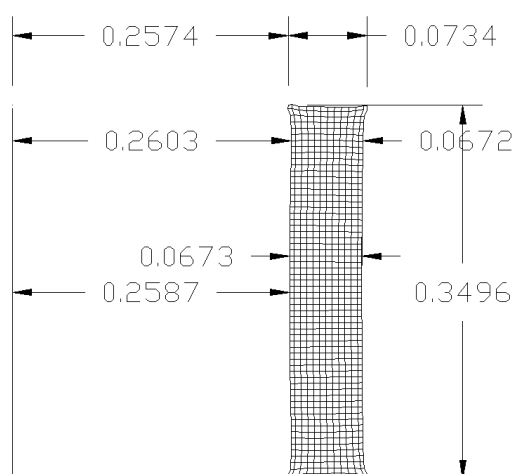


Рис.5. Результаты расчета без учета неоднородности температурного поля.

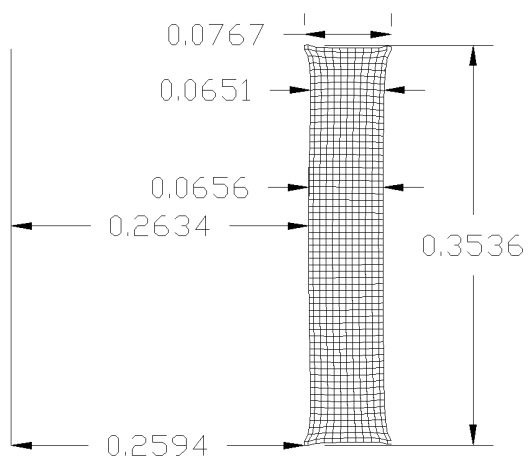


Рис.6. Результаты расчета с учетом неоднородности температурного поля.

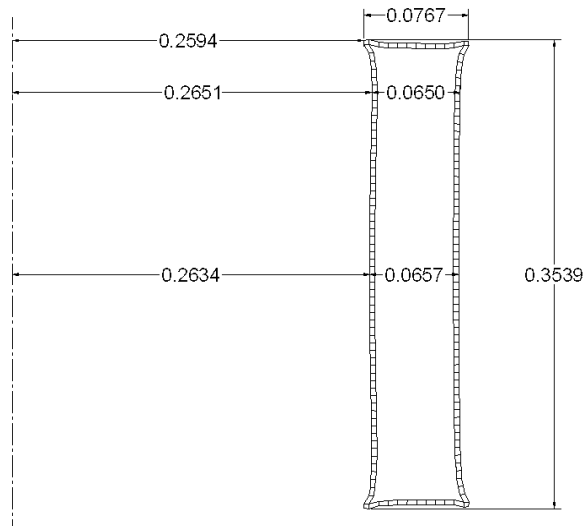


Рис.7. Экспериментальные данные.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный анализ показывает, что для тел, геометрические размеры которых существенно различны в разных направлениях, учет влияния неоднородного нестационарного температурного поля существенно увеличивает точность расчетов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Друянов Б.А., Самаров В.Н. Уплотнение порошкового материала в неоднородном температурном поле. «Порошковая металлургия», №3, т.25, 1989.
2. Bochkov A.V., Kozyrev Y.M., Ponomarev A.V. Modeling Process of Hot Isostatic Pressing with Nonstationary Temperature Field. - Manufacturing Science and Technology 2(2): 45-50, 2014.
3. Бочков А.В., Головешкин В.А., Пирумов А.Р., Пономарев А.В., Самаров В.Н. Особенности влияния неоднородного нестационарного температурного поля на процесс горячего изостатического прессования труб. Фундаментальные и прикладные проблемы техники и технологии. Научно - технический журнал Орел ГТУ, № 6 (284), 2010, с. 3-9.
4. Бочков А.В., Головешкин В.А., Козырев Ю.М., Пономарев А.В., Самаров В.Н. Особенности процесса уплотнения порошковых материалов в неоднородном нестационарном температурном поле. Механика композиционных материалов и конструкций. - Т.11. - №3. - 2011. - С. 401-410.
5. Друянов Б.А. Прикладная теория пластичности пористых тел. - М.: Машиностроение, 1989, 168 с.
6. Грин Р.Дж. Теория пластичности пористых тел. - 1 сб. переводов. «Механика», 1973, №4, с. 109-120.

ВЛИЯНИЕ НАНОПОЛНИТЕЛЕЙ - ФУЛЛЕРЕНОВ НА СВОЙСТВА ТЕРМОЭЛАСТОПЛАСТОВ И КАУЧУКОВ

Валиев Х.Х.², Кузина С.Е.¹, Люсова Л.Р.¹, Снегирева Н.С.³

¹ФГБОУ ВПО Московский государственный университет тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, г.Москва, Россия

²ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г.Москва, Россия

³АНО "Сертификационный центр "Медполимер", г.Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

Исследованы особенности свойств изопрен - и бутадиен - стирольных термоэластопластов и влияния фуллеренов на адгезионные и физико-механические характеристики блок - сополимеров и каучуков в адгезионных композитах. Установлена корреляция изменения этих свойств с данными атомно – силовой микроскопии по агрегации компонент и структуре поверхности пленок таких композиционных материалов.

Ключевые слова: фуллерены; термоэластопласты и каучуки; физико – механические свойства; агрегация, атомно – силовая микроскопия

ВВЕДЕНИЕ

Термоэластопласты (ТЭП) – это полимерные материалы, сочетающие свойства сшитых каучуков в условиях эксплуатации со свойствами термопластов при температуре переработки [1]. Основным преимуществом применения ТЭП является возможность переработки композиций на их основе по технологии пластмасс, характеризующейся отсутствием стадии вулканизации.

Для технологии изготовления эластомерных композиционных материалов и придания им новых свойств наиболее перспективным в настоящее время являются нанополнители с новой организацией структуры углерода – фуллерены. Одним из основных типов эластомерных композитов являются синтетические клеи. В связи с этим возникает необходимость разработки новых составов или доработки уже существующих. Поэтому становится актуальным изучение воздействия новых нанополнителей на свойства клеевых композиций.

В данной работе изучалось влияние фуллеренов на физико-механические и адгезионные свойства ТЭП и каучуков. Молекулы фуллеренов, в которых атомы углерода связаны между собой как одинарными, так и двойными связями, являются трехмерными аналогами ароматических структур. Обладая высокой электроотрицательностью, они выступают в химических реакциях как сильные окислители. Присоединяя к себе радикалы различной природы, фуллерены способны образовывать широкий класс химических соединений, обладающих различными свойствами, что может существенно сказаться на физико-химических характеристиках исследуемых композитов.

1. ОБЪЕКТЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

В работе в качестве объектов исследования были выбраны бутадиен- (изопрен)-стирольные термоэластопласты импортных марок Kraton D-1102, Kraton D-1161 широко представленных на отечественном рынке. Основные свойства данных ТЭП представлены в табл.1.

Таблица 1.

Основные свойства ТЭП Kraton D-1102 и Kraton D-1161 [1].

Марка ТЭП	Структура	Содержа-ние стирола, %масс.	Твёрдость по Шору А, усл. ед., не более	Относительн ое удлинение при разрыве, % не менее	Условная прочность при растяжении, МПа, не менее
Kraton D1161 (США)	СИС, Линейный	15	32	1300	3,5
Kraton D1102 (США)	СБС линейный	29	70	880	33

Изучены два типа клеевых композиций:

- 1) Растворы бутадиен- (изопрен)- стирольных ТЭП 15%-ой концентрации в толуоле
- 2) Клеевые растворы бутадиен- (изопрен)- стирольных ТЭП, представляющие собой 15%-ые растворы ТЭП с фуллеренами в толуоле.

Также были изучены растворы изопренового каучука типа СКИ-3 с высоким содержанием цис-1,4-звеньев, полученного на комплексном титановом катализаторе. СКИ-3. Основные характеристики этого каучука представлены в табл.2.

Таблица 2.

Характеристики изопренового каучука марки СКИ-3 [2-3].

Характеристика	Ед. измерения	СКИ-3
Пластичность	-	0,30 ÷ 0,41
Вязкость по Муни МБ1+4 (100 °С)	-	65 ÷ 85
Условная прочность при растяжении (23 °С)	МПа, не менее	30,4
Относительное удлинение при разрыве	%, не менее	800
Массовая доля золы	%, не более	0,5

Дополнительно были изучены растворы двух марок бутадиен-стирольных каучуков: СКМС-30АРКМ-15 и ДССК-2560. ДССК-2560 - бутадиен-стирольный каучук статистический с высоким содержанием 1,2-звеньев и содержанием 1,4 транс-звеньев не менее 14%. Основные характеристики изученных бутадиен-стирольных каучуков представлены в табл.3.

Таблица 3.

Основные свойства исследованных бутадиен-стирольных каучуков [2 - 3].

	ДССК-2560 растворный	СКМС-30АРКМ-15 эмульсионный
Вязкость по Муни МБ (1+4) 100°С , усл.ед	60 ÷ 70	42 ÷ 51
Массовая доля связанного стирола (α-метилстирола), %	25 ± 2	25 ± 1,5
Массовая доля масла , %	-	14÷17
Массовая доля летучих веществ, %, не более	1	0,6
Массовая доля золы, %, не более	0,3	0,6
Условная прочность при растяжении (23 °С), МПа, не менее	18	21
Относительное удлинение при разрыве, %, не менее	360	400 ÷ 650

В качестве растворителя использовался толуол. Представителями углеродных нанонаполнителей являлись фуллерены [4]. Использованные фуллерены представляли собой смесь фуллеренов состава C_{50} – C_{58} (14,69%), C_{60} (63,12%), C_{62} – C_{68} (5,58%), C_{70} (13,25%), C_{72} – C_{92} (3,06%). Эта смесь хорошо совмещается с большинством полимеров. Дозировка для модификации полимеров 0,01-0,015%. Растворителем фуллеренов являлся толуол.

В качестве субстратов для изучения адгезионных свойств композиций на основе Kraton D-1102, Kraton D-1161 и каучуков: СКМС-30АРКМ-15, ДССК-2560, СКИ-3 применяли резину бутадиен-нитрильного каучука БНКС-40 (табл. 4).

Таблица 4.

Физико-механические свойства резины БНКС-40[2-3].

Условная прочность при растяжении, МПа не менее	30
Относительное удлинение, % не менее	550
Соппротивление раздиру, кН/м не менее	72

1.2. Методы исследования.

Изготовление опытных резиновых смесей и введение фуллеренов в каучуки и ТЭП осуществлялось на микросмесителе «Брабендер», концентрация фуллеренов 0,01%. Требования к изготовлению резиновых смесей на вальцах и закрытых смесителях регламентируются ГОСТ 30263-96. Свободный объем смесительной камеры - 70 см³; тип роторов – незацепляющиеся четырехлопастные; частота вращения ротора - до 80 об/мин; фрикция – 1:1.5; обогрев системы - электрический; напряжение питания - 220В. Композиции на основе ТЭП были изготовлены при температуре 180°C.

Клеевые композиции получали путём растворения исследуемых ТЭП и каучуков в растворителях. Использовался диспергатор T-18 basic Package ULTRA-TURRAX® для создания «удовлетворительного» распределения наночастиц наполнителя в сплошной фазе. Диспергатор предназначен для объемов 10 — 1.500 мл. Потребляемая мощность – 500 Вт, частота вращения насадки – 50-60 ГЦ, диаметр насадки – 13 мм, длина насадки – 175 мм.

Клеевые плёнки получали из растворных адгезионных композиций. Для этого применялась стандартная чашка Петри, установленная на ровной горизонтальной поверхности. В чашку Петри заливали определённое количество раствора, необходимое для образования плёнки толщиной 150 мкм. Затем давали растворителю улетучиться, о чём судили по отсутствию запаха и внешнему осмотру плёнки. По прошествии 3 – 4 суток с момента залива, из чашки Петри извлекали готовые плёнки и вырубали образцы – лопатки длиной и шириной рабочего участка соответственно 1,0 и 0,4 см.

Изготовление адгезионных соединений включало в себя следующие операции:

1) Подготовка субстратов к склеиванию.

Проводилась шероховка резиновых образцов на шлифовальном круге. Затем обезжиривали склеиваемые поверхности нефрасом;

2) Нанесение клея. На поверхность субстратов наносилось определённое количество клеевого раствора (необходимое для получения клеевой плёнки толщиной 100 мкм) с последующей сушкой в течение 15-20 минут (до полного высыхания).

3) Термоактивация клеевой плёнки. Термоактивация проводилась при 120 °С в течение 5 минут. В некоторых случаях для сопоставления использовали образцы с недосушкой клеевого слоя.

4) Дублирование поверхностей с последующим прессованием склейки (время и давление прессования: $\tau_{\text{прес}} = 1$ мин.; $P_{\text{прес}} = 2,5-3$ кгс/см²).

Прочность связи между слоями при расслаивании определялась по ГОСТ 6768 – 7. Сущность метода заключается в расслоении образца типа резина-резина и определении силы, необходимой для отделения двух испытуемых слоёв друг от друга. Прочность связи

(сопротивление расслаиванию) адгезионных соединений определяли спустя 24 часа после склеивания на разрывной машине с безынерционным силоизмерителем при скорости движения нижнего зажима 200 мм/мин. Прочность связи между слоями при расслоении σ_p рассчитывали по формуле:

$$\sigma_p = P_{cp} / b,$$

где P_{cp} – средняя сила расслоения H (кгс); b – ширина образца, m (см). среднюю силу расслоения вычисляли как среднее арифметическое значение не менее трёх наименьших максимальных показаний шкалы силоизмерителя.

Определение прочностных свойств пленок при растяжении проводилось по ГОСТ 270–75. Исследование физико-механических свойств пленок полимеров проводили на разрывном электромеханическом испытательном комплексе компании Instron модели 3345. Для управления комплексом использовалось программное обеспечение, разработанное компанией Instron специально для этой области применения. С помощью программного интерфейса производились установка параметров тестирования, управление системой, сбор и анализ данных, полученных в ходе испытаний. Для испытаний использовались образцы в форме лопаток с длиной и шириной рабочего участка 1,0 и 0,4 см соответственно, вырубленные из пленок штанцевым ножом на вырубном прессе. Для каждого образца предварительно замеряли толщину рабочего участка по трем точкам с помощью индикаторного толщиномера. Всего на каждый полимер было сделано по шесть образцов, испытано не менее пяти из них. Прибор непрерывно автоматически снимает зависимость напряжения от удлинения образца вплоть до разрыва.

При исследовании рельефа поверхности клеевых пленок использовался атомно-силовой микроскоп (АСМ) «EasyScan DFM» компании «Nanosurf AG», Швейцария, работающий при нормальных условиях, с дополнительным использованием моды фазового контраста в полуконтактном режиме [5]. Также использовалась активная антивибрационная система защиты микроскопа TS –150 (Fabrik am Weiher, Швейцария).

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

2.1. Физико-механические свойства термоэластопластов Kraton D-1102 и Kraton D-1161.

Важнейшим показателем, определяющим в значительной степени качество полимерного материала, являются его физико-механические свойства. Они же во многом определяют и адгезионные свойства клеевых композиций на его основе. Поэтому в первую очередь были проведены физико-механические испытания исследуемых марок ТЭП.

Из приведённых выше данных (табл.1) можно видеть, что по комплексу физико-механических свойств изучаемые типы ТЭП существенно отличаются друг от друга. По условной прочности и твёрдости изопрен-стирольные ТЭП уступают бутадиен-стирольным; по относительному удлинению наблюдается обратная зависимость.

Поскольку, объектами исследования являются растворные композиции на основе ТЭП, то необходимо было изучить их свойства на плёнках, полученных из раствора. Плёнки были получены на чашках Петри путём испарения 15%-ых растворов полимера в толуоле. Результаты физико-механических испытаний плёнок представлены на рис.1. Были получены значения условной прочности, вполне соответствующие паспортным данным для этих марок ТЭП.

Наиболее прочными оказались плёнки из термоэластопласта марки Kraton D1102. Его показатель условной прочности при растяжении в пять раз превышает значение для термоэластопласта марки Kraton D1161, содержащий в своём составе 15 % стирола. Таким образом, явно прослеживается зависимость свойств диен-стирольных ТЭП от количества

стирольных звеньев. Если содержание их меньше 15%, то расслоение не происходит и блок-сополимер не обладает свойствами ТЭП. Оптимальное содержание стирола – 25-30%.

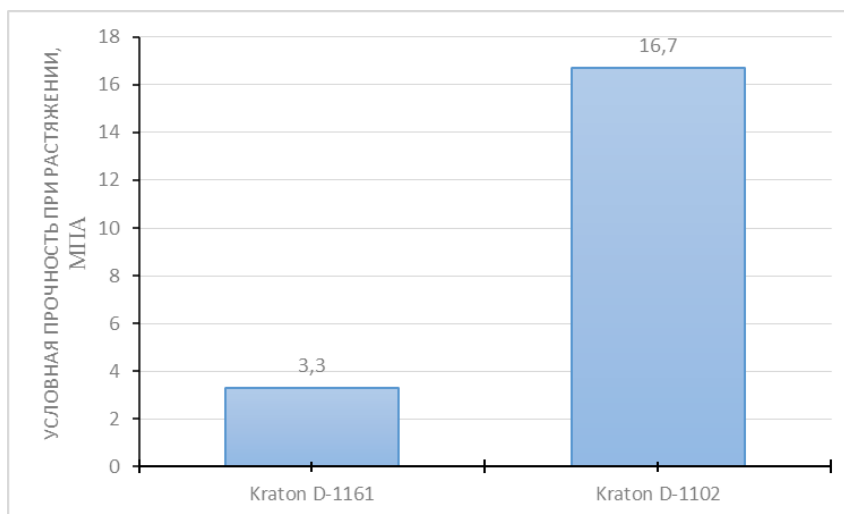


Рис.1. Условная прочность при растяжении пленок, полученных из раствора бутадиен- и изопрен-стирольных ТЭП.

Для исследуемых марок бутадиен- и изопрен-стирольных ТЭП была получена зависимость «напряжение - деформация» (рис.2).

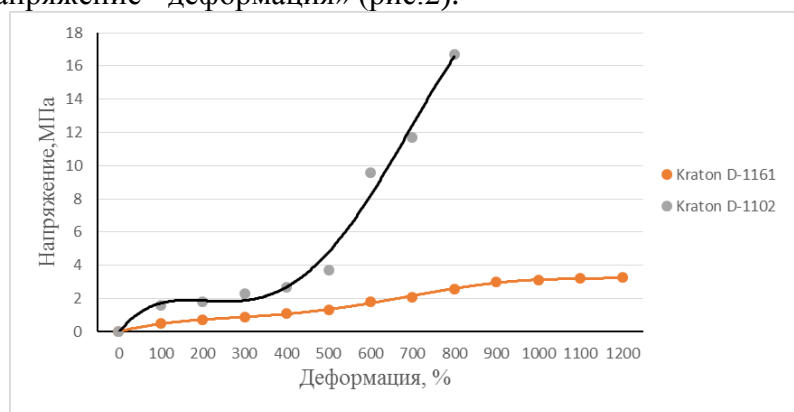


Рис.2. Зависимость «напряжение-деформация» плёнок бутадиен- и изопрен-стирольных ТЭП, полученных из раствора.

Для образца Kraton D1102 были получены типичные кривые напряжение-деформация пространственно-сшитого полимера (рис. 2), обладающего эластичностью. На начальном участке кривой напряжение довольно резко возрастает вследствие сопротивления узлов флуктуационной сетки, которые не успевают распадаться. Это практически область линейной упругости. При дальнейшем росте деформации напряжение растёт медленнее, что обусловлено началом интенсивного распада узлов флуктуационной сетки под действием всё возрастающего напряжения. Распад флуктуационной сетки облегчает перемещение сегментов, которые ориентируются в направлении растяжения. Ориентация макромолекул при деформации приводит к интенсивному росту напряжений. Если полимер построен из стереорегулярных макромолекул, то на последнем участке кривой напряжение-деформация происходит кристаллизация эластомера и в этом случае напряжение возрастает очень резко. Кривая заканчивается точкой, в которой происходит разрыв образца.

Отличие вида кривых для Kraton D-1102 и Kraton D-1161 скорее всего связано с тем, что бутадиен-стирольные термоэластопласты обладают более упорядоченной

структурой, в них больше эффект усиления, а, следовательно и рост прочности. В изопрен-стирольных термоэластопластах метильные звенья мешают образованию регулярной структуры, то есть присутствуют стерические затруднения.

2.2. Адгезионные свойства Kraton D-1102 и Kraton D-1161.

В настоящее время в литературе имеется довольно много сведений о структуре и физико-механических свойствах блок-сополимеров, в то время как сведения об адгезионных и аутогезионных свойствах таких композитов не столь обширны.

В данной работе была предпринята изучение адгезионных свойств ТЭП на модельных клеях, представляющих собой 15%-ые растворы двух марок изопрен-и бутадиен-стирольных (Kraton D1161 и Kraton D1102) ТЭП в толуоле. В качестве субстрата была использована резина на основе бутадиен-нитрильного каучука марки БНКС-40. Результаты определения прочности связи адгезионного соединения в зависимости от времени выдержки образцов приведены на рис. 3.

Можно видеть, что система, содержащая бутадиен-стирольный термоэластопласт марки Kraton D1102, обеспечивает большую прочность связи, чем система, содержащая изопрен-стирольный термоэластопласт марки Kraton D-1161. Наглядно подтверждаются литературные данные о том, что с повышением содержания стирола прочность связи увеличивается. По-видимому, это происходит благодаря наибольшему количеству активных центров, способных осуществлять контакт с полистирольным субстратом.

Упорядоченная структура ТЭП Kraton D1102 обеспечивает его хорошие адгезионные свойства не только благодаря высокой деформационной составляющей. Чем более упорядочена макромолекулярная цепь, тем меньшую энергию она имеет, и тем легче с ней будет взаимодействовать субстрат, то есть такая система обеспечивает лучшее смачивание.

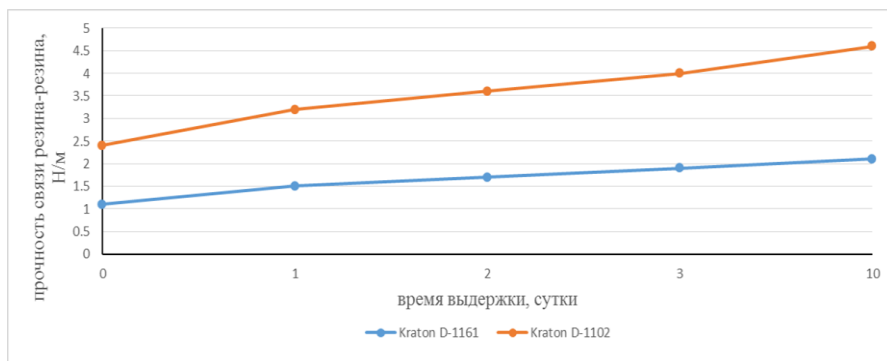


Рис.3. Зависимость прочности связи от времени выдержки.

С течением времени после склеивания макромолекулы двух слоев Kraton D-1102 и Kraton D-1161 успевают продиффундировать друг в друга, и прочность связи возрастает, как видно из рис.3.

2.3. Исследование адгезионных, физико-механических и структурных свойств композитов, наполненных фуллеренами.

Целью введения фуллеренов в адгезионные композиции на основе ТЭП (Kraton D-1161 и Kraton D-1102) и каучуков (СКИ-3, ДССК-2560 и СКМС-30АРКМ-15) являлось исследование их влияния на свойства, полученных из раствора материалов.

Физико-механические свойства бутадиен-и изопрен-стирольных блок – сополимеров представлены на рис.4. Из приведенных результатов видно, что ненаполненные ТЭП обладают большими прочностными характеристиками, введение фуллеренов понижает значения напряжения при заданной деформации, что подтверждает факт увеличения

степени аморфности. При этом эффект «самоусиления» ТЭП снижается, поскольку основной вклад в прочностные характеристики вносят домены стирола – кристаллическая фаза. Увеличение степени аморфности и возможное образование локальных агрегатов стирола может отрицательно влиять на прочностные свойства пленок, полученных из систем Kraton D1161 и Kraton D1102.

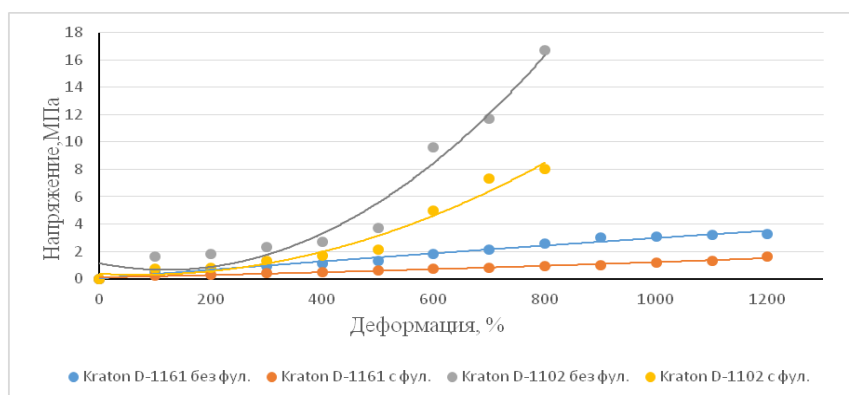


Рис.4. Влияние фуллеренов на прочностные свойства систем на основе бутадиен- и изопрен-стирольных ТЭП.

Для сравнения были также изучены физико-механические свойства исходных и наполненных фуллеренами каучуков ДССК и СКМС-30АРКМ-15. На рис.5 представлены физико-механические свойства некоторых композитов, полученных из ДССК и СКМС-30АРКМ-15.

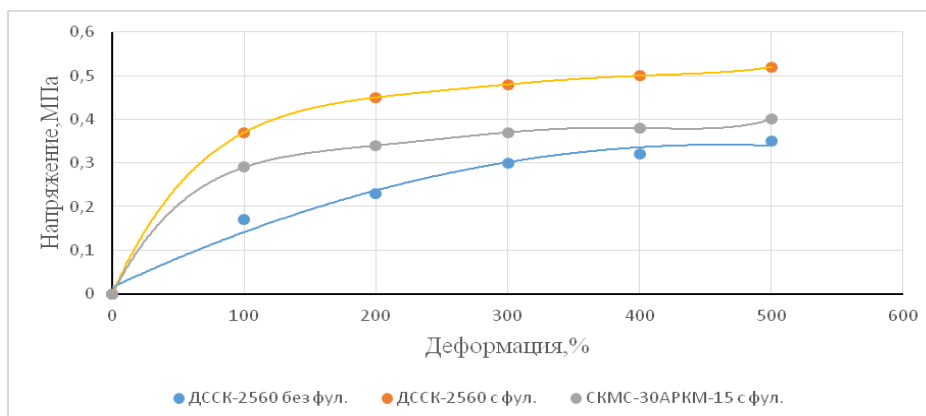


Рис.5. Влияние фуллеренов на прочностные свойства систем на основе каучуков.

Из приведенных данных видно, что образцы, наполненные фуллеренами, имеют лучшие физико-механические свойства. Можно полагать, что это происходит вследствие того, что под действием фуллеренов, бутадиен-стирольные каучуки начинают кристаллизоваться. Вместе с тем можно было бы ожидать больших эффектов усиления этих композитов под влиянием нанонаполнителей.

Дополнительно были изучены адгезионные свойства растворных композиций, модифицированных фуллеренами (рис. 6). Установлено, что фуллерены сильно понижают адгезионные свойства Kraton D-1161 и Kraton D-1102. Это можно объяснить тем, что под действием фуллеренов полистирольные домены ТЭП уменьшают взаимодействие друг с другом и с каучуковой матрицей, уменьшая прочность связи в композите, благоприятствующем агрегации. У каучуков при модификации их фуллеренами происходит небольшое изменение адгезионных свойств.

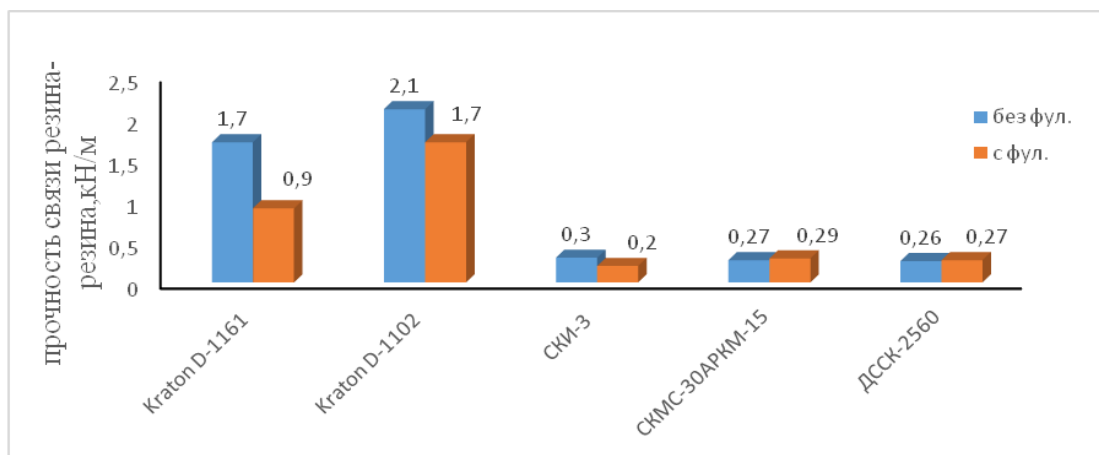


Рис.6. Влияние фуллеренов на прочность связи растворных композиций на основе ТЭП и каучуков.

2.4. Атомно – силовая микроскопия поверхности композитных клеевых пленок

На всех представленных АСМ снимках слева приведено изображение топографии исследуемых образцов, а справа – фазовый контраст этих же образцов.

Прежде всего с помощью АСМ были изучены топография и фазовый контраст фуллеренов, высаженных из суспензии в толуоле на поверхность атомно-гладкой подложки при разном увеличении. В качестве подложки использовался высокоориентированный пиролитический графит (ВОПГ) производства NTM-DT (Зеленоград, Россия). Установленный из снимков средний размер агрегатов фуллеренов составляет порядка 1 мкм. (рис.7). Таким образом, установлена сильная тенденция наночастиц фуллеренов к агрегации при осаждении из толуола. В связи с этим крайне необходимо при изготовлении композиционных материалов использовать различные типы диспергаторов для предотвращения образования больших фуллереновых агрегатов, что было учтено при изготовлении исследованных образцов.

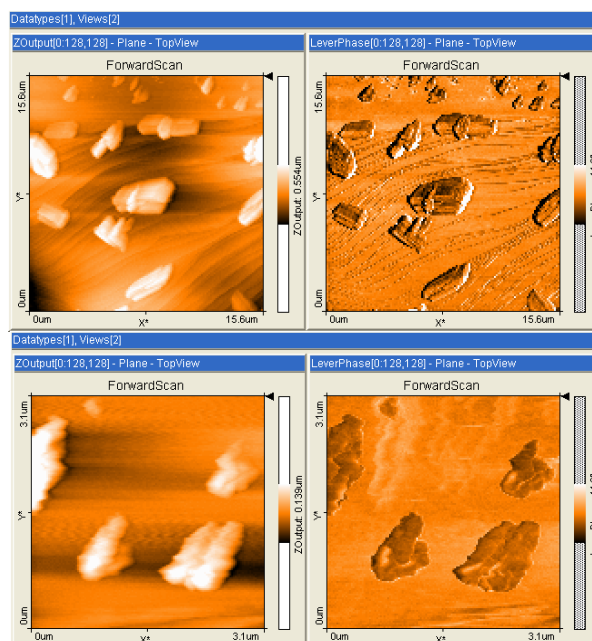


Рис.7. АСМ снимки исходных фуллеренов, высаженных из суспензии в толуоле на поверхность высокоориентированного пиролитического графита. Сканы 15.6 x 15.6 сверху и 3.1 x 3.1 мкм² снизу. Слева-топография, справа-фазовый контраст.

На снимках АСМ рис.8 видно изменение структуры поверхности изопрен-стирольного ТЭП Kraton Д 1161 под действием фуллеренов - нанонаполнителей, заключающиеся в существенном увеличении агрегации и изменении формы полистирольных блоков, что может быть связано с увеличением разупорядоченности структуры, предполагавшейся при исследовании физико-механических свойств (рис.6). Аналогичное изменение структуры поверхности наблюдается и в бутадиен-стирольном ТЭП Kraton Д 1102 (рис.9).

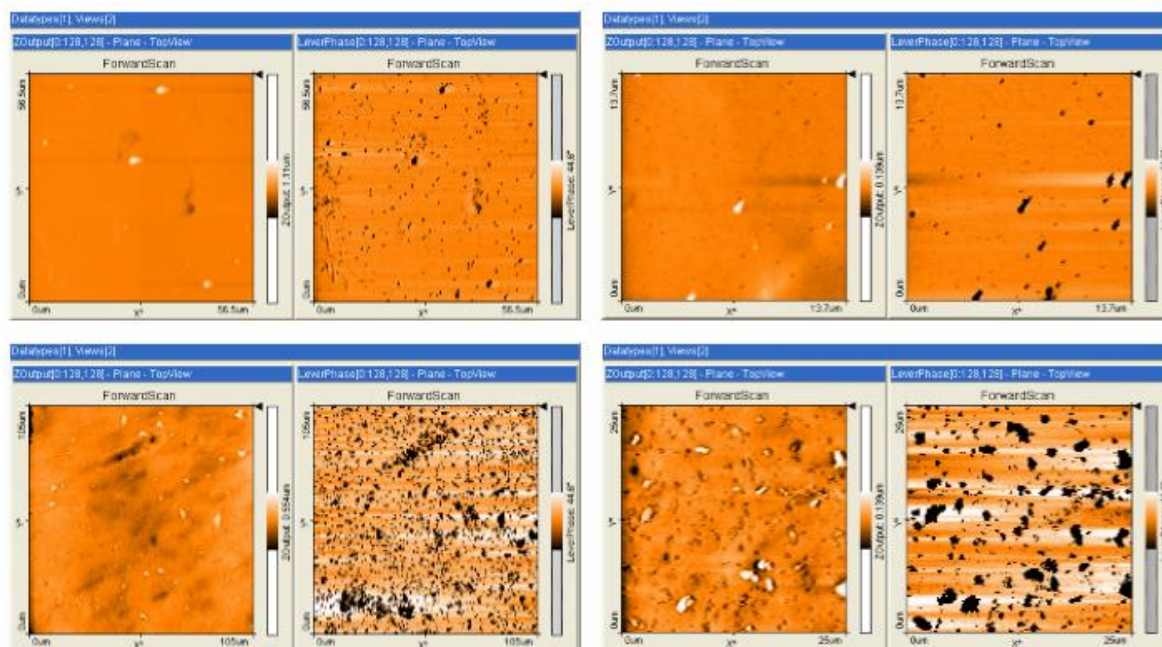


Рис.8. АСМ снимки Kraton Д 1161. На снимках сверху - исходный термоэластопласт. Сканы 56.5 x 56.5 и 13.7 x 13.7 мкм²; на снимках снизу – термоэластопласт, наполненный фуллеренами. Сканы 105 x 105 и 25 x 25 мкм²;слева - топография, справа - фазовый контраст.

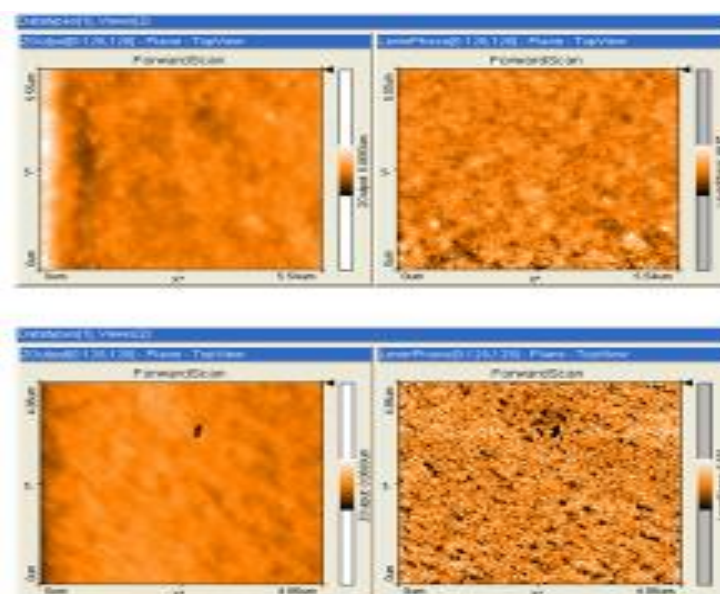


Рис.9. АСМ снимки Kraton Д 1102;сверху - исходный термоэластопласт, скан 5.54 x 5.54 мкм²;снизу – термоэластопласт, наполненный фуллеренами, скан 4.86 x 4.86 мкм²;слева - топография, справа - фазовый контраст.

Исследование структуры поверхности ДССК-2560 (рис.10) визуализирует характерное изменение фазового контраста образцов с фуллереном по сравнению с исходными образцами, детектирующее аналогичную значительную агрегацию стирольных звеньев в бутадиеновой матрице. Это коррелирует с полученными ранее данными по физико-механическим и адгезионным свойствам композитов на основе ДССК-2560.

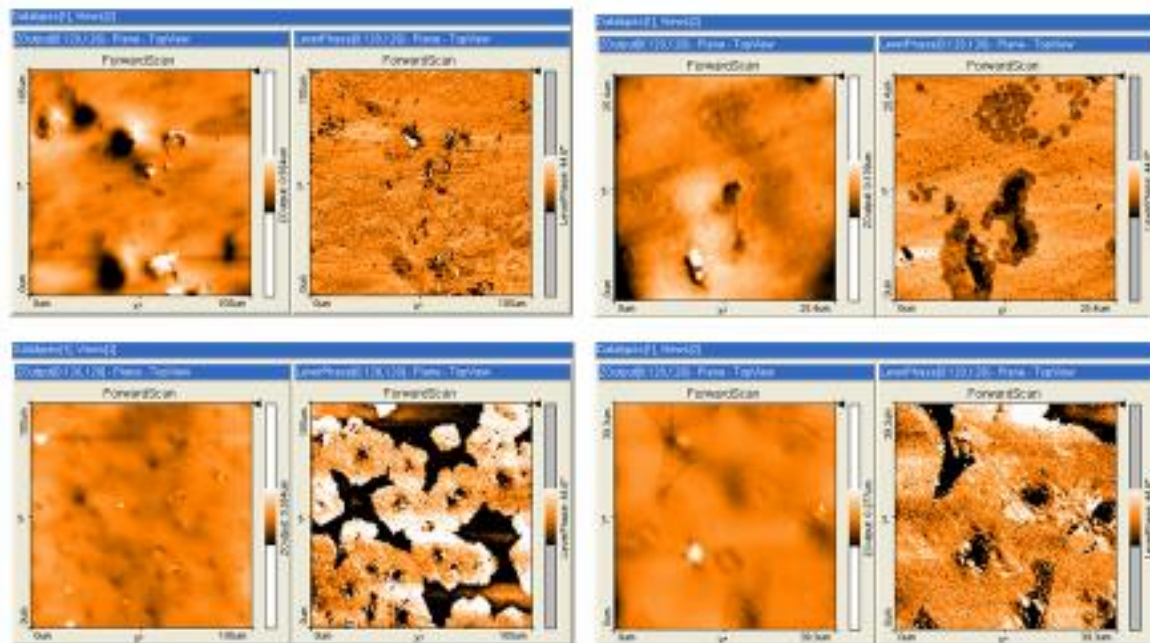


Рис.10. АСМ снимки ДССК-2560. Верхние снимки - исходный полимер. Сканы $105 \times 105 \text{ мкм}^2$ и $25.4 \times 25.4 \text{ мкм}^2$. Нижние снимки – полимер, наполненный фуллеренами. Сканы $105 \times 105 \text{ мкм}^2$ и $39.3 \times 39.3 \text{ мкм}^2$, слева - топография, справа - фазовый контраст.

На АСМ снимках исходного каучука СКИ-3 (рис.11), визуализируется структура поверхности, характеризующаяся наличием микро и нанопор.

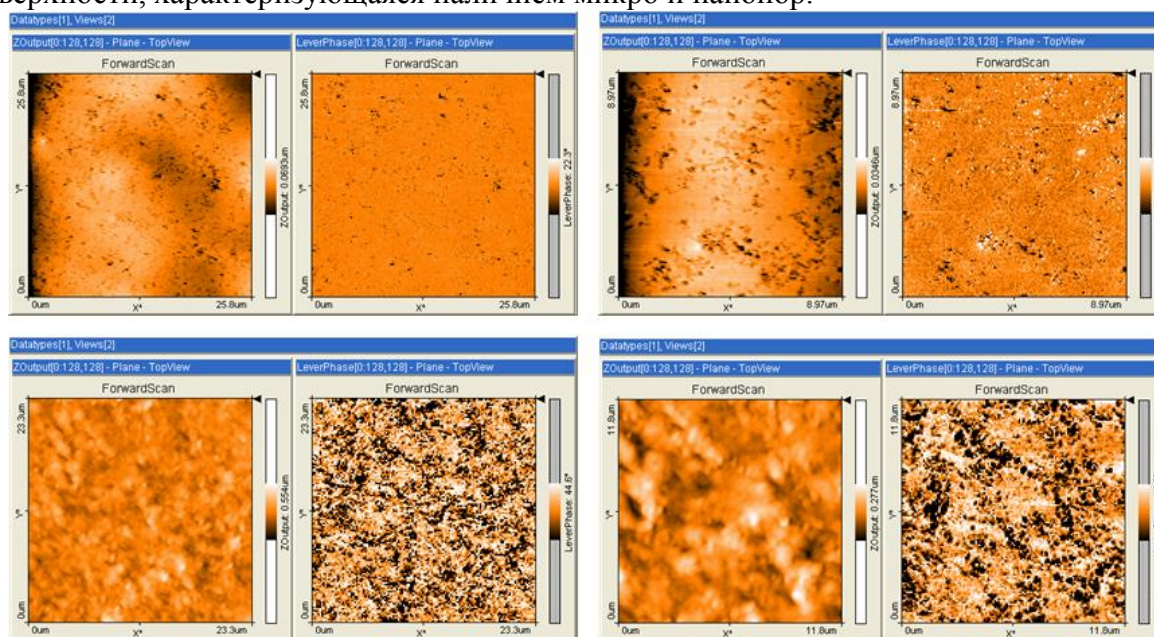


Рис.11. АСМ снимки СКИ-3. На верхних снимках - исходный полимер. Сканы 25.8×25.8 и $8.97 \times 8.97 \text{ мкм}^2$. На нижних снимках – полимер, наполненный фуллеренами.

Сканы 23.3 x 23.3 и 11.8 x 11.8 мкм²; слева - топография, справа - фазовый контраст.

На снимках СКИ-3, модифицированного фуллеренами (рис.11), наблюдается существенное изменение морфологии структуры пор, характеризующееся агрегацией микро и нанопор, что также объясняет снижение адгезионных характеристик этих образцов, полученных выше. На АСМ снимках модифицированного фуллеренами каучука СКМС-30АРКМ-15 (рис.12) наблюдается характерное изменение морфологии структуры стирольных звеньев в бутадиеновой матрице, характеризующееся слабым ориентационным упорядочением. Это объясняет некоторое возрастание адгезионных и физико-механических свойств исследуемых композитов. Вместе с тем также наблюдаемая на снимках АСМ определенная агрегация стирольных звеньев позволяет считать, что можно ожидать еще более существенного усиления прочностных свойств этих композитов при уменьшении таких агрегационных взаимодействий.

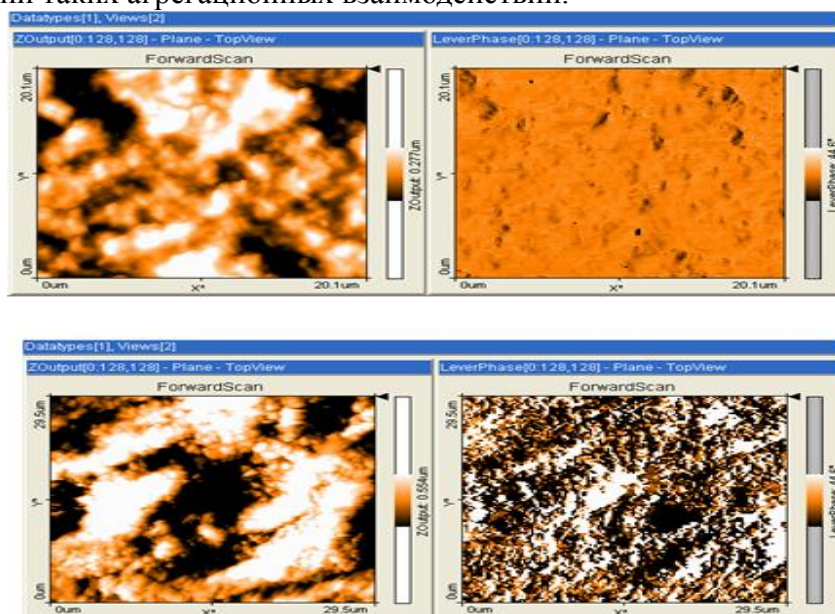


Рис.12. АСМ снимки СКМС – 30АРКМ - 15 сверху - исходный полимер. Скан 20.1 x 20.1 мкм²; снизу – полимер наполненный фуллеренами. Скан 29.5 x 29.5 мкм²; слева - топография, справа - фазовый контраст.

Все эти экспериментальные данные для термоэластопластов и каучуков, наполненных фуллеренами, можно рассматривать как следствие особой электронной структуры этих нанонаполнителей. Высокая электроотрицательность фуллеренов даже при малых используемых концентрациях существенно модифицирует структуру компонент эластомеров, значительно усиливая агрегационные тенденции, что приводит к заметным изменениям свойств материалов.

Благодаря проведенному исследованию структуры поверхности полученных композитов с помощью АСМ оказывается возможным понять причины характера поведения физико-механических и адгезионных свойств изученных образцов, как связанных существенным образом с тенденцией к агрегации составных компонент этих материалов, индуцированных введением фуллеренов.

ВЫВОДЫ

1. Комплексные исследования эластомерных композиционных материалов, модифицированных наноразмерными фуллеренами, включающими методы изучения физико-механических и адгезионных свойств, а также атомно-силовую микроскопию, установили корреляцию между структурой микро поверхности и макроскопическими свойствами исследованных образцов.

2. Установлены различия в условной прочности плёнок, полученных из растворов на основе изучаемых ТЭП. Наибольшей прочностью обладают плёнки на основе бутадиен-стирольных блок - сополимеров, причём, лучший результат показали плёнки из термоэластопластов марки Kraton D1102.
3. Изучение адгезионных свойств винилароматических термоэластопластов марок Kraton D-1102 и Kraton D-1161 показали существенные отличия между ними, что обусловлено различной химической природой блок-сополимеров.
4. Использование АСМ позволило установить характерную тенденцию нанонаполнителей - фуллеренов к агрегации при осаждении из растворов с толуолом.
5. Анализ полученных результатов выявил взаимосвязь особенностей электронной структуры фуллереновых нанонаполнителей с закономерностями агрегации компонент эластомеров в исследованных композитах

ЛИТЕРАТУРА

1. Холден Д., Крихельдорф Х.Р., Куирк Р.П. Термоэластопласты, СПб, ЦОП «Профессия», 2011, 720 с.
2. Соболев В. М., Бородин И. В. Промышленные синтетические каучуки, М., 1977, 392 с.
2. Гришин, Б.С. Материалы резиновой промышленности (информационно-аналитическая база данных): Казань: КГТУ, 2010, 506 с.
3. Игуменова Т.И., Клейменова Н.Л., Акатов Е.С., Попов Г.В. Применение фуллеренсодержащего технического углерода для модификации свойств полиэтилена // Вестник ТГТУ, 2011, Том 17, № 4, с.1071 – 1976.
4. Valiev H.H., Zhogin V.A., Karnet Yu.N., et all Studies on surface structure of polimer membranes – biosensor carries with dynamic force microscopy // Journal of Physics: Conference Series. 2007. T. 61. № 1. p. 384-388.
5. Yanovsky Yu.G., Valiev H.H., Kornev Yu.V. et all // The role of the scale factor in estimation of the mechanical properties of composite materials with nanofillers.// Int. Journal of Nanomech. Sci. and Techn., Vol.1(3), p. 187 – 210 (2010)
6. Yanovsky Yu.G., Nikitina E.A., Karnet Yu.N., Valiev Kh.Kh., Yumashev O.B., Semenov N.A. Quantum mechanics simulation and experimental study of adhesive interaction and aggregation of carbon-silicate nanoparticles—reinforcing fillers of polymer composites //Physical Mesomechanics 2014, Vol. 17, Issue 1, p. 39 - 49

УТОЧНЕНИЕ МОДЕЛИ СНИЖЕНИЯ НАКИПИ ПРИ МАГНИТНОЙ ОБРАБОТКЕ ВОДЫ

Кошоридзе С.И., Левин Ю.К.

ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г.Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

Как известно, для борьбы с накипеобразованием используют обработку водного потока магнитным полем, что просто реализуется и экономично в эксплуатации.

В данной работе популярно поясняется механизм противонакипного действия магнитного поля, основанный том, что запускным импульсом противонакипного процесса является деформация двойного электрического слоя (ДЭС) коллоидных частиц силами Лоренца, согласно гипотезе Гамаюнова Н.И., в омагниченном водном потоке, пересыщенном солями накипи.

1. ИСХОДНАЯ ТЕОРИЯ ДЛФО

С появлением накипи знакомы практически все. Серый налет внутри кастрюль и чайников всегда нервировал аккуратных хозяек, которые пытались очищать посуду даже с помощью пепси-колы. Еще больше неприятностей причиняет накипь в теплоэнергетике. Здесь каждый миллиметр осадка на стенке нагревательного котла снижает мощность нагрева на 5-10 %. В общемировых масштабах годовой ущерб составляет многие миллиарды долларов.

В 1936 году бельгийский инженер Т.И.С. Вермейрен обнаружил, что при нагревании воды, пересекающей силовые линии магнитного поля, на теплообменной поверхности не образуется накипь (отложение, инкрустация). Первый в мире патент на аппарат магнитной обработки воды был выдан Т.И.С. Вермейрену 01.10.1946 г.

С тех пор началось активное применение магнитных полей для обработки жидкостей не только в теплоэнергетике, но и в самых различных областях. Вот малая часть известных примеров. В сельском хозяйстве орошение омагниченной водой повышает урожайность, магнитный браслет на запястье улучшает капиллярное кровоснабжение, магнитные чайные кружки помогают обходиться без литотрипсии, с омагниченной водой повышается нефтеотдача пластов и отмечается много других полезных свойств. Однако долгое время наука не могла понять причины проявления всех этих эффектов, поскольку вода не обладает магнитными свойствами. Вместе с тем необходимая для разгадки этой тайны информация начинала появляться. Так в 1948 году в Амстердаме была опубликована монография Фервея и Овербека, где с учетом трудов Дерягина и Ландау (1938-1941 гг) была представлена теория стабильности лиофобных коллоидов, называемая ДЛФО - по именам авторов [1]. Согласно теории ДЛФО в воде коллоидные частицы, в целом нейтральные, несут на себе электрические заряды - окружены двойным электрическим слоем (ДЭС).

На рис.1 показано, что центральное ядро 1 коллоидной частицы окружено плотным слоем 2 положительных зарядов, именуемым слоем Штерна. Поле слоя Штерна удерживает вокруг коллоидной частицы компенсирующий слой отрицательных зарядов, «противоионов» – диффузный слой 3. Эти противоионы взвешены в воде, притягиваются к слою Штерна им мешает энергия теплового движения kT и молекулы-диполи воды, окружающие ядро этой частицы.

Коллоидные частицы в растворе взаимодействуют друг с другом, причем силы кулоновского отталкивания зарядами диффузного слоя преобладают над силами молекулярного притяжения, чем обеспечивается устойчивость коллоидного раствора, согласно теории ДЛФО.

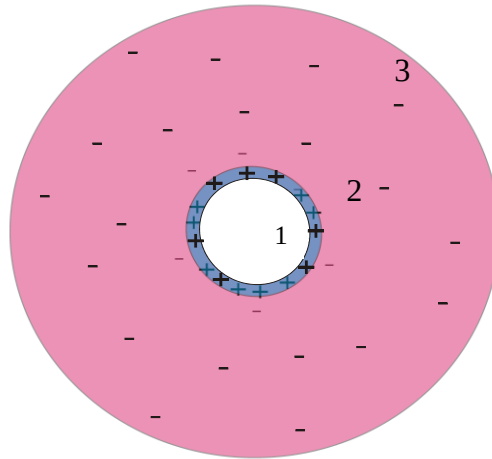


Рис.1. Строение коллоидной частицы

На основе этой теории Гамаюнов Н.И. пояснил механизм воздействия магнитного поля на водный поток [2]. Он показал, что магнитное поле уменьшает толщину двойного электрического слоя (ДЭС) на величину ΔX - сжимает заряженную оболочку вокруг коллоидных частиц за счет сил Лоренца, как показано на рис.2. Это вызывает коагуляцию коллоидных частиц.

Для проведения численных оценок мы обратились к эксперименту, проведенному коллективом польских ученых (г. Краков) на крупномасштабной ТЭЦ в 1985-1990гг, где было зафиксировано снижение накипи в 30 раз [3].

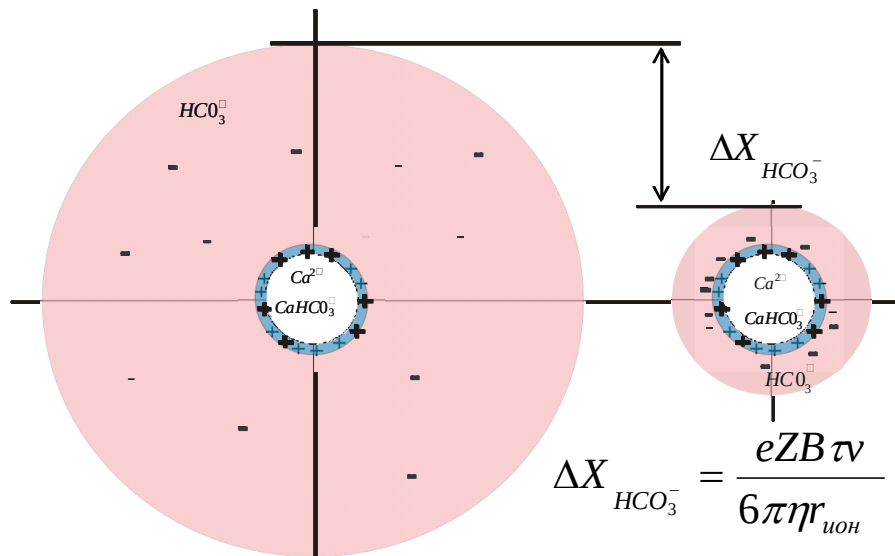


Рис.2. Уменьшение толщины двойного электрического слоя коллоидной частицы в магнитном поле, где e - элементарный заряд.

Таким образом, в дальнейшем численные оценки будут проводиться при условиях краковского эксперимента

$$Z=1, \eta=10^{-3} \text{ кг/(м·с)}, T=300\text{K}, \tau=0.1 \text{ с}, B\nu\tau \approx 0.25 \frac{B \cdot c}{m}, r_{ион}=0.4 \text{ нм},$$

где Z - степень ионизации гидрокарбоната HCO_3^- ,

η - динамическая вязкость воды при температуре T ,

τ - время нахождения воды в магнитном поле,

B и v - магнитная индукция и скорость воды внутри магнитного аппарата, соответственно, $r_{\text{ион}}$ - ионный радиус гидратированного иона HCO_3^- .

Расчеты [4], проведенные при вышеозначенных условиях, подтверждают, что при уменьшенной толщине ДЭС кулоновское отталкивание «побеждается» силами молекулярного притяжения и коллоидный раствор теряет стабильность – в нем начинается коагуляция. Итак, Гамаюнову Н.И. удалось, на основе теории ДЛФО, пояснить возможность эффективного воздействия магнитных полей на физико-химические процессы в водном потоке. Далее, создавая нашу модель [4-8], мы просто постарались выявить цепочку процессов, происходящих в пересыщенном водном потоке.

2. ФИЗИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ, ПРИВОДЯЩИЕ К СНИЖЕНИЮ НАКИПИ ПРИ ОМАГНИЧИВАНИИ ВОДНОГО ПОТОКА

Понятно, что механизм магнитной обработки в целом – многозвенный и первым звеном оказалась утрата стабильности коллоидного раствора. Проследим далее цепочку процессов в пересыщенном растворе.

Отметим, что коагуляция, в первую очередь, изменила судьбу критических зародышей. По определению, эти зародыши в пересыщенном растворе сохраняют свои размеры, т.к. для них вероятности сорбции и десорбции одинаковы. Но при коагуляции они увеличились в размере и перестали быть критическими. Для них раствор становится пересыщенным и на их поверхности начинается кристаллизация молекул солей накипи из водного потока. Следует отметить, что после коагуляции поведение раствора резко меняется – уже после первого столкновения пересыщение $f(k)$ изменяется от нулевого значения (для критических зародышей $k=1$) до $f(k) = 8.4$ - для частицы удвоенной массы [7].

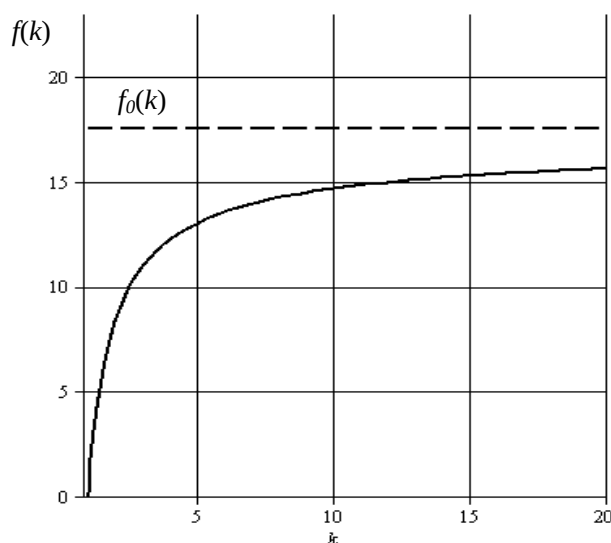


Рис.3. Зависимость пересыщения раствора от массы k частиц.

С этого момента кристаллизация растворенной соли происходит не только на теплообменнике, как до магнитного воздействия, но и на поверхности взвешенных в водном потоке агрегатов. Таким образом, поток массопереноса накипеобразующего вещества переключается на взвесь. Это является одной из составляющих противонакипного эффекта.

При этом равновесная концентрация критических зародышей, которая однозначно определяется термодинамическими характеристиками раствора (температурой T , пересыщением), должна быть неизменной [9]. Поэтому уменьшение концентрации критических зародышей до значения n_1 в ходе коагуляции сопровождается восполнением

их концентрации до равновесного значения n_0 за счет гомогенной нуклеации новых частиц с интенсивностью, которую можно назвать увеличением концентрации частиц за счет гомогенной нуклеации в объеме пересыщенного раствора и оценить выражением

$$K_1 = n_0/n_1$$

Указанное увеличение концентрации частиц за время t определяется выражением

$$K_1 = \left(1 + \frac{t}{\tau_0}\right)^2 > 10^2$$

$$\text{где } \tau_0 = \frac{3\eta W}{4k_B T n_0}$$

$W=1$ - вероятность коагуляции при столкновении частиц, появившихся при гомогенной генерации без ДЭС

$$k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{Дж}}{\text{К}}$$

Появление новых зародышей увеличивает поверхность взвеси и также вносит вклад в противонакипный эффект.

Следует также учесть, что равновесная концентрация критических зародышей связана с их размерами, рассчитывается через вероятность их гомогенной генерации, с учетом константы Толмена δ , характеризующей межфазный слой [10]. Действительно, формирование наноразмерного зародыша определяется эффективным значением поверхностного натяжения кристалл/жидкость σ_{eff} , которое зависит от δ и в несколько раз меньше значения σ для макроразмерного кристалла. Учет константы Толмена на несколько порядков увеличивает концентрацию критических зародышей и самым существенным образом влияет на снижение накипи [8].

Очевидно, что противонакипный эффект связан с процессами массопереноса накипи на трубу и взвесь, различием которых ранее неоправданно пренебрегали. В данной работе этот недостаток устранен - проведена количественная оценка эффекта с учетом специфики массопереноса молекул CaCO_3 на теплообменник и взвесь.

В работе [11] показано, что значение коэффициента β_1 – массопереноса на поверхность стенки теплообменника $\left(\frac{M}{c}\right)$ зависит от гидродинамических характеристик турбулентного потока в круглой трубе и описывается выражением

$$\beta_1 = 0.023 \text{Re}^{-0.2} \text{Pr}^{-2/3} u \quad (1)$$

Здесь Re и Pr - числа Рейнольдса и Прандтля, а u – скорость водного потока в трубе.

Следует отметить, что обычно принимаемое условие равенства коэффициентов массопереноса на стенку и взвесь при дополнительном анализе оказалось неверным. Действительно, процесс осаждения накипи на взвесь не связан с гидродинамикой, поскольку частицы взвеси переносятся вместе с потоком жидкости. Соответственно, массообмен протекает за счет молекулярной диффузии, и эквивалентен массопереносу на твердую сферу в неподвижной среде. В соответствии с [12],

$$\beta_2 = \frac{D}{r_{cr}} \quad (2)$$

D – коэффициент диффузии молекул CaCO_3 в воде.

Полученная оценка $\beta_2/\beta_1 = 7 \cdot 10^4$ соответствует условиям эксперимента [9]

$$C_0 = 0.14 \text{ моль/м}^3 - \text{равновесная молярная концентрация кальцита в воде, } M = 0.1 \frac{\text{кг}}{\text{моль}} -$$

молярная масса CaCO_3 , $\rho = 2711 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ - плотность твердой фазы, R - универсальная газовая постоянная, $\sigma_{s.l.}$ - поверхностное натяжение на плоской границе твердая фаза/жидкость.

Отсюда следует важный вывод, что коренное различие процессов массопереноса солей накипи на поверхность взвеси и на стенки теплообменника приводит к повышенной вероятности кристаллизации солей жесткости на взвешенных кристаллах водного потока, а не на стенке теплообменника, что также дает существенный вклад в противонакипный эффект магнитной обработки.

3. РАСЧЕТ ПРОТИВОНАКИПНОГО ЭФФЕКТА МАГНИТНОЙ ОБРАБОТКИ

В устойчивом коллоидном растворе весь поток I_{10} (моль/с) молекул CaCO_3 осаждается на стенки теплообменной трубы в соответствии с формулой [6,8]

$$I_{10} = \beta_1 L \pi d (C - C_0) \quad (3)$$

где $\pi L d$ – площадь поверхности трубы диаметра d и длины L ; β_1 – коэффициент массопередачи.

В присутствии магнитной обработки тот же самый поток молекул распределяется между взвесью и стенкой пропорционально их площадям, причем размер частиц взвеси и пересыщение раствора по отношению к этим частицам изменяется в ходе коагуляции и на каждом k -том ее этапе определяется теорией быстрой коагуляции Смолуховского [1]. С учетом этого поток молекул I_{2mag} (моль/с) на поверхность кристаллов, взвешенных в водном потоке, вычисляется по формуле

$$I_{2mag} = \sum_{k=2} I_{2kmag} = \sum_{k=2} \beta_2 S_k (C - C_k) \quad (4)$$

где

I_{2kmag} , S_k и C_k , соответственно, поток молекул накипеобразователя на частицы k -го порядка коагуляции, общая поверхность таких частиц и равновесная молярная концентрация молекул CaCO_3 относительно частицы порядка k .

β_2 – коэффициент массопередачи между жидкостью и зародышем (кристаллом взвеси) радиуса r .

Суммирование в (4) распространяется на все частицы, кроме первичных с $k=1$ (критического радиуса), так как для них, по определению, пересыщение отсутствует и поток кристаллообразующих молекул на них равен нулю (процессы сорбции и десорбции уравновешены).

Противонакипный эффект – снижение накипи на стенках теплообменника за счет магнитной обработки воды, определим удобной для практики формулой

$$\Theta = I_{10} / I_{1mag} \quad (5)$$

которая приводится к следующему виду [5]

$$\Theta = 1 + \frac{\sum_{k=2} I_{2kmag}}{\beta_1 L \pi d (C - C_0)} \quad (6)$$

где I_{10} , I_{1mag} – поток молекул CaCO_3 на стенке теплообменника при отсутствии и наличии МОВ, соответственно.

Следует отметить, что знаменатель второго слагаемого описывает поток накипи на стенку трубы с омагниченным водным потоком. Однако при оценке значения β_1 выражением (1) наличие магнитного поля ранее, в работах [5,6,8], к сожалению, не было учтено. Соответственно, целесообразно уточнить выражение (6) подстановкой β_m вместо β_1 , определенного формулой (1)

Вместе с тем, по определению, выигрыш в снижении накипи определяется выражением

$$\Theta = \frac{\beta_1 L \pi d (C - C_0)}{\beta_m L \pi d (C - C_0)} = \frac{\beta_1}{\beta_m},$$

откуда получим

$$\beta_m = \frac{\beta_1}{\Theta}$$

Вышеупомянутая подстановка β_m вместо β_1 дополняет второе слагаемое (6) множителем Θ и приводит к формуле

$$\Theta = \frac{\beta_1 L \pi d (C - C_0)}{\beta_1 L \pi d (C - C_0) - \sum_{k=2} \beta_2 S_k (C - C_k)} \quad (7)$$

На рис.4 приведены результаты расчета противонакипного эффекта Θ в зависимости от отношения δ/r_{cr0} . При построении данного графика для каждого значения δ вычислялся радиус критического зародыша r_{cr} и концентрация этих зародышей n , а потом аналогично [5,6,8] рассчитывался и противонакипный эффект Θ .

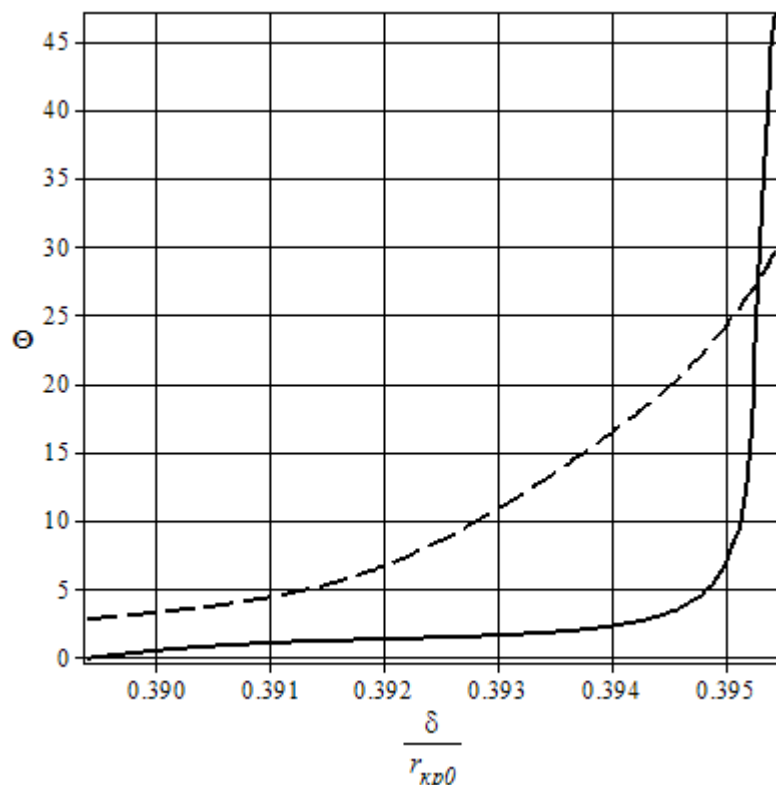


Рис.4. Зависимость противонакипного эффекта Θ с учетом размерного эффекта от нормированной постоянной Толмена: штриховая линия - по формуле (6) и сплошная линия - по формуле (7).

Как видно из графиков, значение δ/r_{cr} при $\Theta=30$ при пересчете почти не поменяло своего значения. При этом для условий эксперимента [3] $\Theta=30$ по уточненной формуле (7), кривая 2 получены следующие значения параметров: $r_{kp} = 8.1 \cdot 10^{-10}$ м (примерное число молекул в зародыше 40), $\delta = 0.6$ нм, $\sigma_{eff} = 0.064$ Дж/м², что может вполне соответствовать ожидаемым на практике.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе рассмотрена модель снижения накипи после магнитной обработки пересыщенного растворами солей CaCO_3 водного потока. Опираясь на исходную гипотезу

Гамаюнова Н.И., согласно которой после магнитной обработки коллоидный раствор теряет устойчивость из-за деформации ДЭС, прослежена цепочка физических эффектов, коренным образом изменяющих поведение коллоидных частиц в растворе. Уточнена предыдущая версия модели [5,6,8], учтено изменение коэффициента массопереноса на поверхность трубы из пересыщенного раствора при наличии магнитного поля.

Выделены основные черты механизма снижения накипи при омагничивании водного потока:

1. Деформация ДЭС силами Лоренца в магнитном поле лишает устойчивости коллоидный раствор и дает старт коагуляции критических зародышей в потоке.
2. С коагуляцией критических зародышей возникают частицы с радиусом кривизны больше критического и резко возрастает пересыщение раствора по отношению к ним.
3. Начинается кристаллизация растворенных солей на их поверхности.
4. Коэффициент массопереноса на взвесь на 4 порядка больше, чем на стенки трубы. Это способствует существенному перераспределению потока кристаллизующейся накипи, снижая ее количество на стенках теплообменника.
5. Убыль концентрации критических зародышей из-за коагуляции восполняется за счет гомогенной генерации зародышей из пересыщенного раствора, что также увеличивает на несколько порядков увеличивает кристаллизацию на взвеси.
6. Наноразмерность критических зародышей способствует увеличению их равновесной концентрации с учетом размерного эффекта (константы Толмена), который снижает энергию образования новой поверхности и уменьшает критический радиус зародышей при их гомогенной генерации.
7. Проведенные количественные оценки на каждом этапе формирования накипи в омагниченном водном потоке приводят к результирующему противонакипному эффекту, полученному в реальном эксперименте [3], что в целом подтверждает предложенную авторами гипотезу о механизме магнитной обработки воды.

ЛИТЕРАТУРА

1. Наука о коллоидах. Т.1. Необратимые процессы / Под ред. Кройта. Г.Р. М.: ИЛ, 1955.
2. Гамаюнов Н.И. // Коллоидный журнал. 1994. Т.56. №2. С.290-298.
3. Szkatula A, Balanda M., Korpec M. // The Europ. Phys. J. – Appl. Phys. 2002. V.18. P. 41-49.
4. Кошоридзе С.И., Левин Ю.К. // Теплоэнергетика. 2011. №7. С.13-16.
5. Кошоридзе С.И., Левин Ю.К. // Модель процесса осаждения накипи в теплоэнергетических установках с магнитной обработкой воды. Механика композиционных материалов и конструкций. Сб. трудов IV-го Всероссийского симпозиума в 2-х томах. Том 1. Москва, 4-6 декабря 2012г. – М.:ИПРИМ РАН, 2012, с.174-181.
6. Кошоридзе С.И., Левин Ю.К. // Теплоэнергетика. 2013. №3. С.74-77.
7. Кошоридзе С.И., Левин Ю.К. // Материалы X международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ`2014) 25-31 мая 2014 г. Алушта. М.: Изд-во МАИ, 2014. С.557-559.
8. Кошоридзе С.И., Левин Ю.К. // Фундаментальные исследования, №9, 2014 с.2433-2439.
9. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.. Физическая кинетика. М.: «Наука». 1979.
10. Рехвиашвили С.Ш., Кишитикова Е.В., Розенберг Б.А. // Журнал технической физики. 2009. Т.79. №12. С.10-13.
11. Ньюмен Дж. Электрохимические системы. М.: Мир, 1977.
12. Шервуд Т., Пигфорд Р., Уилки Ч. Массопередача. М.: Химия, 1982.