

СОДЕРЖАНИЕ

Том 60, номер 5, 2022

К юбилею Александра Александровича Авдеева 643

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛАЗМЫ

- Кинетика и модель лазеров на парах металлов, возбуждаемых индукционным импульсно-периодическим ВЧ-разрядом
М. М. Маликов 644
- Плазменное алитирование стали фольгой при температуре ниже температуры плавления алюминия
Н. Mahmoudi, S. M. M. Hadavi, Y. Palizdar 657
- Генерация второй оптической гармоники в кремнии при воздействии терагерцевого импульса с высокой напряженностью электрического поля
А. В. Овчинников, О. В. Чефонов, М. Б. Агранат 666

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ

- Теплофизические свойства высокоэнтропийного карбида (HfTaTiNbZr)C при температурах от 2500 до 5500 К
А. И. Савватимский, С. В. Онуфриев, А. С. Седегов, С. Н. Юдин, Д. О. Московских 672
- Теплофизические свойства мелкозернистого графита МПГ-7 с химической и структурной гетерогенностью
А. В. Вершинин, В. И. Горбатов, А. А. Куриченко, С. А. Койтов 676
- Исследование версий термодинамической теории возмущений для моделирования свойств бинарных смесей флюидов в широкой области давлений и температур
Ю. А. Богданова, С. А. Губин 682
- Измерение теплопроводности и коэффициента теплоотдачи наножидкостей с одностенными нанотрубками
В. Я. Рудяк, А. В. Минаков, М. И. Пряжников, Д. В. Гузей 692

ТЕПЛОМАССООБМЕН И ФИЗИЧЕСКАЯ ГАЗОДИНАМИКА

- Характеристики течения в следе за крупной движущейся частицей
А. Ю. Вараксин, А. А. Мочалов, А. А. Желебовский 701
- Однослойная алгебраическая модель кажущейся турбулентной вязкости и модифицированный метод эффективной длины
В. В. Горский 708
- Об иницировании пузырьковой детонации волнами малой амплитуды
И. К. Гималтдинов, С. А. Лепихин 715
- Краевые задачи для уравнений параболического типа в нецилиндрических областях
Э. М. Карташов 725
- О фундаментальном решении задач электростатики и теплопроводности для плоскостойких сред
А. Б. Петрин 740
- Применение методов локальных оценок к расчету силы излучения высокотемпературной струи
И. С. Григорьев 752

Расчетное исследование горения водородно-воздушной смеси в модельном канале при ударно-волновой структуре течения <i>Н. В. Кукшинов, Д. Л. Мамышев</i>	763
Экспериментальное исследование процессов сажеобразования при горении переобогащенной кислород-метановой смеси <i>Д. А. Ягодников, О. А. Ворожеева, А. О. Новиков</i>	774

НОВАЯ ЭНЕРГЕТИКА

Гидротермальное окисление алюминия и металлогидридное компримирование водорода <i>А. З. Жук, В. И. Борзенко, П. П. Иванов</i>	781
--	-----

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Контактное электрическое сопротивление графита марки МПГ-7 при постоянном и переменном токе <i>М. Г. Зеодинов, А. В. Костановский, М. Е. Костановская, А. А. Пронкин</i>	789
Поведение магниевго сплава при высокоскоростной деформации под действием ударно-волновой нагрузки <i>Е. В. Струлева, П. С. Комаров, С. А. Евлашин, С. И. Ашитков</i>	793
Волновой теплоперенос в теплозащитных материалах с нелинейной зависимостью теплопроводности от температуры экспоненциального типа <i>В. Ф. Формалев, С. А. Колесник</i>	797

К ЮБИЛЕЮ АЛЕКСАНДРА АЛЕКСАНДРОВИЧА АВДЕЕВА

DOI: 10.31857/S0040364422050246



11 октября 2022 года исполнилось 70 лет Александру Александровичу Авдееву, доктору технических наук, члену редколлегии журнала “Теплофизика высоких температур”.

В 1969 г. А.А. Авдеев поступил в Московский энергетический институт. Успешно закончив обучение, Александр Александрович начал научную карьеру с работы в НПО “Энергия”. Параллельно с работой он поступил в аспирантуру к д.т.н., проф. Д.А. Лабунцову (1977 г.) и в 1979 г. защитил кандидатскую диссертацию (к.т.н.) по теме “Критическое истечение вскипающих жидкостей”. Работа в НПО “Энергия” продолжена уже в должности младшего научного сотрудника. В 1981 г. А.А. Авдеев поступает на работу во Всероссийский научно-исследовательский и проектно-конструкторский институт атомного энергетического машиностроения (ОАО “ВНИИАМ”). С этим институтом связана основная часть творческой, научной деятельности Авдеева, где он последовательно прошел путь от старшего научного сотрудника до генерального директора.

Уже при первом знакомстве с Александром Александровичем его коллег поражали такие присущие ему качества, как интеллигентность, прекрасная теоретическая теплофизическая база, сочетавшиеся с быстротой усвоения и анализа

полученной информации, достаточным напором в споре и умением принять взгляд оппонента при достаточности его аргументации. Поэтому неудивительно была единодушная поддержка в кругу специалистов по теплофизике двухфазных потоков докторской диссертации молодого А.А. Авдеева, которую он защитил в 1987 г. по теме “Тепломассоперенос и гидродинамика неравновесных пузырьковых сред в элементах энергетических машин и аппаратов”.

Занимая высокие посты заместителя директора, а затем и директора, А.А. Авдеев быстро смог перейти от научных проблем пузырьково-снарядного режима течения двухфазного потока к нуждам конкретного атомного энергооборудования, применяя свой теоретический багаж, широкую теплофизическую эрудицию и аргументированное умение отстаивать свою позицию в рамках Минатомпрома.

Рассматривая А.А. Авдеева, в основном, как теплофизика-теоретика, его коллеги-экспериментаторы всегда поражались его умению использовать минимум средств на реконструкцию действующего стенда для решения иной конкретной задачи, грамотность построения эксперимента для получения однозначного ответа на поставленную задачу. При этом использовались материалы экспериментального участка, объем эксперимента и точность применяемых средств измерений, необходимые именно в рассматриваемом исследовании.

Уделяя много времени решению задач энергетики на посту руководителя ОАО “ВНИИАМ”, Александр Александрович не прекратил заниматься теоретической теплофизикой и регулярно публиковал статьи, а позднее занялся работой и над книгами. Одна из них вышла в издательстве “Шпрингер” под названием “Bubble Systems” (2016 г.). Участвуя в развитии отечественной науки, он активно работает в Национальном комитете по теплообмену и в редакционной коллегии журнала “Теплофизика высоких температур”.

Круг интересов Александра Александровича не ограничивается наукой. Многие годы он активно занимается скалолазанием, совершает в паре с лучшими скалолазами России сложные восхождения в Альпах.

Редколлегия и редакция журнала поздравляют Александра Александровича с юбилеем и желают ему крепкого здоровья и дальнейших успехов и достижений!

УДК 621.375.826

КИНЕТИКА И МОДЕЛЬ ЛАЗЕРОВ НА ПАРАХ МЕТАЛЛОВ, ВОЗБУЖДАЕМЫХ ИНДУКЦИОННЫМ ИМПУЛЬСНО-ПЕРИОДИЧЕСКИМ ВЧ-РАЗРЯДОМ

© 2022 г. М. М. Маликов*

*Объединенный институт высоких температур РАН (ОИВТ РАН), Москва, Россия***E-mail: mmalikov@oivtran.ru*

Поступила в редакцию 11.08.2021 г.

После доработки 01.10.2021 г.

Принята к публикации 23.11.2021 г.

Представлена физическая модель процессов, протекающих в неравновесной плазме рабочего тела лазеров на парах металлов, возбуждаемых индукционным импульсно-периодическим ВЧ-разрядом. В основу модели входят дифференциальные уравнения кинетики заселенностей, баланса энергии электронов, электрической цепи, развития индуцированного излучения и др. Все уравнения адаптированы к особенностям индукционного разряда и специальной геометрии разрядной камеры. Описание модели представлено для варианта лазера на парах меди с буферным газом неоном. Отмечены особенности динамики параметров плазмы и лазерного излучения в условиях ВЧ-разряда.

DOI: 10.31857/S004036442205009X

ВВЕДЕНИЕ

Лазеры на самоограниченных переходах атомов металлов [1–4], излучение которых находится в видимом, инфракрасном и ультрафиолетовом диапазонах, весьма привлекательны для различных практических приложений. Однако невысокий КПД, ограниченный ресурс работы и ряд технических особенностей затрудняют их широкое применение, снижают конкурентную способность. Исследования нового безэлектродного способа возбуждения лазеров на парах металлов импульсно-периодическим индукционным разрядом трансформаторного типа [5–7] вызвано стремлением повысить выходные параметры и получить ряд технических и эксплуатационных преимуществ. Улучшение характеристик этих лазеров, возможно, расширит перспективу их применения в промышленности, в прецизионной микрообработке материалов, в селективных технологиях, физических исследованиях, диагностике, в медицине и т.п. [8–10].

Отличительной чертой конструкции индукционных лазеров на парах меди (ИЛПМ) от индукционных лазеров на других рабочих средах (азот, инертные газы и др.) является наличие толстой теплоизоляции, которая увеличивает расстояние между плазменным витком и индуктором, что приводит к значительному снижению коэффициента связи K , трансформатора. Как показывает численное моделирование [6], в этом случае выгодно применять коаксиальные разрядные камеры с кольцевым рабочим объемом. При использовании таких

камер можно достичь значений $K_r \approx 0.5–0.6$. Кроме того, в кольцевом проводящем слое можно создать более однородное по радиусу вихревое электрическое поле, чем в цилиндре [11], что положительно скажется на генерации излучения. При этом для описания процессов в плазме следует применить относительно простую нольмерную модель. В данной работе дается обоснование и приводится детальное описание такой модели, использовавшейся при расчетах ИЛПМ в [5–7].

Согласно результатам численных экспериментов [6], в ИЛПМ реализуется импульс накачки, представляющий собой цуг высокочастотных колебаний тока с частотой $f_{tr} = 10–100$ МГц и временем затухания $\tau_{at} \sim 70–200$ нс, в то время как в обычном (электродном) лазере на парах меди (ЛПМ) импульс тока имеет форму, близкую к форме аперидического разряда с длительностью 150–300 нс. Поэтому в физической модели ИЛПМ желательно учитывать зависимость высокочастотной электрической проводимости плазмы от частоты колебаний тока и влияние изменения во времени эффективного сопротивления на работу электрической схемы. Необходимо контролировать толщину скин-слоя, оценивать влияние магнитного поля индуктора на проводимость плазмы и на другие процессы. Отметим, что за основу описания кинетических процессов в разрядной плазме ИЛПМ была взята разработанная ранее физическая модель обычного ЛПМ [12].

Схема конструкции ИЛПМ и необходимые обозначения представлены на рис. 1. Плазма за-

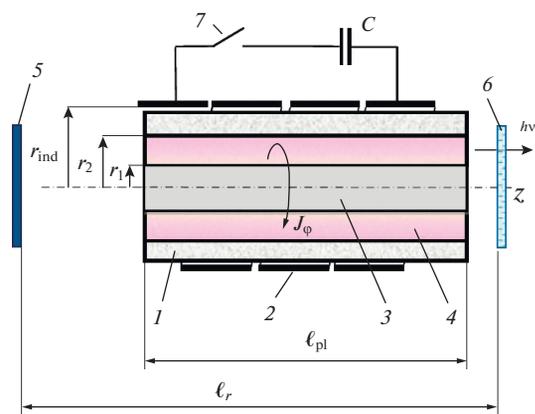


Рис. 1. Схема ИЛПМ: 1 – теплоизоляция, 2 – витки индуктора, 3 – керамическая вставка, 4 – плазма разряда, 5 и 6 – зеркала оптического резонатора, 7 – коммутатор (ключ), C – накопительная емкость.

полняет объем между двумя коаксиальными цилиндрами радиусом r_1 и r_2 . Ось z цилиндрической системы координат направлена вдоль оси цилиндров. Индуцированный азимутальный электрический ток J_ϕ течет в кольцевом зазоре ($r_2 - r_1$) $< r_2, r_1$, который значительно меньше длины активной среды лазера l_{pl} . В типичных условиях работы лазера на парах меди температура стенки T_w (при $r = r_2$) задается равной 1500–1900 К, чему соответствует давление паров меди $P_{Cu} = 1-2$ Торр. Давление неона $P_{Ne} = 50-500$ Торр. Частота следований импульсов накачки (цугов) $f \sim 2-30$ кГц такая же, как и в обычном электродном ЛПМ. Типичная температура газа в кольцевом зазоре (при $f \sim 10$ кГц) $T_g \approx 2500$ К, температура электронов $T_e = 0.3-5$ эВ и их концентрация $n_e = 10^{13}-10^{15}$ см $^{-3}$ ($T_e \geq T_g$). Характерная длительность импульсов излучения для ЛПМ на самоограниченных переходах составляет несколько десятков наносекунд.

КИНЕТИКА ПРОЦЕССОВ В ИЛПМ

Схема уровней атомов меди и атомов буферного газа неона

Учет большого числа уровней требует решения соответствующего количества дифференциальных уравнений для описания их заселенностей, а также знания констант процессов. Для упрощения задачи обычно производится огрубление схемы уровней атома [13] объединением ряда отдельных уровней в блоки. Схема возбужденных уровней и блоков уровней атома меди и неона, принятая в данной работе, представлена на рис. 2.

Всего учтено 124 уровня атома меди (не считая водородоподобных) и 23 уровня неона. Уровни энергии возбужденных атомов и их заселенности n_k нумеруются индексом k или i . Для атома ме-

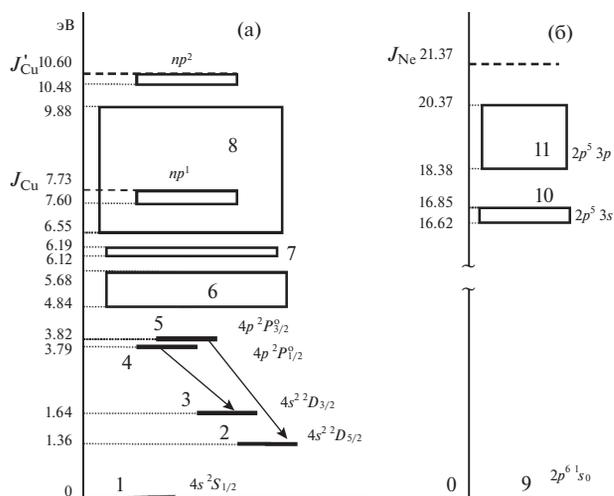


Рис. 2. Схема уровней атомов меди (а) и неона (б).

ди $k = 1-5$ – отдельные нижние уровни, $k = 6-8$ – блоки уровней меди; для атома неона $k = 9$ – основной уровень, $k = 10, 11$ – блоки уровней неона. Блоки высоко лежащих уровней меди, находящихся в равновесии с электронным континуумом обозначены на рис. 2 как np^1 и np^2 . Генерация лазерного излучения происходит при переходе с резонансных уровней на метастабильные. На зеленой (0.51 мкм) линии с $k = 5$ на $i = 2$ ($4p^2P_{3/2}^o \rightarrow 4s^2D_{5/2}$) и на желтой (0.578 мкм) линии с $k = 4$ на $i = 3$ ($4p^2P_{1/2}^o \rightarrow 4s^2D_{3/2}$).

Более детальное обсуждение и обоснование принятой схемы уровней проведено в [12] с использованием представлений о кинетике заселенностей в диффузионном или модифицированном диффузионном приближении [13]. Перечень всех учитываемых уровней атома меди неона, их энергий E_k и статвесов g_k представлен в [4] (см. Приложение П4) и в [12].

Учет столкновительных и радиационных процессов

В принятой модели расчета учитываются следующие физические процессы:

- нагрев свободных электронов электрическим полем (нагревом ионов пренебрегаем);
- ионизация атомов меди и неона со всех уровней;
- тройная рекомбинация на основной и на все возбужденные уровни меди и неона;
- фоторекомбинация на нижние уровни атомов $k = 1-5$ и $k = 9$;
- конверсия атомарных ионов неона в молекулярные ионы и их диссоциативная рекомбинация;
- спонтанное излучение (231 линии атома меди и 55 линий атома неона с известными вероят-

ностями спонтанного излучения A_{ki} [4] (см. Приложение П4);

– реабсорбция спонтанного излучения методом эффективного времени жизни [14];

– возбуждение и тушение электронным ударом всех выбранных состояний атома меди и неона;

– упругие потери энергии электронов при столкновении с атомами и ионами;

– процессы типа ионизации Пеннинга при столкновениях возбужденных атомов неона с атомами меди в основном состоянии;

– процесс перезарядки ионов неона на атомах меди в основном состоянии с образованием ионов меди в возбужденных состояниях ($E_{ex}^+ \approx 13.68-13.87$ эВ); согласно [15], этот процесс можно отнести к перезарядке, близкой к резонансному типу;

– амбиполярная диффузия электронов и двух сортов ионов Cu^+ и Ne^+ , а также диффузия возбужденных атомов меди и неона.

Баланс возбужденных атомов меди и неона

В общем виде, в приближении многожидкостной гидродинамики [16], баланс возбужденных частиц можно представить уравнением

$$\frac{\partial n_k}{\partial t} = \left(\frac{\delta n_k}{\delta t} \right)_{\text{рож}} - \left(\frac{\delta n_k}{\delta t} \right)_{\Gamma} - \text{div}(n_k \mathbf{u}_k). \quad (1)$$

Здесь первый и второй члены в правой части описывают соответственно рождение или гибель возбужденного состояния атома k в объеме за счет всех столкновительных и радиационных процессов, перечисленных выше:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta n_k}{\delta t} \right)_{\text{рож}} = & \left[\sum_{i \neq k} (n_i q_{ik}) + q_k^{\text{rec}} n_e n_k^+ + q_k^{\text{fr}} n_k^+ \right] n_e + \\ & + \sum_{i > k} A_{ik}^* n_i + B_{\text{gr}} \rho_{\text{gr}} \alpha_{\text{gr}} \frac{g_5}{g_2} n_2 \delta_k^{\text{gr}} + \\ & + B_{\text{yel}} \rho_{\text{yel}} \alpha_{\text{yel}} \frac{g_4}{g_3} n_3 \delta_k^{\text{yel}}, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta n_k}{\delta t} \right)_{\Gamma} = & \left[\sum_{i \neq k} (n_k q_{ki}) + n_k q_k^{\text{ion}} \right] n_e + \sum_{i < k} A_{ki}^* n_k + \\ & + B_{\text{gr}} \rho_{\text{gr}} \alpha_{\text{gr}} n_2 \delta_k^{\text{gr}} + B_{\text{yel}} \rho_{\text{yel}} \alpha_{\text{yel}} n_3 \delta_k^{\text{yel}} + q^{\text{pen}} n_1 n_k \delta_k. \end{aligned} \quad (3)$$

Если направленная скорость \mathbf{u}_k частиц в состоянии k связана с градиентом их концентрации, то третий член справа в (1) описывает устранение этих частиц из объема за счет процесса диффузии:

$$-\text{div}(n_k \mathbf{u}_k) = -\text{div} \left(-n_k D_k \frac{\nabla n_k}{n_k} \right) = D_k \Delta n_k. \quad (4)$$

В уравнениях (1)–(4) и везде далее: n_k (см^{-3}) – концентрации, q_{ki} ($\text{см}^3/\text{с}$) – константа скорости

перехода с уровня k на уровень i электронным ударом; q_k^{ion} ($\text{см}^3/\text{с}$), q_k^{rec} ($\text{см}^6/\text{с}$) – константы скорости ионизации электронным ударом и тройной рекомбинации на уровень k ; q^{pen} ($\text{см}^3/\text{с}$) – константы скорости “пенинг” процесса; q_k^{fr} ($\text{см}^3/\text{с}$) – константа фоторекомбинации на уровень k ; A_{ki}^* (с^{-1}) – эффективная вероятность спонтанного излучения с учетом реабсорбции с уровня k на уровень i ; ρ_{gr} , ρ_{yel} ($\text{эВс}/\text{см}^3$) и B_{gr} , B_{yel} ($\text{см}^3/\text{с}^2$ эВ) – соответственно спектральные плотности лазерного излучения и коэффициенты вынужденного излучения при переходах с $k = 5$ на $i = 2$ для зеленой и с $k = 4$ на $i = 3$ для желтой линий генерации лазера; α_{gr} , α_{yel} – коэффициенты, учитывающие конечность ширины спектральных линий (см. ниже); D_k ($\text{см}^2/\text{с}$) – коэффициент диффузии возбужденных атомов; коэффициенты $\delta_k = 1$ при $k = 10, 11$ и $\delta_k = 0$ при $k \neq 10, 11$; $\delta_k^{\text{gr}} = 1$ при $k = 5$, $\delta_k^{\text{gr}} = -1$ при $k = 2$ и $\delta_k^{\text{gr}} = 0$ при $k \neq 2, 5$. Аналогично $\delta_k^{\text{yel}} = 1$ при $k = 4$, $\delta_k^{\text{yel}} = -1$ при $k = 3$ и $\delta_k^{\text{yel}} = 0$ при $k \neq 3, 4$. В уравнении (2) при $k = 1-8$ $n_k^+ = n_{Cu^+}$ (см^{-3}) – концентрация ионов меди, а при $k = 9-11$ $n_k^+ = n_{Ne^+}$ (см^{-3}) – концентрация ионов неона.

Нульмерные приближения процессов переноса частиц и энергии

Дифференциальные уравнения баланса возбужденных частиц и баланса энергии электронов содержат производные по времени и координатам. При описании физических процессов в плазме ИЛПМ будем пренебрегать вязкой диссипацией энергии и запишем уравнения в так называемом “нульмерном” приближении. В этом случае все члены исходных дифференциальных уравнений осредняются по объему кольцевой разрядной камеры с привлечением тех или иных физических представлений о протекающих процессах.

Осреднение уравнения баланса возбужденных атомов меди и неона. При осреднении по объему всех членов дифференциальных уравнений (1) аналогично [16] полагаем, что в середине кольцевой области разрядной трубки объемные процессы гибели возбужденного состояния преобладают над диффузионным уходом частиц на стенку. Диффузионное устранение частиц существенно лишь вблизи границ плазмы. В этом случае радиальное распределение концентраций n_k (рис. 3) принималось пологим в центральной области, а в пристеночных слоях толщиной Λ_k – круто спадающим до нуля (кроме $k = 1$ и $k = 9$).

При $(r_2 - r_1)/r_1 < 1$ величины Λ_k можно считать одинаковыми около обеих стенок $r = r_1$ и $r = r_2$. Такие же радиальные распределения задаются и

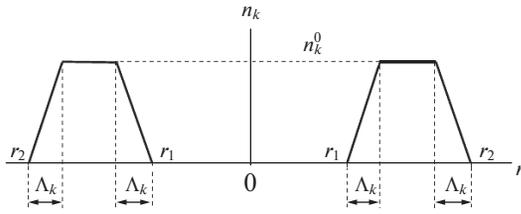


Рис. 3. Модельное радиальное распределение концентраций частиц в кольцевом рабочем объеме разрядной камеры.

для концентраций заряженных частиц n_{Cu^+} , n_{Ne^+} , n_e со своими значениями Λ_{Cu^+} , Λ_{Ne^+} , Λ_e (см. ниже). Принимаем, аналогично [16], что в центральной части кольцевого объема $grad(n_k) \approx 0$ и $\Delta n_k \approx 0$, а в пристеночных слоях:

$$grad(n_k) \sim \frac{n_k^0(t)}{\Lambda_k(t)}, \quad (5)$$

$$D_k \Delta n_k = D_k \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial n_k}{\partial r} \right) \sim D_k \frac{n_k^0(t)}{\Lambda_k^2(t)}. \quad (6)$$

Здесь $n_k^0(t)$ – концентрация возбужденных частиц в центральной части объема, которую с учетом

принятой формы профиля концентраций можно связать со средней по объему концентрацией

$$\langle n_k \rangle \approx n_k^0 \left(1 - \frac{\Lambda_k}{(r_2 - r_1)} \right). \quad (7)$$

Осреднение по кольцевому объему разрядной коаксиальной камеры выражений (6), описывающих диффузию n_k в уравнениях баланса частиц, дает

$$\langle D_k \Delta n_k \rangle \approx D_k \frac{\langle n_k \rangle}{(r_2 - r_1) \Lambda_k} f_k, \quad (8)$$

где

$$f_k = 2 \left(1 - \frac{\Lambda_k}{(r_2 - r_1)} \right)^{-1}. \quad (9)$$

Геометрический фактор f_k изменяется от двух при $\Lambda_k / (r_2 - r_1) \ll 1$ до четырех при $\Lambda_k \approx 0.5(r_2 - r_1)$.

В (5)–(9) величины $\Lambda_k(t)$ (см) приблизительно определяются по аналогии с [16] как характерное расстояние от стенки, на котором скорости диффузного ухода атомов уравниваются со скоростью их гибели за счет объемных процессов. Приравнивая правую часть уравнения (3) (при $r = r_2 - \Lambda_k$ или $r = r_1 + \Lambda_k$) к выражению (6), получим

$$\Lambda_k \approx \sqrt{D_k} / \sqrt{n_e^0 \left(\sum_{i \neq k} q_{ki} + q_k^{ion} \right) + \sum_{i < k} A_{ki}^* + B_{gr} \rho_{gr} \alpha_{gr} \delta_k^{gr} + B_{yel} \rho_{yel} \alpha_{yel} \delta_k^{yel} + q^{pen} n_i \delta_k}. \quad (10)$$

Под корнем в числителе и знаменателе величины n_k^0 сократились; в качестве концентрации электронов n_e^0 (в центральной части объема) подставляем, согласно (7), приближенные значения $n_e^0 \approx 1.5 \langle n_e \rangle$ (см. ниже). В качестве остальных величин под корнем в (10) подставляются их средние по объему значения (знак осреднения опускаем).

Детально рассмотрим вопрос также об осреднении в уравнениях баланса (2), (3) членов $A_{ki}^* n_k$. Реабсорбция спонтанного излучения учитывается методом эффективного времени жизни [13, 14].

В этом методе величина A_{ki}^* представляется в виде $A_{ki} \theta_{ki}$, поэтому можно записать

$$\langle A_{ki}^* n_k \rangle \approx A_{ki} \langle \theta_{ki} \rangle \langle n_k \rangle \alpha = A_{ki}^{ef} \langle n_k \rangle.$$

Здесь A_{ki} – вероятность спонтанного излучения; $\theta_{ki}(x, k_0(x)h)$ – вероятность вылета фотона из точки x объема, занимаемого плазмой [13]; $k_0(x)$ – коэффициент поглощения в центре спектральной линии излучения; h – характерная толщина слоя плазмы. Обычно коэффициент осреднения α полагается равным единице, а вместо $\langle \theta_{ki} \rangle$ под-

ставляется $\theta_0 = \theta_{ki}(0, k_0(0)h)$ – вероятность вылета фотона из середины ($x = 0$) слоя плазмы. Известные выражения θ_0 для плазмы с однородным поглощением ($k_0(x) = const$) представлены в ряде работ [13, 14]. Поскольку величина θ_{ki} в центре объема обычно много меньше единицы, а вблизи стенки порядка единицы, то значение $\langle \theta_{ki} \rangle \alpha$ могут заметно отличаться от значений θ_0 , что может существенно занижить величину $\langle A_{ki}^* n_k \rangle$. В данной расчетной модели были использованы новые, полученные в [17], выражения $\theta_{ki}(x, k_0(x)h)$ для неоднородной плазмы ($k_0(x) \neq const$) и формулы, аппроксимирующие численные значения $Q_{ki}^{ef} = \langle \theta_{ki} \rangle \alpha$ и, соответственно, $A_{ki}^{ef} = A_{ki} Q_{ki}^{ef}$ для различных модельных зависимостей $n_k(r)$ и $k_0(r)$. Подробная информация по этим формулам и необходимые для расчета таблицы коэффициентов представлены также в [4] (Приложение П7).

Для остальных членов в уравнениях баланса (2), (3) коэффициенты осреднения полагаем порядка единицы. Окончательно, баланс для осредненных по объему концентраций возбужденных

атомов ($k = 2-8$ и $k = 10, 11$) принимает вид (знак осреднения опускаем)

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_k}{\partial t} = & \left[\sum_{i \neq k} (n_i q_{ik} - n_k q_{ki}) + q_k^{\text{rec}} n_e n_k^+ + \right. \\ & \left. + q_k^{\text{fr}} n_k^+ - n_k q_k^{\text{ion}} \right] n_e - \sum_{i < k} A_{ki}^{\text{ef}} n_k + \sum_{i > k} A_{ik}^{\text{ef}} n_i - \\ & - B_{\text{gr}} \rho_{\text{gr}} \alpha_{\text{gr}} \left(n_5 - \frac{g_5}{g_2} n_2 \right) \delta_k^{\text{gr}} - B_{\text{yel}} \rho_{\text{yel}} \alpha_{\text{yel}} \times \\ & \times \left(n_4 - \frac{g_4}{g_3} n_3 \right) \delta_k^{\text{yel}} - q^{\text{pen}} n_1 n_k \delta_k - \frac{n_k D_k f_k}{\Lambda_k (r_2 - r_1)}. \end{aligned} \quad (11)$$

В правой части (11) индекс i варьируется от 1 до 11 с учетом ограничений, указанных под знаками сумм. Коэффициенты диффузии D_k (см²/с) возбужденных атомов меди и неона [4, 18] оказались примерно равными и вычислялись по аппроксимирующей формуле

$$D_k = 2.82 \times 10^3 (T_g / 1273)^{1.7} / P_{\text{Ne}}.$$

Для расчета концентрации атомов меди и неона в основном состоянии $k = 1$ и $k = 9$ можно использовать закон сохранения полного числа тяжелых частиц в замкнутом объеме и записать алгебраические выражения (для средних по объему значений концентраций)

$$\begin{aligned} n_1 = & 1.95 \times 10^{23} \frac{T_w}{T_g} \exp(-33160/T_w) - \\ & - \sum_{k=2}^8 n_k - n_{\text{Cu}^+} - np, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} n_9 = & 0.966 \times 10^{19} (P_{\text{Ne}}/T_g) - \\ & - n_{10} - n_{11} - n_{\text{Ne}^+} - 2n_m^+. \end{aligned} \quad (13)$$

В (12) первый член справа определяет концентрацию меди n_{Cu} (в см⁻³) возле стенки, равновесную с температурой T_w (К) и пересчитывается в объеме трубки по температуре смеси T_g (К) [4]. Концентрация атомов меди верхнего блока $np = np1 + np2$ (см⁻³) (рис. 2) представляет собой сумму водородоподобных уровней атома меди, сходящихся к континуумам с границей $J_{\text{Cu}} = 7.726$ эВ и $J_{\text{Cu}}^* = 10.6$ эВ и рассчитывается по формуле Саха–Болцмана (см., например, в [13, 19, 20]). В (13) n_m^+ (в см⁻³) – концентрация молекулярных ионов неона (см. ниже).

Баланс концентраций атомарных и молекулярных ионов. При осреднении по объему кольцевой разрядной камеры балансных уравнений концентраций заряженных частиц, средние значения $\langle n_{\text{Cu}^+} \rangle$, $\langle n_{\text{Ne}^+} \rangle$ и значения в центре объема $n_{\text{Cu}^+}^0$, $n_{\text{Ne}^+}^0$ связываются соотношениями, аналогичными (7).

В общем случае необходимо рассматривать три коэффициента амбиполярной диффузии отдельно для электронов D_a^e и для ионов $D_a^{\text{Cu}^+}$, $D_a^{\text{Ne}^+}$, связанных соотношением [15]

$$D_a^e \approx \left(\frac{n_{\text{Cu}^+}}{n_e} D_a^{\text{Cu}^+} + \frac{n_{\text{Ne}^+}}{n_e} D_a^{\text{Ne}^+} \right).$$

Здесь коэффициенты амбиполярной диффузии для ионов определяются как обычно через коэффициенты диффузии ионов меди D_{Cu^+} и неона D_{Ne^+} :

$$D_a^{\text{Cu}^+, \text{Ne}^+} \approx D_{\text{Cu}^+, \text{Ne}^+} \left(1 + 1.16 \times 10^4 T_e / T_g \right).$$

Величину D_{Cu^+} (см²/с), согласно [15], можно представить в виде

$$D_{\text{Cu}^+} \approx 8.62 \times 10^{-3} T_g^2 P_{\text{Ne}}^{-1} (\sqrt{\chi \mu})^{-1}.$$

Здесь $\chi \approx 2.75$ – поляризуемость неона, $\mu = 15.2$ – приведенная масса. Анализ данных [15] по подвижностям в неоне показал, что значения D_{Cu^+} близки к значениям D_{Ne^+} . При этих условиях балансы для осредненных по объему концентраций ионов с учетом выражений (8) принимают вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_{\text{Cu}^+}}{\partial t} = & \sum_{k=1}^8 n_k q_k^{\text{ion}} n_e + q^{\text{pen}} (n_{10} + n_{11}) n_1 + \\ & + n_1 n_{\text{Ne}^+} q^{\text{rech}} - n_e^2 n_{\text{Cu}^+} \sum_{k=1}^8 q_k^{\text{rec}} - \\ & - n_{\text{Cu}^+} n_e \sum_{k=1}^8 q_k^{\text{fr}} - \frac{n_{\text{Cu}^+} D_a^{\text{Cu}^+} f_{\text{Cu}^+}}{\Lambda_{\text{Cu}^+} (r_2 - r_1)}, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_{\text{Ne}^+}}{\partial t} = & \sum_{k=9}^{11} n_e n_k q_k^{\text{ion}} - n_e^2 n_{\text{Ne}^+} \sum_{k=9}^{11} q_k^{\text{rec}} - \\ & - n_e n_{\text{Ne}^+} \sum_{k=9}^{11} q_k^{\text{fr}} - n_{\text{Ne}^+} n_9^2 q^{\text{con}} - \\ & - n_1 n_{\text{Ne}^+} q^{\text{rech}} - \frac{n_{\text{Ne}^+} D_a^{\text{Ne}^+} f_{\text{Ne}^+}}{\Lambda_{\text{Ne}^+} (r_2 - r_1)}, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\frac{\partial n_m^+}{\partial t} = n_{\text{Ne}^+} n_9^2 q^{\text{con}} - n_m^+ n_e q^{\text{dis}}. \quad (16)$$

Здесь q^{rech} (см³/с), q^{con} (см⁶/с), q^{dis} (см³/с) – константы скорости перезарядки, конверсии и диссоциативной рекомбинации. В (16) диффузией молекулярных ионов пренебрегаем. В уравнениях (14), (15) величины Λ_{Cu^+} и Λ_{Ne^+} определяются как характерные расстояния от стенок, на которых скорости амбиполярного диффузионного устранения ионов сравниваются со скоростью их гибели за счет объемных процессов (рекомбинации) и рассчитываются по формулам

$$\Lambda_{\text{Cu}^+} \approx \sqrt{D_a^{\text{Cu}^+}} / \sqrt{\left(n_e^0\right)^2 \sum_{k=1}^8 q_k^{\text{rec}} + n_e^0 \sum_{k=1}^8 q_k^{\text{fr}}},$$

$$\Lambda_{\text{Ne}^+} \approx \frac{\sqrt{D_a^{\text{Ne}^+}}}{\sqrt{\left(n_e^0\right)^2 \sum_{k=9}^{11} q_k^{\text{rec}} + n_e^0 \sum_{k=9}^{11} q_k^{\text{fr}} + n_9^2 q^{\text{con}} + n_1 q^{\text{rech}}}},$$

где $n_e^0 \approx 1.5 \langle n_e \rangle$. Эти же значения Λ_{Cu^+} и Λ_{Ne^+} подставляются в формулу (9) (вместо Λ_k) для вычисления геометрических факторов f_{Cu^+} и f_{Ne^+} , входящих в уравнения (14), (15). Для определения характерной величины спада электронной концентрации возле стенки можно воспользоваться соотношением

$$\Lambda_e \approx \sqrt{D_a^e} / \sqrt{\left(n_e^0\right) \left(n_{\text{Cu}^+}^0 \sum_{k=1}^8 q_k^{\text{rec}} + n_{\text{Ne}^+}^0 \sum_{k=9}^{11} q_k^{\text{rec}} \right) + n_{\text{Cu}^+}^0 \sum_{k=1}^8 q_k^{\text{fr}} + n_{\text{Ne}^+}^0 \sum_{k=9}^{11} q_k^{\text{fr}} + n_m^+ q^{\text{dis}}}. \quad (17)$$

Концентрация электронов (средняя по объему) находится из соотношения

$$n_e = n_{\text{Ne}^+} + n_{\text{Cu}^+} + n_m^+.$$

Баланс энергии электронов. В гидродинамическом приближении, пренебрегая вязкой диссипацией, баланс энергии электронов можно записать [16, 20]:

$$\frac{3}{2} n_e \frac{\partial T_e}{\partial t} + \frac{3}{2} n_e \mathbf{u}_e \nabla T_e + \text{div} \mathbf{q}_e + n_e T_e \text{div} \mathbf{u}_e = w_{\text{fri}}^e - w_{\text{el}} + w_{\text{inel}}. \quad (18)$$

В левой части (18) \mathbf{q}_e – вектор плотности потока тепла электронов, \mathbf{u}_e – направленная скорость электронов. В правой части

$$w_{\text{fri}}^e = n_e \sum_a v_{ea} m_e (\mathbf{u}_e - \mathbf{u}_a)^2 \approx \frac{j^2}{\sigma} \quad (19)$$

– удельная мощность нагрева свободных электронов в результате взаимного трения потока электронов с тяжелыми частицами (ионами), движущимися с направленной скоростью \mathbf{u}_a . Учитывая, что в рассматриваемых условиях $|\mathbf{u}_e| \gg |\mathbf{u}_a|$ плотность электрического тока $\mathbf{j} \approx -en_e \mathbf{u}_e$, величину w_{fri}^e в (19) можно выразить через плотность тока и проводимость плазмы $\sigma = e^2 n_e / (m_e \sum_a v_{ea})$. Здесь e , m_e – заряд и масса электрона; $\sum_a v_{ea} = v_{e\text{Cu}} + v_{e\text{Cu}^+} + v_{e\text{Ne}} + v_{e\text{Ne}^+}$ – сумма частот упругих столкновений электронов с атомами и ионами меди и неона. В (18) второй член в правой части

$$w_{\text{el}} = \frac{3}{2} n_e \sum_a \alpha_{ea} v_{ea} (T_e - T_a) = 1.63 \times 10^{-3} \left(\frac{v_{e\text{Cu}} + v_{e\text{Cu}^+}}{63.5} + \frac{v_{e\text{Ne}} + v_{e\text{Ne}^+}}{20} \right) \times (T_e - 0.862 \times 10^{-4} T_g) n_e$$

– удельная мощность потерь энергии свободных электронов в упругих столкновениях с атомами и ионами; величина $\alpha_{ea} \approx 2m_e/m_a$, T_a – температуры

тяжелых частиц (атомов и ионов) полагаются одинаковыми и равными температуре рабочей смеси T_g , m_a – массы атомов и ионов. Третий член

$$w_{\text{inel}} = n_e \sum_k \left[n_k \sum_i E_{ki} q_{ki} - \left(\epsilon_k - \frac{3}{2} T_e \right) \times \left(n_k q_k^{\text{ion}} - n_e n_k^+ q_k^{\text{rec}} \right) \right] + q^{\text{rech}} E_{\text{ex}}^+ n_1 n_{\text{Ne}^+}^+ + q^{\text{pen}} n_1 \left[\left(E_{10} - J_{\text{Cu}} - \frac{3}{2} T_e \right) n_{10} + \left(E_{11} - J_{\text{Cu}} - \frac{3}{2} T_e \right) n_{11} \right] \quad (20)$$

– удельная мощность, связанная с обменом энергией между свободными электронами и тяжелыми частицами в неупругих столкновениях. В (20) $E_{ki} = E_k - E_i$ (эВ) – энергия возбуждения ($k < i$, $E_{ki} < 0$) или гашения ($k > i$, $E_{ki} > 0$) уровней электронным ударом, $\epsilon_k = J_k - E_k$ (эВ) – энергия ионизации с уровня k (для блоков см. ниже), $J_{\text{Cu}} = 7.726$ эВ – потенциал ионизации меди.

Уравнение (18), следуя работе [16], можно упростить, подставив известные выражения для направленной скорости электронов \mathbf{u}_e и вектора плотности потока тепла электронов \mathbf{q}_e . При этом полагаем, что \mathbf{u}_e является суммой амбиполярной скорости \mathbf{u}_{am} и токовой скорости \mathbf{u}_ϕ в азимутальном электрическое поле \mathbf{E}_ϕ в разрядной камере ИЛПМ. Плазма неоднородна только в радиальном направлении, так что $\mathbf{E}_\phi \perp \nabla n_e$, $\mathbf{E}_\phi \perp \nabla T_e$ и $\mathbf{u}_\phi \perp \mathbf{u}_{\text{am}}$. Кроме того, $D_a^e \ll D^e$, где D^e – коэффициент диффузии электронов, и $|\mathbf{u}_{\text{am}}| \ll |\mathbf{u}_\phi| \approx |\mathbf{u}_e|$. В этих условиях, согласно [16, 21], в пристеночном слое толщиной Λ_e , определенном выше, изменение концентрации электронов и ионов определяется амбиполярной диффузией. Непосредственно вблизи стенки образуется более узкий слой толщиной порядка дебаевского радиуса. Вблизи границы плазма–слой $(\nabla T_e / T_e) \ll (\nabla n_e / n_e)$ и граничное условие для T_e можно задавать, полагая на границе $(\nabla T_e)_{\text{тр}} \approx 0$. Это обусловлено тем, что коэффициент температуропроводности существенно

превышает коэффициент амбиполярной диффузии. В [16] осреднение по объему дивергентных членов проводилось для радиального диффузионного профиля концентрации n_e в цилиндрической трубке. В данной работе при интегрировании по сечению кольцевого разрядного объема использованы приближенные выражения (4), (5) для дивергентных членов и выражения (9), (17) для f_e и Λ_e . Однородность T_e учитывалась и при осреднении членов в уравнении баланса частиц. Окончательно баланс энергии электронов после осреднения приобретает вид (знаки осреднения везде опускаем)

$$\frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{0.4 \times 10^{19}}{n_e} w_j + \frac{2}{3n_e} (w_{\text{inel}} - w_{el}) - \frac{2f_e D_a^e}{3\Lambda_e (r_2 - r_1)} T_e \left(3 + \ln \left(\frac{\Lambda_e}{D_a^e} \sqrt{\frac{T_e}{m_e}} \right) \right). \quad (21)$$

Здесь в правой части $w_j(t) = \langle j_\varphi^2(t) / \sigma(t) \rangle_V$ – средняя по объему мгновенная удельная мощность джоулева нагрева ($\text{Вт}/\text{см}^3$) свободных электронов (см. ниже); второй член – неупругие и упругие потери энергии электронов. Последний член в правой части (21) – результат осреднения дивергентных членов в исходном уравнении для кольцевой геометрии разрядных камер. Так же как и для цилиндрической камеры [16, 21], он приближенно описывает диффузионное охлаждение электронов и отличается множителями перед D_a^e . Частоты упругих столкновений электронов с атомами меди $v_{e\text{Cu}}$ вычислялись по формуле

$$v_{e\text{Cu}} \approx n_{\text{Cu}} \langle \sigma_{e\text{Cu}} v_e \rangle_{v_e},$$

где были использованы численные значения транспортного сечения упругого столкновения электрона с атомом меди $\sigma_{e\text{Cu}}$ из [22] и осреднение проводилось по максвелловской функции распределения тепловых (хаотических) скоростей электронов v_e . Частоты упругих столкновений электронов с атомами неона $v_{e\text{Ne}}$ и с ионами меди и неона соответственно $v_{e\text{Cu}^+}$, $v_{e\text{Ne}^+}$ рассчитывались по формулам

$$v_{e\text{Ne}} = 1.11 \times 10^{11} T_e^{0.166} \sqrt{T_e} P_{\text{Ne}} T_g^{-1}, \quad (22)$$

$$v_{en_k^+} = (23.4 - 1.15 \lg n_e + 3.45 \lg T_e) 0.286 \times 10^{-5} n_k^+ T_e^{-1.5}. \quad (23)$$

Формула (22) взята из [23], а (23) из [24].

Таблицы всех используемых в уравнениях (10), (11), (14)–(17), (20) констант q_{ki} , q_k^{ion} , q_k^{rec} , q_k^{rech} , q_k^{fr} , q_k^{pen} , q_k^{con} , q_k^{dis} , A_{ki} , A_{ki}^{ef} , B_{gr} , B_{yel} , их экспериментальные и расчетные значения и методики расчета для ЛПМ представлены в монографиях [4] (Прило-

жения П2–П5) и [3]. Там же собран материал по константам для лазеров на самоограниченных переходах в парах других металлов – бария, золота, свинца и др.

Развитие спектральной плотности вынужденного излучения ИЛПМ

Уравнения развития спектральных плотностей ρ_{gr} или ρ_{yel} в оптическом резонаторе в нульмерном приближении получают обычно осреднением по длине резонатора нестационарных уравнений переноса излучения, записанных для двух встречных потоков, распространяющихся вдоль оси резонатора (см., например, [25, 26]):

$$\frac{\partial \rho_{gr}}{\partial t} = (E_5 - E_2) \times \left[\frac{\Delta \Omega}{4\pi} \beta_{gr} A_{gr} n_5 + B_{gr} \rho_{gr} \Phi_{gr} \left(n_5 - \frac{g_5}{g_2} n_2 \right) \right] \frac{\ell_{pl}}{\ell_r} - \rho_{gr} q_r. \quad (24)$$

Здесь представлено выражение лазерной генерации на зеленой линии, для желтой линии оно полностью аналогично. В (24) $\Omega \approx \pi(r_2^2 - r_1^2)/\ell_r^2$ – телесный угол, в пределах которого распространяется лазерное излучение; ℓ_{pl} (см) – длина активной среды лазера; ℓ_r (см) – расстояние между зеркалами резонатора (см. рис. 1); q_r – декремент затухания энергии излучения в пустом резонаторе. Первый член в квадратных скобках описывает вклад спонтанного (“затравочного”) излучения, второй – усиление света в индуцированных переходах. Коэффициенты Φ_{gr} , β_{gr} (или Φ_{yel} , β_{yel} в аналогичном выражении для желтой линии генерации) и выше в (11) коэффициенты α_{gr} , α_{yel} учитывают конечность ширины спектральных линий. Их значения зависят от распределения интенсивности по частоте в контуре линии лазерного излучения $S_{\text{las}}(\nu)$ и в контуре поглощения спектральной линии $S_{\text{ab}}(\nu)$ [26] (для зеленой или желтой линии генерации). Опуская индексы gr и yel, запишем

$$\Phi = \int_{-\infty}^{\infty} S_{\text{las}}(\nu) S_{\text{ab}}(\nu) d\nu, \quad \beta = S_{\text{las}}(\nu_0^{\text{las}}) \int_{\Delta\nu_{\text{las}}} S_{\text{ab}}(\nu) d\nu, \quad \alpha = \Phi / S_{\text{las}}(\nu_0^{\text{las}}),$$

где $\Delta\nu_{\text{las}}$, ν_0^{las} – соответственно ширина контура линии генерации лазерного излучения и частота в середине этого контура. В условиях ЛПМ ширина $\Delta\nu_{\text{las}}$ близка к $\Delta\nu_{\text{ab}}$ – ширине линии поглощения, при этом образование продольных мод резонатора не наблюдается. На основании экспериментальных и расчетных данных из [4, 27, 28] по контурам этих линий вычислены средние по длительности импульса генерации значения для всех указанных коэффициентов, которые мож-

но использовать в расчетах ЛПМ и ИЛПМ (при $T_g \approx 2100\text{--}4000\text{ К}$).

Для зеленой линии генерации ЛПМ ($\lambda = 0.51\text{ мкм}$): $\varphi_{gr} \approx 1.17 \times 10^{-10}\text{ с}$, $\beta_{gr} \approx 1.7 \times 10^{-10}\text{ с}$, $\alpha_{gr} \approx 0.6$, $\Delta\nu_{las} \approx 5300\text{ МГц}$; для желтой линии ЛПМ ($\lambda = 0.578\text{ мкм}$): $\varphi_{yel} \approx 0.95 \times 10^{-10}\text{ с}$, $\beta_{yel} \approx 1.8 \times 10^{-10}\text{ с}$, $\alpha_{yel} \approx 0.24$, $\Delta\nu_{las} \approx 1300\text{ МГц}$.

В уравнении (24) при сильно несимметричном резонаторе ($R_1 \approx 1 - 0.3 \gtrsim R_2 \gtrsim 0$), согласно [26], декремент q_r может быть представлен в виде

$$q_r = \frac{2c(1 - R_2)}{\ell_r(1 + R_1)}.$$

Здесь c – скорость света; R_1, R_2 – коэффициенты отражения зеркал. При $R_1 \approx 1, R_2 \approx 0$ (ЛПМ с одним глухим зеркалом) это выражение дает правильное значение декремента $q_r \approx c/\ell_r$, равное обратной величине характерного времени ухода излучения из резонатора через один торец. Отметим, что в силу заданной геометрии разрядной камеры с центральной вставкой (см. рис. 1) возможно использование только плоских зеркал.

Мощность излучения лазера $W_{las}(t)$, выходящего из оптического резонатора через одно или оба зеркала, как известно:

$$W_{las}(t) = q_r \rho(t) \Delta\nu_{las} F \ell_r,$$

где F – площадь сечения лазерного пучка на выходных зеркалах.

Эффективные константы для блоков возбужденных уровней атомов

Концентрация n_k какого-либо блока уровней (рис. 2) равна сумме отдельных концентраций n_{ks} возбужденных частиц в блоке. Предполагается больцмановское распределение заселенностей уровней внутри блоков. При таком подходе уравнения баланса концентраций для блоков по форме полностью совпадают с аналогичными уравнениями для концентраций одиночных уровней (11). Блок рассматривается как некий эффективный уровень со своей эффективной энергией возбуждения, ионизации и эффективными константами заселения, расселения, спонтанного распада и т.п. [13].

Эффективные константы скорости возбуждения ($k < i$) электронным ударом и девозбуждения ($k > i$) блоков определяются как

$$q_{ki} = \sum_s \left(g_{ks} e^{-E_{ks}/T_e} \sum_m q_{ksim} \right) \left[\sum_s g_{ks} e^{-E_{ks}/T_e} \right]^{-1}.$$

Здесь q_{ksim} – прямая или обратная константа скорости возбуждения электронным ударом при переходе с отдельного уровня s блока k на уровень

m блока i ; g_{ks} и E_{ks} – статистические веса и энергии отдельных уровней блока.

Эффективные константы скорости ионизации q_k^{ion} , тройной рекомбинации q_k^{rec} и фоторекомбинации q_k^{fr} блоков рассчитываются как

$$q_k^{\text{ion}} = \sum_s \left[q_{ks}^{\text{ion}} g_{ks} e^{-E_{ks}/T_e} \left(\sum_s g_{ks} e^{-E_{ks}/T_e} \right)^{-1} \right],$$

$$q_k^{\text{rec}} = \sum_s q_{ks}^{\text{rec}}, \quad q_k^{\text{fr}} = \sum_s q_{ks}^{\text{fr}},$$

где $q_{ks}^{\text{ion}}, q_{ks}^{\text{rec}}, q_{ks}^{\text{fr}}$ – соответственно константы для отдельных уровней в блоке.

Эффективная энергия перехода с блока k на блок i и энергия ионизации блока k определяются по формулам

$$E_{ki} = \sum_s \left[g_{ks} e^{-E_{ks}/T_e} \sum_m (E_{ks} - E_{im}) q_{ksim} \right] / \left[\sum_s \left(g_{ks} e^{-E_{ks}/T_e} \sum_m q_{ksim} \right) \right],$$

$$\varepsilon_k = \sum_s \left(\varepsilon_{ks} g_{ks} q_{ks}^{\text{ion}} e^{-E_{ks}/T_e} \right) \times \left[\sum_s \left(g_{ks} q_{ks}^{\text{ion}} e^{-E_{ks}/T_e} \right) \right]^{-1},$$

где $\varepsilon_{ks} = J_k - E_{ks}$ (эВ) – энергия ионизации с отдельного уровня, J_k – потенциал ионизации меди или неона. Для $k = 1\text{--}8$ берется $J_k = J_{\text{Cu}} = 7.726\text{ эВ}$ при $E_{ks} < 7.726\text{ эВ}$. При $E_{8s} > 7.726\text{ эВ}$ подставляем $J_{\text{Cu}}' = 10.6\text{ эВ}$; при $k = 9, 10, 11$ $J_k = 21.56$ – потенциал ионизации неона.

Эффективная вероятность спонтанного перехода между блоками определена как

$$A_{ki}^{\text{ef}} = \sum_s \left(g_{ks} e^{-E_{ks}/T_e} \sum_m A_{ksim}^{\text{ef}} \right) / \left[\sum_s g_{ks} e^{-E_{ks}/T_e} \right],$$

где A_{ksim}^{ef} – эффективные вероятности спонтанных переходов между отдельными уровнями s и m (с учетом реабсорбции).

УРАВНЕНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СХЕМЫ ИНДУКЦИОННОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ И ЗАКОН ОМА В ПЛАЗМЕ ИЛПМ

Упрощенно электрическая схема индукционного возбуждения может быть представлена в виде трансформатора (без сердечника), в котором роль первичной обмотки играет индуктор (соленоид). Роль вторичной обмотки – плазменный “толстый” виток (рис. 4). Накопительная емкость C , заряженная до начального напряжения $U_c(0)$, замыкается через ключ на индуктор. В результате в кольцевой камере возникают свобод-

ные затухающие колебания вихревого электрического поля и азимутального тока накачки.

На рис. 4 L_{ind} , J_{ind} и R_{ind} – индуктивность индуктора, полный ток и омическое сопротивление первичной цепи; L – индуктивность участка цепи, включающей емкость и ключ; L_{pl} , J_{pl} и $R_{\text{pl}}(t)$ – индуктивность, полный ток и быстро меняющееся сопротивление плазменного “витка”. Значения L_{ind} , L_{pl} и взаимная индуктивность M вычислялись по известным формулам [29] с учетом геометрии проводников. Коэффициент трансформаторной связи находился по соотношению $K_r = M/\sqrt{L_{\text{ind}}L_{\text{pl}}}$. Электрическое сопротивление ключа $R_{\text{key}}(t)$ описывалось модельной функцией, позволявшей задавать как время коммутации, так и джоулевы потери в ключе. Частота f_{tr} свободных колебаний тока в основном определяется параметрами первичной цепи L_{ind} , L и C , а затухание колебаний – сопротивлением плазмы $R_{\text{pl}}(t)$ и R_{ind} . В рассматриваемых условиях работы ИЛПМ f_{tr} лежит в области высоких частот. В этом случае лучше использовать нестационарный обобщенный закон Ома [16, 19], связывающий плотность тока \mathbf{j} и электрическое поле \mathbf{E} в условиях неравновесной, слабоионизованной плазмы:

$$\mathbf{j}(r, t) = \sigma \mathbf{E}(r, t) + \tau_{ea} \frac{\partial \mathbf{j}(r, t)}{\partial t} + \tau_{ea} \mathbf{j}(r, t) \frac{1}{n_e} \frac{\partial n_e}{\partial t}. \quad (25)$$

Здесь $\tau_{ea} = 1/\sum_a v_{ea}$ – характерное время пробега электронов в упругих столкновениях. В (25) пренебрегается градиентными членами, пондеромоторной силой и плазма полагается неподвижной. Отметим, что в случае, когда σ , n_e и τ_{ea} не зависят от времени и однородны, а поле \mathbf{E} есть заданная гармоническая функция с частотой ω (вынужденные колебания), уравнение (25) сводится к известному алгебраическому выражению для \mathbf{j} , \mathbf{E} и высокочастотной проводимости, зависящей от соотношения величин τ_{ea} и ω [30]. Но такие условия в ИЛПМ не выполняются, \mathbf{E} не является заданной функцией. Электрическое сопротивление плазмы довольно быстро изменяется во время короткого (~ 150 нс) импульса возбуждения, что связано с зависимостью σ и τ_{ea} от температуры и концентрации электронов (см. ниже).

В правой части (25) последние два члена обусловлены силой инерции свободных электронов плазмы при изменении их скорости дрейфового движения, что можно трактовать как наличие дополнительной сторонней силы [31], действующей на заряды. Учет этой силы приводит к тому, что в уравнении Кирхгофа [32] для вторичной цепи трансформаторной схемы (для плазменного “витка”), появляется дополнительная сторонняя электродвижущая сила \mathcal{E} [31], зависящая от производных тока $dJ_{\text{pl}}(t)/dt$ и эффективного сопротивления

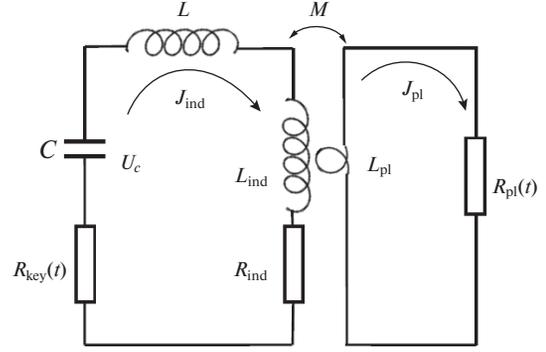


Рис. 4. Электрическая схема генератора импульсов накачки ИЛПМ.

$dR_{\text{pl}}(t)/dt$ (кроме ЭДС самоиндукции и взаимной индукции).

В этом случае систему дифференциальных уравнений, описывающую работу схемы на рис. 4 (двух индуктивно связанных контуров), можно представить в виде

$$U_c = (L + L_{\text{ind}}) \frac{dJ_{\text{ind}}}{dt} - \quad (26)$$

$$- M \frac{dJ_{\text{pl}}}{dt} - J_{\text{ind}} (R_{\text{key}}(t) + R_{\text{ind}}),$$

$$0 = R_{\text{pl}} J_{\text{pl}} + L_{\text{pl}} \frac{dJ_{\text{pl}}}{dt} - M \frac{dJ_{\text{ind}}}{dt} + \mathcal{E}, \quad (27)$$

$$\frac{dU_c}{dt} = - \frac{J_{\text{ind}}}{C}. \quad (28)$$

Используя (25), можно показать, что приближенно

$$\mathcal{E} \approx \frac{\tau_{ea}}{2J_{\text{pl}}} \frac{d(R_{\text{pl}} J_{\text{pl}}^2)}{dt}. \quad (29)$$

В (26), (27), (29) азимутальный ток в плазменном “витке” с учетом цилиндрической геометрии определяется как

$$J_{\text{pl}}(t) = \int_S j_{\text{pl}}(r, t) dS.$$

Здесь $j_{\text{pl}} \equiv j_{\phi}$, $dS = \ell_{\text{pl}} dr$ – элемент площади поперечного сечения тока $S = (r_2 - r_1)\ell_{\text{pl}}$. Мощность джоулевого тепловыделения $W_{\text{pl}}(t)$ во всем плазменном кольцевом объеме и эффективное сопротивление R_{pl} , определяющие диссипацию электрической энергии в джоулево тепло, представляются в виде [33]

$$W_{\text{pl}}(t) = 2\pi \int_V \frac{j_{\text{pl}}^2(r, t)}{\sigma(r, t)} r dr \ell_{\text{pl}}, \quad R_{\text{pl}}(t) = \frac{W_{\text{pl}}(t)}{J_{\text{pl}}^2(t)}, \quad (30)$$

где интегрирование проводится по объему $V = \pi(r_2^2 - r_1^2)\ell_{\text{пл}}$ разрядной камеры. Поэтому среднюю по объему мощность $w_j(t)$ в балансе энергии электронов (21) можно представить как

$$w_j(t) \approx \frac{J_{\text{пл}}^2(t)R_{\text{пл}}(t)}{V}. \quad (31)$$

В то же время для того, чтобы использовать (30) и (31), необходимо знать радиальную зависимость плотности тока $j_{\text{пл}}(r, t)$ и проводимости $\sigma(r, t)$. Детальный обзор работ, посвященных расчету радиального распределения электрических параметров в плазме индукционного разряда, можно найти, например, в [33]. В работе [11] приводятся формулы для расчета $R_{\text{пл}}(t)$ применительно к полному металлическому цилиндру с однородной и постоянной проводимостью σ и с любой глубиной проникновения поля δ в проводящую среду. Выражения состоят из сложных комбинаций функций Бесселя. Значения $R_{\text{пл}}(t)$, рассчитанные по этим формулам с использованием средних по объему разрядной камеры ИЛПМ значений $\sigma(t)$ в условиях слабого скин-эффекта $\delta \geq (r_2 - r_1)$, лежат в области

$$\begin{aligned} R_{\text{пл}}(t) &\approx (2.7-4.7)2\pi/\sigma(t)\ell_{\text{пл}} \approx \\ &\approx \pi(r_2 + r_1)/(\sigma(t)S). \end{aligned} \quad (32)$$

В численных экспериментах ограничимся использованием соотношений (31), (32), связывающих систему дифференциальных уравнений нульмерной модели плазменных процессов (11), (14)–(16), (21), (24) с системой электротехнических уравнений (26)–(29), описывающих формирование импульсов накачки. Совместное решение этих систем уравнений дает самосогласованные значения всех плазменных и электротехнических искомым величин. Отметим, что совместно решается и тепловая задача. В модель работы ИЛПМ входит специально разработанная методика расчета тепловых параметров рабочего тела и элементов высокотемпературной конструкции лазера [34]. В численных экспериментах последовательно просчитывались десятки импульсов накачки, следующих с заданной частотой f , и находился установившийся по всем параметрам режим работы ИЛПМ. По найденным значениям $f_{\text{тр}}$ и σ вычислялась толщина скин-слоя δ [11] и контролировалось выполнение условия $\delta \geq (r_2 - r_1)$. По начальному запасу энергии в накопительной емкости $CU_c^2/2$ оценивалось максимально возможное значение магнитного поля H , создаваемого индуктором. Обычно, оно не превосходило 100–150 эрстед, чему соответствовало максимальное значение параметра Холла для электронов [30] $\beta_e = \tau_{\text{ед}}eH/m_e c \lesssim 0.3$, $\beta_e^2 < 0.1$. Поэтому проводимость $\sigma(t)$ можно считать изотропной величиной

и пренебрегать влиянием магнитного поля на процессы переноса. В случае невыполнения перечисленных выше условий, ограничивалась область задаваемых исходных параметров. Отметим, что влияние указанных значений магнитных полей на генерацию лазерного излучения вследствие эффекта Зеемана, согласно экспериментальным работам (см. гл. 4 в [4]), оказалось невелико.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

С использованием описанной выше модели ИЛПМ впервые показана возможность генерации лазерного излучения в ЛПМ с накачкой импульсно-периодическим ВЧ-разрядом [5–7], в отличие от электродных ЛПМ, где используется аperiodический импульс тока накачки. При этом в численных экспериментах обнаружен ряд новых эффектов – своеобразное поведение кинетических параметров в плазме и разнообразие форм импульсов излучения в зависимости от параметров ВЧ-разряда [7, 35, 36]. Для примера, рассмотрим некоторые результаты расчетов ИЛПМ с объемом кольцевой камеры $V = 1.7$ л ($r_1 = 2.5$ см, $r_2 = 3.5$ см, $\ell_{\text{пл}} = 90$ см) с одновитковым индуктором: $K_r \approx 0.53$, $C = 1.5$ нФ, $U_c(0) = 35$ кВ, $f \sim 10$ кГц, $f_{\text{тр}} \approx 30$ МГц, $T_w = 1823$ К, $n_{\text{Cu}} = 1.5 \times 10^{15}$ см $^{-3}$, $P_{\text{Ne}} = 250$ Торр, $\ell_r = 130$ см, $R_1 = 0.97$, $R_2 \approx 0.1$. На рис. 5 представлена динамика основных параметров плазмы в период импульса возбуждения ($0 < t \lesssim 125$ нс) и в межимпульсный период релаксации ($1.25 \times 10^{-7} \lesssim t \lesssim 10^{-4}$ с). Из рис. 5а видно, что мгновенная удельная мощность $w_j(t)$ пульсирует с удвоенной частотой тока ~ 60 МГц. Это приводит к значительным пульсациям электронной температуры T_e . Эффективное сопротивление $R_{\text{пл}}(t) \sim 1/\sigma(t)$, согласно (32), тоже пульсирует, поскольку проводимость $\sigma(t)$ зависит от T_e . Значительное возрастание $R_{\text{пл}}(t)$ на начальном участке ($0 < t \lesssim 30$ нс) связано с резким ростом T_e . Увеличение концентрации электронов не сдерживает рост $R_{\text{пл}}(t)$, поскольку $n_e(t)$ нарастает медленно и плавно. Последнее обусловлено тем, что характерные ионизационные времена рабочей смеси существенно больше периода ВЧ-колебаний. Высокую скорость ввода энергии можно объяснить большой крутизной колебаний тока в цуге и значительным увеличением сопротивления плазмы $R_{\text{пл}}(t)$. Этими кинетическими эффектами отличается возбуждение лазерной среды индукционным ВЧ-разрядом от возбуждения аperiodическим разрядом с большой длительностью переднего фронта импульса тока. В межимпульсный период (рис. 5б), когда происходит остывание электронов и идут рекомбинационные процессы, динамика параметров плазмы примерно такая же, как и в обычном электродном ЛПМ [37, 38].

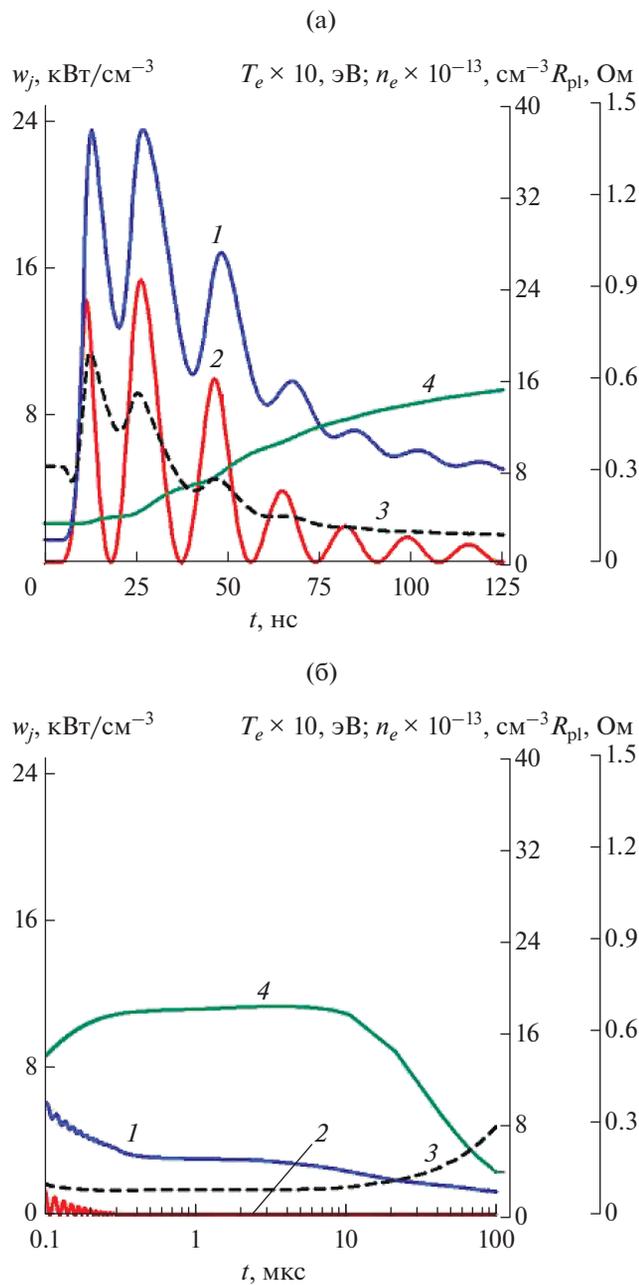


Рис. 5. Динамика параметров плазмы: (а) – период импульса возбуждения ($\tau_{at} \approx 125$ нс), (б) – межимпульсный период; 1 – T_e , 2 – w_j , 3 – R_{pl} , 4 – n_e .

При $10 < t < 100$ мкс концентрация электронов n_e заметно снижается и основной вклад в охлаждение электронов вносят спонтанное излучение и отчасти амбиполярная диффузия. Процесс идет квазистационарно. Отметим, что в период времени $1 < t < 100$ мкс учет в уравнениях (11), (14)–(16) и (21) переноса частиц и энергии электронов на стенки (в нульмерном приближении) вносит заметный вклад в величину предимпульсных значений $n_e(0)$, $n_k(0)$, $T_e(0)$, $R_{pl}(0)$. В период импульса возбуждения $0 < t < 200$ нс роль этих процессов

мала по сравнению с объемными процессами (возбуждение и ионизация уровней, джоулев нагрев электронов).

При стандартном наборе исходных задаваемых параметров ИЛПМ, указанных выше, лазерная генерация $W_{las}(t)$ в каждом пути накачки имела форму одиночного импульса амплитудой свыше

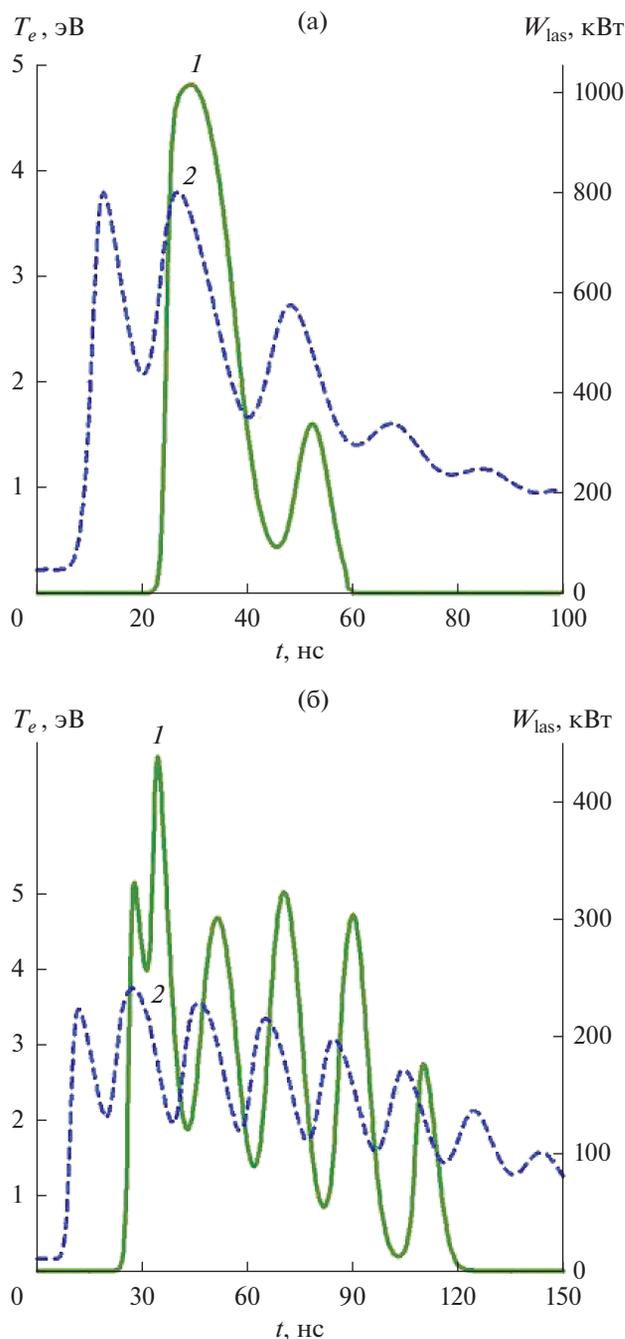


Рис. 6. Динамика $W_{las}(t)$ (1) и $T_e(t)$ (2): (а) – $f = 10$ кГц, $U_c(0) = 35$ кВ, $R_2 = 0.1$; (б) – $f = 2$ кГц, $U_c(0) = 28$ кВ, $\ell_r = 100$ см, $R_2 = 0.02$.

1 МВт, при этом наблюдаются небольшие специфические пульсации $W_{\text{las}}(t)$, связанные с пульсациями T_e в ВЧ-разряде (рис. 6а). Выходная средняя мощность излучения достигала уровня в 100–160 Вт, что указывает на практическую перспективу таких лазеров.

При средних $f_{\text{tr}} \sim 20\text{--}50$ МГц, низких частотах $f < 2\text{--}3$ кГц, напряжениях $U_c(0) < 30$ кВ генерация ИЛПМ $W_{\text{las}}(t)$ приобретала своеобразную форму в виде “гребенки” регулярных пульсаций излучения с частотой $2f_{\text{tr}}$ (рис. 6б). С увеличением f_{tr} свыше 70–80 МГц пульсации T_e и $W_{\text{las}}(t)$ практически сглаживались.

При малых $f_{\text{tr}} \sim 10$ МГц пульсации T_e возрастали и “гребенка” распалась на два–три отдельных импульса излучения. Детально эти эффекты и динамика кинетических параметров плазмы представлены в численных экспериментах [35, 36]. Отметим, что такая форма импульсов генерации неспецифична для обычных ЛПМ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Обоснована и представлена модель кинетики плазменных процессов в индукционном импульсно-периодическом ВЧ-разряде, возбуждающем рабочую среду лазеров на самоограниченных переходах атомов металлов. Рассмотрен вариант нульмерного приближения балансов концентраций возбужденных атомов и энергии электронов применительно к кольцевой геометрии разрядной камеры. Модель учитывает упругие, неупругие и радиационные процессы. Представлены выражения, описывающие диффузионное охлаждение электронного газа и диффузию атомов в кольцевой геометрии. Модель позволяет рассчитать основные физические параметры плазмы и выходные характеристики ИЛПМ, выявить ряд тонких эффектов. Разработка физической модели ИЛПМ и проведение численных экспериментов актуальны для оценки перспективы создания таких лазеров и их практического применения.

Автор выражает благодарность В.М. Батенину за поддержку и участие в работе по этой теме, а также за полезное обсуждение данной статьи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Исаев А.А., Петраш Г.Г.* Исследование импульсных газовых лазеров на атомных переходах. В сб. Импульсные газоразрядные лазеры на переходах атомов и молекул. М.: Наука, 1975. (Тр. ФИАН. 1975. Т. 81. 3 с.).
2. *Little C.E.* Metall Vapor Lasers: Physics, Engineering, and Applications. Chichester (UK): J. Wiley and Sons Ltd., 1999. 620 p.
3. *Batenin V.M., Buchanov V.V., Boichenko A.M., Kazaryan M.I., Klimovskii I.I., Molodykh E.I.* High Brightness Metal Vapor Lasers. V. 1. Physical Fundamentals and Mathematical Models. Boca Raton: CRC Press, 2016. 600 p.
4. *Батенин В.М., Бохан П.А., Бучанов В.В., Евтушенко Г.С., Казарян М.А., Карпухин В.Т., Климовский И.И., Маликов М.М.* Лазеры на самоограниченных переходах атомов металлов. Т. 2 / Под ред. Батенина В.М. М.: Физматлит, 2011. 610 с.
5. *Маликов М.М., Казарян М.А., Карпухин В.Т.* О возможности эффективной накачки лазеров на парах меди импульсно-периодическим индукционным разрядом // Краткие сообщения по физике. 2015. Т. 42. № 5. С. 28.
6. *Батенин В.М., Казарян М.А., Карпухин В.Т., Лябин Н.А., Маликов М.М.* Конструктивные и физические особенности индукционных коаксиальных лазеров на парах меди // Физика плазмы. 2016. Т. 42. № 11. С. 1013.
7. *Batenin V.M., Kazaryan M.A., Karpukhin V.T., Malikov M.M.* Copper Vapor Laser Pumped by Pulse-periodic High-frequency Discharge // High Temperature. 2017. V. 55. № 5. P. 678.
8. *Григорьянц А.Г., Казарян М.А., Лябин В.Н.* Лазерная прецизионная микрообработка материалов. М.: Физматлит, 2017. 416 с.
9. *Евтушенко Г.С., Казарян М.А., Торгаев С.Н., Тригуб М.В., Шиянов Д.В.* Скоростные усилители яркости на индуцированных переходах в парах металлов. Томск: СТТ, 2016. 246 с.
10. *Вараксин А.Ю., Ромаш М.Э., Копейцев В.Н.* О возможностях визуализации при моделировании воздушных смерчей // ТВТ. 2010. Т. 48. № 4. С. 617.
11. Установки индукционного нагрева / Под ред. Слущоцкого А.Е. Л.: Энергоиздат, 1981.
12. *Директор Л.Б., Маликов М.М.* Физическая модель и методика расчета параметров лазера на парах меди. Препринт № 5-249. М.: ИВТАН, 1988. 52 с.
13. *Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Т.* Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. М.: Наука, 1982.
14. *Биберман Л.М.* Приближенный способ учета диффузии резонансного излучения // ДАН СССР. 1948. Т. 59. № 4. С. 659.
15. *Хастед Дж.* Физика атомных столкновений. М.: Мир, 1965.
16. *Голант В.Е., Жилинский А.П., Сахаров С.А.* Основы физики плазмы. М.: Атомиздат, 1977.
17. *Директор Л.Б., Маликов М.М., Фомин В.А.* Реабсорбция излучения неоднородной низкотемпературной плазмы // ЖТФ. 1987. Т. 57. № 1. С. 28.
18. *Кошинар М., Крюков Н.А., Редько Т.П.* Диффузия атомов меди в инертных газах // Оптика и спектроскопия. 1981. Т. 50. № 1. С. 62.
19. *Франк-Каменецкий Д.А.* Лекции по физики плазмы. М.: Атомиздат, 1964.
20. *Гудзенко Л.И., Яковленко С.И.* Плазменные лазеры. М.: Атомиздат, 1978.
21. *Жилинский А.П., Ливенцева И.Ф., Цендин Л.Д.* Баланс энергии электронного газа в низкотемпературной слабоионизованной плазме // ЖТФ. 1977. Т. 47. № 2. С. 304.
22. *Scheibner K.F., Hazi A.U., Henry R.J.W.* Electron-impact Excitation Cross Sections for Transitions in Atomic Copper // Phys. Rev. A. 1987. V. 35. № 11. P. 4869.

23. *Baille P., Chang J.-S., Claude A., Hobson R.M., Ogram G.L., Yau A.W.* Effective Collision Frequency of Electrons in Noble Gases // *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 1981. V. 14. P. 1485.
24. *Брагинский С.И.* Вопросы теории плазмы. Т. 1 / Под ред. Леонтовича М.А. М.: Госатомиздат, 1963.
25. Методы расчета оптических квантовых генераторов / Под ред. Степанова Б.И. Минск: Наука и техника, 1968. Т. 2. С. 184.
26. *Жидков А.Г., Протопопов С.В., Серeda О.В., Терских А.О., Яковленко С.И.* Формирование светового потока в лазерных системах // *Тр. ФИАН.* 1989. Т. 21. С. 116.
27. *Исаев А.А.* Спектральный состав индуцированного излучения импульсного лазера на парах меди // *Квантовая электроника.* 1980. Т. 7. № 3. С. 599.
28. *Батенин В.М., Климовский И.И., Морозов А.В., Селезнева Л.А.* Спектральный состав индуцированного излучения лазера на парах меди и его временная эволюция // *ТВТ.* 1979. Т. 17. № 3. С. 483.
29. *Калантаров П.Л., Цейтлин Л.А.* Расчет индуктивностей. Л.: Энергия, 1970.
30. *Райзер Ю.П.* Физика газового разряда. 3-е изд. М.: Интеллект, 2009. 736 с.
31. *Тамм И.Е.* Основы теории электричества. М.: Наука; Гл. ред. физ.-мат. лит., 1976.
32. *Попов В.П.* Основы теории цепей. М.: Высшая школа, 2007.
33. *Дресвин С.В.* Основы теории и расчета высокочастотных плазмотронов. Л.: Энергоатомиздат, 1991.
34. *Директор Л.Б., Карпухин М.Т., Маликов М.М.* Теплофизическая модель лазеров на парах металлов с разрядными камерами цилиндрической и коаксиальной геометрии // *ТВТ.* 2014. Т. 52. № 3. С. 442.
35. *Батенин В.М., Карпухин В.Т., Маликов М.М., Менделеев В.Я., Казарян М.А., Захарян Р.А., Лябин Н.А.* Особенности излучения лазера на парах меди, возбуждаемого импульсно-периодическим ВЧ-разрядом // *Краткие сообщения по физике.* 2018. Т. 45. № 6. С. 11.
36. *Batenin V.M., Kazaryan M.A., Karpukhin V.T., Malikov M.M.* Dependence of Induction Copper Vapor Laser Radiation on the Parameters of RF Discharge and the Optical Cavity // *Laser Phys.* 2019. V. 29. № 8. P. 5002.
37. *Директор Л.Б., Маликов М.М.* Баланс энергии электронов и возбужденных атомов в плазме лазера на парах меди // *ТВТ.* 1989. Т. 27. № 5. С. 1036.
38. *Дьячков Л.Г., Кобзев Г.А.* Баланс энергии электронов в послесвечении лазеров на парах металлов // *ЖТФ.* 1978. Т. 48. № 11. С. 2343.

УДК 537.5;621.793.182

ПЛАЗМЕННОЕ АЛИТИРОВАНИЕ СТАЛИ ФОЛЬГОЙ ПРИ ТЕМПЕРАТУРЕ НИЖЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ПЛАВЛЕНИЯ АЛЮМИНИЯ

© 2022 г. Н. Mahmoudi¹, S. M. M. Hadavi^{1, 2, *}, Y. Palizdar¹¹Materials and Energy Research Center, Karaj, Iran²Tarbiat Modares University, Tehran, Iran

*E-mail: s.hadavi@modares.ac.ir

Поступила в редакцию 08.08.2019 г.

После доработки 08.08.2019 г.

Принята к публикации 19.05.2021 г.

В работе исследуется алитирование стали AISI 4340, когда образец покрывался алюминиевой фольгой (Al–1.6 мас. % Si) толщиной 50 мкм и помещался на место катода генератора тлеющего разряда. Образец нагревался при повышении силы тока и постепенном повышении давления и напряжения. Установка рассчитана на обработку образца при 600°C (температура плавления алюминия). Для сравнения проведен эксперимент при 750°C. Алюминирование проводилось в течение примерно 5 мин при рабочей температуре. Характеристики покрытия исследованы с помощью автоэмиссионной сканирующей электронной микроскопии, энергодисперсионной спектроскопии и рентгеновской дифракции. Покрытие состояло из двойного слоя толщиной 90 мкм из богатых алюминием фаз FeAl₃ и Fe₂Al₅ под алюминием в процессе обработки при 600°C. Сделан вывод о том, что воздействие плазмы заключалось не только в нагреве образца, но и в обеспечении диффузионной пары Al–сталь и усилении взаимной диффузии элементов железа и алюминия в алюминоидах железа с высоким содержанием алюминия. Плазменное алитирование фольгой при 750°C привело к формированию многослойного покрытия, состоящего из фаз алюминоида железа (Fe₂Al₅ и FeAl) толщиной ~140 мкм. Сравнение толщины покрытия, полученного в данном исследовании, с толщиной покрытия, полученного при горячем алитировании погружением, показало, что бомбардировка ионами поверхности образца во время плазменного процесса увеличивает толщину покрытия за счет активации поверхности и усиления взаимной диффузии железа и алюминия в алюминоидах.

DOI: 10.31857/S0040364422050088

ВВЕДЕНИЕ

Алитирование – обработка поверхности для повышения стойкости подложки к высокотемпературному окислению и коррозии [1–3]. Фактически во время эксплуатации при высоких температурах на алитированной поверхности образуется относительно плотный оксид алюминия, который действует как пассивный слой для дальнейшей диффузии анионов и/или катионов. Алюминидные покрытия изготавливаются с использованием различных диффузионных и диффузионно-наплавочных процессов. Пакетное алитирование, заключающееся в диффузии алюминия в ходе реакции галогенидных активаторов с алюминиевым порошком, является основной технологией обработки в диффузионных процессах. Горячее алитирование, т.е. погружение основного металла в расплавленный алюминий при последующей диффузионной обработке, является широко используемым методом среди диффузионно-наплавочных технологий. Интерес представляет получение адгезивных алюминидных фаз в качестве слоя покрытия с высоким содержанием алюми-

ния. Также ценность представляет процесс, позволяющий сократить время нанесения покрытия и снизить рабочую температуру как с технической, так и с экономической точки зрения.

Помимо традиционных диффузионных и диффузионно-наплавочных методов, в последнее время практикуется плазменно-пастовое алитирование титановых сплавов [4] и сталей [5, 6]. В этом методе алюминиевый порошок в качестве прекурсора помещается на поверхность основного металла, где алюминий диффундирует в поверхность подложки с помощью энергии, вырабатываемой при ионной бомбардировке из плазмы тлеющего разряда. Однако введение других легирующих элементов совместно с алюминием затруднено из-за неравномерности распределения порошковых добавок на поверхности подложки. В [7] использовалась алюминиевая фольга для алитирования углеродистой стали. Пять листов алюминиевой фольги толщиной 20 мкм прессовались на верхнюю часть стальной подложки, чтобы получить источник Al общей толщины 100 мкм для диффузионной пары. Перед диффузионной обработкой образцы нагревались до 650°C и выдержи-

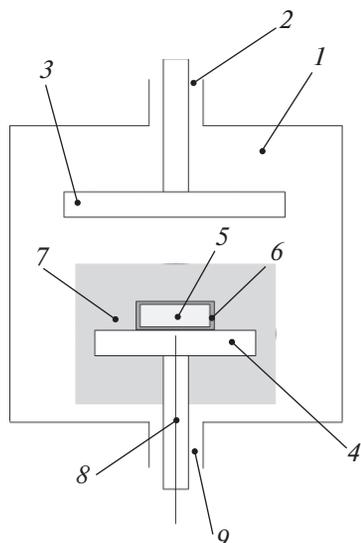


Рис. 1. Схематическое изображение плазменного реактора: 1 – камера, 2 – вход для газа, 3 – пластина-анод, 4 – пластина-катод, 5 – образец, 6 – алюминиевая фольга, 7 – тлеющий разряд, 8 – термопара, 9 – выход для газа.

вались в течение 1 ч в вакууме (10^{-3} Па). Микроструктура образца состояла из одного слоя Al толщиной 100 мкм. Затем применялась диффузионная обработка при температурах 700, 800, 900, 1000°C.

Цель данной работы – исследовать новый процесс, называемый одностадийным плазменным алитированием фольгой, протекающий при температуре 600°C (ниже температуры плавления алюминия). Для выяснения влияния плазмы проведена еще одна серия экспериментов при 750°C, т.е. с плавлением алюминиевой фольги.

ЭКСПЕРИМЕНТ

Прокатный цилиндр из стали AISI 4340 имеет следующий состав: содержание С – 0.37, Ni – 2.0, Cr – 1.0, Mo – 0.3, Mn – 0.6, Si – 0.3, P – 0.015, S – 0.01 мас. %. Цилиндр из данной стали разрезался на образцы диаметром 12 мм и высотой 2 мм. Перед нанесением покрытия поверхность образцов шлифовалась до средней шероховатости $R_a = 0.3$ мкм, обезжиривалась и очищалась этанолом. Затем образцы покрывались алюминиевой фольгой толщиной 50 мкм номинального состава Al–1.6 мас. % Si. Плазменное алитирование фольгой проводилось в плазменном реакторе, схема которого показана на рис. 1.

После откачки камеры (объемом 2.7 л) до давления около 0.1 мбар в камеру нагнетался аргон в качестве рабочего газа до давления около 0.5 мбар. Плазма тлеющего разряда инициировалась вокруг катодной пластины путем подачи на цепь

напряжения 250 В от источника постоянного тока максимальной мощностью 2 кВт. Для нагрева образца помещались на катодную пластину, где температура увеличивалась за счет постепенного увеличения давления рабочего газа, а также потенциала между катодом и анодом. Поверхность образца достигала заданной температуры 600 и 750°C примерно через 30 и 45 мин соответственно. По достижении образцом температуры эксперимента давление газа и напряжение выдерживались фиксированными в течение 5 мин. По истечении времени нагрева образец охлаждался отключением потенциала и пропусканием через камеру газообразного аргона до достижения комнатной температуры.

Поперечные сечения и элементный состав образцов с покрытием исследовались с помощью сканирующей электронной микроскопии с полевой эмиссией (СЭМ-ПЭ) совместно с энергодисперсионной спектроскопией (ЭДС). Фазовая структура поверхностного слоя алитированных образцов анализировалась методом рентгеновской дифракции (РФА) с использованием $\text{CuK}\alpha$ -излучения. Микротвердость каждого слоя покрытия измерялась по поперечному сечению образца при нагрузке 100 г в течение 10 с.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Микроструктуры поперечного сечения образцов, алюминированных при 600 и 750°C, представлены на рис. 2. Слой покрытия в образце, алитированном при 600°C, состоял из двойного слоя алюминидов железа и небольшого количества алюминия поверх алюминидов общей толщиной около 90 мкм (рис. 2а). Слой покрытия, полученный на образце, алитированном при 750°C, состоял из четырех дискретных слоев общей толщиной около 125–150 мкм (рис. 2б). При этом покрытие, полученное при 750°C, более однородно, чем покрытие, сформированное при 600°C.

Поверхность раздела подложка–покрытие относительно плоская у образца, полученного при 750°C, тогда как для образца, обработанного при 600°C, граница раздела неровная (рис. 2).

Химические составы в точках А–D, отмеченных на рис. 2а, в диффузионном слое образца, алитированного при 600°C, приведены в табл. 1. Химический состав в точке А на верхней части покрытия соответствует алюминиевой фольге, содержащей примерно 1.7 ат. % кремния. В точке В на границе слоев 1 и 2 соотношение концентраций алюминия и железа составляет 70.5/22.5. Наложение этого соотношения без учета содержания кремния на фазовую диаграмму Fe–Al позволило уточнить состав фаз. На рис. 3 показана система Fe–Al и насыщенная Al часть фазовой диаграммы, опубликованная в [8, 9]. В точке В на

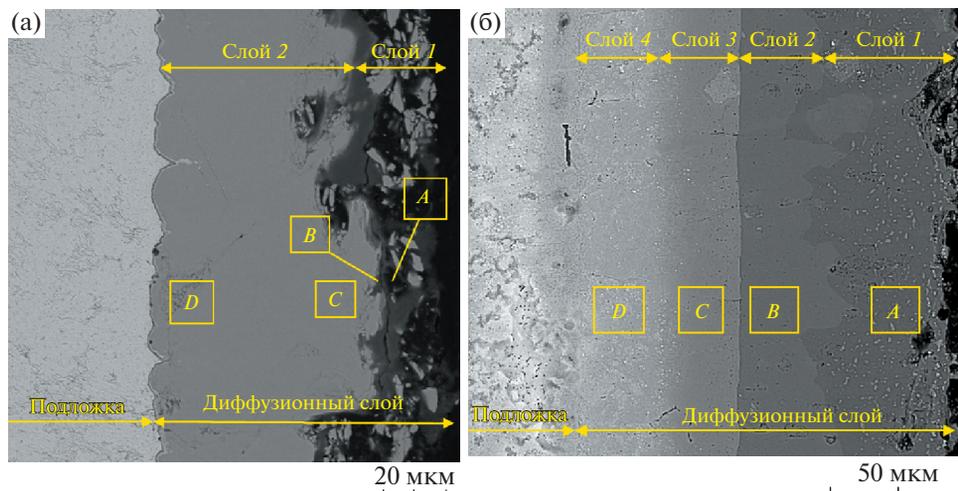


Рис. 2. Поперечные сечения образцов с покрытием, алитированным при (а) 600 и (б) 750°C.

рис. 2а образец может состоять из богатых алюминием фаз алюминидов железа $FeAl_3$ и/или Fe_2Al_5 , тогда как согласно рис. 2б возможно образование Fe_4Al_{13} , в котором больше алюминия, чем в $FeAl_3$. Это согласуется с измеренным содержанием алюминия в точке В.

В [10] обобщены диапазоны стабильности и плотности фаз в системе железо–алюминий (табл. 2). На основании яркости фаз на изображениях электронной микроскопии обратного рассеяния и с учетом плотностей фаз вместе с ЭДС-анализом можно выделить фазы Al–Fe.

В [11] исследованы интерметаллические соединения, образующиеся в системе Fe–Al–Si, и приведен средний состав различных фаз (табл. 3) и максимальной растворимости кремния в различных фазах Fe–Al (табл. 4). Показано, что при 600°C кремний растворялся в Fe_2Al_5 примерно до 1.47 ат. %, тогда как при 800°C в закаленных образцах растворимость увеличивается примерно до 2 ат. %. О какой-либо растворимости кремния в $FeAl_2$ и Fe_2Al_3 не сообщается. В работе [12] низкоуглеродистая сталь погружалась в ванну расплава Al–7Si–2Cu при 690°C на 5, 10, 15, 25 и 40 мин. Большое количество кремния в ванне расплава

привело к образованию интерметаллидов, таких как $\tau_1-Al_2Fe_3Si_3$, тогда как в текущем исследовании только 1.6 ат. % кремния присутствовало в алюминиевой фольге, поэтому ожидалось отсутствие $\tau_1-Al_2Fe_3Si_3$.

В слое 2 на рис. 2а концентрация алюминия и железа в покрытии постоянна, и, судя по соотношению концентраций Al к Fe (72 : 25), по-видимому, образовалась фаза алюминидов железа Fe_2Al_5 , насыщенная алюминием. Кроме того, отсутствие других фаз в диффузионном слое указывает на то, что легирующие элементы основного металла стали, такие как Ni, Cr и Mo, растворены в образовавшейся фазе алюминидов железа. Результаты ЭДС-анализа четырех участков диффузионного слоя 1–4 в алитированном образце при 750°C (рис. 2б) также представлены в табл. 2. Фазовый состав не может быть установлен на основе общих концентраций Al и Fe. Но судя по соотношению концентраций Al и Fe в слое 2, можно оценить, что этот слой состоял из богатого алюминием алюминидов железа Fe_2Al_5 .

На рис. 4 и 5 показаны слои 1 и 4 (см. рис. 2б) при большем увеличении. Светлые осадки (точка А) распределены в слое 1. Химический состав в точке А, полученный с помощью ЭДС, следующий (в ат. %):

Таблица 1. Результаты ЭДС в рассматриваемых точках в поперечных сечениях покрытия (ат. %)

Элемент	Обработка при 600°C				Обработка при 750°C			
	точка А	точка В	точка С	точка D	область А	область В	область С	область D
Al	98	70.59	73.08	71.99	68.79	65.73	48.50	50.76
Fe	—	22.5	25.26	25.71	29.23	31.98	48.83	46.08
Ni	0.2	0.38	0.31	0.54	0.55	0.90	1.45	1.35
Cr	0.1	0.17	0.17	0.20	0.18	0.23	0.33	0.40
Si	1.7	6.36	1.18	1.56	1.25	1.16	0.89	1.42

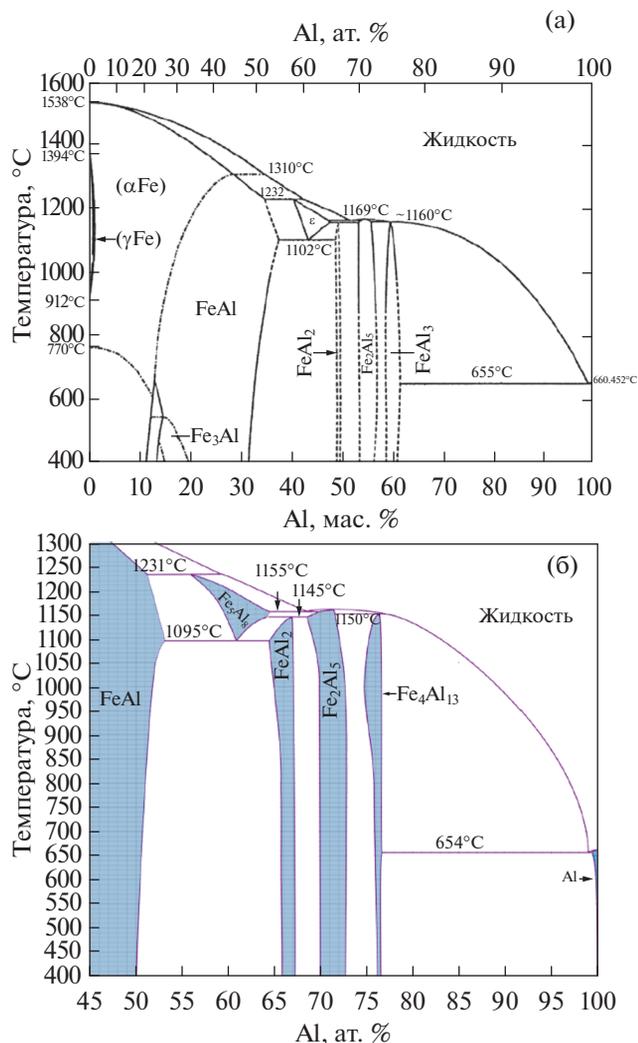


Рис. 3. Равновесные диаграммы Fe–Al (а) [8] и (б) [9].

Fe – 28.9, Al – 64.4, Ni – 2.9, Cr – 0.6, Si – 3.3. Он соответствует фазе $FeAl_2$. Кремний вводился в покрытие из исходной фольги алюминия. Как показано

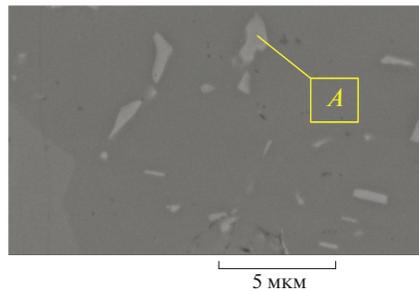


Рис. 4. Микроструктура слоя 1 (рис. 2б) алитированного образца при большом увеличении.

на рис. 6, а также в табл. 3 и 4, растворимость кремния в алюминиды железа достаточно высока и составляет 3.3 ат. % кремния. В слое 3 (рис. 2б, область С) атомарные концентрации алюминия и железа практически одинаковы, что свидетельствует об образовании фазы $FeAl$. Так как растворимость легирующих элементов стали (Ni, Cr, Mo) в фазе $FeAl$ составляла около 5 ат. % [13], что превышает их концентрации в стали, можно сделать вывод, что легирующие элементы стали растворены в этой фазе. ЭДС-анализ слоя 4 (рис. 2б, область D) показал, что этот слой состоит из Fe (50.7 ат. %), Al (46.0), Ni (1.3), Cr (0.4), Si (1.4), что близко к фазе $FeAl$. На рис. 5 показан слой 4 при большом увеличении, в котором обнаружены темные осадки, богатые углеродом. ЭДС-анализ показал, что эти осадки содержат Fe (31.1 ат. %), Al (12.2), Ni (0.5), Cr (0.3), Si (1.2), C (54.5), которые, вероятно, представляли собой карбиды некоторых легирующих элементов стали.

Результаты РФА поверхностей образцов, алитированных при 600 и 750°C, представлены на рис. 7. Для покрытия, синтезированного при 600°C, наблюдались картины чистого алюминия, Fe_4Al_{13} ($FeAl_3$) и Fe_2Al_5 , тогда как в покрытии, синтезированном при 750°C, обнаружены пики чистого алю-

Таблица 2. Диапазон стабильности Al в различных фазах системы Al–Fe и их плотность [10]

Фаза	Диапазон стабильности, ат. % Al	Плотность, г/см ³
Твердый раствор Fe	0–45	
γ -Fe	0–1.3	
$FeAl$	23–55	5.37
Fe_3Al	23–34	6.67
Fe_2Al_3	58–65	
$FeAl_2$	66–66.9	4.36
Fe_2Al_5	70–73	4.11
$FeAl_3$	74.5–76.5	3.95
Твердый раствор Al	99.998–100	

Таблица 3. Средний состав фаз (ат. %) в системе Fe–Al–Si [11]

Фаза	Обработка при 800°C			Обработка при 600°C		
	Fe	Al	Si	Fe	Al	Si
FeAl ₃	22.62	72.19	5.19	26.87	71.65	1.47
Fe ₂ Al ₅	28.0	70.0	2.0			
FeAl	51.2	38.41	10.38			
Fe ₃ Al	76.77	19.55	3.65			

Таблица 4. Растворимость Si в фазах Fe–Al (ат. %) при разных температурах после закалки образца [11]

Фаза	1115°C	1020°C	900°C	800°C	600°C
FeAl ₃	5.42	5.64	5.86	5.19	1.48
Fe ₂ Al ₅	7.57	4.4	4.66	2.0	
FeAl	11.58	16.24	16.3	10.38	
Fe ₃ Al	2.45	5.31	7.44	5.60	
Fe ₂ Al ₃	11.31				

Таблица 5. Микротвердость по Виккерсу различных слоев алитированных покрытий методом плазменного алитирования фольги

Твердость (HV)	Обработка при 600°C		Обработка при 750°C			
	Слой 1	Слой 2	Слой 1	Слой 2	Слой 3	Слой 4
	–	933	–	920	894	536

миния, фаз Fe₂Al₅ и FeAl₂. Следует отметить, что в обоих образцах преобладает фаза Fe₂Al₅.

Результаты измерений микротвердости диффузионных слоев образцов, алитированных при 600 и 750°C, представлены в табл. 5. Поскольку слой 1 покрытия, полученного при 600°C, относительно пористый, точно измерить твердость не удалось. Твердость слоя 2 этого покрытия по толщине почти не изменялась. Твердость покрытия, алитированного при 750°C, постепенно снижается при переходе от поверхностного слоя к междиффузионному. С другой стороны, в [14, 15] со-

общается о твердости алюминидов железа для фаз FeAl₃, Fe₂Al₅, FeAl₂, FeAl и Fe₃Al по Виккерсу, которая составляет 990, 820, 1030, 640 и 350 соответственно. При сравнении измеренной микротвердости с твердостью алюминидов железа подтверждаются результаты ЭДС и РФА покрытий, полученных плазменным алитированием фольги при 600 и 750°C.

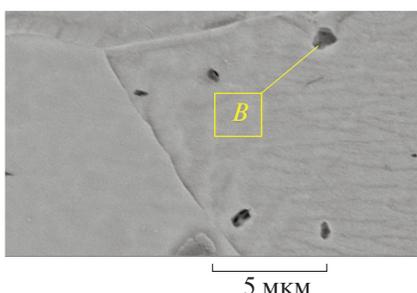


Рис. 5. Микроструктура слоя 4 (рис. 2б) алитированного образца при большем увеличении.

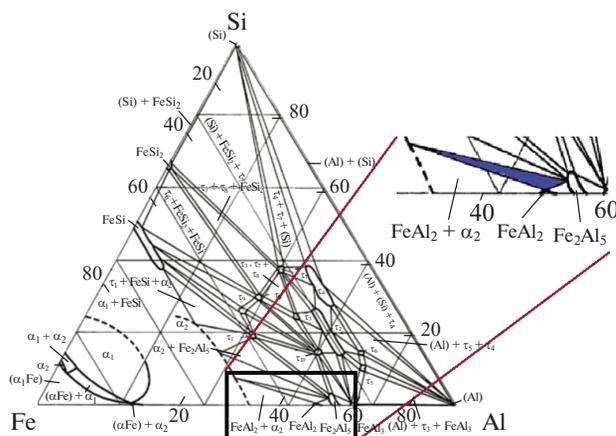


Рис. 6. Изотермическая область системы Al–Fe–Si при 600°C [11].

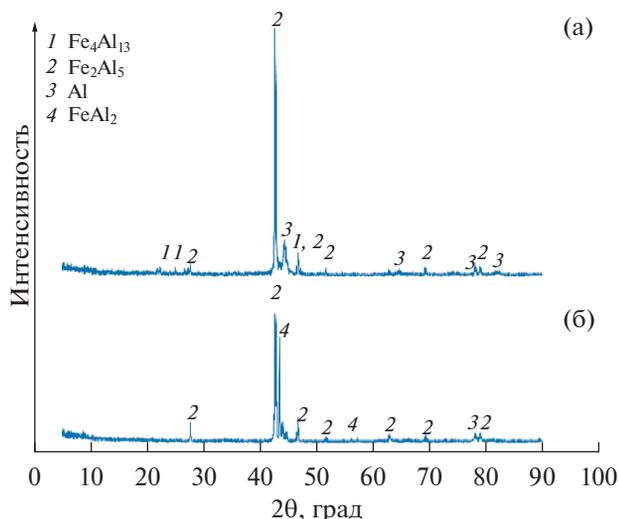


Рис. 7. РФА-данные для образцов, алитированных при 600 (а) и 750°C (б).

Во время плазменного алитирования фольги бомбардировка высокоэнергетическими ионами аргона и ускоренными атомами поверхности алюминиевой фольги приводит к преобразованию кинетической энергии в тепловую. По достижении поверхностью образцов температуры 600°C, при размягчении фольги и ее прилипанию к стали происходила твердотельная диффузия между сталью и наложенной алюминиевой фольгой.

С другой стороны, из-за низкой скорости диффузии при данной температуре образовывались богатые алюминием алюминиды железа FeAl_3 и Fe_2Al_5 с преобладанием фазы Fe_2Al_5 . В [16] экспериментально и теоретически показано, что константа скорости роста фазы Fe_2Al_5 примерно в 20 раз больше, чем фазы FeAl_3 . Авторы [17] связали причину такого большого различия с относительно большим количеством вакансий на оси c кристаллической структуры Fe_2Al_5 . Кроме того, в [18] проанализированы работы других исследователей и сделан вывод, что коэффициенты диффузии Fe и Al в Fe_3Al , Fe_2Al и FeAl в твердом состоянии не сильно различаются.

В процессе плазменного алитирования фольги при 750°C происходит плавление алюминия на поверхности образца. При этом возможны следующие процессы. Во-первых, свободные атомы расплавленного алюминия могут диффундировать в объем стали, во-вторых, железо и легирующие элементы стали могут растворяться в расплавленном алюминии, оставляя $\text{Al} + \text{Fe}_2\text{Al}_5$, согласно рис. 3. Коэффициент диффузии жидкого алюминия в твердое железо зарегистрирован со значением $1.8 \times 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}$ (1003–1673 К), а железа в расплавленный алюминий – $53 \times 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}$ (793–922 К) [19]. Согласно уравнению Аррениуса, ожи-

дается, что коэффициент диффузии железа будет выше при температуре 750°C (1023 К). Это означает, что алюминий диффундирует в железо со значительно меньшей скоростью, чем железо в расплавленный алюминий.

Как сообщалось в [19, 20], при увеличении концентрации железа в алюминиевом расплаве на границе твердое тело–жидкость избыточные растворенные вещества образуют различные фазы алюминиды железа, богатые алюминием. Более того, по мере того, как диффузия продолжается, образуются другие железо-алюминидные фазы, самодиффузия железа и/или алюминия в этих фазах вызывала беспокойство. Энергии активации Q и D_0 Fe и Al в FeAl и FeAl_3 в интервале температур 1173–1358 К приведены в [18]. Уравнение Аррениуса для коэффициента диффузии учитывается в виде

$$D = D_0 e^{-Q/RT},$$

где R – газовая постоянная, Дж/К, T – температура, К. Тогда коэффициенты диффузии Al в Fe_3Al и FeAl при 1173 К равны 8.2×10^{-15} и $6.3 \times 10^{-16} \text{ м}^2/\text{с}$ соответственно, а для диффузии железа 9.3×10^{-15} и $1.0 \times 10^{-13} \text{ м}^2/\text{с}$ соответственно. Так, видно, что диффузия железа происходит быстрее, чем Al в железо-алюминиды, и, следовательно, преобладает диффузия железа наружу. Это приводит к фазовому переходу на границе раздела покрытие–подложка в соответствии с реакцией



Дальнейшая диффузия железа в матрицу покрытия вдали от границы раздела покрытие–подложка приводит к гетерогенному зарождению и росту промежуточной фазы FeAl_2 в матрице покрытия Fe_2Al_5 согласно



В [21] исследована система Fe–Al при высоких температурах с использованием метода DCSC и сообщается, что экзотермические реакции идут в следующем порядке: FeAl_3 – Fe_2Al_5 – FeAl_2 – FeAl .

Для выяснения влияния плазмы на микроструктуру покрытия выполнено сравнение между горячим алитированием и плазменным алитированием фольги. В табл. 6 обобщены данные из литературы о толщине и микроструктуре покрытия во время горячего алитирования погружением. Плазменное алитирование фольги при 600°C привело к образованию относительно толстого слоя алюминиды FeAl_3 – Fe_2Al_5 , насыщенного алюминием. Это показало уникальную роль плазмы в создании пары алюминий–сталь и дальнейшей взаимной диффузии железа и алюминия в формировании слоев алюминиды с высоким содержанием алюминия. Сформированное за 5 мин покрытие толщиной около 100 мкм показывает роль ионной бом-

Таблица 6. Сравнение горячего погружения и алитирования фольгой с плазменным алитированием фольгой

Рабочая пара	Температура погружения, время последующей обработки	Микроструктура (толщина, мкм)	Источник
Al на конструкционной углеродистой стали	700°C, 5 мин	Al (82)–Fe ₂ Al ₅ (27)	[20]
	700°C, 5 мин с последующей диффузионной обработкой при 600°C в течение 20 мин	Al (71)–Fe ₂ Al ₅ (35)	
	700°C, 5 мин с последующей диффузионной обработкой при 600°C в течение 60 мин	Al (65)–Fe ₂ Al ₅ (47)	
	700°C, 5 мин с последующей диффузионной обработкой при 600°C в течение 60 мин	Fe ₂ Al ₅ (117)	
	750°C, 5 мин	Al (90)–Fe ₂ Al ₅ (70)	
	750°C, 5 мин с последующей диффузионной обработкой при 600°C в течение 60 мин	Al (105)–Fe ₂ Al ₅ (58)	
	750°C, 5 мин с последующей диффузионной обработкой при 800°C в течение 60 мин	Fe ₂ Al ₅ (125)	
	800°C, 5 мин	Al (130)–Fe ₂ Al ₅ (200)	
Al на Fe	700°C, 30 с	Очень тонкий FeAl ₃ –Fe ₂ Al ₅ (65)	[16]
	700°C, 15 мин	Очень тонкий FeAl ₃ –Fe ₂ Al ₅ (170)	
	800°C, 30 с	FeAl ₃ (6)–Fe ₂ Al ₅ (120)	
	800°C, 15 мин	FeAl ₃ (10)–Fe ₂ Al ₅ (205)	
	900°C, 30 с	Очень тонкий FeAl ₃ –Fe ₂ Al ₅ (220)	
	900°C, 15 мин	Очень тонкий FeAl ₃ –Fe ₂ Al ₅ (230)	
Al–10% Si на низкоуглеродистой стали	700°C, 16 с	Al–FeAl ₃ –Fe ₂ Al ₅ (25) с частицами эвтектического Si на поверхности	[22]
Фольга из Al, напресованная на простую углеродистую сталь	Преддиффузионная обработка при 650°C в течение 1 ч	Al (100)	[7]
	Диффузионная обработка при 700°C в течение 60 мин	Fe ₂ Al ₅ (120)	
	Диффузионная обработка при 800°C в течение 60 мин	Fe ₂ Al ₅ (130)	
	Диффузионная обработка при 1000°C в течение 60 мин	Fe ₂ Al ₅ (50)–FeAl (75)–диффузионный слой Al (110)	
Al–1.6 мас. % Si на стали 4340	Плазменное алитирование фольгой при 600°C в течение 5 мин	Al–FeAl ₃ (20–40)–Fe ₂ Al ₅ (50–70)	Данная работа
	Плазменное алитирование фольгой при 750°C в течение 5 мин	Fe ₂ Al ₅ + FeAl ₂ (33–53)–Fe ₂ Al ₅ (30)–FeAl (60)	

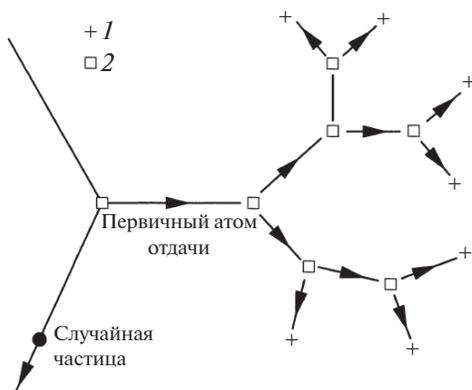


Рис. 8. Схема формирования дефектов решетки столкновительными каскадами [23]: 1 – смещенный атом, 2 – вакансия.

бардировки во время плазменной обработки в процессе плазменного алитирования фольги.

Слой покрытия, сформированный при 750°C , также отличался от слоев, полученных при горячем алитировании погружением, по толщине и фазам. При данной температуре и всего за 5 мин обработки образовался относительно толстый слой алюминиды Fe_2Al_3 . Поскольку процесс алитирования является контролируемым диффузией, влияние плазмы на толщину и микроструктуру покрытия должно быть связано с усилением дефектов кристалла. Считается, что, когда энергичные тяжелые ионы бомбардируют кристалл, они создают узлы с беспорядком решетки [23]. Даже когда ионы замедляются в кристаллической решетке, они сталкиваются с атомами решетки, что в свою очередь дает энергию для смещения атомов из их узлов решетки. Эти первичные выбивные атомы могут вытеснять другие атомы и создавать вторичные, тройные и выбивные атомы (рис. 8) и, как результат, могут создавать кристаллические дефекты, такие как вакансии и междоузельные атомы. Увеличение количества дефектов в решетке облегчает диффузию частиц и, следовательно, увеличивает толщину покрытия, как и происходит при плазменном алитировании стали фольгой.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- Для обогащения алюминием поверхности стали AISI 4340 использовался одностадийный процесс плазменного алитирования фольгой при температуре 600°C , т.е. ниже точки плавления алюминия.

- Хотя при 600°C алюминий находится в твердом состоянии, уже через 5 мин выдержки на поверхности образца вместе со слоями Al и FeAl_3 образуется относительно толстый слой интерметаллида Fe_2Al_3 .

- Плазма не только обеспечивает источник нагрева, но также активирует поверхность для твердотельной диффузии.

- Для сравнения также проведено плазменное алитирование фольгой при 750°C в течение ~ 5 мин, в результате чего образовалось многослойное покрытие, состоящее из Fe_2Al_3 , FeAl_2 и FeAl .

- Независимо от температуры процесса Fe_2Al_3 является преобладающей фазой в микроструктуре покрытия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bates B.L., Wang Y.Q., Zhang Y., Pint B.A. Formation and Oxidation Performance of Low-temperature Pack Aluminide Coatings on Ferritic–Martensitic Steels // Surf. Coating Tech. 2009. V. 204. P. 766.
2. Muralidharan G., Blue C.A., Sikka V.K., Dahotre N.B. Surface Modification of 4340 Steel with Iron Aluminides using High-energy-density Processes // Engineered Steel Surfaces, Proc. MS&T-04, New Orleans, September 2004. Materials Science and Technol. Conf. Proc., 2004. V. 2. P. 357.
3. Badaruddin M., Wang C.J., Wardono H., Tarkono T., Asmi D. High-temperature Oxidation Behavior of Aluminized AISI 4130 Steel // AIP Conf. Proc. 2016. V. 1711. № 1. 04002.
4. Rastkar A.R., Paresh P., Darvishnia N., Hadavi S.M.M. Microstructural Evolution and Hardness of TiAl_3 and TiAl_2 Phases on Ti–45Al–2Nb–2Mn–1B by Plasma Pack Aluminizing // Appl. Surf. Sci. 2013. V. 276. P. 112.
5. Yuan G., Zhiyong H., Chong X. Paste Plasma Aluminizing by Hollow Cathode Discharge // J. Chinese Soc. Corr. Protect. 1997. V. 17. P. 286.
6. Rastkar A.R., Rezyani N. The Effects of Processing Time on the Microstructure and Composition of Plasma Pack-aluminized and Oxidized Surface Layers on Low Carbon Steel // Metall. Mater. Trans. A. 2015. V. 46(9). P. 4132.
7. Sasaki T., Yakou T. Features of Intermetallic Compounds in Aluminized Steels Formed Using Aluminum Foil // Surf. Coatings Tech. 2006. V. 201. P. 2131.
8. Henager C.H. Hydrogen Permeation Barrier Coatings. N.Y., 2008.
9. Li X., Scherf A., Heilmaier M., Stein F. The Al-rich Part of the Fe–Al Phase Diagram // J. Phase Equilib. Diff. 2016. V. 37. № 2. P. 162.
10. Atabaki M.M., Nikodinovski M., Chenier P., Ma J., Harooni M., Kovacevic R. Welding of Aluminum Alloys to Steels: An Overview // J. Manuf. Sci. Prod. 2014. V. 14. № 2. P. 59.
11. Maitra T., Gupta S.P. Intermetallic Compound Formation in Fe–Al–Si Ternary System: Part II // Mater. Charact. 2002. V. 49. № 4. P. 293.
12. Huilgol P., Bhat S., Bhat K.U. Hot-dip Aluminizing of Low Carbon Steel Using Al-7Si-2Cu Alloy Baths // J. Coatings. 2013. V. 2013. <https://doi.org/10.1155/2013/180740>
13. Titran R.H., Vedula K.M., Anderson G.G. High Temperature Properties of Equiatomic FeAl with Ternary Additions. In: High-temperature Ordered Intermetallic Alloys: Symposium, November 26–28 1984. Boston,

- Massachusetts: Materials Research Society Proc., 1984. P. 309.
14. *Bahadur A., Mohanty O.N.* Structural Studies of Hot Dip Aluminized Coatings on Mild Steel // Mater. Trans., JIM. 1991. V. 32. № 11. P. 1053.
 15. *Yajiang L., Juan W., Yonglan Z., Holly X.* Fine Structures in Fe₃Al Alloy Layer of a New Hot Dip Aluminized Steel // Bull. Mater. Sci. 2002. V. 25. P. 635.
 16. *Bouché K., Barbier F., Coulet A.* Intermetallic Compound Layer Growth Between Solid Iron and Molten Aluminium // Mater. Sci. Eng. A. 1998. V. 249. P. 167.
 17. *Cheng W.J., Wang C.J.* Growth of Intermetallic Layer in the Aluminide Mild Steel During Hot-dipping // Surf. Coat. Tech. 2009. V. 204. P.824.
 18. Landolt-Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, New Series, Group III: Crystal and Solid State Physics. V. 26. Diffusion in Metals and Alloys / Ed. Mehrer H. Berlin: Springer, 1990.
 19. *Deqing W., Ziyuan S., Longjiang Z.* A Liquid Aluminum Corrosion Resistance Surface on Steel Substrate // Appl. Surf. Sci. 2003. V. 214. P. 304.
 20. *Kobayashi S., Yakou T.* Control of Intermetallic Compound Layers at Interface Between Steel and Aluminum by Diffusion-treatment // Mater. Sci. Eng. A. 2002. V. 338. P. 44.
 21. *Chojnacki M., Józwiak S., Karczewski K., Bojar Z.* Modification of Fe and Al Elemental Powders' Sintering with Addition of Magnesium and Magnesium Hydride // Intermetallics. 2011. V. 19. P. 1555.
 22. *Wang C.J., Chen S.M.* The High-temperature Oxidation Behavior of Hot-dipping Al-Si Coating on Low Carbon Steel // Surf. Coat. Tech. 2006. V. 200. P. 6601.
 23. *Nastasi M., Mayer J.W., Hirvonen J.K.* Ion-Solid Interactions: Fundamentals and Applications. N.Y.: Cambridge University Press, 1996.

УДК 538.9

ГЕНЕРАЦИЯ ВТОРОЙ ОПТИЧЕСКОЙ ГАРМОНИКИ В КРЕМНИИ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ТЕРАГЕРЦЕВОГО ИМПУЛЬСА С ВЫСОКОЙ НАПРЯЖЕННОСТЬЮ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

© 2022 г. А. В. Овчинников*, О. В. Чефонов**, М. Б. Агранат***

ФГБУН Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*E-mail: a.ovtch@gmail.com

**E-mail: oleg.chefonov@gmail.com

***E-mail: agranat2004@mail.ru

Поступила в редакцию 03.06.2022 г.

После доработки 07.09.2022 г.

Принята к публикации 13.10.2022 г.

Представлены результаты экспериментальных исследований генерации второй оптической гармоники фемтосекундного лазерного импульса с длиной волны излучения 1240 нм в поверхностном слое кремния при воздействии импульсами терагерцевого излучения с максимальной напряженностью электрического поля до 23 МВ/см. Показано, что в диапазоне полей до 15 МВ/см интенсивность второй гармоники пропорциональна диэлектрической восприимчивости $\chi^{(3)}$ и квадрату напряженности электрического поля терагерцевого импульса.

DOI: 10.31857/S0040364422050106

ВВЕДЕНИЕ

Генерация второй гармоники (ГВГ) является одним из наиболее широко используемых нелинейно-оптических процессов в экспериментальных исследованиях. Впервые ГВГ была продемонстрирована в 1961 г. благодаря изобретению лазера, обеспечивающего монохроматическое излучение с высокой интенсивностью [1]. Генерация второй гармоники также наблюдалась в центросимметричных средах, находящихся в постоянном или переменном электрическом поле. Электрическое поле приводило к нарушению симметрии, что устраняло запрет на ГВГ в такой среде [2]. О результатах по исследованию ГВГ, индуцированной электрическим полем (EFISH), сообщалось в ряде работ [3, 4]. Некоторое время эти измерения ограничивались низкочастотными полями переменного тока. Однако, благодаря разработкам источников интенсивных импульсов терагерцевого (ТГц) излучения [5, 6], в кристаллах бета-бората бария [7] и во многих центросимметричных средах [8] была обнаружена ГВГ, индуцированная полем ТГц-импульса (TFISH) [8–10]. TFISH описывается как нелинейное явление третьего порядка, в котором интенсивность сигнала второй гармоники (ВГ) пропорциональна интенсивности ТГц-импульса, квадрату интенсивности основной частоты лазера I_{ω} и нелинейной восприимчивости материала $\chi^{(3)}$

третьего порядка: $I_{2\omega}^{\text{TFISH}} \sim |\chi^{(3)}|^2 I_{\omega}^2 I_{\text{THz}}$. Теоретическое и экспериментальное исследование меха-

низма TFISH в полупроводниках было выполнено в ряде работ [11, 12]. Генерация второй гармоники, индуцированная импульсом ТГц-излучения, наблюдалась также в нецентросимметричных сегнетоэлектриках [13] и антиферромагнитных материалах [14]. Эти работы показали возможность разработки сверхбыстрых устройств на основе таких материалов, которые могли бы работать с пикосекундной скоростью обработки данных. Однако для наиболее часто используемых материалов, лежащих в основе большинства фотонных компонентов [15] и современной полупроводниковой промышленности [16, 17], пока недостаточно разработано методов управления симметрией центросимметричного кристалла кремния неразрушающим и сверхбыстрым способом. В связи с этим задача исследования свойств кремния и механизмов генерации второй оптической гармоники под действием импульсов ТГц-излучения сохраняет свою актуальность.

Ранее в работе [18] были представлены экспериментальные исследования генерации второй оптической гармоники в кремнии при воздействии импульсов ТГц-излучения с напряженностью электрического поля, падающей на образец, до 22 МВ/см. Было показано, что при напряженности электрического поля свыше 8 МВ/см наблюдается отклонение зависимости энергии импульса второй гармоники от напряженности электрического поля ТГц-импульса от квадратичной, что связывалось с изменением эф-

фактивной диэлектрической восприимчивости $\chi^{(2)}$, которая определялась как $\chi^{(2)}(E_\Omega) + \chi_j^{(2)}(j(E_\Omega)) = \chi^{(3)}E_\Omega + \chi^{(3)}j(E_\Omega)$, где E_Ω – напряженность электрического поля ТГц-импульса, а $j(E_\Omega)$ – плотность тока. Более детальный анализ экспериментальных данных затруднен в связи с используемой схемой эксперимента, в которой пучки ТГц- и зондирующего излучения распространялись в попутном направлении.

В данной работе представлены экспериментальные результаты исследования интенсивности генерации второй оптической гармоники инфракрасного фемтосекундного лазерного импульса в поверхностном слое пластины кремния при воздействии ТГц-импульсов с различной напряженностью электрического поля в диапазоне от 1 до 23 МВ/см (падающих на образец) при одновременном измерении временной зависимости пропускания зондирующего импульса.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ СХЕМА

Исследование индуцированной ГВГ в кремнии проводилось в схеме “pump-probe”, в которой в качестве накачки использовался импульс ТГц-излучения, а в качестве пробы – фемтосекундный импульс с длиной волны излучения 1240 нм и длительностью 100 фс. Экспериментальная схема для проведения исследований аналогична схеме в работе [19] и представлена на рис. 1.

Генерация импульсов ТГц-излучения осуществлялась методом оптического выпрямления лазерных импульсов с длиной волны излучения

1240 нм, длительностью импульса 80 фс и с энергией в импульсе до 30 мДж [20] в нелинейном органическом кристалле ДСТМС (4-N,N-диметиламино-4'-N'-метилстильбазолия 2,4,6-триметилбензолсульфонат) [21, 22]. Излучение хром-форстеритовой лазерной системы является оптимальным источником накачки для генерации ТГц-излучения в кристалле ДСТМС с эффективностью до 3% и гауссовым пространственным распределением [23, 24], что позволяет фокусировать ТГц-пучок в размер, близкий к дифракционному пределу [25, 26]. Для проведения экспериментов использовался кристалл ДСТМС диаметром 8 мм и толщиной 440 ± 5 мкм. Эффективность преобразования составляла 1.6%, а энергия импульса – 120 мкДж. Для ослабления излучения лазерной накачки после ТГц-кристалла был установлен фильтр, который ослаблял в 10^8 раз излучение с длиной волны меньше 34 мкм. Для достижения максимальной напряженности электрического поля пучок ТГц-излучения расширялся до ~50 мм с помощью телескопа 6 : 1, состоящего из двух внеосевых параболических зеркал (PM1 и PM2). Фокусировка ТГц-излучения осуществлялась с помощью внеосевого параболического зеркала (PM3) с эффективным фокусным расстоянием 50.8 мм и диаметром 50.8 мм. Диаметр ТГц-пучка в фокальной плоскости составил 170 ± 10 мкм по уровню $1/e$, что близко к дифракционному пределу 154 мкм для центральной длины волны 170 мкм. Пространственное распределение ТГц-пучка измерялось “ножевым методом”.

Временная форма ТГц-импульса измерялась методом электрооптического детектирования. В качестве зондирующего излучения использовался фемтосекундный оптический импульс с длиной волны излучения 1240 нм, а в качестве электрооптического кристалла фосфид галлия (GaP (110)) толщиной 200 мкм.

Эксперименты проводились в геометрии встречного распространения зондирующего и ТГц-пучков, что позволяло исследовать ГВГ вблизи поверхности пластины кремния со стороны входа ТГц-импульса при максимально возможных значениях напряженности электрического поля ТГц-импульса.

Кремний является средой с центральной симметрией и генерация второй гармоники в объеме запрещена, так как диэлектрическая восприимчивость $\chi^{(2)} = 0$. Однако при наличии внешнего воздействия симметрия кремния может быть нарушена и генерация второй гармоники становится возможной [27]. Частным случаем такого воздействия может являться внешнее электрическое поле ТГц-импульса, при котором квадратичная восприимчивость становится отличной от нуля $\chi^{(2)} = \chi^{(2)}(E_\Omega) = \chi^{(3)}E_\Omega$, а соответствующая нелинейная поляризация имеет вид

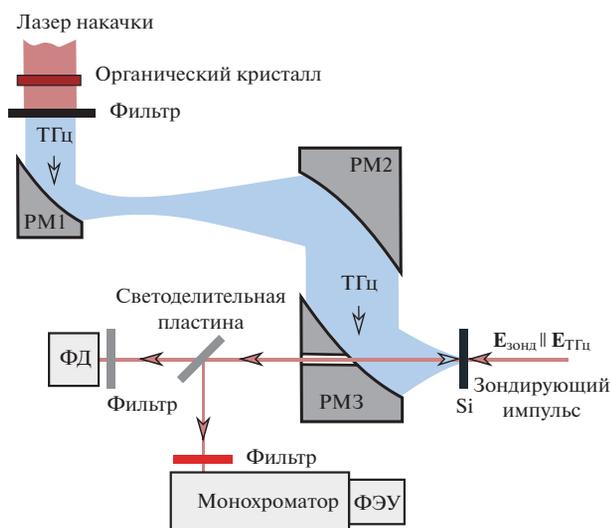


Рис. 1. Экспериментальная схема измерений: PM1, PM2, PM3 – внеосевые параболические зеркала; ФЭУ – фотоэлектронный умножитель; Si – кремниевая пластина; ФД – фотодиод.

$$P(2\omega) \propto \chi^{(3)} E_{\Omega} E_{\omega} E_{\omega},$$

где $\chi^{(3)}$ – феноменологический тензор объемной кубической восприимчивости среды, не обращающийся в нуль в centrosимметричных средах, а E_{ω} и E_{Ω} – электрические поля инфракрасного лазера и ТГц-импульсов.

Интенсивность излучения ГВГ достигает максимума на длине когерентности $l_c = \lambda / (4|n_{\omega} - n_{2\omega}|)$, где λ – длина волны излучения, $n_{\omega} = 3.515$ – показатель преломления среды на основной длине волны, $n_{2\omega} = 3.888$ – показатель преломления среды на длине волны второй гармоники, на которой выполняется условие фазового синхронизма. Длина когерентности в кремнии для длин волн 1240 и 620 нм составляет ~1 мкм. Область перекрытия ТГц- и зондирующего импульсов в случае встречной геометрии определяется как $l_{\text{THz}} = c\tau_{\text{THz}} / (|n_{\omega} + n_{\text{THz}}|)$, где τ_{THz} – длительность ТГц-импульса; $n_{\omega}, n_{\text{THz}}$ – показатели преломления кремния на длине волны зондирующего и ТГц-импульсов. Для ТГц-импульса длительностью 1 пс (FWHM) и $n_{\omega} = 3.52$, $n_{\text{THz}} = 3.56$ область кремния, в которой происходит нарушение симметрии в присутствии зондирующего импульса, составляет величину 42 мкм. Если для зондирующего излучения с длиной волны 1240 нм кремний является прозрачным материалом в невозбужденном состоянии (энергия кванта излучения зондирующего импульса 0.98 эВ меньше ширины запрещенной зоны кремния 1.1 эВ), то для излучения второй гармоники с длиной волны 620 нм кремний непрозрачен, а толщина слоя, в котором интенсивность излучения уменьшается в e раз, определяется как $l = \lambda / (4\pi k)$ и составляет величину ~3 мкм [28]. Так как $l_{\text{THz}} \gg l_c$, то генерация излучения второй гармоники возникает только при перекрытии зондирующего и ТГц-импульсов вблизи поверхности со стороны входа ТГц-импульса [29] в слое толщиной, не превышающей глубину свободного пробега фотона 620 нм.

Одновременно с измерением интенсивности второй гармоники измерялось пропускание излучения зондирующего импульса.

Излучение зондирующего импульса фокусировалось в центральную область ТГц-пучка в пятно диаметром 20 мкм (по уровню $1/e$) с помощью линзы с фокусным расстоянием 100 мм. Регистрация интенсивности излучения второй гармоники с длиной волны 620 нм осуществлялась фотоэлектронным умножителем с охлаждением для уменьшения шумов. Для блокирования излучения пробного импульса на основной частоте использовался интерференционный фильтр (FB620-10, Thorlabs) и монохроматор, настроенный на пропускание излучения с длиной волны 620 нм. Регистрация интенсивности излучения зондирующего

импульса, прошедшей через экспериментальный образец, осуществлялась InGaAs фотодиодом (DET01CFC/M, Thorlabs) с максимальной чувствительностью в диапазоне 800–1700 нм и постоянной времени ~1 нс. Интенсивность пробного излучения составляла 10^{10} Вт/см², что исключало возникновение каких-либо нелинейных эффектов в образце, а также было существенно ниже порога создания свободных носителей заряда за счет двухфотонного поглощения (энергия кванта излучения зондирующего импульса 0.98 эВ меньше ширины запрещенной зоны кремния).

В качестве экспериментального образца в работе использовалась полированная пластина кристаллического кремния, легированного атомами бора (p -тип), с ориентацией (100) и толщиной 235 мкм. Концентрация легирующей примеси составляла 1.6×10^{15} см⁻³ и определялась по измеренному удельному сопротивлению (12.2 Ом см) четырехзондовым методом. Образец был установлен на моторизованном трансляторе для оптимального расположения в фокальной плоскости фокусирующего параболического зеркала.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Для исследования генерации второй оптической гармоники в кремнии при воздействии импульсов ТГц-излучения были проведены измерения интенсивности второй гармоники и коэффициента пропускания кремния на длине волны излучения 1240 нм в зависимости от временной задержки между ТГц- и зондирующим импульсами при различных значениях напряженности электрического поля (рис. 2).

Так как процесс генерации второй оптической гармоники в centrosимметричной среде в присутствии электрического поля ТГц-импульса является безынерционным, то временная зависимость интенсивности второй гармоники должна повторять временную форму ТГц-импульса, а интенсивность должна быть пропорциональна квадрату напряженности электрического поля [29, 30]. На рис. 3 представлены результаты сравнения временной формы ТГц-импульса, временной зависимости интенсивности второй гармоники и коэффициента пропускания зондирующего импульса, полученные при максимальной напряженности электрического поля ТГц-импульса. Как видно из рисунка, при наличии четырех экстремумов во временной форме ТГц-импульсов в интенсивности второй гармоники наблюдаются только два максимума. При этом второй максимум по интенсивности значительно меньше первого, несмотря на то что напряженность электрического поля ТГц-импульса, падающего на образец, выше.

В ряде работ [31–33] было показано, что при воздействии ТГц-импульсов с высокой напряженно-

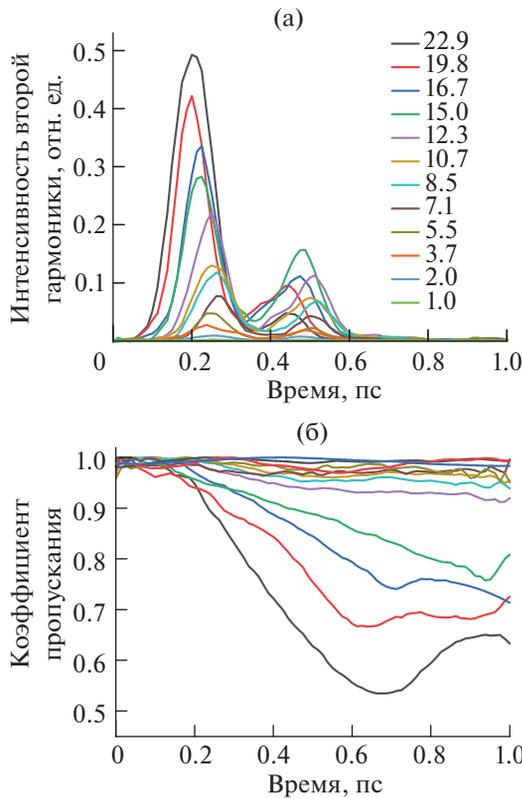


Рис. 2. Зависимости интенсивности второй гармоники (620 нм) (а) и пропускания зондирующего излучения (1240 нм) (б) от времени при напряженностях электрического поля ТГц-импульса 1.0–22.9 МВ/см.

стью электрического поля в кремнии происходит генерация свободных носителей заряда с высокой концентрацией. Для оценки влияния индуцированных носителей заряда на генерацию второй оп-

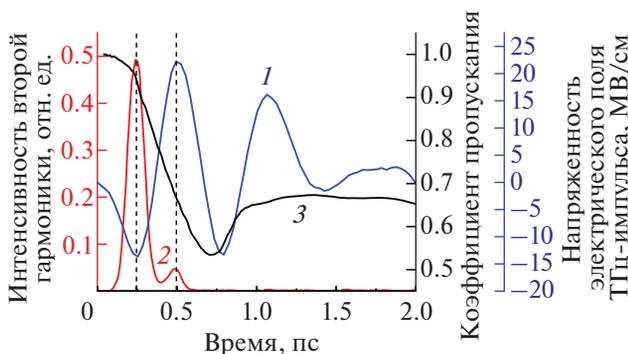


Рис. 3. Сравнение временной формы ТГц-импульса (1), падающего на образец, интенсивности второй гармоники (2) и зависимости коэффициента пропускания зондирующего излучения с длиной волны 1240 нм образцом кремния (3) при максимальной напряженности электрического поля (~23 МВ/см).

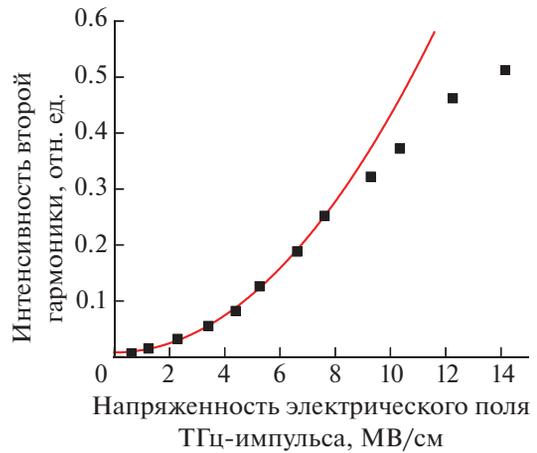


Рис. 4. Зависимость интенсивности ВГ в первом максимуме от напряженности электрического поля ТГц-импульса: точки – экспериментальные данные, кривая – квадратичная зависимость.

тической гармоники была построена зависимость интенсивности ВГ в первом максимуме (в области 200 фс) от напряженности электрического поля ТГц-импульса, падающего на образец, в первом экстремуме (рис. 4).

Как видно из рисунка, экспериментальные данные до ~8 МВ/см хорошо аппроксимируются квадратичной зависимостью, что свидетельствует о механизме ГВГ, связанном с воздействием импульса ТГц-излучения, при котором интенсивность ВГ пропорциональна диэлектрической восприимчивости $\chi^{(3)}$ и квадрату напряженности электрического поля ТГц-импульса [7, 10], как было показано выше. При напряженностях электрического поля свыше 8 МВ/см наблюдается отклонение от квадратичной зависимости. Кроме этого, начиная с данной величины напряженности электрического поля происходит уменьшение пропускания зондирующего импульса (рис. 2б), что может приводить к снижению интенсивности второй гармоники, так как $I_{2\omega} \sim I_{\omega}^2$. Зависимость ВГ от напряженности электрического поля с учетом уменьшения интенсивности зондирующего импульса представлена на рис. 5. В этом случае все экспериментальные точки хорошо аппроксимируются квадратичной зависимостью. Таким образом, механизм ГВГ при значениях напряженности электрического поля ТГц-импульса до ~14 МВ/см не отличается от механизма при низких значениях полей [10].

Аналогичная обработка экспериментальных данных (с учетом изменения пропускания зондирующего излучения) выполнена для интенсивности второй гармоники во втором максимуме (рис. 2а), которая соответствовала второму экстремуму напряженности электрического поля ТГц-импуль-

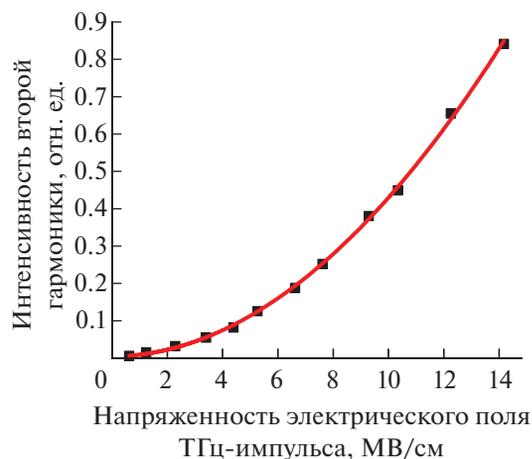


Рис. 5. Зависимость интенсивности ВГ в первом максимуме от напряженности электрического поля ТГц-импульса с учетом коэффициента пропускания пробного импульса: точки — экспериментальные данные, кривая — квадратичная зависимость.

са, величина которого достигала ~ 23 МВ/см (падающего на образец ТГц-импульса). Результаты представлены на рис. 6.

Как и для первого максимума второй гармоники, экспериментальные данные достаточно хорошо аппроксимируются квадратичной зависимостью до 15 МВ/см. При напряженностях электрического поля выше 15 МВ/см наблюдается существенное отклонение экспериментальных данных от квадратичной зависимости. Уменьшение интенсивности второй гармоники может быть связано с увеличением отражения и/или поглощения излучения ТГц-импульса вследствие образования высокой концентрации свободных носителей заря-

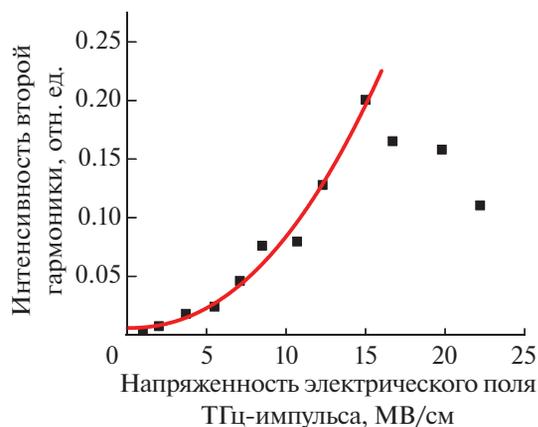


Рис. 6. Зависимость интенсивности ВГ во втором максимуме от напряженности электрического поля ТГц-импульса, падающего на образец, с учетом коэффициента пропускания пробного импульса: точки — экспериментальные данные, кривая — квадратичная зависимость.

да либо с изменением эффективной диэлектрической восприимчивости второго порядка $\chi^{(2)}$ за счет возникновения транзиентных токов, как было предложено в ранее выполненной работе [18]. Полученные экспериментальные результаты не позволяют сделать однозначный вывод о причинах уменьшения интенсивности второй оптической гармоники при напряженностях электрического поля ТГц-импульса выше 15 МВ/см и требуются дополнительные исследования.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспериментальные исследования генерации второй оптической гармоники в кремнии при воздействии импульсов ТГц-излучения с напряженностью электрического поля до 23 МВ/см, падающего на образец, показали, что до 15 МВ/см интенсивность второй гармоники пропорциональна квадрату напряженности электрического поля ТГц-импульса, что соответствует механизму TFIISH. В диапазоне от 8 до 15 МВ/см необходимо учитывать ослабление зондирующего излучения с длиной волны 1240 нм в кремнии за счет генерации свободных носителей заряда под действием ТГц-импульса. При напряженностях поля выше 15 МВ/см, исходя из полученных экспериментальных данных, интерпретация зависимости интенсивности второй гармоники от напряженности электрического поля затруднена.

Все экспериментальные работы были выполнены на уникальной тераваттной хром-форстеритовой лазерной системе (УНУ “ЛТФК”) в центре коллективного пользования “Лазерный фемтосекундный комплекс” ОИВТ РАН. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Franken P.A., Hill A.E., Peters C.W., Weinreich G. Generation of Optical Harmonics // Phys. Rev. Lett. 1961. V. 7. P. 118.
2. Terhune R.W., Maker P.D., Savage C.M. Optical Harmonic Generation in Calcite // Phys. Rev. Lett. 1962. V. 8. P. 404.
3. Blanchard P.M., Mitchell G.R. A Comparison of Photoinduced Poling and Thermal Poling of Azo-Dye-Doped Polymer Films for Second Order Nonlinear Optical Applications // Appl. Phys. Lett. 1993. V. 63. P. 2038.
4. Guillet de Chatellus H., Freysz E. Measurement of the Third-order Susceptibility of Glasses by FISH of Femtosecond Pulses // Opt. Express. 2001. V. 9. P. 586.
5. Hebling J., Almasi G., Kozma I., Kuhl J. Velocity Matching by Pulse Front Tilting for Large Area THz-pulse Generation // Opt. Express. 2002. V. 10. P. 1161.
6. Hirori H., Doi A., Blanchard F., Tanaka K. Single-cycle Terahertz Pulses with Amplitudes Exceeding 1 MV/cm

- Generated by Optical Rectification in LiNbO_3 // *Appl. Phys. Lett.* 2011. V. 98. P. 091106.
7. *Chen J., Han P., Zhang X.C.* Terahertz-field-induced Second-harmonic Generation in a Beta Barium Borate Crystal and Its Application in Terahertz Detection // *Appl. Phys. Lett.* 2009. V. 95. P. 011118.
 8. *Dai J., Xie X., Zhang X.C.* Detection of Broadband Terahertz Waves with a Laser-induced Plasma in Gases // *Phys. Rev. Lett.* 2006. V. 97. P. 8.
 9. *Cook D.J., Hochstrasser R.M.* Intense Terahertz Pulses by Four-wave Rectification in Air // *Opt. Lett.* 2000. V. 25. P. 1210.
 10. *Nahata A., Heinz T.F.* Detection of Freely Propagating Terahertz Radiation by Use of Optical Second-harmonic Generation // *Opt. Lett.* 1998. V. 23. P. 67.
 11. *Bodrov S.B., Sergeev Y.A., Korytin A.I., Stepanov A.N.* Terahertz-field-induced Second Optical Harmonic Generation from Si(111) Surface // *Phys. Rev. B. Amer. Phys. Soc.* 2022. V. 105. P. 1.
 12. *Бодров С.Б., Корытин А.И., Сергеев Ю.А., Степанов А.Н.* Генерация второй гармоники оптического излучения в кристаллах типа цинковой обманки при комбинированном воздействии фемтосекундного оптического и сильного терагерцевого полей // *Квантовая электроника.* 2020. Т. 50. № 5. С. 496.
 13. *Grishunin K.A., Ilyin N.A., Sherstyuk N.E., Mishina E.D., Kimel A., Mukhortov V.M., Ovchinnikov A.V., Chefonov O.V., Agranat M.B.* THz Electric Field-induced Second Harmonic Generation in Inorganic Ferroelectric // *Sci. Rep.* 2017. V. 7. P. 687.
 14. *Овчинников А.В., Чефонов О.В., Агранат М.Б., Гришушин К.А., Ильин Н.А., Писарев Р.В., Кимель А.В., Калашишникова А.М.* Генерация второй оптической гармоники под действием пикосекундных терагерцевых импульсов в центросимметричном антиферромагнетике NiO // *Письма ЖЭТФ.* 2016. Т. 104. № 7. С. 467.
 15. *Bogaerts W., Chrostowski L.* Silicon Photonics Circuit Design: Methods, Tools, and Challenges // *Laser Photonics Rev.* 2018. V. 12. P. 1700237.
 16. *Kim D., Jung H.J., Park I.J. et al.* Efficient, Stable Silicon Tandem Cells Enabled by Anion-engineered Wide-bandgap Perovskites // *Science.* 2020. V. 368. P. 155.
 17. *Yang C.H., Leon R.C.C., Hwang J.C.C. et al.* Operation of a Silicon Quantum Processor Unit Cell Above One Kelvin // *Nature.* 2020. V. 580. P. 350.
 18. *Ovchinnikov A.V., Chefonov O.V., Mishina E.D., Agranat M.B.* Second Harmonic Generation in the Bulk of Silicon Induced by an Electric Field of a High Power Terahertz Pulse // *Sci. Rep.* 2019. V. 9. P. 9753.
 19. *Ovchinnikov A.V., Chefonov O.V., Agranat M.B., Kudryavtsev A.V., Mishina E.D., Yurkevich A.A.* Free-carrier Generation Dynamics Induced by Ultrashort Intense Terahertz Pulses in Silicon // *Opt. Express.* 2021. V. 29. P. 26093.
 20. *Агранат М.Б., Ашитков С.И., Иванов А.А., Конященко А.В., Овчинников А.В., Фортвов В.Е.* Тераваттная фемтосекундная лазерная система на хром-форстерите // *Квантовая электроника.* 2004. Т. 34. № 6. С. 506.
 21. *Yang Z., Mutter L., Stillhart M., Ruiz B., Aravazhi S., Jazbinsek M., Schneider A., Gramlich V., Günter P.* Large-size Bulk and Thin-film Stilbazolium-salt Single Crystals for Nonlinear Optics and THz Generation // *Adv. Funct. Mater.* 2007. V. 17. P. 2018.
 22. *Stillhart M., Schneider A., Günter P.* Optical Properties of 4-N,N-Dimethylamino-4'-N'-Methyl-Stilbazolium 2,4,6-Trimethylbenzenesulfonate Crystals at Terahertz Frequencies // *J. Opt. Soc. Am. B.* 2008. V. 25. P. 1914.
 23. *Vicario C., Ovchinnikov A.V., Ashitkov S.I., Agranat M.B., Fortov V.E., Hauri C.P.* Generation of 0.9-mJ THz Pulses in DSTMS Pumped by a Cr:Mg₂SiO₄ Laser // *Opt. Lett.* 2014. V. 39. P. 6632.
 24. *Vicario C., Jazbinsek M., Ovchinnikov A.V., Chefonov O.V., Ashitkov S.I., Agranat M.B., Hauri C.P.* High Efficiency THz Generation in DSTMS, DAST, and OH1 Pumped by Cr:Forsterite Laser // *Opt. Express.* 2015. V. 23. P. 4573.
 25. *Chefonov O.V., Ovchinnikov A.V., Agranat M.B., Stepanov A.N.* Terahertz Beam Spot Size Measurements by a CCD Camera // *Opt. Lett.* 2019. V. 44. P. 4099.
 26. *Chefonov O.V., Ovchinnikov A.V., Hauri C.P., Agranat M.B.* Broadband and Narrowband Laser-Based Terahertz Source and Its Application for Resonant and Non-resonant Excitation of Antiferromagnetic Modes in NiO // *Opt. Express.* 2019. V. 27. P. 27273.
 27. *Ding Y., Zeng Y., Yu X., Liu Z., Qian J., Li Y., Peng Y., Song L., Tian Y., Leng Y., Li R.* Terahertz-assisted Even Harmonics Generation in Silicon // *Science.* 2022. V. 25. P. 103750.
 28. *Green M.A.* Self-consistent Optical Parameters of Intrinsic Silicon at 300 K Including Temperature Coefficients // *Sol. Energy Mater. Sol. Cells.* 2008. V. 92. P. 1305.
 29. *Bodrov S.B., Sergeev Y.A., Korytin A.I., Burova E.A., Stepanov A.N.* Terahertz Pulse Induced Femtosecond Optical Second Harmonic Generation in Transparent Media with Cubic Nonlinearity // *J. Opt. Soc. Am. B.* 2020. V. 37. P. 789.
 30. *Grishunin K., Bilyk V., Sherstyuk N., Mukhortov V., Ovchinnikov A., Chefonov O., Agranat M., Mishina E., Kimel A.V.* Transient Second Harmonic Generation Induced by Single Cycle THz Pulses in Ba_{0.8}Sr_{0.2}TiO₃/MgO // *Sci. Rep.* 2019. V. 9. P. 697.
 31. *Tarekegne A.T., Iwaszczuk K., Zalkovskij M., Strikwerda A.C., Jepsen P.U.* Impact Ionization in High Resistivity Silicon Induced by an Intense Terahertz Field Enhanced by an Antenna Array // *New J. Phys.* 2015. V. 17. P. 043002.
 32. *Tarekegne A.T., Hirori H., Tanaka K., Iwaszczuk K., Jepsen P.U.* Impact Ionization Dynamics in Silicon by MV/cm THz Fields // *New J. Phys.* 2017. V. 19. P. 123018.
 33. *Chefonov O.V., Ovchinnikov A.V., Agranat M.B., Fortov V.E., Efimenko E.S., Stepanov A.N., Savel'ev A.B.* Nonlinear Transfer of an Intense Few-cycle Terahertz Pulse Through Opaque n-Doped Si // *Phys. Rev. B.* 2018. V. 94. P. 165206.

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ

УДК 546.261+536.63

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО КАРБИДА (HfTaTiNbZr)C ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ ОТ 2500 ДО 5500 К

© 2022 г. А. И. Савватимский¹ *, С. В. Онуфриев¹,
А. С. Седегов², С. Н. Юдин², Д. О. Московских²¹Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия²Московский институт стали и сплавов, Москва, Россия

*E-mail: savvatimskiy.alexander@gmail.com

Поступила в редакцию 10.05.2022 г.

После доработки 15.06.2022 г.

Принята к публикации 13.10.2022 г.

Впервые представлены экспериментальные теплофизические данные для высокоэнтропийного карбида (HfTaTiNbZr)C при высоких температурах (2500–5500 К). Использовался быстрый (10 мкс) метод нагрева импульсом тока. Образцы в виде плоских пластинок толщиной ~100 мкм зажимались между стеклянными пластинами для фиксации образца и предотвращения возникновения шунтирующего разряда. Измерены температуры солидуса, ликвидуса и свойства карбида – теплота плавления, введенная энергия (энтальпия) и теплоемкость – в зависимости от температуры. Температура измерялась с помощью быстродействующего пирометра на длине волны 856 нм.

DOI: 10.31857/S0040364422050118

ВВЕДЕНИЕ

За последний десяток лет начаты исследования нового класса сплавов, названных высокоэнтропийными [1–5]. В отличие от классических сплавов, имеющих элемент-основу и легирующие элементы, высокоэнтропийные сплавы содержат значительное количество элементов (от 5 до 12–15), вводимых в равных или близких к равным долях. В этих сплавах за счет большой степени беспорядка и большой величины конфигурационной энтропии идет преимущественное формирование твердого раствора на базе кристаллических решеток ОЦК или ГЦК. Ожидается, что импульсный нагрев током позволит получить новые знания при исследовании высокоэнтропийных материалов на основе многокомпонентных соединений металлов, в том числе нескольких карбидов в эквивалентном соотношении элементов.

В настоящей работе представлены итоги экспериментального исследования высокоэнтропийного многокомпонентного карбида (HfTaTiNbZr)C [6–9] при быстром нагреве импульсом тока. Такой карбид может быть синтезирован различными методами. В данном случае осуществлялся самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС) из смесей пяти металлов и графита. Для получения компактной керамики использовалось искровое плазменное спекание (ИПС).

ПОЛУЧЕНИЕ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО КАРБИДА КАК ТВЕРДОГО РАСТВОРА

В качестве исходных материалов использовались промышленно выпускаемые в России порошки Hf, Ta, Ti, Nb, Zr и порошок графита (размер частиц – 7–10 мкм). Все процессы, связанные с обработкой порошков, проводились в атмосфере аргона чистотой 99.998%. Порошки (HfTaTiNbZr)C получались с помощью СВС [10, 11]. Реакционная смесь для СВС создавалась в две стадии:

1) приготовление металлического нанокompозита эквивалентного состава с чередованием металлических слоев Hf/Ta/Ti/Nb/Zr на уровне 100–300 нм, размер агломератов полученных композиционных порошков составил 10–30 мкм;

2) последующее смешивание полученного нанокompозита с графитом Hf/Ta/Ti/Nb/Zr + C.

Приготовление смесей осуществлялось с помощью высокоэнергетической механической обработки, процесс проводился в лабораторной планетарной шаровой мельнице “Активатор 2S”. После первой и второй стадий получались реакционные смеси Hf/Ta/Ti/Nb/Zr + C с размером нанокompозиционных агломератов до 50 мкм.

Эти смеси синтезировались в лабораторном СВС-реакторе [12]. Для иницирования горения сверху образец поджигался вольфрамовой спиралью. Керамическая подставка с образцом помещалась в герметичную камеру реактора, из которой при помощи форвакуумного насоса от-

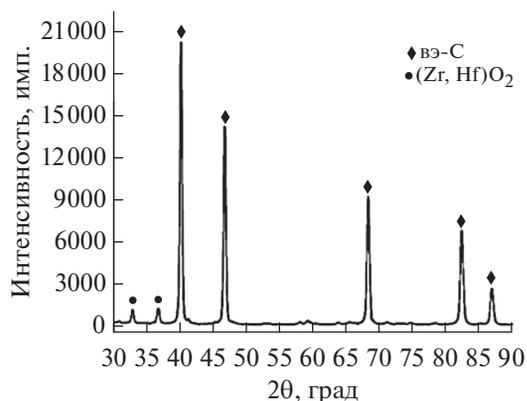


Рис. 1. Дифрактограмма высокоэнтропийного карбида (HfTaTiNbZr)C после ИПС (вэ-С – высокоэнтропийный карбид).

качивался воздух, затем насос выключался, и рабочая камера заполнялась аргоном (до 2 атм). После этого с помощью электрического тока раскаленная вольфрамовая спираль инициировала СВС-процесс.

Полученные СВС-порошки (HfTaTiNbZr)C представляли собой агломераты размером до 50 мкм субмикронных частиц карбидной фазы (менее 300 нм). Данные порошки консолидировались на установке для ИПС (LABOX 650, Япония). Спекание проводилось в течение 30 мин в графитовых пресс-формах диаметром 30 мм при температуре 1800°C в аргоне. Скорость нагрева составляла 100°C/мин, давление прессования – 50 МПа.

На рис. 1 показаны дифрактограммы (излучение Co-K α) (HfTaTiNbZr)C после ИПС. Данная дифрактограмма содержит основные пики кубической высокоэнтропийной фазы (HfTaTiNbZr)C. Однако вблизи углов $2\theta = 32^\circ$ и 37° все еще наблюдается система отражения от (Zr, Hf)O₂.

На рис. 2 представлен состав карбидной фазы (HfTaTiNbZr)C в различных точках образца. Наблюдается близкая концентрация металлов на уровне 7–9 ат. %, однородность распределения которых подтверждает довольно низкий коэффициент вариации (2.5–4.5%) концентрации каждого металла для 15 точек сканирования. Анализ выполнялся методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (ЭДРС).

Концентрация кислорода в спеченном (HfTaTiNbZr)C находится на уровне 2–3 ат. %. Для той точности, которой обладает ЭДРС, концентрация углерода составила приблизительно 55 ат. %, что довольно близко к заданному содержанию углерода в 50 ат. %.

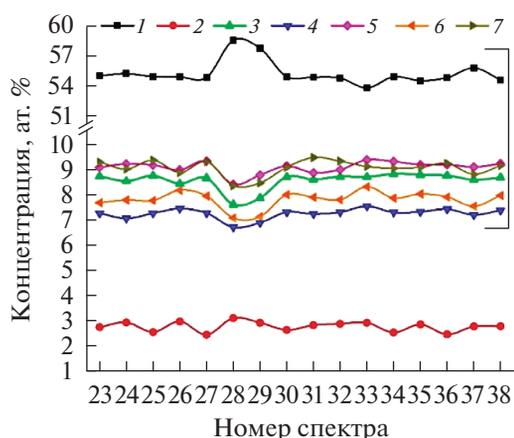


Рис. 2. Химический состав карбидной фазы: 1 – С, 2 – О, 3 – Ti, 4 – Zr, 5 – Nb, 6 – Hf, 7 – Ta.

ПОДГОТОВКА ОБРАЗЦОВ ДЛЯ ИМПУЛЬСНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Образец исследуемого карбида в виде пластины с размерами $\sim(0.1-0.15) \times 4 \times 15$ мм³ размещался между двумя стеклянными пластинами ($\sim 3-4$ мм толщиной и шириной 8 мм) и приклеивался к нижней пластине. Боковые зазоры между пластинами вдоль образца заполнялись клеем (супермомент). Поверхность образца, на которой фиксировался пирометр, была свободна от клея.

Роль стеклянных пластин состоит также в том, что предотвращается возможное нарушение стехиометрии образца за время нагрева. Этому способствует и короткое время нагрева. Склеенная ячейка зажималась с торцов между электродами (через тонкую прокладку индия) для обеспечения плотного электрического контакта. Общий вид сборки представлен на рис. 3. Температура измерялась по излучению поверхности плоского образца (через верхнюю стеклянную пластину) в вертикальном направлении; диаметр пятна визирования пирометра – 1.2 мм.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИМПУЛЬСНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Методика импульсного нагрева микросекундной длительности и оценка погрешностей измерений свойств подробно изложены в [13, 14]. Высокое начальное напряжение (~ 16 кВ) на конденсаторе обеспечивало большую величину тока в импульсе (21 кА) и кратковременность процесса нагрева.

Для высокоэнтропийного карбида (HfTaTiNbZr)C спектральная нормальная излучательная способность принята равной $\epsilon_{\lambda, n} = 0.5$, что близко к значениям $\epsilon_{\lambda, n}$ для монокарбидов металлов, входящих в исследуемый высокоэнтропийный карбид. Исходная плотность карбида составляла 7.903 г/см³.

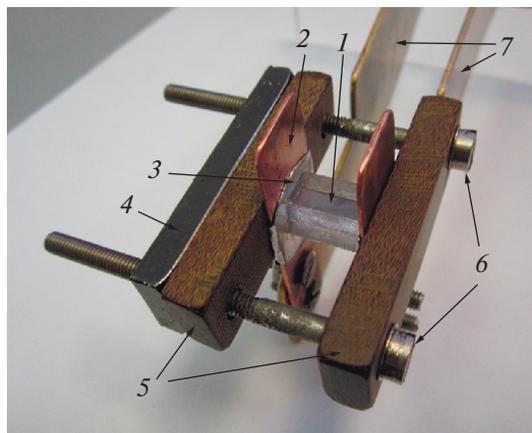


Рис. 3. Один из образцов высокоэнтропийного карбида (толщина – 0.104 мм, ширина – 4.6 мм, длина – 13.5 мм), зажатый между двух стеклянных пластин 1 и подсоединенный к медным электродам 2 через индиевые прокладки 3; 4 – металлическая пластина, 5 – изолирующие пластины, 6 – стягивающие винты, 7 – подводящие латунные электроды.

Осциллограммы записи напряжения, тока и излучения плоской поверхности для одного из образцов показаны на рис. 4.

На рис. 5 представлена зависимость энтальпии $H(T)$ от температуры с регистрацией области плавления. Аппроксимация зависимости $H(T)$ твердой и жидкой фаз в интервалах температур 2500–3500 К и 4500–5500 К дает линейные зависимости: $H(T) = -0.646 + 8.52 \times 10^{-4}T$ кДж/г – твердая фаза; $H(T) = 1.055 + 7.49 \times 10^{-4}T$ – жидкая фаза. Отклонение экспериментальных значений от расчетных не превышает 4%.

На рис. 5 видны моменты начала плавления и появления жидкой фазы. На зависимости $H(T)$ наблюдается область плавления 2. Начало плавления данного карбида – 3900 ± 80 К, окончание – 4300 ± 80 К. Плавление начинается при введенной энергии 2.8 кДж/г, заканчивается при 4.2 кДж/г. Теплота плавления составляет $4.2 - 2.8 = 1.4$ кДж/г.

Экспериментально измеренная температура плавления высокоэнтропийного карбида (HfTaTiNbZr)C составила 4300 ± 80 К, что несколько выше, чем соответствующая средняя температура плавления 3872 К, рассчитанная по правилу смесей, вероятно, именно из-за эффекта высокой энтропии. Отметим, что увеличение значения $T_{пл}$ (эксп.) относительно $T_{пл}$ (расч.) в целом согласуется с теоретическими расчетами $T_{пл}$ похожих высокоэнтропийных соединений, таких как (TiZrHfNb)C, (TiZrHfTa)C, (TiZrNbTa)C, (TiHfNbTa)C и (ZrHfNbTa)C [15].

Теплоемкость C_p высокоэнтропийного карбида (HfTaTiNbZr)C, измеренная по методике, подробно изложенной в [16], представлена на рис. 6.

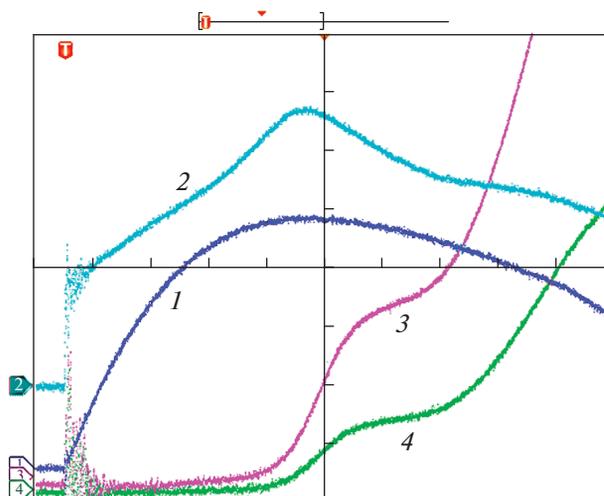


Рис. 4. Осциллограммы импульсного эксперимента для высокоэнтропийного карбида; развертка по всему экрану – 10 мкс; длительность от момента пуска тока до плавления (площадки на осциллограммах 3, 4) составляет 5 мкс; 1 – ток через образец, 2 – напряжение на образце, 3 – излучение поверхности (высокая чувствительность), 4 – малая чувствительность.

Напомним, что теплоемкость C_p во всем диапазоне твердой фазы, измеренная при быстром нагреве, может быть несколько повышенной за счет присутствия исходных дефектов, которые исчезают только после плавления. Кроме того, в твердой фазе наблюдается крутой рост C_p (за ~300–400 К до начала плавления), что, возможно, связано с появлением дефектов Френкеля (появление

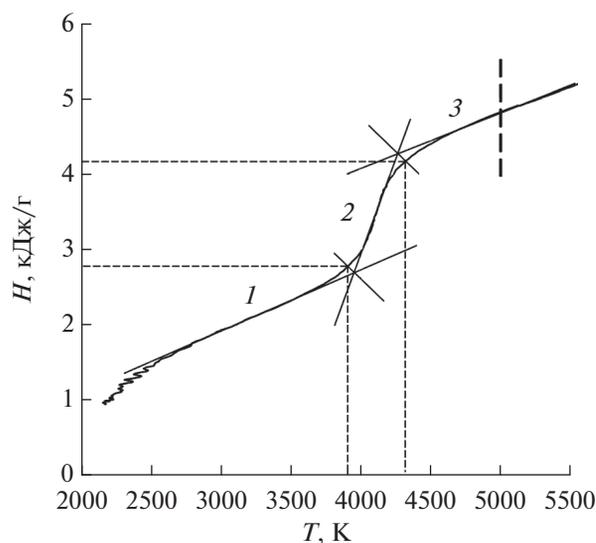


Рис. 5. Зависимость энтальпии H (или удельной введенной джоулевой энергии) от температуры для карбида (HfTaTiNbZr)C: 1 – твердая фаза, 2 – область плавления, 3 – жидкая фаза; штриховая линия – граница проверки линейности пирометра.

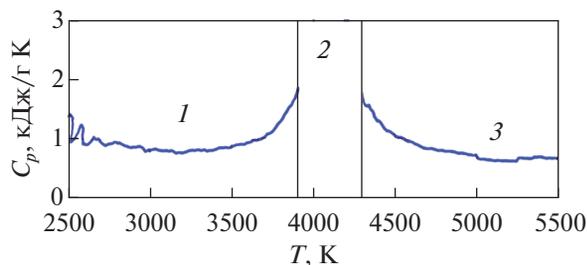


Рис. 6. Зависимость удельной теплоемкости C_p от температуры для высокоэнтропийного карбида: 1 – твердое состояние, 2 – плавление (3900–4300 К), 3 – жидкое состояние.

ние неравновесных парных дефектов – вакансии и междоузельного атома – обеспечивает начало плавления в условиях быстрого нагрева и медленной диффузии равновесных вакансий). После плавления исходные дефекты и дефекты Френкеля исчезают и не влияют на величину C_p жидкой фазы.

На рис. 6 видно крутое падение теплоемкости в интервале температур 4300–4600 К и ее стремление к постоянному значению.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Впервые исследован высокоэнтропийный карбид (HfTaTiNbZr)C как в твердом, так и в жидком состояниях в диапазоне температур 2500–5500 К. Получены следующие свойства: теплота плавления (1.4 кДж/г), температура солидуса и ликвидуса (3900 и 4300 К); энтальпия и теплоемкость (до 5500 К). Эксперимент с использованием быстрого нагрева микросекундным импульсом тока позволяет получить достоверные данные по теплофизическим свойствам высокоэнтропийных карбидов при высоких температурах (как и металлов [17]).

Высокая термодинамическая стабильность таких многокомпонентных карбидов, высокая тугоплавкость и коррозионная стойкость (отмечаемые в литературных обзорах [4, 5]) привлекательны для создания эффективной тепловой защиты в атомной энергетике и в ракетно-космической отрасли.

Авторы ОИВТ РАН благодарны гранту РФФ № 19-79-30086 в части измерения теплофизических свойств, а авторы НИТУ “МИСИС” гранту РФФ № 18-79-10215 в части синтеза и спекания высокоэнтропийных соединений за финансовую поддержку данного исследования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Potschke J., Dahal M., Herrmann M. et al. Preparation of High-entropy Carbides by Different Sintering Techniques // J. Mater. Sci. 2021. V. 56. P. 11237.
2. Yeh J.-W., Chen S.-K., Lin S.-J. et al. Nanostructured High-Entropy Alloys with Multiple Principal Ele-

ments: Novel Alloy Design Concepts and Outcomes // Adv. Eng. Mater. 2004. V. 6. P. 299.

3. Рогачев А.С. Структура, стабильность и свойства высокоэнтропийных сплавов // ФММ. 2020. Т. 121. № 8. С. 807.
4. Савченко А.М. Энтропийные эффекты в реальных системах // Атомная стратегия. 2015. № 110. С. 14. <https://clck.ru/334Uor>
5. Savchenko A. Energy Nature of Configurational Entropy. Generation of Entropy and Anti-entropy Flows. Saarbrücken, Germany: LAP Lambert Acad. Publ., 2015.
6. Kovalev D. Yu., Kochetov N.A., Chuev I.I. Fabrication of High-entropy Carbide (TiZrHfTaNb)C by High-energy Ball Milling // Ceramics Int. 2021. V. 47. № 23. P. 32626.
7. Istomin P., Istomina E., Nadutkin A., Grass V., Lysenkov A., Kudryavtsev A. Preparation of (Ti,Zr,Hf,Nb,Ta)C High-entropy Carbide Ceramics Through Carbo-silicothermic Reduction of Oxides // J. Europ. Ceramic Society. 2021. V. 41. № 14. P. 6934.
8. Dusza J., Csanádi T., Medved' D., Sedlák R., Vojtko M., Ivor M., Ünsal H., Tatarko P., Tatarková M., Šajgalík P. Nanoindentation and Tribology of a (Hf-Ta-Zr-Nb-Ti)C High-entropy Carbide // J. Europ. Ceramic Society. 2021. V. 41. № 11. P. 5417.
9. Pak A. Ya., Grinchuk P.S., Mamontov G. Ya., Yakich T. Yu., Gumovskaya A.A. Production of HfTaTiNbZrC₅ High-entropy Carbide Micropowder in the Plasma of an Atmospheric Pressure Arc Discharge // J. Eng. Phys. Thermophys. 2021. V. 94(1). P. 88.
10. Московских Д.О., Мукасян А.С., Рогачев А.С. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез нанопорошков карбида кремния // Докл. РАН. 2013. Т. 449. № 2. С. 176.
11. Mukasyan A.S., Shuck C.T., Pauls J.M. et al. The Solid Flame Phenomenon: A Novel Perspective // Adv. Eng. Mater. 2018. V. 20. P. 1701065.
12. Sedegov A.S., Bobojanov A.R., Vorotilo S. et al. Study of Phase Formation and Properties of High-entropy Carbide HfTaTiNbZrC₅ Obtained by Selfpropagating High-temperature Synthesis // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 2021. V. 1014. 012049.
13. Savvatimskiy A.I., Onufriev S.V., Valyano G.E. et al. Thermophysical Properties of Tantalum Carbide (TaC) within 2000–5500 K Temperature Range // Ceramics Int. 2022. V. 48. № 14. P. 19655.
14. Савватимский А.И., Онуфриев С.В. Метод и техника исследования высокотемпературных свойств проводящих материалов в интересах ядерной энергетики // Ядерная физика и инжиниринг. 2015. Т. 6. № 11–12. С. 622.
15. Shi-Yu Liu, Shuoxin Zhang, Shiyang Liu, De-Jun Li, Yaping Li, Sanwu Wang. Phase Stability, Mechanical Properties, and Melting Points of High-entropy Quaternary Metal Carbides from First-principles // J. Europ. Ceramic Society. 2021. V. 41. № 13. P. 6267.
16. Онуфриев С.В., Савватимский А.И. Измерение теплоемкости проводящих веществ в условиях микросекундного нагрева импульсом тока // ТВТ. 2018. Т. 56. № 5. С. 704.
17. Савватимский А.И. Теплоемкость и электросопротивление металлов Ta и W от точки плавления до 7000 К при импульсном нагреве током // ТВТ. 2021. Т. 59. № 5. С. 686.

УДК 621.785.377

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕЛКОЗЕРНИСТОГО ГРАФИТА МПГ-7 С ХИМИЧЕСКОЙ И СТРУКТУРНОЙ ГЕТЕРОГЕННОСТЬЮ

© 2022 г. А. В. Вершинин¹, *, В. И. Горбатов^{2, 3}, А. А. Куриченко², С. А. Койтов¹¹АО «ОКБ Новатор», Екатеринбург, Россия²ФГБОУ ВО «Уральский государственный горный университет», Екатеринбург, Россия³ФГБУН Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*E-mail: a_ershinin@live.com

Поступила в редакцию 21.10.2021 г.

После доработки 11.01.2022 г.

Принята к публикации 15.02.2022 г.

Методом температурных волн измерена температуропроводность образцов графита марки МПГ-7 плотностью от 1802 до 1869 кг/м³ с химической и структурной гетерогенностью в интервале температур от 600 до 1700 К. На основании полученных результатов рассчитаны температурные зависимости коэффициента теплопроводности, позволяющие оценить теплопроводность графита МПГ-7 в зависимости от типа его дефектности (химические и структурные гетерогенности). Показано, что наблюдаемые различия в значениях коэффициента теплопроводности графита МПГ-7 в зависимости от типа его дефектности могут быть связаны с электронным вкладом в общий процесс переноса энергии.

DOI: 10.31857/S0040364422020156

ВВЕДЕНИЕ

Устойчивость к воздействию высокотемпературного газового потока [1], высокая температура сублимации [2], сохранение прочности и пластичности вплоть до температуры 2500°С [3], устойчивость к термоудару и высокому градиенту температур обуславливают использование графита марки МПГ-7 в наиболее теплонапряженной части соплового блока ракетных твердотопливных двигателей — вкладыша критического сечения. Однако для практического применения данной марки графита в качестве вкладыша нужны надежные (достоверные) значения теплофизических свойств МПГ-7, в частности, при высоких температурах.

Известно, что мелкозернистые графиты марки МПГ демонстрируют разные теплофизические свойства в зависимости от пористости и макроскопической плотности в рамках одной марки разных партий [4, 5]. Наряду с различной пористостью, мелкозернистые графиты могут характеризоваться химической и макроструктурной гетерогенностью [6, 7]. Химическую гетерогенность формируют примесные элементы, характеризующиеся своим типом симметрии и параметрами решетки. Макроструктурная гетерогенность обусловлена аморфизированным графитом с размером упорядоченных областей углерода ~5–10 нм. Графит с химической и макроструктурной гетерогенностью отличается от хорошо структурированного минимальным размером упорядоченных областей и максимальным содержанием аморф-

ной фазы с sp^3 -типом гибридизации [8], которая увеличивает суммарную дефектность и уменьшает кристалличность. Химические и макроструктурные гетерогенности, согласно принятой терминологии, можно классифицировать как химические и структурные дефекты [9–11]. На сегодняшний день в литературе отсутствует информация о влиянии дефектов данного рода на такие теплофизические свойства графита, как температуропроводность и коэффициент теплопроводности.

Цель настоящей работы — экспериментальное исследование коэффициента температуропроводности образцов графита марки МПГ-7 с химической и структурной гетерогенностью в интервале температур от 600 до 1700 К и оценка влияния этих факторов на величину коэффициента теплопроводности образцов по отношению к коэффициенту теплопроводности бездефектного графита.

ХАРАКТЕРИСТИКА ОБРАЗЦОВ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА

Объектами исследования являются образцы графита марки МПГ-7 (высший сорт), вырезанные из заготовок, прошедших рентгеноскопический контроль без определяемых примесей и макроструктурных неоднородностей — образец № 1, с примесными химическими элементами (химическая гетерогенность) — образец № 2 и с макроструктурными неоднородностями (макроструктурная гетерогенность) — образец № 3. Производство за-

готовок выполнено в соответствии с технологией АО “НИИГрафит” на заводе графитовых изделий ЗАО “Технографит” (г. Вязьма). Детальное описание образцов №№ 2 и 3 и структурные характеристики наблюдаемых в них аномалий приведены в работах [6, 7].

Плотность образцов определялась при комнатной температуре прямыми измерениями геометрических размеров и массы и методом гидростатического взвешивания согласно ГОСТ 18898-89 (ISO 2738-87). Для измерения плотности были вырезаны образцы графита диаметром 10 мм и толщиной 20 мм. Масса образцов измерялась на аналитических весах Shimadzu AW220 с погрешностью менее 0.1 мг, диаметр – микрометром рычажным МРП 25 с погрешностью 0.002 мм, толщина – электронным длинномером ШЦ-П-250-0.05, который проверялся по образцовым мерам непосредственно перед измерениями, с погрешностью 0.005 мм.

Теплофизические характеристики (температуропроводность и относительная теплоемкость) исследовались методом плоских температурных волн [12] на оригинальной установке, описанной в работе [13]. Суть реализации данного метода заключается в следующем. Представительный плоскопараллельный образец размещается в вакуумной водоохлаждаемой камере, в которой после предварительного вакуумирования (до 10^{-2} Па) создается избыточная инертная атмосфера с использованием гелия. Для изменения средней температуры образца в ходе эксперимента используется цилиндрическая электропечь сопротивления, изготовленная из ленточного молибдена. Темп нагрева и охлаждения электропечи задается программно по линейному закону. Температурные волны в образце создаются воздействием на одну из его поверхностей модулированным по амплитуде излучением лазера типа ЛГН-701 (длина волны излучения – 10.6 мкм, мощность – 60 Вт). Модуляция лазерного излучения осуществляется механически с помощью вращающегося диска с отверстиями. Диск приводится в движение вентильным двигателем с сервоприводом Delta ASD-A0121LA, скорость вращения которого устанавливается с помощью управляющей компьютерной программы в соответствии с заданной частотой модуляции лазерного излучения. Температура другой поверхности образца контролируется при помощи двух датчиков: термопарного и фотоэлектрического (фотодиод). Термопарный датчик, изготовленный из вольфрам-рениевой проволоки (ВР5/20) диаметром 50 мкм, прижимается к образцу вблизи центральной точки. Область визуирования фотодатчика также включает в себя эту центральную точку. Сигналы с датчиков после прохождения через линейные нормирующие цепи подаются на внешний аналого-цифровой преобразователь Е14-440 и затем поступают в компьютер для обработки. Оценка амплитуды и фазовый

сдвиг колебаний температуры второй поверхности образца по отношению к колебаниям лазерного излучения осуществляется в соответствии с квазиоптимальной процедурой, включающей преобразование Фурье. Толщины плоскопараллельных образцов диаметром 12 мм в настоящих измерениях выбирались из диапазона 2.2–2.6 мм. Частоты температурных волн изменялись от 6.0 до 12 Гц. Темп нагрева и охлаждения образцов не превышал 5 К/мин. Оценка погрешности измерений показала, что неопределенность измерения температуропроводности составляет 2%, а относительной теплоемкости – 5% (средние квадратичные значения).

На описанную методику экспериментального определения теплофизических свойств получен аттестат ФГУП “ВНИИМС” [14].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Рассчитанная по данным прямых измерений геометрических размеров и массы, а также определенная методом гидростатического взвешивания плотность графита составила 1802, 1869 и 1838 кг/м³ для образцов №№ 1–3 соответственно. Как можно заметить, максимальную плотность имеет образец с химической гетерогенностью (№ 2), а минимальную – графит без структурных и химических дефектов (№ 1). Результаты измерения плотности образца № 1 хорошо согласуются с литературными данными и с данными, заявленными разработчиками графита МПГ-7 (“НИИГрафит”). По приведенным результатам можно заключить, что существенное влияние на плотность (увеличение) графита оказывают химические дефекты.

На рис. 1 представлены результаты измерений температурной зависимости коэффициента температуропроводности $a(T)$ трех образцов графита

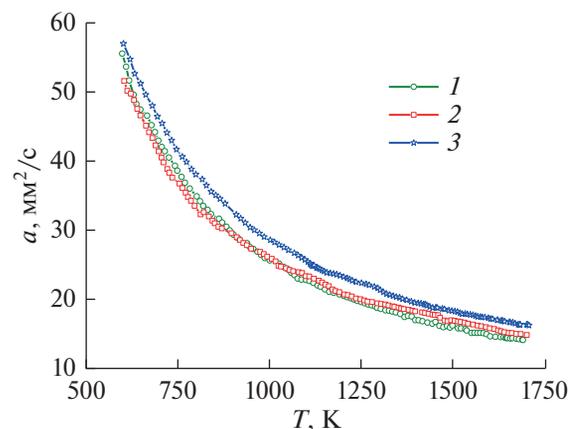


Рис. 1. Температурные зависимости температуропроводности трех образцов графита марки МПГ-7: 1 – № 1, 2 – № 2, 3 – № 3.

марки МПГ-7, полученных при нагреве. Все зависимости имеют практически одинаковый быстро убывающий характер с максимальным изменением температуропроводности в температурном интервале от 600 до 1000 К. При этом зависимости $\lambda(T)$ для образцов графита без определяемых примесей и макроструктурных неоднородностей (№ 1 и № 2) практически совпадают друг с другом, в то время как аналогичная зависимость для образца с макроструктурной гетерогенностью (№ 3) лежит заметно выше них. В целом порядок величины коэффициентов температуропроводности и характер его зависимости от температуры для всех измеренных образцов хорошо согласуются с литературными данными [5] для образцов графита марки МПГ-6.

Также следует заметить, что все зависимости $\lambda(T)$, полученные на этих же образцах в процессе охлаждения, в пределах погрешности измерений совпадают с представленными на рис. 1. Кроме того, последующие циклы нагрева–охлаждения показали полную повторяемость температурных зависимостей коэффициента температуропроводности, что свидетельствует о стабильности теплотехнических свойств исследуемой марки графита.

Для определения коэффициента теплопроводности λ используется соотношение [15]

$$\lambda = aC_p\rho,$$

где C_p – удельная теплоемкость при постоянном давлении; ρ – плотность образца. С помощью данного соотношения по результатам измерения температуропроводности и плотности рассчитаны температурные зависимости коэффициента теплопроводности $\lambda(T)$ трех образцов графита марки МПГ-7. При этом использовались литературные данные по температурным зависимостям удельной теплоемкости [5] и коэффициента линейного расширения [16] для графита марки МПГ-6. Такое заимствование вполне оправдано, поскольку в работах [16, 17] показано, что теплоемкость и коэффициент линейного расширения плотных поликристаллических графитов практически не зависят от технологии их получения и пористости. Относительная погрешность определения $\lambda(T)$ составила ~6%.

Результаты оценки температурных зависимостей коэффициента теплопроводности, аппроксимированных выражением

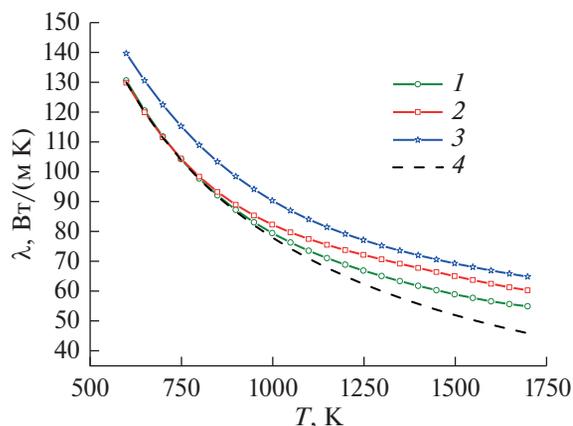


Рис. 2. Температурные зависимости теплопроводности образцов МПГ-7: 1 – № 1, 2 – № 2, 3 – № 3, 4 – функция (3).

$$\lambda(T) = A - BT + CT^2 - DT^3 + ET^4, \quad (1)$$

показаны на рис. 2. Достоверность аппроксимации $\lambda(T)$ для всех образцов составила не менее 0.998. Значения коэффициентов аппроксимации (1) представлены в таблице.

Зависимости $\lambda(T)$ для всех исследованных образцов имеют вид кривых, характерных для слоистых структур с гексагональным типом решетки [18]: с повышением температуры значения коэффициента теплопроводности быстро уменьшаются по закону, близкому к гиперболическому. Значения $\lambda(T)$, полученные для образца без дефектов (№ 1), хорошо согласуются с данными, приводимыми в литературе, тогда как для образцов с химическими (№ 2) и структурными (№ 3) дефектами температурные зависимости коэффициента теплопроводности лежат выше. Причем до 800 К зависимости $\lambda(T)$ образцов №№ 1, 2 практически совпадают.

Чтобы понять возможную причину такого поведения коэффициента теплопроводности исследованных образцов в зависимости от природы дефектов, рассмотрим возможные механизмы переноса энергии в графитах. Как известно, монокристаллический графит в силу своей анизотропии проявляет полупроводниковые свойства [19]: электропроводность в плоскости слоев носит металлический характер, в перпендикуляр-

Коэффициенты аппроксимации температурной зависимости коэффициента теплопроводности образцов графита марки МПГ-7

Образец МПГ-7	A , Вт/(м·К)	B , 10^{-1} Вт/(м·К ²)	C , 10^{-4} Вт/(м·К ³)	D , 10^{-7} Вт/(м·К ⁴)	E , 10^{-11} Вт/(м·К ⁵)
№ 1	425.32	8.7786	8.545	3.9143	6.8913
№ 2	441.54	9.5354	9.6409	4.4837	7.8588
№ 3	371.97	6.4631	5.5383	2.2414	3.499

ном направлении графит – полупроводник. Поэтому можно предположить, что основных механизмов переноса тепла в графите два: фононный и электронный [20–22]. Относительная роль фононной и электронной теплопроводности в общем процессе переноса энергии в графите при высоких температурах изучалась в [23]. Для этого использовались экспериментальные данные по коэффициентам теплопроводности, удельной теплоемкости и удельного электрического сопротивления двух образцов графита РОСО АХМ 50. На основе анализа данных было установлено, что различия в значениях коэффициента теплопроводности исследованных образцов напрямую связаны с разницей в удельном электросопротивлении. Также с помощью закона Видемана–Франца–Лоренца $\lambda = LT/\rho$ по температурной зависимости удельного электросопротивления $\rho(T)$ и классическому значению числа Лоренца L вычислен электронный вклад $\lambda_{эл}$ в общую теплопроводность. Оценка вклада $\lambda_{эл}$ показала, что при 500 К отношение $\lambda_{эл}/\lambda$ составляет ~1% и затем постепенно возрастает до 15% при 2400 К.

Этот результат позволяет оценить величину электронного вклада $\lambda_{эл}$ в общую теплопроводность образцов графита марки МПГ-7. Действительно, в бездефектном образце № 1 при 600 К отношение $\lambda_{эл}/\lambda$ пренебрежимо мало. В данном случае такое приближение вполне оправдано, поскольку, согласно [19, 24], при нормальных температурах функция Лоренца графита примерно в 100–200 раз больше, чем значение, обычно получаемое для металлов. Тогда полная теплопроводность образца определяется только фононной (решеточной) составляющей теплопроводности $\lambda(T) = \lambda_p(T)$, которая при высоких температурах может быть определена по обобщенной формуле Лейбфрида–Шлемана [25]

$$\lambda_p = B \frac{n^{1/3} a M \Theta^3}{\gamma^2 T}, \quad (2)$$

где B – коэффициент, зависящий от структуры и типа химической связи материала; n – число атомов в элементарной ячейке; a^3 – средний объем, занимаемый одним атомом в кристалле; M – средняя масса атома; Θ и γ – средние значения температуры Дебая и параметра Грюнайзена для всех фононных ветвей, участвующих в теплопереносе. Предполагая независимость B , Θ и γ от температуры и учитывая, что коэффициент теплопроводности бездефектного образца при $T = 600$ К равен 130 Вт/(м К), формулу (2) можно записать как

$$\lambda_p = \frac{A_p}{T}, \quad (3)$$

где $A_p = 7.8 \times 10^4$ Вт/м.

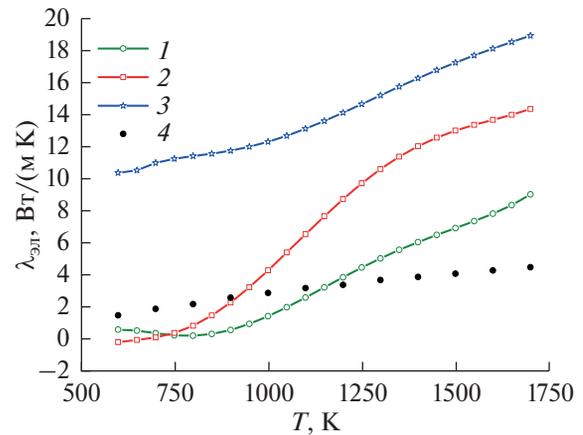


Рис. 3. Температурные зависимости электронного вклада в теплопроводность образцов МПГ-7: 1 – № 1, 2 – № 2, 3 – № 3, 4 – данные [23].

Рассчитанная по формуле (3) температурная зависимость $\lambda_p(T)$ показана на рис. 2. Из представленных данных следует, что в интервале температур 600–900 К фононный вклад в теплопроводность бездефектного образца и образца с химическими дефектами является доминирующим. Это хорошо согласуется с тем, что графит характеризуется фононной теплопроводностью вдоль слоев [15] с учетом изгибных колебаний в низкотемпературной области [26]. Однако при температуре более 900 К зависимости $\lambda(T)$ этих образцов расположены выше зависимости $\lambda_p(T)$. Причем с ростом температуры разница $\lambda(T) - \lambda_p(T)$ увеличивается. Отсюда можно предположить, что наблюдаемое расхождение обусловлено электронным вкладом в общую теплопроводность.

На рис. 3 показаны температурные зависимости электронного вклада $\lambda_{эл}$, которые представляют собой разность между зависимостями $\lambda(T)$ исследованных образцов графита марки МПГ-7 и зависимостью $\lambda_p(T)$, рассчитанной по формуле (3). Видно, что зависимость $\lambda_{эл}(T)$ бездефектного образца (№ 1) выше 800 К по абсолютной величине и по неубывающему характеру хорошо согласуется с данными работы [22]. Поведение $\lambda_{эл}(T)$ образца № 2 можно объяснить наличием примесных элементов, дающих положительный вклад в теплопроводность посредством увеличения количества носителей заряда и, как следствие, электронной теплопроводности. Образец № 3 демонстрирует максимальные значения электронной теплопроводности в сравнении с другими образцами во всем температурном диапазоне, и его температурная зависимость идет практически параллельно зависимости $\lambda_{эл}(T)$ бездефектного образца. Как показано в работе [7], макроструктурные неоднородности графита обусловлены при-

сутствием областей, характерных для структуры графена, что подтверждается колебательными спектрами образца № 3. Известно, что графен обладает более высокими значениями коэффициента теплопроводности в сравнении с графитом [27–29]. Данная особенность объясняет максимальные значения λ образца № 3 среди всех исследуемых образцов.

Сопоставляя полученные результаты $\lambda(T)$ с плотностью исследованных образцов, можно отметить, что образец с $\rho = 1869 \text{ кг/м}^3$ демонстрирует значение коэффициента теплопроводности, равное 60 Вт/(м К) , для образца с $\rho = 1838 \text{ кг/м}^3$ коэффициент теплопроводности составляет 65 Вт/(м К) , тогда как образец с $\rho = 1802 \text{ кг/м}^3$ характеризуется коэффициентом теплопроводности, равным 55 Вт/(м К) при $T = 1700 \text{ К}$. Зависимость $\lambda(T)$ и численные значения λ для образца № 1 хорошо согласуются с литературными данными. Известно, что плотность графита обусловлена его пористостью, однако ранее в литературе не учитывались другие факторы, влияющие на нее [5]. Принимая во внимание полученные экспериментально данные о $\lambda(T)$ образцов с химической и структурной гетерогенностью, можно заключить, что коэффициент теплопроводности графита не всегда напрямую зависит от плотности.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Измерена температуропроводность в диапазоне температур от 600 до 1700 К образцов промышленно изготавливаемого графита марки МПГ-7 различной плотности с выявленными химической и структурной гетерогенностями. На основе этих экспериментальных данных рассчитаны температурные зависимости коэффициента теплопроводности бездефектного графита и графита с химическими и структурными гетерогенностями. Установлено влияние химической и структурной гетерогенности на коэффициент теплопроводности графита. Показано, что теплопроводность графита марки МПГ-7 при высоких температурах не всегда напрямую зависит от его исходной плотности при нормальных условиях. Имеющиеся количественные отличия в теплопроводности графита с дефектами по отношению к бездефектному графиту, скорее всего, связаны с неодинаковым влиянием электронного вклада в общий процесс переноса энергии.

Полученные данные могут быть использованы при тепловых расчетах узлов и деталей, работающих при высоких температурах. На основании полученных результатов возможно производить оценку теплофизических свойств посредством неразрушающего контроля рентгеноскопическим методом заготовок и готовых изделий, выполненных из графита марки МПГ-7.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Виницкий А.М.* Ракетные двигатели на твердом топливе. М.: Машиностроение, 1973. 347 с.
2. *Фролов А.М., Шейндлин М.А., Васин А.А.* Экспериментальное исследование состава пара при лазерно-индуцированной сублимации мелкокристаллического графита до 4200 К // Вестн. ОИВТ РАН. 2019. Т. 2. С. 44.
3. *O'Driscoll W.G.* Features and Behaviour of Carbon // Nucl. Eng. 1958. V. 3. № 32. P. 479.
4. *Лутков А.И.* О влиянии пористости на эффективную теплопроводность графита // ИФЖ. 1973. Т. 25. № 2. С. 323.
5. *Станкус С.В., Савченко И.В., Агажанов А.Ш., Яцук О.С., Жмуриков Е.И.* Теплофизические свойства графита МПГ-6 // ТВТ. 2013. Т. 51. № 2. С. 205.
6. *Вершинин А.В., Вершинина М.В., Белякова Е.Г., Поляков Е.В., Бамбуров В.Г., Волков И.В.* Исследования включений, выявляемых в процессе рентгеноконтроля заготовок и деталей из мелкозернистого графита марки МПГ-7 // Вестн. Концерна ВКО "Алмаз-Антей". 2017. № 4. С. 80.
7. *Вершинин А.В., Белякова Е.Г., Вершинина М.В., Поляков Е.В., Бамбуров В.Г., Бакланова И.В., Вовкотруб Э.Г., Язовских К.А.* Структурный анализ включений, выявляемых в процессе рентгеновского контроля заготовок и деталей из мелкозернистого графита марки МПГ-7 // Вестн. Концерна ВКО "Алмаз-Антей". 2019. № 4. С. 78.
8. *Tuinstra F., Koenig J.L.* Raman Spectrum of Graphite // J. Chem. Phys. 1970. V. 53. № 3. P. 1126.
9. *Виргильев Ю.С.* Графиты для реакторостроения. М.: ФГУП "НИИграфит", 2011. 89 с.
10. *Костилов В.И., Шипков Н.Н., Калашиников Я.А. и др.* Графитация и алмазообразование. М.: Металлургия, 1991. 223 с.
11. *Убеллоде А.Р., Льюис Ф.А.* Графит и его кристаллические соединения. Пер. с англ. М.: Мир, 1965. 256 с.
12. *Ивлиев А.Д.* Метод температурных волн в теплофизических исследованиях // ТВТ. 2009. Т. 47. № 5. С. 771.
13. *Ивлиев А.Д., Куриченко А.А., Векшин И.М.* Высокотемпературная температуропроводность твердых растворов системы Y–Ho // ТВТ. 2016. Т. 54. № 2. С. 219.
14. *Ивлиев А.Д., Куриченко А.А., Мешков В.В., Гой С.А.* Методика ГСССД МЭ 207–2013. Методика экспериментального исследования температуропроводности конденсированных материалов с использованием температурных волн. ГСССД. Аттестат № 207. Деп. ФГУП "Стандартинформ". 20.03.2013. № 902а–2013 кк.
15. *Дульнев Г.Н., Заричняк Ю.П.* Теплопроводность смесей и композиционных материалов. Л.: Энергия, 1974. 264 с.
16. *Станкус С.В., Яцук О.С., Жмуриков Е.И., Тесchio L.* Тепловое расширение искусственных графитов в интервале температур 293–1650 К // Теплофизика и аэромеханика. 2012. Т. 19. № 5. С. 637.
17. *Жмуриков Е.И., Савченко И.В., Станкус С.В., Тесchio L.* Измерение теплофизических свойств графитовых композитов для конверторов нейтронной

- мишени // Вестн. НГУ. Сер. Физика. 2011. Т. 6. № 2. С. 77.
18. *Лифшиц И.М.* О тепловых свойствах цепных и слоистых структур при низких температурах // ЖЭТФ. 1952. Т. 22. № 4. С. 475.
19. *Мармер Э.Н.* Углеродистые материалы. М.: Металлургия, 1973. 136 с.
20. *Жмуриков Е.И., Бубненко И.А., Дремов В.В., Самарин С.И., Покровский А.С., Харьков Д.В.* Графит в науке и ядерной физике. Новосибирск, 2013. 193 с.
21. *Костановский А.В., Костановская М.Е., Зеодинов М.Г.* О фоновом механизме теплопроводности графита при высоких температурах // ТВТ. 2013. Т. 51. № 3. С. 477.
22. *Берман Р.* Теплопроводность твердых тел. М.: Мир, 1979. 286 с.
23. *Taylor R.E., Groot H.* Thermophysical Properties of POCO Graphite // High Temp.–High Press. 1980. V. 12(2). P. 147.
24. *Powell R.W., Schofield F.H.* The Thermal and Electrical Conductivities of Carbon and Graphite to High Temperatures // Proc. Phys. Soc. 1939. V. 51. P. 153.
25. *Slack G.A.* The Thermal Conductivity of Nonmetallic Crystals. In: Solid State Physics / Eds. Seitz F., Turnbull D., Ehrenreich H. N.Y.: Academic, 1979. V. 34. 71 p.
26. *Абдуллаев Н.А.* Параметр Грюнайзена в слоистых кристаллах // ФТТ. 2001. Т. 43. № 4. С. 697.
27. *Chen S., Moore A.L., Cai W., Suk J.W., An J., Mishra C., Amos C., Magnuson C.W., Kang J., Shi L., Ruoff R.S.* Raman Measurements of Thermal Transport in Suspended Monolayer Graphene of Variable Sizes in Vacuum and Gaseous Environments // ACS Nano. 2010. V. 5. P. 321.
28. *Balandin A.A.* Thermal Properties of Graphene and Nanostructured Carbon Materials // Nat. Mater. 2011. V. 10. P. 569.
29. *Chen S., Wu Q., Mishra C., Kang J., Zhang H., Cho K., Cai W., Balandin A.A., Ruoff R.S.* Thermal Conductivity of Isotopically Modified Graphene // Nat. Mater. 2012. V. 11. P. 203.

УДК 536.71

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЕРСИЙ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СВОЙСТВ БИНАРНЫХ СМЕСЕЙ ФЛЮИДОВ В ШИРОКОЙ ОБЛАСТИ ДАВЛЕНИЙ И ТЕМПЕРАТУР

© 2022 г. Ю. А. Богданова*, С. А. Губин

Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, Россия

*E-mail: yabogdanova@mephi.ru

Поступила в редакцию 28.06.2021 г.

После доработки 16.07.2021 г.

Принята к публикации 28.09.2021 г.

В статье рассмотрены основные положения трех версий теории возмущения ВН (Henderson D., Barker J.A.), WCA (Weeks J.D., Chandler D., Andersen H.C.) и KLRR (Kang H.S., Lee C.S., Ree T., Ree F.H.), используемых для расчета термодинамических свойств бинарных смесей плотных газов в широкой области давлений и температур. Взаимодействие молекул описывается с помощью сферически-симметричного парного потенциала $\epsilon\text{-}6$. Верификация проведена путем сравнения экспериментальных данных по сжатию бинарных смесей гелий–водород и аммиак–водород, а также по ударно-волновому сжатию жидких N_2 , O_2 с результатами равновесных термодинамических расчетов и моделирования методом Монте-Карло. Показано, что для термодинамического моделирования свойств бинарных смесей наиболее точной версией теории возмущений является модернизированная теория KLRR-T.

DOI: 10.31857/S0040364422040032

ВВЕДЕНИЕ

Методы термодинамического моделирования сложных химических систем в настоящее время успешно используются при решении научных и прикладных задач, например, при разработке новых высокотемпературных процессов в химических реакторах и энергетических установках, для оптимизации процессов синтеза материалов для микроэлектроники, в задачах физики и химии детонационных и ударных волн и т.п. [1–4]. При этом особенно важно реалистичное прогнозирование термодинамических свойств многокомпонентных продуктов сложных химических систем в широкой области давлений и температур [1, 3, 5].

Во многих практических задачах, где необходимо термодинамическое моделирование сложных химических систем при высоких давлениях и температурах, рассматриваются системы, в значительной степени или даже полностью состоящие из плотных газообразных (или флюидных – в сверхкритической области) компонентов. Для таких систем прогнозируемые термодинамические свойства в существенной степени определяются надежностью теорий статистической механики для построения моделей уравнений состояния (УРС) и методик термодинамических расчетов.

Теоретические модели, основанные на потенциалах взаимодействия молекул [6–29], позволяют рассчитывать термодинамические свойства плот-

ного газа в согласии с экспериментальными данными и результатами моделирования методами Монте-Карло и молекулярной динамики. Совершенствование аппарата статистической механики стимулировало разработку вариационной теории MCRSR (Mansoori–Canfield–Rasaiah–Stell–Ross) [9, 10], термодинамических теорий возмущений [6, 7, 11–13] и интегральных уравнений для функций распределения молекул в приближении мягких сфер HMSA (hypernetted-chain/soft core mean spherical approximation) [14, 28].

Использование теории возмущений [6, 7, 11–13, 15, 25–27, 29] для разработки УРС плотных газов основано на предположении, что структура флюида в первую очередь определяется силами отталкивания на малых расстояниях и лишь в незначительной степени силами притяжения большого радиуса действия. Поэтому в теории возмущений для сферических молекул в качестве базисной используется система твердых сфер, а слабые силы притяжения учитываются в виде возмущений.

Термодинамические теории возмущений различаются методиками разделения потенциала взаимодействия на базисную и возмущающую части и критериями для оценки диаметров твердых сфер [11–13]. В зависимости от этого результаты различаются по точности рассчитываемых термодинамических параметров смеси, а также диапазонами

плотностей и температур, в которых данная методика позволяет получить достоверные результаты.

В настоящей работе каждая методика разделения потенциала расширена для случая бинарных смесей. Проведена верификация результатов термодинамического моделирования свойств бинарных смесей (H_2-He , NH_3-H_2 , N_2-N , O_2-O) с доступными экспериментальными данными и результатами компьютерного моделирования методами Монте-Карло и молекулярной динамики. Для проведения термодинамических расчетов использовалась разработанная авторами теоретическая модель уравнения состояния двухкомпонентной системы [15]. Впервые выполняется сравнение предсказаний теоретической модели УРС двухкомпонентной смеси [15] с использованием различных версий теории возмущений с результатами моделирования Монте-Карло и экспериментальными данными термодинамических свойств бинарных смесей.

Таким образом, настоящая работа направлена на решение актуальной научной задачи повышения достоверности термодинамического моделирования бинарных смесей флюидов при высоких давлениях и температурах, в том числе в сверхкритической области.

ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Основная идея любой теории возмущений состоит в разделении потенциала $\phi_{ij}(r)$ исследуемой системы в точке $r = \lambda$ на две составляющие: основную часть $\phi_{ij}^{ref}(r)$, представляющую собой потенциал взаимодействия молекул в некоторой базисной системе (ref – reference – базисный), и малое возмущение $\phi_{ij}^{pert}(r)$ (pert – perturbation – возмущение). В качестве базисной системы обычно используется модель твердых сфер [10–15], так как она наиболее изучена и для нее известна радиальная функция распределения молекул.

Для двухкомпонентной смеси разделение потенциала взаимодействия $\phi_{ij}(r)$ для каждой пары молекул ij ($ij = 1, 2$) можно представить в виде

$$\left. \begin{aligned} \phi_{ij}(r) &= \phi_{ij}^{ref} + \phi_{ij}^{pert}; \\ \phi_{ij}^{ref} &= 0 \end{aligned} \right\}, \quad r \geq \lambda_{ij}; \quad (1)$$

$$\left. \begin{aligned} \phi_{ij}^{ref} &= \phi_{ij}(r) - \phi_{\lambda,ij}(r) \\ \phi_{ij}^{pert} &= \phi_{\lambda,ij}(r) \end{aligned} \right\}, \quad r < \lambda_{ij},$$

где r – расстояние между молекулами, λ_{ij} – точка разделения потенциала, $\phi_{\lambda,ij}(r)$ – сглаживающий потенциал.

Методика расчета базисной и возмущающей частей потенциала (1), а также определение точки

разделения потенциала целиком определяются конкретной версией теории возмущений.

Для расчета термодинамических свойств равновесной системы при заданных температуре T и объеме V достаточно знать энергию Гельмгольца этой системы. Тогда величины всех необходимых термодинамических параметров могут быть найдены путем вычисления соответствующих производных энергии Гельмгольца.

Для двухкомпонентной системы избыточная свободная энергия Гельмгольца F^{ex} в расчете на одну молекулу в соответствии с теорией возмущений определяется по формуле

$$\frac{\beta F^{ex}}{N} = \frac{\beta F^{HS}}{N} + \frac{\rho}{2} \sum_{i,j=1}^2 x_i x_j \int_0^{\infty} g_{ij}^{HS}(r) \beta \phi_{ij}^{pert}(r) d^3r, \quad (2)$$

где x_i, x_j – мольные доли компонентов смеси; ρ – плотность смеси; $g_{ij}^{HS}(r, \rho, T)$ – радиальная функция распределения твердых сфер, зависящая от расстояния между молекулами типа i и j ; $\beta = 1/(k_B T)$; k_B – постоянная Больцмана, F^{HS} – избыточная энергия Гельмгольца базисной системы твердых сфер, методика расчета которой описана в [16].

Для расчета радиальных функций распределения $g_{ij}^{HS}(r, \rho, T)$ в [17] применялась методика, включающая корректирующую поправку, предложенную Верле и Вейсом [18]:

$$g_{ij}^{HS}(r, \{R\}, \rho) = H(r - R_{ij}) g_{ij}^{PY}(r, \{R^W\}, \rho) + \delta g_{ij}(r), \quad (3)$$

$$H(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0, \end{cases}$$

где $g_{ij}^{PY}(r)$ – функции распределения твердых сфер, полученные из уравнения Перкуса–Йевики [18]; R_{ij} – эффективный диаметр твердой сферы i -го компонента; $\xi = \frac{\pi}{6} \sum_{i=1}^2 \rho_i R_{ii}^3$ – коэффициент упаковки твердых сфер; R_{ij}^W определяется по формуле

$$R_{ij}^W = R_{ij}(1 - \xi/16)^{1/3}.$$

Использование выражения (3) позволяет получить более точные значения радиальных функций распределения $g_{ij}^{HS}(r, \rho, T)$, чем функций $g_{ij}^{PY}(r)$, полученных из уравнения Перкуса–Йевики [19], в сравнении с данными моделирования методом Монте-Карло. Аналитическое выражение для расчета функций распределения, а также подробное описание методики представлено в [17].

Численный расчет интеграла, присутствующего в формуле (2), требует значительных временных затрат, быстро увеличивающихся с ростом переменной интегрирования r . Поэтому в настоящей работе используется методика, которая без

потери точности значительно упрощает вычисления и сокращает время расчета. Второе слагаемое формулы (2), содержащее интеграл для $i, j = 1, 2$, с учетом выражения (3) и разделения потенциала (1) может быть представлено в виде суммы трех составляющих:

$$F_{ij}^{\text{ex}} = 2\pi\rho\beta \int_0^{\infty} g_{ij}(r) \varphi_{ij}^{\text{pert}}(r) r^2 dr = F_{1,ij} + F_{2,ij} + F_{3,ij}, \quad (4)$$

$$F_{1,ij} = 2\pi\rho\beta \int_{R_{ij}^W}^{\infty} g_{ij}^{\text{PY}}(r, \{R^W\}, \rho) \varphi_{ij}(r) r^2 dr, \quad (5)$$

$$F_{2,ij} = -2\pi\rho\beta \int_{R_{ij}^W}^{\lambda_{ij}} g_{ij}^{\text{PY}}(r, \{R^W\}, \rho) \varphi_{ij}^{\text{ref}}(r) r^2 dr, \quad (6)$$

$$F_{3,ij} = 2\pi\rho\beta \left[\int_{R_{ij}}^{\infty} \varphi_{ij}^{\text{pert}}(r) \delta g_{ij}(r) r^2 dr - \int_{R_{ij}^W}^{R_{ij}} \varphi_{\lambda,ij}(r) g_{ij}^{\text{PY}}(r, \{R^W\}, \rho) r^2 dr \right]. \quad (7)$$

Появление слагаемого $F_{3,ij}$ в выражении для энергии Гельмгольца (4) связано с коррекцией (3) функций распределения твердых сфер Перкуса–Йевика согласно методике Верле и Вейса [18]. В [29] показано, что эта коррекция значительна только при высоких плотностях. Поэтому вклад в суммарную энергию Гельмгольца оказывается наибольшим именно в области высоких плотностей. Авторы [27] в своей методике расчетов по теории KLRР пренебрегают слагаемым (7) в формуле (4), безосновательно указывая, что вклад в суммарную величину энергии Гельмгольца невелик.

Также для численного вычисления интегралов (5)–(7) использовалась методика, подробно описанная в [15] и позволяющая рассчитать избыточную энергию Гельмгольца с высокой точностью и быстродействием по сравнению с прямым численным интегрированием в выражении (3).

Далее с помощью соответствующих первых и вторых производных избыточной энергии Гельмгольца (2) можно рассчитать все необходимые термодинамические параметры двухкомпонентной смеси флюидов.

Например, коэффициент сжимаемости $Z = PV/(Nk_B T)$, соответствующий давлению P , рассчитывается путем численного дифференцирования избыточной энергии Гельмгольца по плотности:

$$Z = 1 + \beta\rho \left(\frac{\partial F^{\text{ex}}}{\partial \rho} \right)_\beta. \quad (8)$$

Аналогично вычисляется избыточная внутренняя энергия в расчете на одну молекулу путем дифференцирования по температуре:

$$U^{\text{ex}} = \left(\frac{\partial \beta F^{\text{ex}}}{\partial \beta} \right)_\rho. \quad (9)$$

Входящие в выражения (8) и (9) частные производные избыточной энергии Гельмгольца (4) по переменным ρ и β вычисляются численным дифференцированием функции на равномерной сетке по четырем соседним узлам. Для этого применяется формула, полученная по методу Рунге–Ромберга, обеспечивающая достаточный для целей данной работы четвертый порядок точности по шагу сетки. Эта методика позволяет избежать появления нефизических слагаемых при дифференцировании избыточной энергии Гельмгольца при использовании термодинамически зависящих потенциалов взаимодействия. Через соответствующие первые и вторые производные энергии Гельмгольца также можно выразить и все остальные термодинамические параметры флюида.

Теория возмущений Баркера–Хендерсона. Для случая бинарных смесей в версии Баркера и Хендерсона (ВН) [12] базисный потенциал $\varphi^{\text{ref}}(r)$ и возмущающая часть $\varphi^{\text{pert}}(r)$ имеют вид

$$\varphi_{ij}^{\text{ref}} = \begin{cases} \varphi_{ij}(r), & r < \sigma_{ij}, \\ 0, & r \geq \sigma_{ij}, \end{cases} \quad (10)$$

$$\varphi_{ij}^{\text{pert}} = \begin{cases} 0, & r < \sigma_{ij}, \\ \varphi_{ij}(r), & r \geq \sigma_{ij}. \end{cases}$$

Здесь r – межмолекулярное расстояние; σ_{ij} – расстояние, при котором $\varphi_{ij}(\sigma_{ij}) = 0$, является точкой разделения межмолекулярного потенциала взаимодействия $\varphi_{ij}(r)$.

Версия ВН успешно использовалась для расчета термодинамических параметров однокомпонентных систем, молекулы которых взаимодействуют в соответствии с потенциалом Леннард–Джонса [20], а также при расчете равновесных параметров системы пар–жидкость при высоких давлениях [21].

Теория возмущений Вика, Чендлера, Андерсена (WCA). Теория WCA [13, 22] – широко используемая модель теории возмущений, в которой базисный потенциал $\varphi^{\text{ref}}(r)$ и возмущающая часть $\varphi^{\text{pert}}(r)$ определяются как

$$\varphi_{ij}^{\text{ref}} = \begin{cases} \varphi_{ij}(r) + \varepsilon_{ij}, & r < r_{m,ij}, \\ 0, & r \geq r_{m,ij}, \end{cases} \quad (11)$$

$$\varphi_{ij}^{\text{pert}} = \begin{cases} -\varepsilon_{ij}, & r < r_{m,ij}, \\ \varphi_{ij}(r), & r \geq r_{m,ij}. \end{cases}$$

Отличие WCA от ВН заключается в определении базисного потенциала и местоположения точки разделения потенциала взаимодействия. В версии WCA точка разделения потенциалов совпадает с местоположением минимума потенциала межмолекулярного взаимодействия $r_{m,ij} = 2^{1/6} \sigma_{ij}$.

Для определения диаметров твердых сфер предложен термодинамический критерий – равенство сжимаемостей базисной системы и эквивалентного твердосферного флюида. Эта методика позволяет описать термодинамические свойства плотных однокомпонентных флюидов в хорошем согласии с экспериментальными данными [13, 22, 23] лишь в области низких плотностей, хотя результаты могут быть реалистичными и при высоких плотностях в зависимости от вида потенциала межмолекулярного взаимодействия.

На основе метода WCA в [22] получено выражение для энтропии, которое успешно используется для расчета термодинамических параметров различных сплавов.

Однако результаты расчетов термодинамических свойств однокомпонентных веществ с использованием версий теории возмущений ВН и WCA отклоняются от результатов моделирования методом Монте-Карло на 10–15% и дают нереалистичные результаты в области высоких плотностей и температур, представляющих наибольший интерес.

Версия KLRR теории возмущений. Более удачной из теорий, позволяющих получать УРС плотных газов как при высоких давлениях и температурах, так и при более низких температурах и высоких плотностях, является теория возмущений KLRR [11]. Эта теория воспроизводит результаты расчетов Монте-Карло с хорошей точностью для разных типов потенциалов взаимодействия молекул, включая потенциалы exp-6, реалистичность которых для расчетов параметров ударного сжатия и детонации подтверждается многими исследованиями [25, 26].

В версии KLRR сглаживающий потенциал $\phi_\lambda(r)$ является функцией межмолекулярного расстояния, в отличие от предыдущих версий (нулевое значение в ВН и постоянная величина в WCA):

$$\left. \begin{aligned} \phi_{ij}^{\text{ref}} &= 0, \\ \phi_{ij}^{\text{pert}} &= \phi_{ij}(r), \end{aligned} \right\} r \geq \lambda_{ij}, \quad (12)$$

$$\left. \begin{aligned} \phi_{ij}^{\text{ref}} &= \phi_{ij}(r) - \phi_{\lambda_{ij}}(r), \\ \phi_{ij}^{\text{pert}} &= \phi_{\lambda_{ij}}(r), \end{aligned} \right\} r < \lambda_{ij}.$$

Определение точки разделения потенциала λ_{ij} и функциональной формы сглаживающего потенциала $\phi_{\lambda_{ij}}(r)$ является произвольным при выполнении условия, что $\phi_{ij}^{\text{ref}}(r)$ имеет отталкивательный характер.

В данной работе используется самая простая – линейная – форма для сглаживающего потенциала $\phi_{\lambda_{ij}}(r)$:

$$\phi_{\lambda_{ij}} = \phi_{ij}(\lambda_{ij}) + (r - \lambda_{ij}) \phi'_{ij}(\lambda_{ij}), \quad i, j = 1, 2.$$

Точка разделения потенциала межмолекулярного взаимодействия в оригинальной версии KLRR зависит от плотности и вычисляется как

$$\lambda_{ij} = \min \{r_{m,ii}, a_{fcc,i}\}, \quad (13)$$

где $a_{fcc,i} = 2^{1/6}/\rho_i^{1/3}$ – эквивалент расстояния ГЦК-решетки, $\rho_i = N_i/V$ – концентрация i -го компонента в смеси.

Эта схема переходит в форму WCA при низких плотностях, имеющих параметр решетки $a_{fcc,i} > r_{m,ii}$. Для плотностей выше кривой плавления и температур выше $k_B T/\epsilon_{ii} = 100$ использование этой схемы приводит к согласию результатов расчетов с данными метода Монте-Карло для однокомпонентных флюидов, молекулы которых взаимодействуют по потенциалам Леннард–Джонса, exp-6 и обратностепенным потенциалом.

Однако метод расчета точки разделения λ_{ij} имеет недостаток, связанный с выбором негладкой функции (13). Скачкообразная зависимость функции $\lambda_{ij}(\rho_i)$ приводит к тому, что вторые и высшие частные производные избыточной энергии Гельмгольца по плотности и термодинамические параметры, вычисляемые по этим производным (например, коэффициент изотермического сжатия), имеют разрывы при той же плотности. Этот недостаток теории KLRR может приводить к практическим трудностям при выполнении термодинамических расчетов с таким УРС.

В настоящей работе значения точек разделения для одноименных потенциалов λ_{ii} вычисляются с использованием следующей непрерывной функции, предложенной в [27] для однокомпонентного флюида:

$$\lambda_{ii} = r_{m,ii} \left(1 + (\rho_{\sigma,ii} r_{m,ii}^3)^{n/3} \right)^{-1/n}, \quad (14)$$

где $\rho_{\sigma,ii} = \rho_{ii}/\sqrt{2}$, n – некоторый параметр.

При $n = 120$ функции (13), (14) становятся очень близки друг к другу. На рис. 1 показана зависимость точки разделения λ_{ii} от плотности при различных значениях параметра n в формуле (14).

Таким образом, замена кусочно заданной функции (13) в правиле выбора точки разбиения потенциала на гладкую функцию (14) с $n = 120$ позволяет устранить недостаток оригинальной версии KLRR [11] и тем самым избежать разрывов в производных эффективного диаметра твердых сфер.

Модифицированная таким образом версия теории возмущений KLRR [11] с учетом выражений для расчета энергии Гельмгольца (5)–(7) является улучшенной версией – KLRR-T, на основе которой разработана теоретическая модель УРС [15], реализованная в виде вычислительных программ, для расчета термодинамических свойств бинарных смесей. При этом теория сохраняет свои главные достоинства: высокую точность в широком

диапазоне изменений плотности и температуры и быстроедействие.

С использованием (14) в данной работе рассчитываются местоположения разделения потенциалов лишь одноименных взаимодействий ($i=j=1, 2$ для бинарной смеси). Точка разделения λ_{ij} перекрестного потенциала взаимодействия определяется таким образом, чтобы выполнялось условие аддитивности диаметров твердых сфер базисной системы $R_{12} = (R_{11} + R_{22})/2$.

РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ БИНАРНЫХ СМЕСЕЙ С ПОТЕНЦИАЛОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ EXP-6

Для тестирования рассмотренных версий теории возмущений для расчета термодинамических параметров бинарных смесей взаимодействие между частицами в системе описывается модифицированным потенциалом Букингема exp-6

$$\varphi(r) = \frac{\varepsilon}{\alpha - 6} \left(6 \exp \left[\alpha \left(1 - \frac{r}{r_{m,ij}} \right) \right] - \alpha \left(\frac{r_{m,ij}}{r} \right)^6 \right), \quad r \geq c, \quad (15)$$

$$\varphi(r) = +\infty, \quad r \leq c, \quad (16)$$

где $\varepsilon_{ij} > 0$ – глубина потенциальной ямы ($\min[\varphi_{ij}(r)] = -\varepsilon_{ij}$); $r_{m,ij}$ – расстояние между молекулами, при котором потенциальная энергия минимальна ($\varphi_{ij}(r_{m,ij}) = -\varepsilon_{ij}$); α_{ij} – параметр, определяющий жесткость отталкивания молекул.

Однако трехпараметрический потенциал (15), (16) с постоянными значениями параметров α_{ij} , $r_{m,ij}$, ε_{ij} хорошо описывает межмолекулярные силы только для веществ с неполярными или почти неполярными молекулами, но оказывается слишком грубым приближением для полярных молекул, в особенности для молекул с водородными связями (например, H_2O и NH_3) [30].

В [30] на примере H_2O показано, что зависящие от ориентации электростатические взаимодействия молекул могут быть учтены в квантово-механических потенциалах путем введения в эти потенциалы температурных зависимостей. В [27] приведена соответствующая модифицированная форма и для потенциала exp-6, в которой глубина потенциальной ямы зависит от температуры:

$$\varepsilon_{ii} = \varepsilon_{0,ii} \left(1 + \frac{\theta_{ii}}{T} \right), \quad (17)$$

где θ_{ii} – параметр, отвечающий за учет электростатических эффектов.

Дополнение потенциала температурной зависимостью позволяет учитывать вклад от дипольных взаимодействий, который становится значительным при температурах порядка θ_{ii} и ниже. Мо-

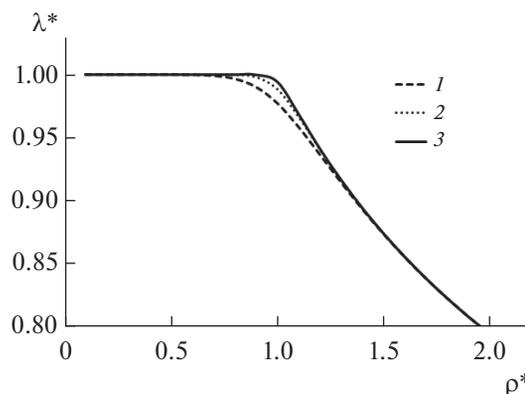


Рис. 1. Зависимость точки разделения от плотности при различных n согласно выражению (14): 1 – $n = 30$, 2 – 60, 3 – 120.

дифицированный таким образом потенциал exp-6 (15)–(17) имеет четыре параметра α_{ij} , $r_{m,ij}$, $\varepsilon_{0,ii}$, θ_{ii} , причем для неполярных веществ $\theta_{ii} = 0$. На примере воды и аммиака показано [25, 26, 30, 31], что термодинамический расчет с теоретическим УРС на основе потенциалов вида (15)–(17) удовлетворительно воспроизводит результаты ударно-волновых измерений удельного объема этих веществ в широком диапазоне изменения давления (от тысяч до сотен тысяч атмосфер). При использовании стандартного трехпараметрического потенциала exp-6 (15)–(17) такие результаты получить не удается.

Методика определения параметров потенциалов exp-6 (15)–(17) по данным динамических (ударно-волновых) и статических экспериментов разработана в [29]. В настоящей работе для дальнейших расчетов используются потенциальные параметры для одноименных пар молекул, найденные в [29], которые представлены в табл. 1.

В двухкомпонентной смеси также происходят взаимодействия между парами разноименных молекул ($i \neq j$). Перекрестные параметры потенциала для таких пар молекул могут быть либо заданы в явной форме, либо формально выражены через потенциальные параметры для соответствующих пар одноименных молекул:

$$r_{m,ij} = k_{ij} \frac{r_{m,ii} + r_{m,jj}}{2}, \quad (18)$$

$$\varepsilon_{ij} = l_{ij} \sqrt{\varepsilon_{ii} \varepsilon_{jj}}, \quad \alpha_{ij} = m_{ij} \sqrt{\alpha_{ii} \alpha_{jj}}.$$

Здесь k_{ij} , l_{ij} и m_{ij} – корректирующие множители, значения которых обычно близки к единице. Эти множители могут быть определены, если имеется подходящая теоретическая информация или экспериментальные данные. В противном случае принимается $k_{ij} = l_{ij} = m_{ij} = 1$, что сводит формулы (18) к классическим смесевым правилам Лоренца–Бертло. В данной работе для описания перекрестных взаимодействий используются ад-

Таблица 1. Параметры потенциала исследуемых веществ

	H ₂	He	NH ₃	N ₂	N	O ₂	O
ϵ_0/k_B , К	36.4	10.57	207	100.6	120.0	96.2	277.0
r_m , м ⁻¹⁰	3.43	2.97	3.69	4.25	2.65	3.79	2.57
α_{ij}	11.1	13.6	12.8	12.3	10.4	14.7	11.5
θ_{ij} , К	0	0	199	0	0	0	0

дитивные параметры, т.е. $k_{ij} = I_{ij} = m_{ij} = 1$ в выражениях (18).

Таким образом, в предложенной модели УРС двухкомпонентной смеси плотных газов межмолекулярные взаимодействия описываются модифицированными, зависящими от температуры потенциалами exp-6 (15)–(17). Тем самым разработанная модель УРС оказывается применимой для смесей, содержащих вещества как с неполярными, так и с полярными молекулами.

Для исследования точности термодинамического моделирования с использованием рассмотренных версий теории возмущений выбраны несколько бинарных смесей, имеющих различные потенциальные параметры, для которых имеется достаточное количество экспериментальных данных и результатов моделирования других авторов. В состав выбранных смесей также включены вещества с полярными молекулами.

Термодинамические расчеты выполнены с использованием модели уравнения состояния бинарных смесей [15]. Модель УРС [15] реализована в виде вычислительного алгоритма и компьютерной программы, позволяющей рассчитывать избыточные термодинамические свойства флюида при заданных значениях температуры и плотности. Все исследуемые в работе версии теории возмущений реализованы в этой программе путем редактирования соответствующих блоков подпрограмм, в

которых производится разделение потенциала взаимодействия на базисную и возмущающую части в соответствии с уравнениями (10), (11) или (12).

На рис. 2 показан вид возмущающей части потенциала и местоположения точек разделения потенциала для каждой версии теории возмущений на примере молекулы азота.

Для тестирования первой выбрана бинарная смесь гелия и водорода H₂–He. Выбор этой смеси объясняется наличием данных моделирования методом Монте-Карло [32] в широком интервале температур 50–7000 К и плотностей $\rho = 0.15\text{--}0.8$ г/см³, а также значительно различающимися потенциальными параметрами компонентов смеси. Однако в [32] расчеты выполнены с использованием неаддитивного перекрестного потенциала для H₂–He. Поэтому дополнительно проведено моделирование методом Монте-Карло с помощью программного кода MC Towhee [33, 34] в указанном интервале термодинамических состояний.

Результаты расчетов представлены в табл. 2, в которой показаны исходные параметры (температура, плотность, состав смеси), рассчитанные значения давления и внутренней энергии с использованием различных схем разделения потенциала взаимодействия, а также результаты моделирования методом Монте-Карло (МК).

Суммарная статистика максимальных и средних отклонений давления и избыточной внутренней энергии от данных МК представлена в табл. 3.

Наилучшее согласие с данными моделирования методом Монте-Карло имеют результаты расчетов, полученные с использованием версии KLRР-Т теории возмущений, особенно в области высоких температур и давлений (табл. 2, 3).

Далее рассматриваются бинарные смеси N₂–N и O₂–O, которые являются продуктами ударно-волнового сжатия жидких азота и кислорода вследствие диссоциации при высоких температурах. Ударные адиабаты N₂ и O₂ тщательно исследованы, доступно большое количество экспериментальных и теоретических результатов для сравнения [35–42].

Моделирование термодинамических параметров бинарных смесей N₂–N и O₂–O, полученных в результате ударно-волнового сжатия, также выполнено с использованием всех трех способов раз-

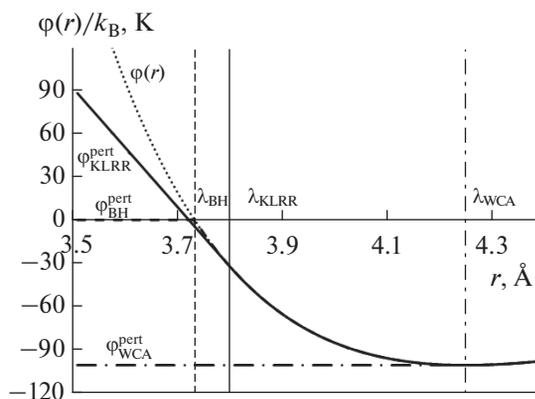


Рис. 2. Местоположения точек разделения потенциала и вид возмущающей части потенциала для различных версий теории возмущений.

Таблица 2. Результаты расчета давления и избыточной внутренней энергии для двухкомпонентной смеси H_2-He

T, K	$V, \text{см}^3/\text{моль}$	Состав $[H_2] : [He]$	$P, \text{ГПа}; U^{ex}, \text{кДж/моль}$			
			МК	ВН	WCA	KLRR-T
50	20	1 : 1	0.036; -0.816	0.0452; -0.611	0.035; -0.808	0.035; -0.809
100	14	1 : 1	0.284; -0.565	0.297; -0.329	0.283; -0.576	0.286; -0.562
300	10	1 : 1	1.65; 2.14	1.58; 2.19	1.53; 1.99	1.68; 2.21
300	10	3 : 1	2.134; 2.91	2.06; 3.04	1.73; 2.33	2.16; 2.99
300	10	1 : 3	1.29; 1.66	1.21; 1.70	1.25; 1.62	1.30; 1.69
1000	9	1 : 1	4.11; 7.59	3.89; 7.58	3.90; 7.36	4.12; 7.64
1000	9	3 : 1	4.91; 9.75	4.63; 9.67	4.42; 8.97	4.93; 9.81
1000	9	1 : 3	3.42; 5.90	3.40; 6.09	3.35; 5.86	3.43; 5.9
4000	8	1 : 1	11.6; 22.6	11.5; 22.5	11.4; 22.3	11.6; 22.7
4000	7	1 : 1	15.2; 28.3	14.8; 27.89	14.8; 27.6	15.3; 28.4
7000	4.5	1 : 1	49.8; 76.4	47.5; 72.8	47.1; 71.9	51.2; 77.1
7000	4.5	3 : 1	53.1; 91.1	47.5; 80.7	46.4; 78.3	55.8; 91.8
7000	4.5	1 : 3	45.7; 62.2	44.2; 60.6	44.1; 60.2	46.2; 62.8

Таблица 3. Статистика относительных отклонений рассчитанных в настоящей работе значений давления и внутренней энергии смеси H_2-He от результатов МК

Версия теории возмущений	KLRR-T	ВН	WCA
Среднее значение модуля отклонения, %			
$\delta P, \%$	1.45	4.13	4.75
$\delta U^{ex}, \%$	1.11	3.11	4.21
Максимальное значение модуля отклонения, %			
$\delta P, \%$	5.21	10.66	12.58
$\delta U^{ex}, \%$	3.13	11.38	14.06

деления межмолекулярного потенциала взаимодействия. Результаты расчетов в соответствии с экспериментальными данными и результатами моделирования МК [35, 44] представлены графически в виде ударных адиабат в $P-V$ - и $T-P$ -координатах на рис. 3, 4. Следует отметить, что на рис. 3б заметно отклонение результатов расчета по KLRR-T от экспериментальных данных [35] при давлении выше 50 ГПа. Это связано с началом процесса ионизации в этой области, которая не учитывалась в авторских расчетах для исследуемых версий теории возмущений. Поэтому дополнительно выполнено сравнение с данными МК-моделирования [35, 44] во всем рассматриваемом диапазоне термодинамических состояний. В табл. 4 представлена статистика относительных отклонений значений давления на ударной адиабате жидких азота и кислорода от данных МК-моделирования [43] для количественной оценки точности рассчитываемых свойств бинарных смесей N_2-N и O_2-O на основе исследуемых в работе версий теории возмущений.

Рис. 3, 4 и табл. 4 демонстрируют, что результаты термодинамического моделирования с использованием версии KLRR-T [15] теории возмущений для расчета состояний ударно-волнового сжатия жидких азота и кислорода согласуются с экспериментальными данными в пределах указанной авторами погрешности, расчетами других авторов и результатами моделирования методом Монте-Карло. В свою очередь версии ВН [12] и WCA [13] лишь удовлетворительно описывают свойства бинарных смесей N_2-N и O_2-O , образующихся в результате диссоциации при сжатии в ударной волне.

В [45] опубликованы экспериментальные данные для бинарных смесей, одним из компонентов которых является аммиак. Эти данные предоставляют хорошую возможность верифицировать описанные методики разделения потенциалов для случая двухкомпонентных смесей, содержащих полярные молекулы аммиака. Это смеси аммиак-водород, содержащие 34.75 и 57.49% аммиака.

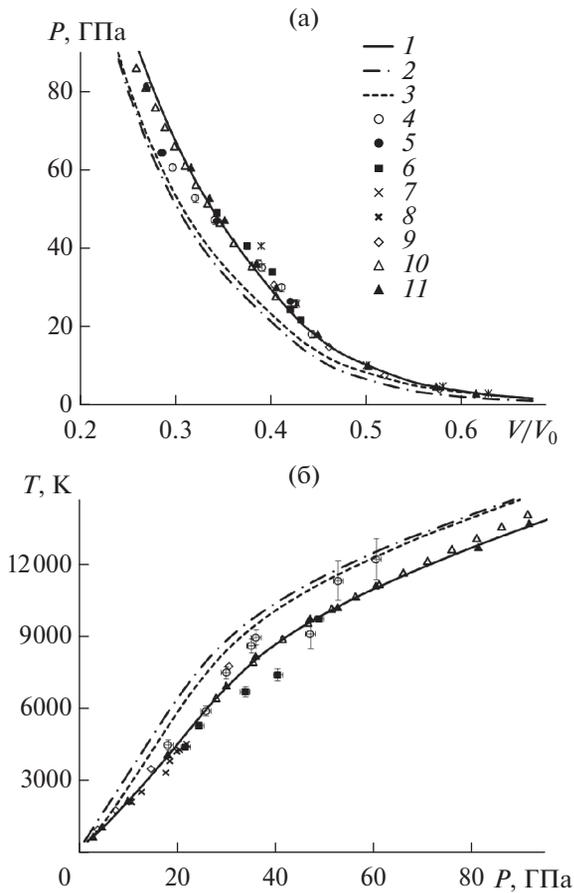


Рис. 3. Ударная адиабата жидкого азота в координатах $P-V$ (а) и $T-P$ (б) для начального состояния: $T_0 = 77$ К, $\rho_0 = 0.808$ г/см³, $U_0 = -2.84$ ккал/моль; расчет: 1 – данная работа, KLRR-T; 2 – ВН, 3 – WCA; эксперименты: 4 – [35], 5 – [36], 6 – [37], 7 – [38]; 8 – справочник [39]; 9 – результаты расчетов [40]; 10, 11 – результаты МК-моделирования [43, 44].

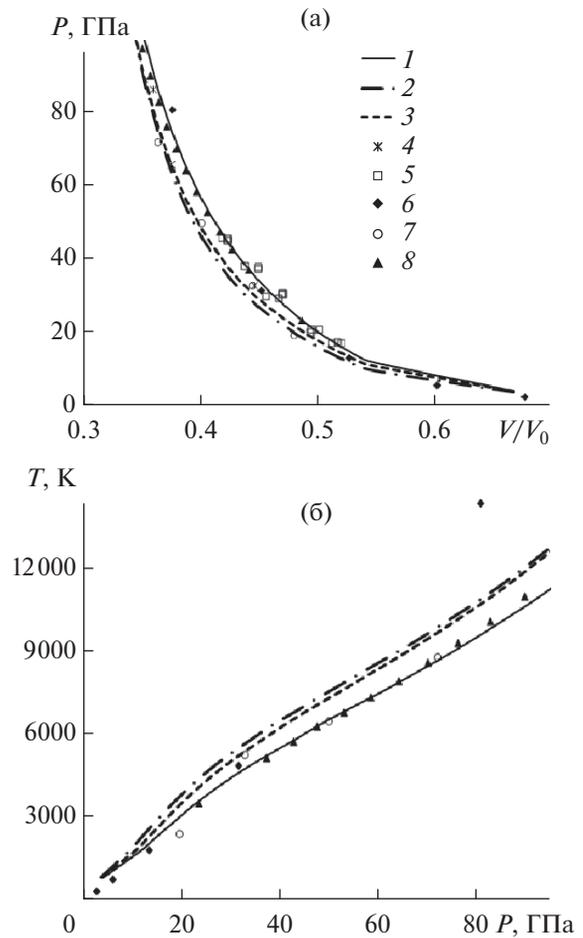


Рис. 4. Ударная адиабата жидкого кислорода в координатах $P-V$ (а) и $T-P$ (б) для начального состояния: $T_0 = 77$ К, $\rho_0 = 1.202$ г/см³, $U_0 = -1.41$ ккал/моль; 1 – данная работа, KLRR-T; 2 – ВН; 3 – WCA; 4 – эксперимент [36]; 5 – [41]; 6 – квантовое моделирование методом молекулярной динамики [42]; 7 – [40]; 8 – МК-моделирование [43].

Результаты расчетов показаны графически в виде изотерм при 423 и 573 К в $P-V$ -координатах на рис. 5. Статистика отклонений результатов расчетов от экспериментальных данных представлена в табл. 5.

Рис. 5 и табл. 5 демонстрируют одинаково хорошее согласие с экспериментальными данными результатов на основе версий KLRR-T и WCA.

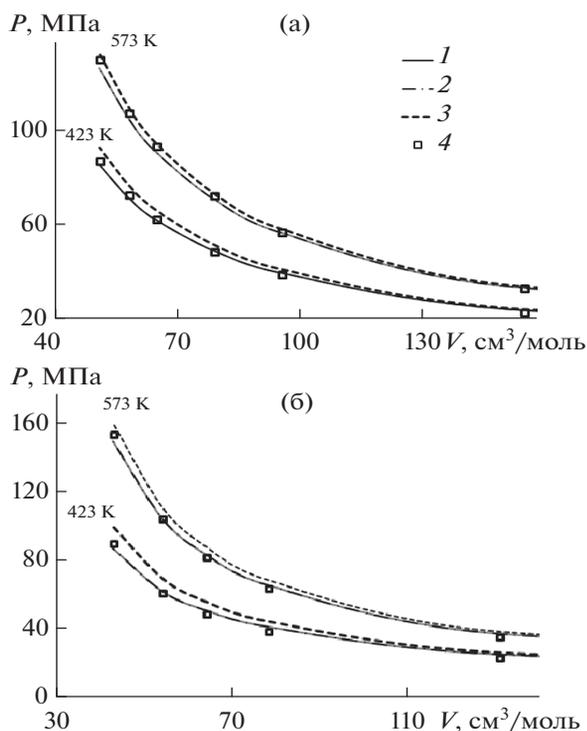
Анализируя полученные результаты, можно отметить, что погрешность расчетов на основе версий ВН [12] и WCA [13] растет с увеличением отношений потенциальных параметров компонентов бинарных смесей. Это поведение объяс-

Таблица 4. Статистика относительных отклонений рассчитанных в настоящей работе значений давления смесей N_2-N и O_2-O от результатов МК-моделирования [43]

Версия теории возмущений	KLRR-T [15]	ВН [12]	WCA [13]
Среднее значение модуля отклонения, %			
N_2-N	3.5	17.1	20.8
O_2-O	2.4	10.3	14.1
Максимальное значение модуля отклонения, %			
N_2-N	9.8	21.1	27.6
O_2-O	4.9	14.3	20.7

Таблица 5. Относительные отклонения рассчитанных в настоящей работе значений давления смеси $\text{NH}_3\text{--H}_2$ от экспериментальных данных [45]

Версия теории возмущений	KLRR-T [15]	ВН [12]	WCA [13]
Среднее значение модуля отклонения, %			
34.75% NH_3	1.74	3.65	1.73
57.49% NH_3	3.85	8.98	3.86
Максимальное значение модуля отклонения, %			
34.75% NH_3	4.43	6.31	4.43
57.49% NH_3	9.37	14.9	9.38

**Рис. 5.** Изотермы смеси $\text{NH}_3\text{--H}_2$ с долей аммиака 34.75 (а) и 57.49% (б): 1 – данная работа, KLRR-T; 2 – ВН; 3 – WCA; 4 – эксперимент [45].

няется тем, что способы разделения потенциалов взаимодействия и точки разделения потенциалов напрямую связаны со значениями параметра r_m и не зависят от полярности молекул веществ смеси. Таким образом, можно предположить, что эти версии теории возмущений могут применяться только для моделирования свойств бинарных систем с незначительно различающимися потенциальными параметрами r_m .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате рассмотрения различных версий теории возмущений показано, что версия теории возмущений KLRR-T предсказывает термодинамические свойства бинарных смесей веществ с заметно различающимися потенциальными пара-

метрами в согласии с экспериментальными данными и результатами моделирования методами Монте-Карло и молекулярной динамики в широкой области высоких давлений и температур. Эта область охватывает как низкоплотные состояния разреженного газа, так и высокоплотные состояния с давлениями в десятки гигапаскалей, пока влияние ионизации не начнет изменять параметры состояния продуктов ударно-волнового сжатия веществ.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Сон Э.Е.* Современные исследования теплофизических свойств веществ (на основе последних публикаций в ТВТ) (Обзор) // ТВТ. 2013. Т. 51. № 3. С. 392.
2. *Sumskoi S.I., Sofyin A.S., Agapov A.A., Zainetdinov S.Kh.* Parameters of Shock Waves During Detonation and Deflagration of Fuel–Air Clouds // J. Phys: Conf. Ser. 2020. V. 1686. 012085.
3. *Shargatov V.A.* A Method of Calculating of the Thermodynamic Properties and the Composition of the Explosion Products of Hydrocarbons and Air under Partial Chemical Equilibrium // J. Phys: Conf. Ser. 2016. V. 774. 012078.
4. *Брякина У.Ф., Губина Т.В., Шаргатов В.А.* Достаточное условие применимости модели химически равновесной смеси для описания состояния продуктов взрыва // Хим. физика. 2011. Т. 30. № 6. С. 40.
5. *Wilhelmsen O., Aasen A., Skaugen G. et al.* Thermodynamic Modeling with Equations of State: Present Challenges with Established Methods // Industr. Eng. Chem. Res. 2017. V. 56. № 13. P. 3503.
6. *Зеленер Б.В., Норман Г.Э., Филинов В.С.* Теория возмущений и псевдопотенциал в статистической термодинамике. М.: Наука, 1981. 187 с.
7. *Зеленер Б.В., Норман Г.Э., Филинов В.С.* Термодинамическая теория возмущений для систем с различными короткодействующими частями потенциалов межчастичного взаимодействия // ТВТ. 1976. Т. 14. № 3. С. 469.
8. *Неручев Ю.А., Болотников М.Ф.* Супрамолекулярные аспекты в межмолекулярном взаимодействии // ТВТ. 2020. Т. 58. № 3. С. 469.
9. *Ross M.* The Repulsive Forces in Dense Argon // J. Chem. Phys. 1980. V. 73. № 9. P. 4445.

10. *Ross M.* A High-density Fluid-perturbation Theory Based on an Inverse 12th-power Hard-sphere Reference System // *J. Chem. Phys.* 1979. V. 71. № 4. P. 1567.
11. *Kang H.S., Lee C.S., Ree T., Ree F.H.* A Perturbation Theory of Classical Equilibrium Fluids // *J. Chem. Phys.* 1985. V. 82. № 1. P. 414.
12. *Henderson D., Barker J.A.* Perturbation Theory and Equation of State for Fluids. II. A Successful Theory of Liquids // *J. Chem. Phys.* 1967. V. 47. № 11. P. 4714.
13. *Weeks J.D., Chandler D., Andersen H.C.* Role of Repulsive Forces in Determining the Equilibrium Structure of Simple Liquids // *J. Chem. Phys.* 1971. V. 54. P. 5237.
14. *Zerah G., Hansen J.-P.* Self-consistent Integral Equations for Fluid Pair Distribution Functions: Another Attempt // *J. Chem. Phys.* 1986. V. 84. № 4. P. 2336.
15. *Богданова Ю.А., Губин С.А., Викторов С.Б., Губина Т.В.* Теоретическая модель уравнения состояния двухкомпонентного флюида с потенциалом exp-6 на основе теории возмущений // *ТВТ.* 2015. Т. 53. № 4. С. 506.
16. *Mansoori G.A., Carnahan N.F., Starling K.E., Leland T.W. Jr.* Equilibrium Thermodynamic Properties of the Mixture of Hard Sphere // *J. Chem. Phys.* 1971. V. 54. P. 1523.
17. *Богданова Ю.А., Губин С.А., Маклашова И.В.* Радиальные функции распределения молекул для универсальной модели уравнения состояния газообразных/флюидных/твердых систем // *Ядерная физика и инжиниринг.* 2019. Т. 10. № 3. С. 285.
18. *Verlet L., Weis J.-J.* Equilibrium Theory of Simple Liquids // *Phys. Rev. A.* 1972. V. 5. № 2. P. 939.
19. *Lebowitz J.L.* Exact Solution of Generalized Percus-Yevick Equation for a Mixture of Hard Sphere // *Phys. Rev.* 1964. V. 133. P. A895.
20. *Leonard P.J., Henderson D., Barker J.A.* Perturbation Theory and Liquid Mixtures // *Trans. Faraday Soc.* 1970. V. 66. P. 2439.
21. *Rogers B.L., Prausnitz J.M.* Calculation of High-pressure Vapour-liquid Equilibria with a Perturbed Hard-sphere Equation of State // *Trans. Faraday Soc.* 1971. V. 67. P. 3474.
22. *Weeks J.D., Chandler D., Andersen H.C.* Relationship between the Hard-sphere Fluid and Fluids with Realistic Repulsive Forces // *Phys. Rev. A.* 1971. V. 4. № 4. P. 1597.
23. *Weeks J.D., Chandler D., Andersen H.C.* Perturbation Theory of the Thermodynamic Properties of Simple Liquids // *J. Chem. Phys.* 1971. V. 55. № 11. P. 5422.
24. *Dubin N.E., Yuryev A.A., Vatolin N.A.* Straightforward Calculation of the WCA Entropy and Internal Energy for Liquid Metals // *Thermochim. Acta.* 2011. V. 518. № 1-2. P. 9.
25. *Victorov S.B., El-Rabii H., Gubin S.A., Maklashova I.V., Bogdanova Yu.A.* An Accurate Equation-of-state Model for Thermodynamic Calculations of Chemically Reactive Carbon-containing Systems // *J. Energ. Mater.* 2010. V. 28. P. 35.
26. *Викторов С.Б., Губин С.А., Маклашова И.В., Пенекин В.И.* Модели уравнений состояния продуктов и методика термодинамического моделирования детонации // *Ядерная физика и инжиниринг.* 2010. Т. 1. № 1. С. 80.
27. *Byers-Brown W., Horton T.V.* Hard-sphere Perturbation Theory for Classical Fluids to High Densities // *Mol. Phys.* 1988. V. 63. № 1. P. 125.
28. *Fried L.E., Howard W.M.* An Accurate Equation of State for the Exponential-6 Fluid Applied to Dense Supercritical Nitrogen // *J. Chem. Phys.* 1998. V. 109. № 17. P. 7338.
29. *Victorov S.B., Gubin S.A.* A New Accurate Equation of State for Fluid Detonation Products Based on an Improved Version of the KLR Perturbation Theory // *Proc. 13th Int. Detonation Symp. Norfolk: Los Alamos National Laboratory,* 2006. P. 13.1118.
30. *Ree F.H.* A Statistical Mechanical Theory of Chemically Reacting Multiphase Mixtures: Application to the Detonation Properties of PETN // *J. Chem. Phys.* 1984. V. 81. № 3. P. 1251.
31. *Ree F.H.* Molecular Interaction of Dense Water at High Temperature // *J. Chem. Phys.* 1982. V. 76. № 12. P. 6287.
32. *Ree F.H.* Simple Mixing Rule for Mixtures with exp-6 Interactions // *J. Chem. Phys.* 1983. V. 78. P. 409.
33. MCCCSTowhee. <http://towhee.sourceforge.net>
34. *Martin M.G.* MCCCSTowhee: a Tool for Monte Carlo Molecular Simulation // *Mol. Simulat.* 2013. V. 39. P. 1212.
35. *Nellis W.J., Radousky H.B., Hamilton D.C., Mitchell A.C., Holmes N.C., Christianson K.B., van Thiel M.* Equation of State, Shock Temperature, and Electrical Conductivity Data of Dense Fluid Nitrogen in the Region of the Dissociative Phase Transition // *J. Chem. Phys.* 1991. V. 94. P. 2244.
36. *Nellis W.J., Mitchell A.C.* Shock Compression of Liquid Argon, Nitrogen, and Oxygen to 90 GPa (900 kbar) // *J. Chem. Phys.* 1980. V. 73. P. 6137.
37. *Мочалов М.А., Жерноклетов М.В., Илькаев Р.И. и др.* Экспериментальное измерение плотности, температуры и электропроводности ударно-сжатой неидеальной плазмы азота в мегабарном диапазоне давлений // *ЖЭТФ.* 2010. Т. 137. Вып. 1. С. 77.
38. *Воскобойников И.М., Гоголя М.Ф., Долгобородов Ю.А.* Температуры ударного сжатия жидких азота и аргона // *Докл. АН СССР.* 1979. Т. 246. № 3. С. 579.
39. Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ / Под ред. Трунина Р.Ф., Гударенко Л.Ф., Жерноклетова М.В., Симакова Г.В. 2-е изд., перераб. и доп. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2006. 531 с.
40. *Ross M., Ree F.H.* Repulsive Forces of Simple Molecules and Mixtures at High Density and Temperature // *J. Chem. Phys.* 1980. V. 73. № 12. P. 6146.
41. LASL Shock Hugoniot Data / Stanley P. Marsh. University of California Press, 1980. 653 p.
42. *Wang Cong, Zhang Ping.* Ab Initio Study of Shock Compressed Oxygen // *J. Chem. Phys.* 2010. V. 132. № 15. P. 154307.
43. *Аникеев А.А., Богданова Ю.А., Губин С.А.* Многокомпонентная версия замыкания HMSA для моделирования ударных адиабат CO₂, N₂ и O₂ // *Горение и взрыв.* 2015. Т. 8. № 1. С. 183.
44. *Brennan J.K., Rice B.M.* Molecular Simulation of Shocked Materials Using Reaction Ensemble Monte Carlo: Part I. Application to Nitrogen Dissociation // *Tech. Rep.* 2006. NTIS Iss. № 200710.
45. *Казарновский Я.С., Симонов Г.Б., Аристов Г.Е.* Сжимаемость смесей азот-водород-аммиак при высоких давлениях и температурах // *ЖФХ.* 1940. Т. 14. № 5-6. С. 774.

УДК 536;532.584;538.93

ИЗМЕРЕНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛОТДАЧИ НАНОЖИДКОСТЕЙ С ОДНОСТЕННЫМИ НАНОТРУБКАМИ

© 2022 г. В. Я. Рудяк^{1, 2, 3, 4, *}, А. В. Минаков^{1, 2, 3}, М. И. Пряжников^{1, 2, 3}, Д. В. Гузей^{1, 2}¹Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет, Новосибирск, Россия²Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия³Институт теплофизики СО РАН, Новосибирск, Россия⁴Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

*E-mail: valery.rudyak@mail.ru

Поступила в редакцию 21.05.2021 г.

После доработки 02.11.2021 г.

Принята к публикации 23.11.2021 г.

Статья посвящена экспериментальному изучению теплопроводности и теплоотдачи наножидкостей с одностенными нанотрубками. Измерена теплопроводность наножидкостей на основе этиленгликоля, воды и изопропилового спирта. Весовая концентрация углеродных трубок варьировалась от 0.05 до 0.5%. Показано, что во всех случаях коэффициент теплопроводности наножидкостей значительно повышается. Так, например, для наножидкости на основе изопропилового спирта при весовой концентрации 0.05% превышение коэффициента теплопроводности по сравнению с базовой жидкостью составило 10.5%, а при концентрации 0.25–51%. Представлены результаты измерения коэффициента теплоотдачи наножидкости на основе изопропилового спирта в цилиндрическом канале. Коэффициент теплоотдачи наножидкости также имеет высокие значения: при концентрации трубок 0.25% коэффициент теплоотдачи в 1.5 раза выше, чем у базовой жидкости. Наряду с коэффициентом теплоотдачи систематически изучено падение давления в канале, для чего предварительно исследована вязкость используемых наножидкостей.

DOI: 10.31857/S0040364422030024

ВВЕДЕНИЕ

Интерес к наножидкостям инициирован в первую очередь их возможными теплофизическими применениями. Перспективность использования наножидкостей связывалась с тем, что наночастицы (особенно металлические) имеют очень высокую теплопроводность. Естественно поэтому было ожидать, что и наножидкости, включающие наночастицы, будут иметь достаточно высокую теплопроводность. Существующие на сегодняшний день экспериментальные данные в целом подтверждают эту точку зрения (см. [1–5] и цитируемую там литературу), хотя первоначально ожидаемые значения теплопроводности оказались явно завышенными. Наножидкости с оксидными частицами превышают теплопроводность базовых флюидов на 15–30% при объемной концентрации частиц до 6–8%. Теплопроводность наножидкостей с металлическими наночастицами еще выше.

Вместе с обычными наножидкостями (со сферическими частицами), о которых речь шла выше, в литературе принято называть наножидкостями и такие, в которых в качестве дисперсных частиц ис-

пользуются углеродные нанотрубки (УНТ). В зависимости от технологии получения УНТ могут быть одностенными (ОУНТ) и многостенными (МУНТ). ОУНТ имеют характерный диаметр от ~1 до 2 нм, тогда как диаметр МУНТ может составлять десятки нанометров. Длина первых обычно меняется от сотен нанометров до нескольких микрометров, а у вторых – до сотен микрометров. Таким образом, отношение диаметра УНТ к их длине может составлять сотни и тысячи, и их нельзя считать обычными наночастицами, характерный размер которых не превышает 100 нм. Все УНТ имеют уникальные механические свойства, сочетая и высокую прочность, и высокую упругость, они могут быть проводящими или иметь полупроводниковые свойства.

УНТ имеют высокую теплоемкость [6], теплопроводность МУНТ превышает 3000 Вт/(м К), теплопроводность ОУНТ вдвое выше [7, 8]. Поэтому их использование в различных теплофизических приложениях представляется естественным. Такие приложения в значительной мере инициированы экспериментами [9], где указывалось, что наножидкость с концентрацией МУНТ 1% позволяет увеличить теплопроводность на 160%.

К настоящему времени опубликованы десятки статей, посвященных экспериментальному изучению теплопроводности наножидкостей с УНТ (см., например, статьи [10–14] и цитируемую в них литературу). Однако полученные результаты оказались чрезвычайно разнородными и достаточно противоречивыми. Причин этому несколько. Во-первых, в работах использовались различные УНТ. Наножидкости с ОУНТ и МУНТ в общем случае имеют существенно разные свойства, и теплопроводность в частности. Кроме того, свойства УНТ зависят от технологии их получения. Поэтому сами УНТ, используемые для приготовления наножидкостей, могут оказаться разными. Например, доля углерода может колебаться от 70 до 99%. Во-вторых, для приготовления наножидкостей с УНТ, как правило, используются различные поверхностно активные вещества (ПАВ). В результате базовые жидкости часто оказываются различными, что существенно меняет свойства получаемых наножидкостей. Поскольку в качестве ПАВ обычно берутся высокомолекулярные соединения, то базовые жидкости чрезвычайно чувствительны к ультразвуковой обработке. В статьях же иногда вообще не указывается время такой обработки и закачиваемая в жидкость мощность. Наконец, нередко сопоставляются данные при разных температурах. Рамки этого раздела не позволяют сделать сколько-нибудь полный обзор полученных в последние два десятилетия данных, поэтому здесь ограничимся лишь формулированием наиболее надежных выводов.

Прежде всего, надо разделить наножидкости с ОУНТ и МУНТ. Обычно в качестве базовых при приготовлении наножидкостей используются вода и этиленгликоль с различными ПАВ. Весовая концентрация МУНТ варьируется от 0.05 до 3%. Диаметры нанотрубок различны – от 20 до 150 нм, длина трубок также изменяется в широких пределах: от 5 мкм до 30 мм. Зарегистрированное повышение коэффициента теплопроводности над соответствующим значением базовой жидкости составляло от 2.3 до 79% [10–20].

Работ, в которых исследуется теплопроводность наножидкостей с ОУНТ, примерно на порядок меньше, чем с МУНТ. Здесь концентрации нанотрубок изменяются в тех же пределах, а повышение коэффициента теплопроводности составляет от 10 до 36% [10–14, 21–25]. Однако, говоря о повышении коэффициента теплопроводности, всегда следует понимать, что теплопроводность первичной базовой жидкости (например, воды или этиленгликоля) может существенно отличаться от конечной базовой жидкости (с добавлениями ПАВ). Даже малая концентрация ПАВ в ряде случаев существенно уменьшает теплопроводность первичной базовой жидкости. Такое уменьшение фиксируется при использовании многих ПАВ [11].

Зависимость от температуры теплопроводности наножидкостей с УНТ в общем случае традиционная: с ростом температуры теплопроводность наножидкостей растет. Однако наличие ПАВ может существенно изменить эту зависимость. Так, при использовании ряда ПАВ с ростом температуры теплопроводность наножидкостей падает [11, 17].

Представленный краткий обзор показывает, что данные по теплопроводности наножидкостей с УНТ весьма различны. Связано это, в частности, с тем, что в большинстве работ исследовались совершенно разные наножидкости. Поэтому нельзя ожидать появления каких-либо общих выводов. Нельзя, таким образом, получить и возможность предсказывать теплопроводность тех или иных наножидкостей. Для этого необходимо исследовать конкретные классы наножидкостей, дифференцируя наножидкости с МУНТ и ОУНТ, базовыми жидкостями и ПАВ. Целью данной работы является экспериментальное изучение теплопроводности и коэффициента теплоотдачи наножидкостей на основе этиленгликоля (ЭГ), воды (В) и изопропилового спирта (ИПС) с ОУНТ. Использовались ОУНТ, произведенные компанией OCSiAl (Новосибирск). В настоящее время эти нанотрубки широко применяются для разнообразных приложений, что объясняет актуальность изучения свойств наножидкостей именно с такими нанотрубками. Помимо этого, в работе проведено прямое сопоставление коэффициента теплопроводности наножидкостей с ОУНТ с коэффициентами теплопроводности наножидкостей с металлическими и оксидными наночастицами. Представлены результаты измерения коэффициента теплоотдачи наножидкости на основе изопропилового спирта в цилиндрическом канале. Исследована вязкость и реология используемых наножидкостей для изучения изменения давления.

ПРИГОТОВЛЕНИЕ И ХАРАКТЕРИСТИКА НАНОЖИДКОСТЕЙ

В использованных в настоящей работе порошках ОУНТ по данным термогравиметрического анализа содержание трубок по массе равно $75 \pm 1\%$. Еще $\sim 11\%$ составляли углеродные наночастицы, а остальное – металлические примеси. Диаметр ОУНТ, определенный с помощью КР-спектроскопии (спектроскопия комбинационного рассеяния), составляет 1.6 ± 0.4 нм. Полная удельная поверхность по БЭТ-методу [26] – $500 \text{ м}^2/\text{г}$, а их средняя плотность – $1.8 \text{ г}/\text{см}^3$. По данным атомно-силовой микроскопии длина ОУНТ превышала 4 мкм. Между ОУНТ действуют большие силы Ван-дер-Ваальса. Наличие таких взаимодействий приводит к возможному образованию агломератов, поэтому в исходном порошке ОУНТ и содержатся преимущественно в виде агломератов.

Все изученные в данной работе наножидкости были приготовлены двухшаговым методом. На первом шаге к определенному объему базовой жидкости добавляется необходимое по весу количество нанопорошка и полученная первичная наножидкость механически перемешивается. Изучалась теплопроводность наножидкостей на основе ИПС, ЭГ и В. В последнем случае в качестве ПАВ использовался додецилсульфат натрия (СДС) с весовой концентрацией 1%. При использовании ПАВ сначала создается базовая жидкость, к исходной базовой жидкости (В или ЭГ) добавляется необходимое количество ПАВ. Получающаяся первичная наножидкость характеризуется определенной концентрацией ПАВ и ОУНТ. Чтобы минимизировать наличие в наножидкости пучков УНТ, на втором шаге первичная наножидкость подвергается ультразвуковой обработке (УЗО) с помощью установки “Volna” UZTA-0.4/22-OM (22 ± 1.65 кГц, 400 Вт). УЗО первичной наножидкости продолжалась 90 мин. Расщепление пучков УНТ происходит в несколько стадий и удачно названо “растегивающейся молнией” [27].

Качество получаемой при этом наножидкости контролировалось несколькими способами. Прежде всего, использовалась электронная микроскопия. В результате УЗО действительно удается разрушить большинство агломератов. По полученным фотографиям помимо изолированных трубок были выделены и их пучки диаметром около 5 и 20–40 нм. Кроме того, качество и стабильность наножидкостей контролировались по так называемой оптической плотности (прозрачности). С этой целью использовались спектрофотометр UV-3600 и анализатор коллоидной устойчивости Turbiscan. Контроль с помощью данных приборов при УЗО позволяет создать достаточно однородные и устойчивые наножидкости. Одновременно это дает возможность найти верхнюю границу необходимой мощности УЗО. Обычно при дальнейшем продолжении УЗО качество наножидкости практически не меняется.

Работа анализатора Turbiscan основана на методе многократного рассеяния света. Исследуемый образец (20 мл) помещался в стеклянную вialsу. В качестве источника излучения использовался лазерный диод ближней ИК-области (880 нм). Два синхронных оптических сенсора измеряют интенсивность прошедшего через образец излучения и излучения, рассеянного образцом в обратном направлении. Анализатор сканирует образец по высоте вialsы (до 55 мм), производя измерение пропускания и обратного рассеяния каждые 40 мкм. На рис. 1 в качестве примера показаны профили обратного рассеяния для наножидкости на основе ИПС при концентрации ОУНТ, равной 0.05%, без УЗО и после 90 мин УЗО. В последнем случае измеренный сигнал оказывается устойчивым и однородным, что и свидетельствует об однород-

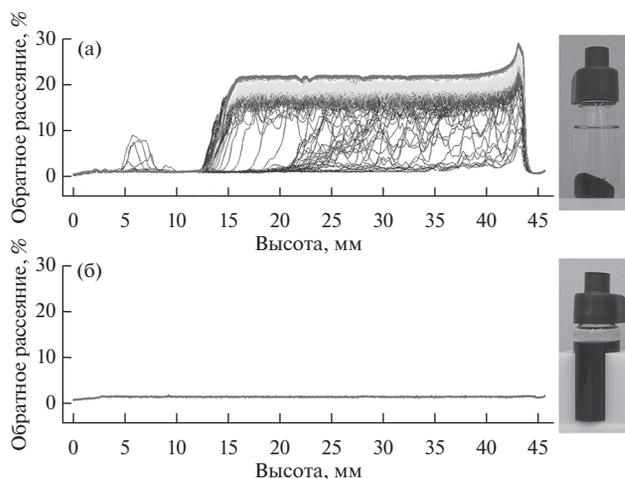


Рис. 1. Сигнал обратного рассеяния наножидкости на основе ИПС с весовой концентрацией ОУНТ 0.05% без УЗО (а) и после 90 мин УЗО (б).

ности и устойчивости полученной наножидкости. На это указывают и фотографии виал с наножидкостями справа.

В общем случае время УЗО, конечно, зависит от концентрации ОУНТ. Соответствующий контроль осуществлялся с помощью акустического и электроакустического спектрометра DT1202. Акустический метод основан на измерении степени ослабления ультразвукового сигнала и используется для определения размеров частиц, в том числе в непрозрачных и концентрированных средах. Ультразвуковые волны рассеиваются на частицах, что приводит к изменениям в спектре ультразвукового сигнала. На основе спектра ослабленного сигнала и по скорости звука рассчитывается средний размер частиц и распределение частиц по размерам. Пример изменения среднего размера ОУНТ в результате УЗО представлен на рис. 2. Здесь сопоставлены распределения ОУНТ в наножидкостях на основе ИПС с весовой концентрацией ОУНТ 0.1% после 10 (кривая 1) и 90 мин (кривая 2) УЗО. Средний размер после 10 мин УЗО равен 0.52 мкм, а после 90 мин – 0.43 мкм.

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ НАНОЖИДКОСТЕЙ С ОУНТ

В данной работе изучалась теплопроводность наножидкостей на основе ИПС, ЭГ и В + СДС. Весовая концентрация ОУНТ варьировалась от 0.05 до 0.5%. Все представленные ниже измерения выполнены при температуре 25°C. Коэффициент теплопроводности измерялся на установке, разработанной авторами на основе метода нагреваемой нити. Установка систематически описана и тестируется в работе [28]. Позднее с ее помощью измерена теплопроводность нескольких десятков наножидкостей на основе воды, этиленгликоля и

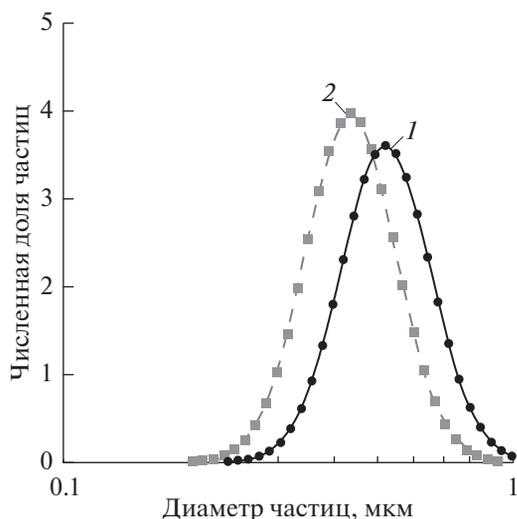


Рис. 2. Распределения по размерам ОУНТ при их концентрации 0.1% в наножидкости на основе ИПС при различном времени УЗО: 1 – 10 мин, 2 – 90 мин.

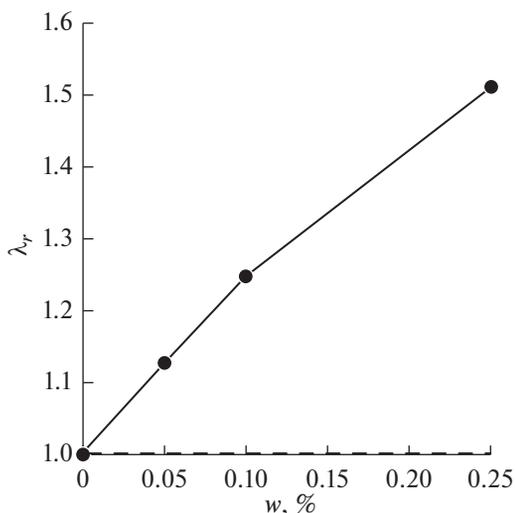


Рис. 3. Зависимости относительного коэффициента теплопроводности наножидкости на основе ИПС от весовой концентрации ОУНТ.

машинного масла с различными частицами [5]. Проведенные тесты показали, что точность измерения – не ниже 3%.

На первом этапе изучено влияние времени обработки ультразвуком на свойства наножидкостей. Ниже в качестве примера приводятся данные для наножидкости на основе ИПС. Представлены данные для двух весовых концентраций нанотрубок (0.05 и 0.1%). Время УЗО варьировалось от 10 до 200 мин. Результаты влияния времени УЗО на коэффициент теплопроводности наножидкостей с ОУНТ приведены в табл. 1. С увеличением времени УЗО коэффициент теплопроводности наножидкости несколько снижается, но если обработка длилась более 90 мин, то коэффициент теплопроводности практически не меняется (в пределах точности измерения). Стоит отметить, что с увеличением концентрации УНТ время УЗО должно увеличиваться.

Зависимости относительного коэффициента теплопроводности $\lambda_r = \lambda/\lambda_0$ (λ и λ_0 – соответственно коэффициенты теплопроводности наножидкости и ИПС) от весовой концентрации ОУНТ w для наножидкости на основе ИПС при-

ведены на рис. 3. Теплопроводность наножидкостей значительно выше теплопроводности базового флюида. При минимальной концентрации ОУНТ (0.05%) она превышает теплопроводность ИПС на 10.5%, а при максимальной (0.25%) – на 51%. Стоит отметить, что объемные концентрации частиц при этом примерно вдвое ниже. Коэффициент теплопроводности наножидкости почти в 70 раз больше значения, предсказываемого классической теорией Максвелла [29] для крупнодисперсных жидкостей (пунктирная линия на рис. 3).

При изучении наножидкостей с обычными сферическими частицами установлено, что важным фактором, определяющим их теплопроводность, является базовая жидкость. Показано, что повышение теплопроводности в наножидкости будет тем выше, чем ниже теплопроводность базовой жидкости (см. [5, 30]). Подобная ситуация реализуется и в наножидкостях с ОУНТ. Зависимость относительного коэффициента теплопроводности наножидкостей на основе трех разных базовых флюидов от концентрации ОУНТ приведена на рис. 4. Максимальный коэффициент теплопроводности из всех рассмотренных жидкостей имеет вода, далее ЭГ, а затем ИПС. Рис. 4 показывает, что, как и для наножидкостей со сферическими частицами, теплопроводность наножидкостей с ОУНТ тем выше, чем ниже теплопроводность базовой жидкости. При концентрации нанотрубок 0.25% в наножидкости на основе В + СДС коэффициент теплопроводности увеличивается на 13%, на основе ЭГ – на 24%, а на основе ИПС – на 51%. Точные значения коэффициента теплопроводности для этих трех наножидкостей приведены в табл. 2. Таким образом, использование наножидкости в качестве хлад-

Таблица 1. Влияние длительности обработки ультразвуком на относительный коэффициент теплопроводности наножидкостей на основе ИПС с ОУНТ

t , мин	λ/λ_0	t , мин	λ/λ_0
60	1.136	10	1.278
90	1.125	90	1.246
200	1.123	200	1.243
0.05% ОУНТ		0.10% ОУНТ	

агента будет тем эффективнее, чем ниже теплопроводность базовой жидкости.

На практике в качестве хладагента нередко используется вода. По этой причине на рис. 4 приведены данные для наножидкости на основе В + СДС при концентрации ОУНТ, равной 0.5%. Теплопроводность повышается в этом случае на 13.5%. Необходимо, однако, иметь в виду следующее. Раствор В + СДС при температуре 25°C имеет теплопроводность почти на 20% ниже, чем у воды [17]. Наконец, повышение коэффициента теплопроводности можно существенно увеличить, если использовать смесь воды и этиленгликоля.

Теплопроводность наножидкостей с обычными сферическими частицами к настоящему времени достаточно хорошо изучена. Прежде всего, установлено, что она не описывается классической теорией Максвелла [29] и ее обобщениями. Коэффициент теплопроводности, как правило, существенно превышает значение, предсказываемое этой теорией. В наножидкостях с частицами оксидов металлов теплопроводность повышается на 15–30% при объемной концентрации частиц 6–8% (см. [5] и цитируемую там литературу). В наножидкостях с металлическими частицами можно ожидать еще больших значений теплопроводности, но производство соответствующих наножидкостей требует существенно больших усилий. Более концентрированные (при концентрации наночастиц свыше 6–8%) стабильные наножидкости делать фактически не удается, во всяком случае их практическое применение весьма проблематично. Второе важное обстоятельство состоит в том, что теплопроводность наножидкостей зависит также от размера частиц, причем она увеличивается с ростом размера частиц, но в любом случае повышение теплопроводности оказывается порядка 15–30%. Более того, если размер наночастиц достаточно мал, то теплопроводность наножидкостей может не превышать значений, предсказываемых теорией Максвелла, или быть даже ниже [5, 31].

В данной работе исследовалась теплопроводность наножидкостей с ОУНТ при существенно меньших их концентрациях. Интересно и важно с практической точки зрения сопоставить значения получаемых повышенных коэффициентов теплопроводности для наножидкостей со сферическими наночастицами и с ОУНТ. Такое сопоставление выполнено на рис. 5. Здесь сравниваются данные для наножидкостей на основе воды с частицами оксидов металлов [5] и алюминия. Теплопроводность наножидкости с частицами алюминия измерена специально для данной работы. Наножидкость с ОУНТ приготовлена на основе воды и СДС. Во всех остальных случаях ПАВ не использовались. Максимальная концен-

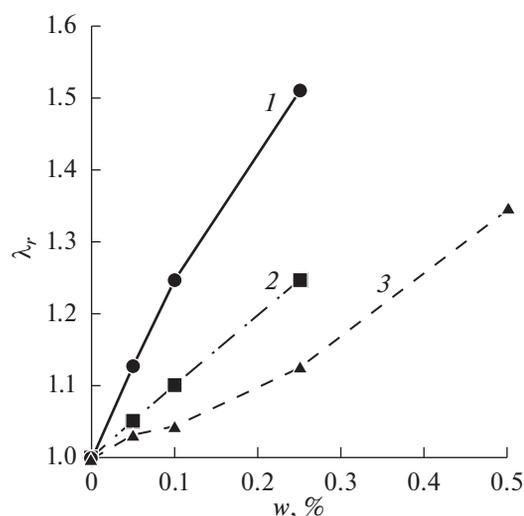


Рис. 4. Зависимости относительного коэффициента теплопроводности от весовой концентрации наножидкости с ОУНТ на основе ИПС (1), ЭГ (2), В + СДС (3).

трация ОУНТ составляла 0.25%. Данные рис. 5 хорошо иллюстрируют преимущества использования в наножидкостях ОУНТ по сравнению с обычными наночастицами. Для увеличения коэффициента теплопроводности наножидкости на 20–25% необходима весовая концентрация металлических наночастиц ~10%, оксидных наночастиц — 20–25%. С другой стороны, 35%-ное повышение коэффициента теплопроводности наножидкости с ОУНТ требует их концентрации примерно на два порядка меньше перечисленных значений.

ИЗМЕРЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛОТДАЧИ

Высокая относительная теплопроводность наножидкостей с ОУНТ, продемонстрированная в предыдущем разделе, свидетельствует о том, что использование таких наножидкостей в различных теплообменных устройствах весьма перспективно. Это почти очевидно при ламинарном режиме течения, поскольку в этом случае теплооб-

Таблица 2. Коэффициент теплопроводности наножидкости при различной весовой концентрации ОУНТ, Вт/(м К)

$w, \%$	В + СДС	ЭГ	ИПС
0	0.608	0.252	0.141
0.05	0.628	0.284	0.148
0.10	0.635	0.314	0.155
0.25	0.685	0.381	0.176
0.50	0.820	—	—

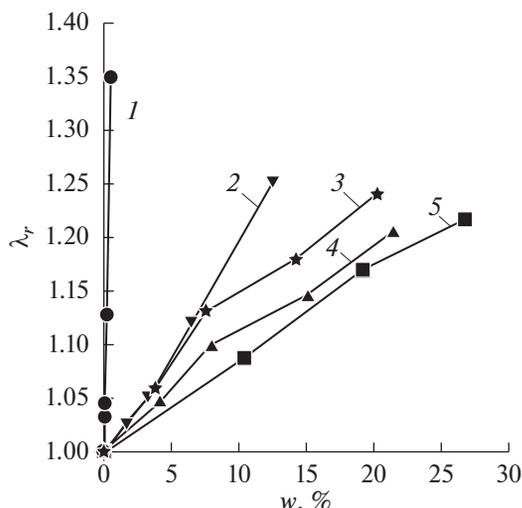


Рис. 5. Зависимости относительного коэффициента теплопроводности наножидкостей на основе воды с различными наночастицами и ОУНТ: 1 – ОУНТ, 2 – Al (90 нм), 3 – Al₂O₃ (150 нм), 4 – TiO₂ (150 нм), 5 – ZrO₂ (105 нм).

мен наножидкости определяется в основном теплопроводностью рабочей жидкости [32, 33]. Конечно, использование наножидкостей с ОУНТ имеет свои важные особенности, для изучения которых необходимо проведение соответствующих экспериментов. В этом разделе приведены данные измерения коэффициента теплоотдачи в цилиндрическом канале наножидкости на основе ИПС с ОУНТ. Эксперименты выполнялись на установке, которая ранее использовалась в работах [32–34] при измерении коэффициента теплоотдачи в течениях наножидкостей с обычными частицами. Установка представляет собой замкнутый контур с циркулирующим теплоносителем. С помощью насоса рабочая жидкость прокачивается через измерительный обогреваемый участок. После прохождения измерительного участка рабочая жидкость поступает в теплообменник, в котором отдает тепло термостату. Контроль расхода жидкости в контуре осуществляется при помощи скоростного расходомера.

Обогреваемый участок представляет собой трубку из нержавеющей стали диаметром 10 мм и длиной 1 м. Толщина стенки трубки – 1 мм. Нагрев трубки осуществляется путем подачи электрического тока непосредственно на ее стенку. Такой способ позволяет получить нагрев с постоянной плотностью теплового потока на стенке. Трубка теплоизолирована. Мощность нагрева регулируется при помощи изменения напряжения подаваемого на трансформатор тока. В ходе эксперимента измерялась сила тока, пускаемая на стенку трубки. Для измерения локальной температуры трубки на стенках на равном расстоянии

друг от друга закреплялись шесть медь-константановых термопар. Измерения температуры осуществлялись измерителями ТРМ-200. Помимо этого, при помощи термопар измерялась температура теплоносителя на входе и выходе из обогреваемого участка. Участок контура от обогревателя до места измерения температуры теплоносителя был также теплоизолирован. Измерения перепада давления проводились при помощи дифференциального манометра ОВЕН ПД200. Установка позволяет проводить измерения локального и среднего коэффициентов теплоотдачи и перепада давления до значений числа Рейнольдса для воды $\sim 2 \times 10^4$. Точность измерения температуры составляла $\sim 0.1^\circ\text{C}$, перепад давления измерялся с точностью 1%. Погрешность измерения расхода не превышает 1%.

В процессе экспериментов определялся локальный коэффициент теплоотдачи

$$\alpha = GC_p(T_i - T_o)S^{-1}(T_w - \bar{T})^{-1}.$$

Здесь $C_p = \rho^{-1}[(1 - \phi)\rho_f C_{pf} + \phi\rho_p C_{pp}]$ – теплоемкость наножидкости; ρ_f и ρ_p – плотности базовой жидкости и материала наночастицы; C_{pf} и C_{pp} – теплоемкости несущей жидкости и материала частиц соответственно; ϕ – объемная концентрация УНТ; $\bar{T} = (T_i + T_o)/2$ – средняя температура жидкости; T_i, T_o – соответственно температура на входе и выходе из обогреваемого участка; T_w – локальная температура стенки канала; G – массовый расход; S – площадь поверхности обогреваемого участка. Наряду с локальным коэффициентом теплообмена определялся и средний

$$\bar{\alpha} = GC_p(T_i - T_o)S^{-1}(\bar{T}_w - \bar{T})^{-1},$$

где \bar{T}_w – средняя арифметическая температура стенки канала, полученная осреднением по данным шести термопар.

Сопоставление зависимости среднего коэффициента теплопередачи от массового расхода наножидкости на основе ИПС при концентрации ОУНТ, равной 0.1 и 0.25%, представлено на рис. 6. Использование наножидкостей значительно повышает среднее значение коэффициента теплоотдачи, при концентрации ОУНТ 0.25% коэффициент теплоотдачи увеличился почти в 1.5 раза. Такое увеличение коэффициента теплоотдачи с помощью наножидкостей с частицами оксидов металлов практически недостижимо. Это чрезвычайно сложно реализовать и для наножидкостей с металлическими наночастицами, здесь потребовались бы очень высокие концентрации частиц (десятки процентов по весу).

Таким образом, если стоит задача максимально повысить значение коэффициента теплоотда-

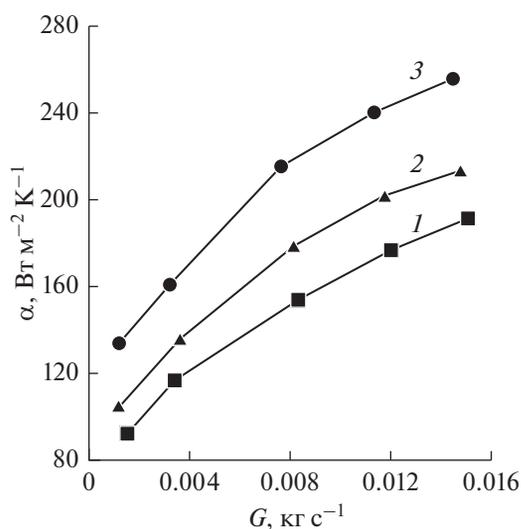


Рис. 6. Сопоставление зависимости среднего коэффициента теплопередачи от массового расхода для ИПС (1) и наножидкостей на основе ИПС с ОУНТ: 2 – 0.1%, 3 – 0.25%.

чи при конвективном теплообмене, то ОУНТ не имеют конкурентов среди других наночастиц. Вместе с тем известно, что вязкость обычных наножидкостей существенно превышает вязкость базовых жидкостей (см. [35] и цитируемую там литературу). Более того, с добавлением наночастиц реологические свойства флюида могут меняться [36]. Аналогичная ситуация реализуется и в наножидкостях с ОУНТ. Их реологические свойства практически всегда становятся неньютоновскими, если только концентрации ОУНТ не слишком малы [37]. Реологические свойства и вязкость наножидкости на основе ИПС с ОУНТ также изучены в [37]. Установлено, что данная наножидкость действительно является неньютоновской при всех рассмотренных концентрациях ОУНТ. Во всех случаях эти наножидкости являются вязкопластическими, и их реология хорошо описывается моделью Хершеля–Балкли. Это, в частности, означает, что течение жидкости начинается лишь по достижении некоторого критического значения скорости сдвига, причем это значение растет с увеличением концентрации ОУНТ. Стоит отметить также, что обычно индекс жидкости уменьшается, а параметр консистентности, напротив, растет с увеличением концентрации ОУНТ. Реологические свойства наножидкости могут меняться и с ростом температуры.

Таким образом, при изучении теплоотдачи важной характеристикой является и падение давления вдоль канала. Данные измерения падения давления вдоль канала в зависимости от массового расхода представлены на рис. 7, который показывает, что потери давления при прокачивании наножидкости с ОУНТ существенно превышают

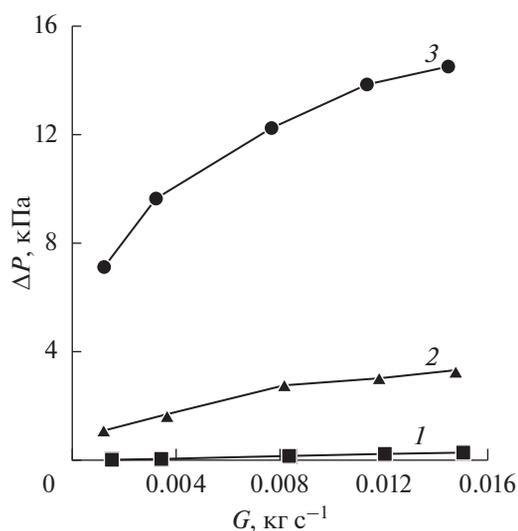


Рис. 7. Зависимости перепада давления от расхода для наножидкости на основе ИПС: 1 – ИПС, 2 – ИПС + 0.1% ОУНТ, 3 – ИПС + 0.25% ОУНТ.

соответствующие значения для ИПС. Подводя итог, следует отметить, что наножидкости превосходят базовые по коэффициенту теплоотдачи, но для их прокачки требуются значительно большие затраты энергии. Поэтому с практической точки зрения для повышения теплогидравлической эффективности наножидкостей с ОУНТ можно рекомендовать использовать их при более высокой входной температуре теплоносителя. При этом вязкость наножидкости будет существенно снижаться, а коэффициент теплопроводности возрастать.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной статье изучена теплопроводность трех наножидкостей на основе ИПС, ЭГ и В + СДС с ОУНТ. При весовой концентрации 0.25% в наножидкости на основе В + СДС коэффициент теплопроводности увеличивается на 13%, на основе ЭГ – на 24%, на основе ИПС – на 51%. Это делает ОУНТ чрезвычайно перспективным материалом для повышения теплопроводности теплоносителей. Близкие результаты для наножидкости на основе воды получены в работе [23]. Здесь при той же концентрации увеличение теплопроводности составляет ~11%. В работе [22] указывается, что при весовой концентрации ОУНТ 1.14% теплопроводность повышается на 19.4%, но более высокая концентрация трубок.

ПАВ – обычно диэлектрические жидкости, и их использование приводит к снижению теплопроводности базовой жидкости по сравнению с первичной. Естественным следствием является и общее снижение теплопроводности наножидкости. По этой причине в ряде случаев для создания наножидкостей применяется функционализация

УНТ [23, 38–40]. Известны разные ее способы. В полярных средах успешно используется жидко-фазное или газофазное окисление УНТ различными реагентами. В неполярных органических растворителях требуются более сложные методы функционализации с использованием, например, полистирола и полиизопрена, карбоксильных групп и т.д. Функционализация, однако, обычно существенно меняет свойства УНТ, поэтому в данной работе она не применялась.

Наножидкости с УНТ на основе ЭГ также достаточно часто исследовались. С ОУНТ таких исследований, однако, немного. Авторам неизвестны работы, где используется ЭГ без ПАВ. В [41] в качестве ПАВ использовалась соль желчи и при объемной концентрации 0.225% повышение коэффициента теплопроводности составило 15%. Можно упомянуть и работу [26], где использовались ОУНТ, функционализированные гидроксильными группами (–COOH). Здесь при объемной концентрации ОУНТ ~2.16% повышение теплопроводности составило 36%, что несколько выше значения, полученного в данной работе, однако существенно выше и концентрации.

Стоит также отметить, что во всех случаях теплопроводность наножидкостей с ОУНТ не описывается классическими теориями, включая теорию Максвелла для крупнодисперсных жидкостей, последняя дает увеличение теплопроводности почти на два порядка меньше (см. рис. 4), чем наножидкость на основе ИПС. Как и для обычных наножидкостей, базовая жидкость также существенно влияет на теплопроводность наножидкости с ОУНТ. Относительный коэффициент теплопроводности наножидкостей тем выше, чем ниже коэффициент теплопроводности базовой жидкости.

Измерение коэффициента теплоотдачи также показало очень высокие его значения для наножидкости. При концентрации ОУНТ 0.25% коэффициент теплоотдачи наножидкости на основе ИПС увеличился в 1.5 раза по сравнению с ИПС. Таким образом, если стоит задача максимально повысить значение коэффициента теплоотдачи при конвективном теплообмене, то использование ОУНТ не имеет конкурентов. Вместе с тем наножидкости даже при не очень высоких концентрациях ОУНТ оказываются неньютоновскими. В примере, приведенном в данной статье, наножидкости являлись вязкопластическими. С ростом концентрации ОУНТ индекс жидкости снижается, а параметр консистенции увеличивается. В результате падение давления при течении наножидкости с ОУНТ оказывается значительно больше, чем у базовой жидкости. Однако если наножидкость повышает коэффициент теплоотдачи по сравнению с чистой жидкостью при фиксированном значении перепада давления, то

она является эффективной. С наножидкостями обычно так дело и обстоит.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (соглашение № 20-19-00043).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wang X.-Q., Mujumdar A.S. Heat Transfer Characteristics of Nanofluids: A Review // *Int. J. Thermal Sci.* 2007. V. 46. P. 1.
2. Daungthongsuk W., Wongwises S. A Critical Review of Convective Heat Transfer of Nanofluids // *Renewable Sustainable Energy Rev.* 2007. V. 11. P. 797.
3. Yu W., France D.M., Routbort J.L., Choi S.U.S. Review and Comparison of Nanofluid Thermal Conductivity and Heat Transfer Enhancements // *Heat Transfer Eng.* 2008. V. 29. P. 432.
4. Kleinstreuer K., Yu F. Experimental and Theoretical Studies of Nanofluid Thermal Conductivity Enhancement: A Review // *Nanoscale Res. Lett.* 2011. V. 6. № 229. P. 22.
5. Pryazhnikov M.I., Minakov A.V., Rudyak V.Ya., Guzei D.V. Thermal Conductivity Measurements of Nanofluids // *Int. J. Heat Mass Transfer.* 2017. V. 104. № 1. P. 1275.
6. Рехвиашвили С.Ш., Сокуров А.А., Бухурова М.М. Теплоемкость упорядоченного массива одностенных углеродных нанотрубок // *ТВТ.* 2019. Т. 57. № 4. С. 524.
7. Kim P., Shi L., Majumdar A., McEuen P.L. Thermal Transport Measurements of Individual Multiwalled Nanotubes // *Phys. Rev. Lett.* 2001. V. 87. P. 215502.
8. Yu C., Shi L., Yao Z., Li D., Majumdar A. Thermal Conductance and Thermopower of an Individual Single-Wall Carbon Nanotube // *Nano Lett.* 2005. V. 5. P. 1842.
9. Choi S., Zhang Z., Yu W., Lockwood F., Grulke E. Anomalous Thermal Conductivity Enhancement in Nanotube Suspensions // *Appl. Phys. Lett.* 2001. V. 79. № 14. P. 2252.
10. Younes H., Christensen G., Li D., Hong H., Ghaferi A.A. Thermal Conductivity of Nanofluids: Review // *J. Nanofluids.* 2015. V. 4. № 2. P. 107.
11. Estellé P., Halelfadl S., Maré M. Thermal Conductivity of CNT Water Based Nanofluids: Experimental Trends and Models Overview // *J. Therm. Eng.* 2015. V. 1. № 2. P. 381.
12. Soltanimehr M., Afrand M. Thermal Conductivity Enhancement of COOH Functionalized MWCNTs/Ethylene Glycol–Water Nanofluid for Application in Heating and Cooling Systems // *Appl. Therm. Eng.* 2016. V. 105. P. 716.
13. Tawfik M.M. Experimental Studies of Nanofluid Thermal Conductivity Enhancement and Applications: A Review // *J. Renewable Sustainable Energy Rev.* 2017. V. 75. P. 1239.
14. Akhilesh M., Santarao K., Babu M.V.S. Thermal Conductivity of CNT-Watered Nanofluids: A Review // *Mech. Mech. Eng.* 2018. V. 22. № 1. P. 207.
15. Assael M.J., Metaxa I.N., Arvanitidis J., Christofilos D., Lioutas C. Thermal Conductivity Enhancement in Aqueous Suspensions of Carbon Multi-Walled and Double-Walled Nanotubes in the Presence of Two Dif-

- ferent Dispersants // *Int. J. Thermophys.* 2005. V. 26. P. 647.
16. *Ding Y., Alias H., Wen D., Williams R.A.* Heat Transfer of Aqueous Suspensions of Carbon Nanotubes (CNT Nanofluids) // *Int. J. Heat Mass Transfer.* 2006. V. 49. № 1–2. P. 240.
 17. *Sadri R., Ahmadi G., Togun H., Dahari M., Kazi S.N., Sadeghinezhad E., Zubir N.* An Experimental Study on Thermal Conductivity and Viscosity of Nanofluids Containing Carbon Nanotubes // *Nanoscale Res. Lett.* 2014. V. 9. P. 151.
 18. *Singh N., Chand G., Kanagaraj S.* Investigation of Thermal Conductivity and Viscosity of Carbon Nanotubes–Ethylene Glycol Nanofluids // *Heat Transfer Eng.* 2012. V. 33. № 9. P. 821.
 19. *Liu M.S., Lin M.C.C., Wang C.C.* Enhancements of Thermal Conductivities with Cu, CuO, and Carbon Nanotube Nanofluids and Application of MWNT/Water Nanofluid on a Water Chiller System // *Nanoscale Res. Lett.* 2011. V. 6. № 297. P. 1.
 20. *Mirbagheri M.H., Akbari M., Mehmandoust B.* Proposing a New Experimental Correlation for Thermal Conductivity of Nanofluids Containing Functionalized Multiwalled Carbon Nanotubes Suspended in a Binary Base Fluid // *Int. Comm. Heat Mass Transfer.* 2018. V. 98. P. 216.
 21. *Chen L., Xie H.* Surfactant-Free Nanofluids Containing Double- and Single-Walled Carbon Nanotubes Functionalized by Wet-Mechanochemical Reaction // *Thermochim. Acta.* 2010. № 1–2. P. 67.
 22. *Choi T.Y., Maneshian M.H., Kang B., Chang W.S., Han C.S., Poulikakos D.* Measurement of the Thermal Conductivity of a Water-Based Single-Walled Carbon Nanotube Colloidal Suspension with a Modified 3- ω Method // *Nanotechnology.* 2009. V. 20. P. 315706.
 23. *Harish C., Ishikawa K., Einarsson E., Aikawa S., Chiashi S., Shiomi J., Maruyama S.* Enhanced Thermal Conductivity of Ethylene Glycol with Single-Walled Carbon Nanotube Inclusions // *Int. J. Heat Mass Transfer.* 2012. V. 55. № 13–14. P. 3885.
 24. *Harish C., Ishikawa K., Einarsson E., Aikawa S., Inoue T., Zhao P., Watanabe M., Chiashi S., Shiomi J., Maruyama S.* Temperature-Dependent Thermal Conductivity Increase of Aqueous Nanofluid with Single-Walled Carbon Nanotube Inclusion // *Mater. Express.* 2012. V. 2. № 3. P. 213.
 25. *Nanda J., Maranville C., Bollin S.C., Sawall D., Ohtani H., Remillard J.T., Ginder J.M.* Thermal Conductivity of Single-Wall Carbon Nanotube Dispersions: Role of Interfacial Effects // *J. Phys. Chem. C.* 2008. V. 112. № 3. P. 654.
 26. *Brunauer S., Emmett P.H., Teller E.* Adsorption of Gases in Multimolecular Layers // *J. Am. Chem. Soc.* 1938. V. 60. № 2. P. 309.
 27. *Strano J.M., Moore V.C., Miller M.K., Allen M.J., Haroz E.H., Kittrell C., Hauge R.H., Smalley R.E.* The Role of Surfactant Adsorption During Ultrasonication in the Dispersion of Single-Walled Carbon Nanotubes // *J. Nanosci. Nanotechnol.* 2003. V. 3. P. 81.
 28. *Минаков А.В., Рудяк В.Я., Гузей Д.В., Прыажников М.И., Лобасов А.С.* Измерение коэффициента теплопроводности наножидкостей методом нагреваемой нити // *ИФЖ.* 2015. Т. 88. № 1. С. 148.
 29. *Maxwell J.C.* A Treatise on Electricity and Magnetism. Oxford: Clarendon Press, 1881. 513 p.
 30. *Xie H., Lee H., Youn W., Choi M.* Nanofluids Containing Multiwalled Carbon Nanotubes and their Enhanced Thermal Conductivities // *J. Appl. Phys.* 2003. V. 94. № 8. P. 4967.
 31. *Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л.* Моделирование коэффициента вязкости наножидкости методом молекулярной динамики // *ЖТФ.* 2015. Т. 85. № 6. С. 9.
 32. *Минаков А.В., Рудяк В.Я., Гузей Д.В., Лобасов А.С.* Измерение коэффициента теплоотдачи наножидкости на основе воды и частиц оксида меди // *ТВТ.* 2015. Т. 53. № 2. С. 256.
 33. *Guzei D.V., Minakov A.V., Rudyak V.Ya.* On the Efficiency of Convective Heat Transfer of Nanofluids in Laminar Flow Regime // *Int. J. Heat Mass Transfer.* 2019. V. 139. P. 180.
 34. *Гузей Д.В., Минаков А.В., Рудяк В.Я.* Исследование теплоотдачи наножидкостей в турбулентном режиме течения в цилиндрическом канале // *Изв. РАН. МЖГ.* 2016. № 2. С. 65.
 35. *Minakov A.V., Rudyak V.Ya., Pryazhnikov M.I.* Systematic Experimental Study of the Viscosity of Nanofluids // *Heat Transfer Eng.* 2021. V. 42. № 12. P. 1024.
 36. *Minakov A.V., Rudyak V.Ya., Pryazhnikov M.I.* Rheological Behavior of Water, and Ethylene Glycol-Based Nanofluids Containing Oxide Nanoparticles // *Colloids Surf., A.* 2018. V. 554. P. 279.
 37. *Rudyak V.Ya., Minakov A.V., Pryazhnikov M.I.* Preparation, Characterization, and Viscosity Studying the Single-Walled Carbon Nanotube Nanofluid // *J. Mol. Liq.* 2021. V. 329. № 1. P. 115517.
 38. *Schierz A., Zänker H.* Aqueous Suspensions of Carbon Nanotubes: Surface Oxidation, Colloidal Stability, and Uranium Sorption // *Environ. Pollut.* 2009. V. 157. P. 1088.
 39. *Chiang Y.C., Lin W.H., Chang Y.C.* The Influence of Treatment Duration on Multi-Walled Carbon Nanotubes Functionalized by H₂SO₄/HNO₃ Oxidation // *Appl. Surf. Sci.* 2011. V. 257. P. 2401.
 40. *Manzetti S., Gabriel J.-C.P.* Methods for Dispersing Carbon Nanotubes for Nanotechnology Applications: Liquid Nanocrystals, Suspensions, Polyelectrolytes, Colloids, and Organization Control // *Int. Nano Lett.* 2019. V. 9. P. 31.
 41. *Ali A.J., Tugolukov E.N.* An Experimental Study on the Influence of Functionalized Carbon Nanotubes CNT Taunit Series on the Thermal Conductivity Enhancement // *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* 2019. V. 693. P. 012001.

УДК 532.529

ХАРАКТЕРИСТИКИ ТЕЧЕНИЯ В СЛЕДЕ ЗА КРУПНОЙ ДВИЖУЩЕЙСЯ ЧАСТИЦЕЙ

© 2022 г. А. Ю. Вараксин^{1, 2, *}, А. А. Мочалов^{1, 2}, А. А. Желебовский^{1, 2}¹Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия²Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

*E-mail: varaksin_a@mail.ru

Поступила в редакцию 03.12.2021 г.

После доработки 28.03.2022 г.

Принята к публикации 07.06.2022 г.

Предпринята попытка измерения характеристик течения, формирующегося за крупной частицей, движущейся в нисходящем турбулентном потоке воздуха в канале. Измерения проводились с использованием PIV-метода, позволяющего фиксировать мгновенные поля скоростей. Приводятся и анализируются данные по деформации поля мгновенной скорости воздуха в турбулентном следе за крупной частицей.

DOI: 10.31857/S0040364422050143

ВВЕДЕНИЕ

Особенности движения дисперсной примеси в виде частиц (капель) в турбулентных потоках газа (жидкости) и ее обратное влияние на характеристики турбулентности несущей фазы являются ключевыми проблемами теории двухфазных течений [1].

Хорошо известно, что присутствие в двухфазном потоке крупных частиц ведет к дополнительной генерации энергии турбулентности.

Все исследования, касающиеся образования турбулентных вихрей за плохообтекаемыми телами (частицами), можно условно разбить на несколько групп:

1) классические исследования следов за обтекаемыми телами (прежде всего, сферической формы) [2, 3];

2) изучение влияния турбулентности набегающего потока на развитие турбулентного следа, образующегося за одиночной сферой (частицей) [4–6];

3) исследования турбулентности, индуцируемой частицами, в неподвижном газе (жидкости) [7, 8];

4) изучение влияния частиц на ламинарно-турбулентный переход для течения суспензий с крупными частицами в трубе [9–11];

5) исследования влияния крупных частиц на характеристики турбулентности двухфазного потока [12–23].

В опубликованных недавно обзорах [2, 3] приводятся и анализируются работы нескольких последних десятилетий, посвященные экспериментальным и численным исследованиям развития сложных нестационарных вихревых структур за

одиночной неподвижной сферой с ростом числа Рейнольдса. Отмечается, что в последние годы благодаря использованию обладающих высоким пространственно-временным разрешением метода PIV для физического и метода DNS для численного моделирования удалось получить много новой информации, касающейся как осредненных параметров, так и тонких структурных характеристик отрывного течения за неподвижной сферой.

В [4] выполнено прямое численное моделирование влияния изотропного турбулентного потока на течение в следе за одиночной сферической частицей. Число Рейнольдса частиц изменялось в диапазоне от 50 до 600, а их диаметр превышал колмогоровский пространственный масштаб турбулентности в 1.5–10 раз. Изучено влияние турбулентности набегающего потока на осредненную и мгновенную структуру следа. Показано, что осредненная (по времени) структура следа в случае турбулентности окружающего потока характеризуется меньшим дефицитом скорости и более пологим профилем скорости. Энергия набегающего потока, потерянная в следе, восстанавливается быстрее в турбулентном градиентном потоке, чем в случае однородного потока. Энергия пульсаций скорости увеличивается в следе при низкой интенсивности турбулентности набегающего потока и затухает при более высокой интенсивности. Полученные результаты находятся в согласии с результатами экспериментальных исследований [5, 6].

В [7] выполнено численное моделирование (основанное на осредненных уравнениях Рейнольдса) процесса генерации турбулентности каплями, образующимися при струйном распыле жидкости в

неподвижном воздухе. Выявлено, что кинетическая энергия генерируемой турбулентности определяется величиной относительной скорости капель и воздуха и становится максимальной в равновесной области, где капли достигают предельной скорости осаждения. Краткий обзор подобного рода работ содержится в [8].

Экспериментальное исследование влияния присутствия крупных частиц диаметром 5.7–13.3 мм на ламинарно-турбулентный переход при течении жидкости в трубе (диаметр – 33.5 мм) выполнено в [9]. Установлено, что присутствие крупных частиц нейтральной плавучести в суспензии приводит к ламинарно-турбулентному переходу (отличающемуся от классического) даже при невысоком объеме содержания (5%) частиц.

В пионерской экспериментальной работе [12] показано, что наличие в турбулентном потоке крупных пластиковых частиц (диаметр – 3000 мкм) приводит к существенному росту интенсивности пульсаций газа по поперечному сечению трубы вследствие образования турбулентных следов.

Имеется значительное количество работ, авторы которых пытались предложить безразмерные критерии, отвечающих за “направление” (ламинаризация или турбулизация) влияния частиц. В [13] предложено использовать в качестве основного безразмерного параметра отношение диаметра частиц к характерному масштабу длины турбулентного потока d_p/l . Показано, что существует критическое значение этого параметра $d_p/l \approx 0.1$, ниже которого частицы подавляют турбулентность, а выше которого генерируют ее. В [14] предложен другой безразмерный параметр – число Рейнольдса частицы Re_p . Предполагается, что крупные частицы ($Re_p > 400$) вызывают вихри за собой, дестабилизирующие течение и трансформирующие энергию осредненного движения в энергию турбулентности. Мелкие же частицы подавляют энергию турбулентности, расходуя ее на собственное ускорение (вовлечение в пульсационное движение).

В [15] предложена аналитическая модель для определения члена, отвечающего за дополнительную генерацию турбулентности, в уравнении баланса пульсационной энергии на основе решения для автомодельного турбулентного следа. Такая интерпретация автомодельного решения для дальнего следа позволяет надеяться на работоспособность модели не только при малых, но и при умеренных объемных концентрациях частиц в отличие от работ, в которых дополнительные члены, обусловленные генерацией турбулентных пульсаций скорости, вводятся на основе эмпирических соображений [16–18] или прямого использования автомодельного решения для следа [19].

Дальнейшее развитие работа [15] получила в [20, 21], где на основе двухпараметрической k – ϵ -модели турбулентности для двухфазного потока получено выражение, предсказывающее влияние частиц различной инерционности на величину энергии турбулентности несущей фазы.

Среди последних работ, посвященных прямому численному моделированию ламинаризирующего и турбулизирующего влияния частиц на несущую фазу, можно выделить работы [22, 23].

Цель настоящей работы – проведение измерений мгновенных характеристик течения, формирующегося за движущейся в турбулентном потоке крупной частицей с хорошим пространственным разрешением.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА И МЕТОДИКА ИЗМЕРЕНИЙ

Для изучения нисходящих турбулентных двухфазных потоков использовалась экспериментальная установка, схема которой показана на рис. 1. Визуализация несущего воздуха реализована при помощи генератора частиц-трассеров 1 (модель Safex F2010) путем ввода в поток микрокапель глицерина (диаметр от 1 до 5 мкм). Инерция данных частиц-трассеров настолько мала, что они практически полностью отслеживают все турбулентные пульсации скорости воздуха. Требуемая концентрация частиц-трассеров достигается путем регулирования расхода глицерина.

На входе в вертикальный канал с целью стабилизации воздушного потока установлен лемнискатный насадок 2. Внутри лемнискатного насадка вдоль оси канала располагался узел подачи крупных частиц 3. В роли крупных частиц дисперсной фазы использовались пластиковые частицы диаметром $d_p = 6$ мм (плотность частиц $\rho_p = 1050$ кг/м³). С целью снижения эффекта отражения света и засветки приемной оптики производилось чернение поверхности крупных частиц.

После прохождения лемнискатного насадка двухфазный поток попадает в круглую трубу 4 длиной 850 мм (внутренний диаметр – 100 мм), которая переходит в канал квадратного сечения 5 длиной 1000 мм со стороной 100 мм. Расстояние от места ввода крупных частиц до измерительной области 6 составляло 1700 мм. Улавливание крупных частиц производилось с использованием циклона 7. В корпусе циклона устанавливался регулируемый вентилятор, посредством которого осуществлялась подача воздуха через канал с требуемым расходом.

Предметом настоящего исследования являлось изучение характеристик течения в следе за одиночными движущимися крупными частицами 8.

Для измерений мгновенных скоростей воздуха используется метод 2D PIV (Particle Image Velocimetry).

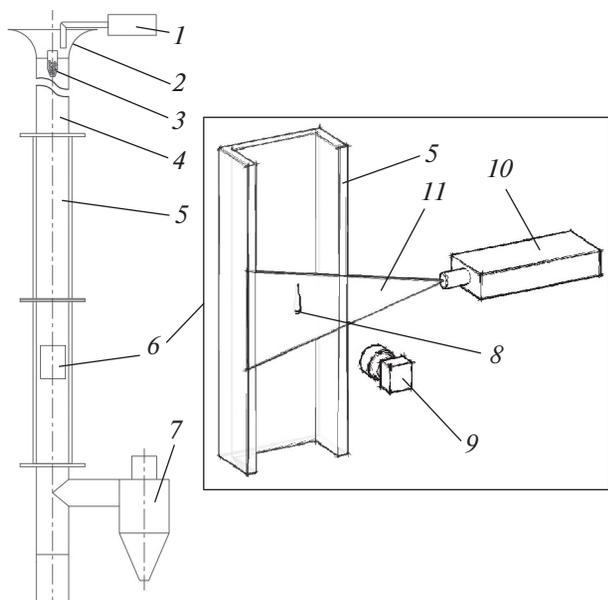


Рис. 1. Схема экспериментальной установки: 1 – генератор частиц-трассеров, 2 – лемнискатный насадок, 3 – узел подачи крупных частиц, 4 – круглая труба, 5 – канал квадратного сечения, 6 – измерительная область и диагностические средства, 7 – циклон с регулируемым вентилятором, 8 – движущаяся крупная частица, 9 – кросскорреляционная камера, 10 – импульсный лазер, 11 – плоскость “лазерного ножа”.

metry). К преимуществам этого метода относятся бесконтактность, хорошее пространственное разрешение и широкий динамический диапазон.

Использование метода PIV позволяет получать мгновенные поля скоростей воздуха и затем производить необходимую статистическую обработку для получения требуемых характеристик турбулентного потока (распределения осредненных скоростей, среднеквадратичных пульсационных (rms) скоростей, напряжений Рейнольдса, завихренности и др.).

Основным диагностическим оборудованием б является 2D PIV-система компании Dantec Dynamics. В состав данной системы входят монохромная кросскорреляционная камера 9 (модель Flow Sense EO 2M) с разрешением 1600×1200 пикселей с установленным объективом (модель Zeiss 50 mm f/1.4 ZF.2) и двоянный импульсный лазер 10 (модель Dual Power 145-15) с энергией 145 мДж и длиной волны 532 нм, служащий для формирования лазерного ножа 11.

Таким образом, описанная выше экспериментальная установка позволяла формировать нисходящий воздушный турбулентный поток воздуха, в который вводятся крупные сферические частицы и микрометровые частицы-трассеры, необходимые для измерения полей мгновенных скоростей в формируемом следе за крупными частицами.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В экспериментах выполнены измерения полей мгновенных скоростей воздуха как в отсутствие крупных сферических частиц, так и в следах, развивающихся за движущимися в потоке одиночными крупными частицами.

На рис. 2 приведены типичная фотография частицы, полученная кросскорреляционной камерой, и используемая система координат. Центр прямоугольной системы координат ($x - y$) находится в задней критической точке частицы (рис. 2а). Ось x направлена вниз по потоку. Задняя критическая точка частицы имеет координаты $X = 0, Y = 0$.

Отметим, что большая разница в диаметрах частиц-трассеров и крупных частиц дисперсной фазы позволяет проводить измерения полей мгновенных скоростей воздуха в интересующей области течения в следе за частицей (рис. 2б).

Вначале были выполнены измерения профиля осредненной скорости несущего воздуха. Измерения показали, что осредненная скорость несущего воздуха на оси канала $V_{xc} = 1.8$ м/с. Соответствующее этой скорости число Рейнольдса равно $Re = 10100$.

Затем проводились измерения осредненной скорости крупных частиц. Данная скорость равна $V_{px} = 5.2$ м/с. Из этого следует вывод, что крупные частицы значительно опережали несущий воздух и практически достигалось условие гидродинамической стабилизации двухфазного течения. Число Рейнольдса частицы, определяемое по относительной скорости воздуха и крупных частиц и диаметру последних, равно $Re_p = 1360$.

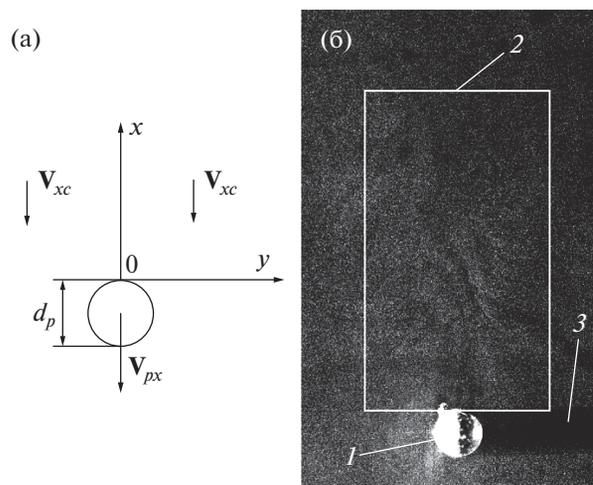


Рис. 2. Движение крупной частицы в нисходящем турбулентном потоке: (а) – используемая система координат; (б) – фотография движущейся частицы: 1 – частица, 2 – исследуемая область течения в следе за частицей, 3 – тень в лазерном ноже.

Данное значение свидетельствует в пользу того, что за крупными движущимися частицами должны образовываться развитые турбулентные следы, которые характеризуются наличием нестационарных трехмерных вихревых структур. Данные вихревые структуры действительно наблюдались в эксперименте, а их характеристики являлись предметом настоящего исследования.

Остановимся на одном важном моменте. В настоящей работе рассматривается течение с крупными частицами. Особенностью этого класса двухфазных потоков является различие в осредненных ($V_x \neq V_{px}$) скоростях фаз и полная инертность частиц по отношению к турбулентным пульсациям скорости газа, т.е. пульсационная скорость частиц $v'_{px} = 0$ и $Stk_L \rightarrow \infty$.

Число Стокса в крупномасштабном пульсационном движении Stk_L определяется как

$$Stk_L = \frac{\tau_p}{T_L}, \quad (1)$$

где τ_p – время динамической релаксации частицы, T_L – временной лагранжев интегральный масштаб турбулентности.

Время динамической релаксации частицы записывается в следующем виде:

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu C(Re_p)}. \quad (2)$$

Здесь μ – динамическая вязкость, $C(Re_p) = 0.11Re_p/6$ – поправочная функция к закону сопротивления Стокса для крупных частиц ($Re_p > 1000$).

Временной лагранжев интегральный масштаб турбулентности обычно представляется как

$$T_L = C_\mu^{1/2} k / \varepsilon = l / (C_\mu^{1/4} k^{1/2}), \quad (3)$$

где $C_\mu = 0.09$ – постоянная, k – кинетическая энергия турбулентности, ε – скорость диссипации энергии турбулентности, l – интегральный пространственный масштаб турбулентности (длина пути смешения Прандтля–Никурадзе).

Для проведения оценок приняты допущения, что $l \approx 0.07 H$ (H – ширина канала), $2k \approx 3\overline{v_{xc}^2} \approx 0.0075V_{xc}^2$ ($\overline{v_{xc}^2}$ – квадрат пульсационной скорости газа на оси канала). Тогда, используя соотношения (1)–(3), можно получить для оси канала $Stk_L \approx 39$ (таблица). Полученное число Стокса свидетельствует о том, что рассматриваемые в данном исследовании частицы не вовлекаются в пульсационное движение и их пульсационная скорость пренебрежимо мала.

На основе PIV-измерений получены векторные карты как несущего потока без крупных сферических частиц, так и в следах за крупными сферическими частицами. Векторные карты несущего

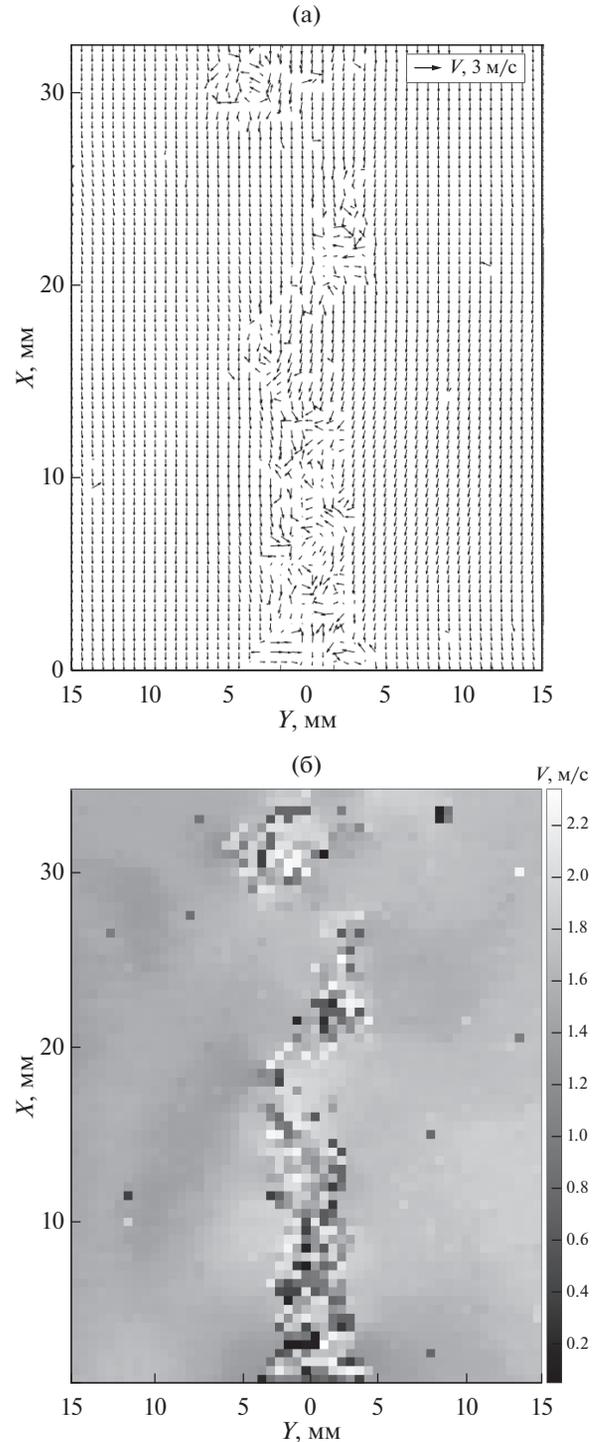


Рис. 3. Поле мгновенных скоростей воздуха в следе за крупной частицей и в окружающем потоке: (а) – исходная векторная карта, (б) – восстановленные значения скоростей.

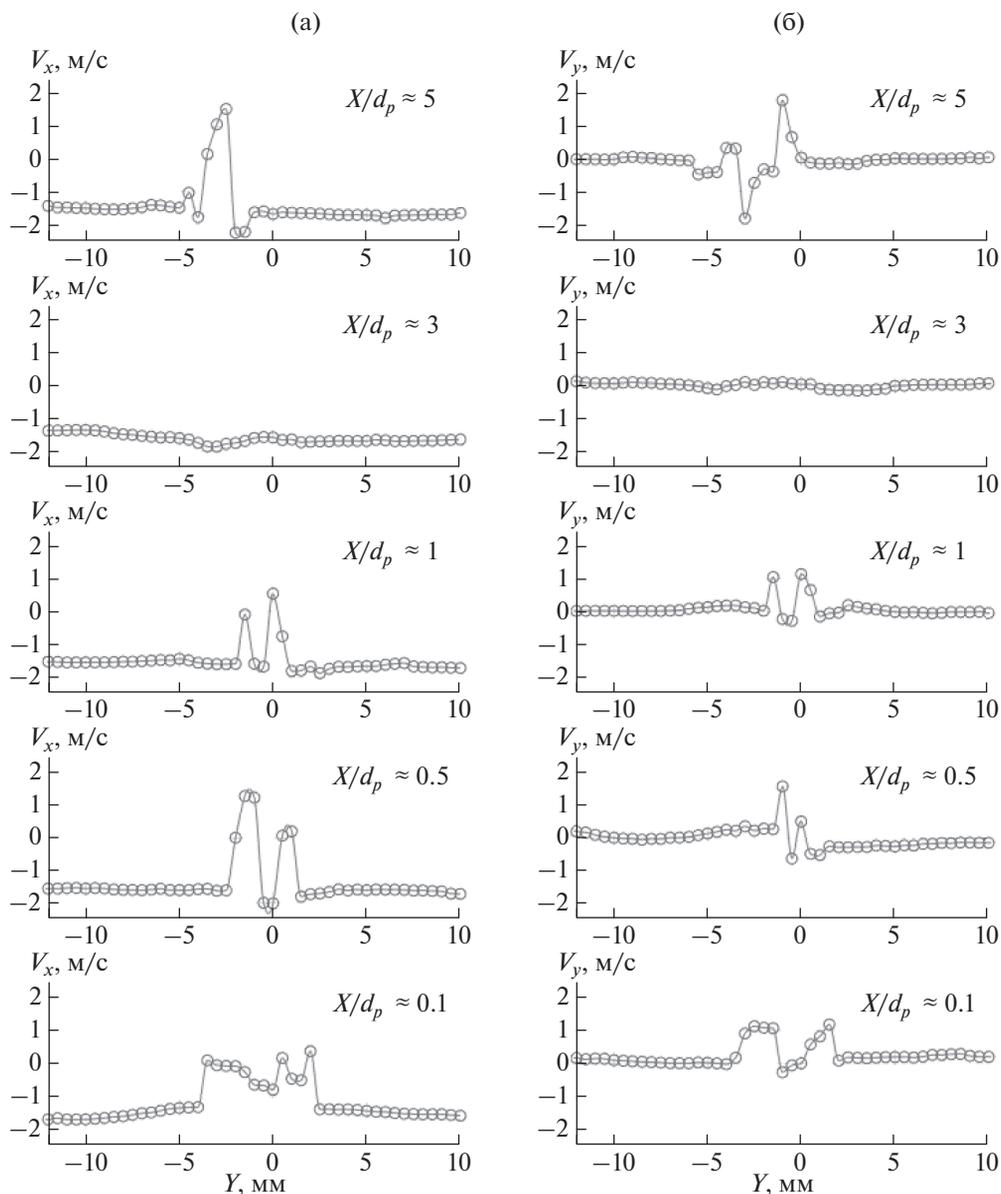


Рис. 4. Распределения мгновенной скорости воздуха в следе за крупной частицей и в окружающем потоке на разных расстояниях от поверхности частицы: (а) – продольная скорость, (б) – поперечная скорость.

го воздушного потока определялись при помощи автокорреляционного алгоритма по изображениям частиц-трассеров. Использовались два сеточных разбиения. Для определения характеристик несущего потока применялась укрупненная сетка с квадратной ячейкой 64×64 пикселей, что соответствует физическому размеру в канале $2.5 \times 2.5 \text{ мм}^2$. Для нахождения характеристик течения в следе за частицей определено предельное пространственное разрешение векторной карты с размером расчетных областей 16×16 пикселей, что соответствует физическому размеру $0.5 \times 0.5 \text{ мм}^2$.

На рис. 3 приведены типичные мгновенные поля мгновенных скоростей воздуха в следе за круп-

ной частицей. Показаны исходная векторная карта (рис. 3а) и значения мгновенных скоростей (градиентная интерпретация) воздуха в следе за крупной частицей и окружающем потоке (рис. 3б).

Приведенные на рис. 3 данные по мгновенным скоростям являются ценной первичной информацией для последующей обработки и анализа структуры и характеристик сложных нестационарных вихревых структур в турбулентных следах за движущимися крупными частицами.

На рис. 4 приведены распределения продольной v_x и поперечной v_y составляющих мгновенной скорости воздуха в следе за крупной частицей

Основные характеристики исследуемого потока

d_p , мм	ρ_p , кг/м ³	V_{xc} , м/с	V_{px} , м/с	Re	Re_p	μ , кг/(м с)	τ_p , с	k , м ² /с ²	l , м	T_L , с	Stk _L
6	1050	1.8	5.2	10100	1360	18×10^{-6}	4.7	0.012	0.007	0.12	39

и окружающем потоке для разных расстояний X/d_p от поверхности частицы.

Происходит значительная деформация профиля продольной скорости воздуха вследствие присутствия крупной частицы (рис. 4а). Так, в непосредственной близости от поверхности крупной частицы ($X/d_p = 0.1$) скорость воздуха становится близкой к нулю. При $X/d_p = 0.5$ распределение мгновенной скорости воздуха имеет два выраженных пика, которые связаны с генерируемой в следе за движущейся частицей вихревой структуры. С увеличением расстояния от частицы вниз по потоку ($X/d_p = 1$) деформация профиля мгновенной скорости снижается, что, по-видимому, вызвано затуханием присоединенных вихрей вследствие вязкости окружающего воздуха. При $X/d_p = 3$ возмущения потока практически не наблюдаются, что свидетельствует в пользу отсутствия вихревых структур в данном сечении. При дальнейшем увеличении расстояния ($X/d_p = 5$) можно опять наблюдать значительную деформацию профиля скорости воздуха. Вероятно, данная деформация связана с нахождением в исследуемой области вихревой структуры в виде отсоединенного вихря.

Данные рис. 4б отчетливо показывают, что происходит генерация поперечной составляющей скорости воздуха вследствие присутствия крупной частицы. В невозмущенном (присутствии крупной частицы) потоке указанная составляющая скорости близка к нулю. С увеличением расстояния от частицы вниз по потоку поперечная скорость уменьшается и к сечению $X/d_p = 3$ практически исчезает. При $X/d_p = 5$ можно наблюдать характерное для вихревых структур распределение скоростей, однозначно свидетельствующее в пользу высказанного ранее (при анализе рис. 4а) предположения о нахождении в данном сечении отсоединенного вихря.

На рис. 5 приведены распределения продольной и поперечной составляющих мгновенных скоростей воздуха в следе за крупной частицей и окружающем ее потоке для двух выборочных сечений: $Y/d_p = -0.5$ (рис. 5а, 5б) и $Y/d_p = 0.5$ (рис. 5в, 5г). Эти сечения располагаются на расстоянии одного радиуса слева и справа от вертикальной оси частицы соответственно.

Данные рис. 5 дают важную дополнительную информацию о местоположении и протяжен-

ности (в продольном направлении) наблюдаемых вихревых структур, генерируемых в следе за движущейся частицей.

Например, наличие эффектов деформации профиля продольной скорости (рис. 5а) и генерации поперечной скорости (рис. 5б) и их отсутствие (рис. 5в, 5г) в области $X = 0-9$ мм ($X/d_p = 0-1.5$) говорят о том, что область существования присоединенных вихрей смещена влево от вертикальной оси крупной частицы и ее протяженность (в рассмотренном сечении) равна 9 мм. Наличие тех же эффектов (рис. 5в, 5г) и их отсутствие (рис. 5а, 5б) в области $X = 9-15$ мм ($X/d_p = 1.5-2.5$) свидетельствуют в пользу того, что область существования отсоединенного вихря, напротив, смещена вправо от вертикальной оси крупной частицы и ее протяженность (в рассмотренном сечении) составляет 6 мм. В целом же данные рис. 5 находятся в хорошем согласии с выводами, сделанными при анализе рис. 4.

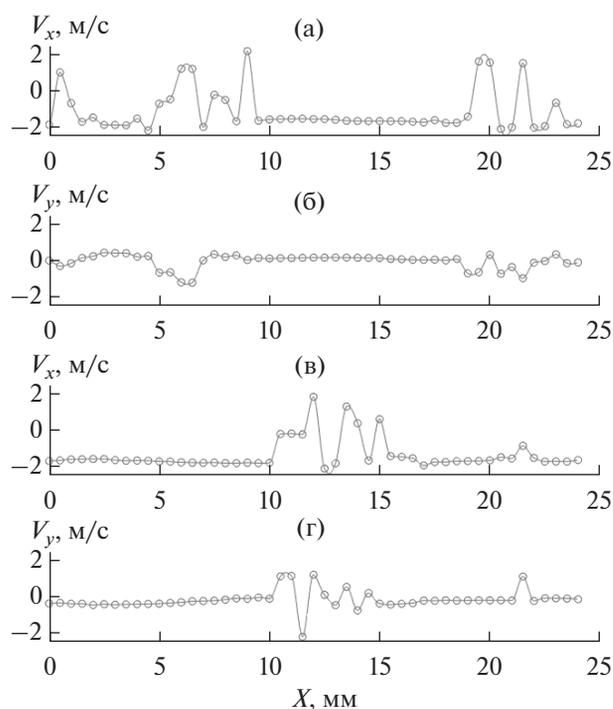


Рис. 5. Распределения мгновенной скорости воздуха в следе за крупной частицей и в окружающем потоке для двух выборочных сечений: (а), (б) — $Y/d_p \approx -0.5$; (в), (г) — 0.5 ; (а), (в) — продольная скорость; (б), (г) — поперечная скорость.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведена апробация возможности использования методов визуализации и оптической диагностики для изучения вихревого следа за крупной частицей с хорошим пространственным разрешением. Приведены и проанализированы результаты измерения характеристик течения, формирующегося в следе за крупной частицей, движущейся в нисходящем турбулентном потоке воздуха в канале.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 20-19-00551).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Вараксин А.Ю.* Влияние частиц на турбулентность несущего потока газа // ТВТ. 2015. Т. 53. № 3. С. 441.
2. *Tiwary S.S., Pal E., Bale S., Minocha N., Patwardhan A.W., Nandakumar K., Joshi J.B.* Flow Past a Single Stationary Sphere. 1. Experimental and Numerical Techniques // Powder Technol. 2020. V. 365. P. 115.
3. *Tiwary S.S., Pal E., Bale S., Minocha N., Patwardhan A.W., Nandakumar K., Joshi J.B.* Flow Past a Single Stationary Sphere. 2. Regime Mapping and Effect of External Disturbances // Powder Technol. 2020. V. 365. P. 215.
4. *Bagchi P., Balachandar S.* Response of the Wake of an Isolated Particle to an Isotropic Turbulent Flow // J. Fluid Mech. 2004. V. 518. P. 95.
5. *Wu J.-S., Faeth G.M.* Sphere Wakes at Moderate Reynolds Numbers in a Turbulent Environment // AIAA J. 1994. V. 32. P. 535.
6. *Wu J.-S., Faeth G.M.* Effect of Ambient Turbulence Intensity on Sphere Wakes at Intermediate Reynolds Numbers // AIAA J. 1994. V. 33. P. 171.
7. *Gai G.D., Kudriakov S., Thomine O., Mimouni S., Hadjadj A.* Two-fluid RANS Modelling of Turbulence Created by a Vertically Falling/Moving Particle Cloud // Flow, Turbul. Combust. 2022. V. 108. № 3. P. 819.
8. *Gai G.D., Hadjadj A., Kudriakov S., Thomine O.* Particles-induced Turbulence: A Critical Review of Physical Concepts, Numerical Modelings, and Experimental Investigations // Theor. Appl. Mech. Lett. 2020. V. 10. P. 241.
9. *Leskovec M., Lundell F., Innings F.* Pipe Flow with Large Particles and Their Impact on the Transition to Turbulence // Phys. Rev. Fluids. 2020. V. 5. P. 112301.
10. *Singh S., Potherat A., Pringle C.C.T., Bates I.R.J., Holdsworth M.* Simultaneous Eulerian-Lagrangian Velocity Measurements of Particulate Pipe Flow in Transitional Regime // Rev. Sci. Instrum. 2020. V. 91. P. 095110.
11. *Hogendoorn W., Chandra B., Poelma C.* Suspension Dynamics in Transitional Pipe Flow // Phys. Rev. Fluids. 2021. V. 6. P. 064301.
12. *Tsuji Y., Morikawa Y., Shiomi H.* LDV Measurements of an Air-Solid Two-phase Flow in a Vertical Pipe // J. Fluid Mech. 1984. V. 139. P. 417.
13. *Gore R.A., Crowe C.T.* Effect of Particle Size on Modulating Turbulent Intensity // Int. J. Multiphase Flow. 1989. V. 15. № 2. P. 279.
14. *Hetsroni G.* Particles-turbulence Interaction // Int. J. Multiphase Flow. 1989. V. 15. № 5. P. 735.
15. *Зайчик Л.И., Вараксин А.Ю.* Влияние следа за крупными частицами на интенсивность турбулентности несущего потока // ТВТ. 1999. Т. 37. № 4. С. 683.
16. *Yuan Z., Michaelides E.E.* Turbulence Modulation in Particulate Flows – a Theoretical Approach // Int. J. Multiphase Flow. 1992. V. 18. № 5. P. 779.
17. *Кондратьев Л.В.* Структура турбулентного течения газозвеси в пристеночной области трубы // ИФЖ. 1988. Т. 55. № 6. С. 1029.
18. *Деревич И.В.* Влияние примеси крупных частиц на турбулентные характеристики газозвеси в каналах // ПМТФ. 1994. № 2. С. 70.
19. *Yarin L.P., Hetsroni G.* Turbulence Intensity in Dilute Two-phase Flows. 3. The Particles-turbulence Interaction in Dilute Two-phase Flow // Int. J. Multiphase Flow. 1994. V. 20. № 1. P. 27.
20. *Вараксин А.Ю.* О влиянии макро-, микро- и наночастиц на турбулентность несущего газа // Докл. РАН. Физика, техн. науки. 2021. Т. 497. № 1. С. 36.
21. *Вараксин А.Ю.* Анализ механизмов влияния макро-, микро- и наночастиц на энергию турбулентности несущего газа // ТВТ. 2021. Т. 59. № 4. С. 527.
22. *Yu Z.S., Xia Y., Guo Y., Lin J.Z.* Modulation of Turbulence Intensity by Heavy Finite-size Particles in Upward Channel Flow // J. Fluid Mech. 2021. V. 913. P. A3.
23. *Yang B., Peng C., Wang G.C., Wang L.P.* A Direct Numerical Simulation Study of Flow Modulation and Turbulent Sedimentation in Particle-laden Downward Channel Flows // Phys. Fluids. 2021. V. 33. P. 093306.

УДК 621.1.016+536.2

ОДНОСЛОЙНАЯ АЛГЕБРАИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КАЖУЩЕЙСЯ ТУРБУЛЕНТНОЙ ВЯЗКОСТИ И МОДИФИЦИРОВАННЫЙ МЕТОД ЭФФЕКТИВНОЙ ДЛИНЫ

© 2022 г. **В. В. Горский**^{1, 2, *}¹АО «ВПК «НПО машиностроения», Реутов, Россия²Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

*E-mail: vpk@vpk.npomash.ru

Поступила в редакцию 07.10.2021 г.

После доработки 04.05.2022 г.

Принята к публикации 07.06.2022 г.

Предложено использование формулы Прандтля–Ван-Дрийдта во всей области двумерного ламинарно-турбулентного пограничного слоя для исследования конвективного теплообмена и трения на высокотемпературных элементах конструкций высокоэнергетических устройств. Сформулирована современная модификация метода эффективной длины В.С. Авдуевского для решения данных задач. Проведен анализ полученных при экстремально высоких значениях числа Рейнольдса экспериментальных данных по конвективному теплообмену, для которых имелась возможность установить положение переходной области на поверхности затупленной части испытанных моделей. Предложена новая модификация формулы Прандтля–Ван-Дрийдта, учитывающая зависимость константы Кармана от положения переходной области на затупленной части модели. В свою очередь идеология классического метода эффективной длины применена к расчету не ламинарно-турбулентного теплообмена в целом, а только к той его составляющей, которая обусловлена турбулентными пульсациями в газе. Получено удовлетворительное качество описания проанализированных экспериментальных данных на всей поверхности затупленной модели, имеющее место в рамках применения предложенных методов расчета.

DOI: 10.31857/S0040364422050040

ВВЕДЕНИЕ

При обтекании стенки газовым потоком с большими числами Рейнольдса вызываемые в нем возмущения сопровождаются возникновением турбулентных пульсаций в вязкой пристенной области течения.

Широкое распространение в настоящее время получило численное моделирование процесса ламинарно-турбулентного обтекания тел, основанное на использовании различных полуэмпирических алгебраических и дифференциальных моделей турбулентной вязкости. В инженерной же практике широко распространен метод эффективной длины В.С. Авдуевского.

Одной из основных проблем, стоящих на пути обоснованности применения на практике любой полуэмпирической модели расчета, является удовлетворительное качество ее верификации на базе анализа экспериментальных данных. Причем наиболее остро эта проблема стоит при описании турбулентного теплообмена и трения, так как турбулентная вязкость обусловлена газодинамической структурой течения газа. И в этой связи сложно

ожидать существования универсальной модели расчета турбулентной вязкости.

В развитом двумерном турбулентном пограничном слое обычно выделяется несколько принципиально различных областей течения газа: внутренняя пристеночная область, внешняя область закона следа и надслой.

Пристеночная область включает в себя ламинарный подслой с линейным изменением профиля скорости, переходную зону и область логарифмического изменения профиля скорости [1]. Каждая из перечисленных подобластей характеризуется индивидуальными присущими только ей свойствами и закономерностями.

В этой области поток характеризуется мелкомасштабной турбулентностью с изотропными свойствами, а пульсации в газе, инициированные стенкой, практически полностью затухают к внешней границе этой области [2].

В подобласти закона следа и перемежаемости (надслой), где силы вязкости крайне малы, выполняется закон дефекта скоростей [3].

Естественно, что для различных прикладных задач роль течения газа во внешней части погра-

ничного слоя будет также различной. Нижеизложенные материалы посвящены исследованию этой роли для одного важного для практики случая двумерного конвективного теплообмена, который характеризуется

- рассмотрением затупленных тел достаточно малого удлинения;

- слоистым характером их обтекания высокотемпературным газовым потоком при экстремально высоких значениях числа Рейнольдса.

В этих условиях обоснованным является исследование конвективного теплообмена и трения в рамках ламинарно-турбулентного пограничного слоя в сочетании с алгебраической моделью кажущейся турбулентной вязкости [1, 4]. При этом наиболее часто на практике применяются двухслойные модели Болдуина–Ломакса [5] и Себечи–Смита [6].

В данных моделях в пристеночной области кажущаяся турбулентная вязкость рассчитывается по формуле Прандтля–Ван-Дриеста [7], учитывающей ее зависимость от градиента осредненной скорости.

Во внешней же области пограничного слоя используются различные формы записи закона следа.

В этой связи необходимо обратить внимание на следующие обстоятельства.

Во-первых, в рассматриваемых условиях сложно ожидать существенного влияния, оказываемого на конвективный теплообмен течением газа во внешней части пограничного слоя при экстремально высоких числах Рейнольдса. А именно такой режим обтекания этих тел вызывает наибольший практический интерес, так как он во многих случаях является определяющим с точки зрения работоспособности фрагментов конструкций изделий, подверженных экстремально высокому нагреву.

Во-вторых, полуэмпирический характер всех моделей кажущейся турбулентной вязкости вызывает необходимость их апробации на широком круге экспериментальных данных, что в свою очередь создает повышенные требования к определению положения переходной зоны на испытываемой модели. Наиболее качественная информация такого рода известна лишь в условиях испытания затупленных конусов при экстремально высоких числах Рейнольдса.

В-третьих, объем экспериментальных данных, пригодных для апробации моделей кажущейся турбулентной вязкости, крайне ограничен. Это препятствует качественному установлению значений констант, входящих в математическое описание течения газа, одновременно как для внутренней, так и внешней областей пограничного слоя.

В-четвертых, опубликованные методы расчета турбулентного теплообмена апробированы на экспериментальных данных, полученных в условиях

практически безградиентного обтекания стенки газовым потоком (см., например, [4]). Однако в работах [8, 9] указано на недопустимость применения этих методов в условиях сугубо градиентного характера обтекания стенки.

По этой причине представляется целесообразным модифицировать существующие модели кажущейся турбулентной вязкости отдельно в условиях, которые существенно различаются вкладом, вносимым течением газа во внешней области пограничного слоя в контролируемые результаты измерений.

В этом плане анализируемые ниже результаты экспериментальных исследований представляются практически идеальной базой для модификации существующих моделей кажущейся турбулентной вязкости во внутренней части ламинарно-турбулентного пограничного слоя.

Это вызывает необходимость в оценке влияния, оказываемого на конвективный теплообмен течением газа во внешней части пограничного слоя, что, естественно, проще всего сделать с использованием однослойной алгебраической модели кажущейся турбулентной вязкости.

Скорректированная при этом модель течения во внутренней части пограничного слоя в принципе может найти определенное применение и в тех случаях, когда изучение течения газа во внешней области пограничного слоя является обязательным. Однако при этом может использоваться полученное в рамках однослойной модели математическое описание кажущейся турбулентной вязкости, обусловленной трением.

Выполнению исследований, направленных на решение сформулированной задачи, и посвящена основная часть данной статьи.

Метод эффективной длины, предложенный в 60-х годах прошлого века и оперирующий суммарным тепловым потоком, широко используется в инженерной практике. Согласно современным воззрениям, этот поток обусловлен как ламинарными, так и турбулентными составляющими процессов переноса в газе. Попытке применения идеи метода эффективной длины для описания только турбулентной составляющей теплового потока посвящена вторая часть данной статьи.

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Объектом настоящих исследований является осесимметричное обтекание воздухом кругового затупленного конуса малого удлинения с углом полураствора, равным 9° , для сопоставления расчетных и экспериментальных данных. Использовалась методика численного интегрирования дифференциальных уравнений ламинарно-турбулентного пограничного слоя, описанная в работе [10], а

для расчета кажущейся турбулентной вязкости μ_T во всем пограничном слое применялась формула Прандтля–Ван-Драйста

$$\begin{aligned} \mu_T &= \rho [k y D(y)]^2 |u_y|, \\ D(y) &= 1 - \exp\left(-\frac{y/y^*}{26}\right), \\ y^* &= \frac{\mu_w}{\rho_w v^*}, \quad v^* = \sqrt{\frac{Fr_w}{\rho_w}}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь k – константа Кармана; u_y – частная производная тангенциальной проекции вектора скорости по координате y ; ρ – плотность газа; Fr – удельное напряжение трения; y^* , v^* – характерные значения длины и скорости, используемые в качестве масштабов, а индекс w относится к стенке.

В данной формуле принята линейная зависимость масштаба турбулентности от удаления y расчетного узла от стенки, а для плавного сопряжения течения газа в пристеночной области с течением в ламинарном подслое используется демпфирующая функция Ван-Драйста $D(y)$.

Анализируемые экспериментальные данные, опубликованные в работах [11, 12], соответствуют обтеканию конуса при различных углах атаки, что в свою очередь обеспечивает массовый характер экспериментальных данных по конвективному теплообмену на затуплении. Однако эти данные характеризуются значительным разбросом для различных экспериментов.

Поэтому в подробном анализе этих данных, выполненном в [9], удалось установить только недопустимость применения постоянного значения константы Кармана на всей поверхности затупления конуса и предложить степенную зависимость этой константы от координаты s , отсчитываемой вдоль образующей конуса от его критической точки.

В данной работе используется принципиально другой подход к решению той же задачи, основанный на анализе экспериментальных данных, полученных в одном эксперименте, что позволило учесть влияние на конвективный теплообмен месторасположения переходной области на поверхности затупления конуса за счет применения для расчета константы Кармана формулы вида

$$k = k_{2n} (3 - 2\alpha^n)_{\max}^n,$$

$$\alpha = \begin{cases} 0, & s \leq s_L; \\ 1, & s > s_L \wedge s \geq s_{B1}; \\ (s - s_L) / (s_{B1} - s_L), & s > s_L \wedge s < s_{B1}. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь s – координата, отсчитываемая от критической точки конуса вдоль его образующей в калибрах от радиуса сферического затупления модели; k_{\max} – максимальное значение константы Кармана, достигаемая с ростом координаты s . Индексы L и $B1$ относятся соответственно к концу ламинарного режима течения газа в пограничном слое и к стыку затупления конуса с его боковой поверхностью.

При этом применение формулы (2) обеспечивает монотонное возрастание константы Кармана в пределах $[0, k_{\max}]$ с сохранением ее дифференцируемости на всей области определения координаты s .

Показатель степени n и константа k_{\max} рассматриваются ниже как инструменты согласования расчетных и экспериментальных данных.

При проведении расчетных исследований использовались результаты численного решения уравнений Эйлера, которые удовлетворительно согласуются с приведенными в работах [11, 12] экспериментальными данными.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Объектом настоящего исследования являются экспериментальные данные по ламинарно-турбулентному теплообмену на затупленном конусе, обтекаемом под различными углами атаки, опубликованные в работах [11, 12].

Данные эксперименты проведены при трех режимах обтекания затупленного конуса потоком воздуха, характеризующихся различными значениями числа Рейнольдса Re_∞ , рассчитанного по параметрам газа в набегающем потоке и радиусу R_0 сферического затупления модели.

Условия проведения данных экспериментальных исследований приведены в табл. 1.

В работах [9, 10] проведен подробный анализ всей совокупности экспериментальных данных по

Таблица 1. Условия проведения экспериментов

№	$Re_\infty \times 10^{-6}$	M_∞	ρ_∞ , кг/м ³	T_∞ , К	H_F	$q_{w,0}$, МВт/м ²
I	10	5	0.902	73.65	0.133	0.41224
II	4	5	0.350	73.81	0.232	0.25325
III	2.5	5	0.209	73.07	0.190	0.18965

Примечание. M_∞ , ρ_∞ , T_∞ – число Маха, плотность и температура набегающего на модель потока воздуха; H_F – отношение энтальпии газа на стенке к энтальпии торможения в набегающем потоке; T_w , $q_{w,0}$ – температура стенки и удельный тепловой поток в критической точке сферы, рассчитанные по формуле Фея–Ридделла [13] для случая холодной стенки.

теплообмену на затуплении конуса, приведенных в работах [11, 12] для различных углов его атаки газовым потоком. На базе этого анализа сделан вывод о том, что во всех режимах проведенных испытаний четко прослеживается месторасположение переходной области на поверхности затупления.

Это позволило решить обратную задачу по определению эффективной высоты b_{Tr} шероховатости модели, определяющей положение переходной области на ее поверхности в рамках методики ПАНТ [14].

При этом было установлено, что величина параметра b_{Tr} равна примерно 3, 4.5 и 9 мкм для моделей, использованных при проведении испытаний в режимах I, II, III соответственно.

Данные значения шероховатости и использовались при проведении настоящих исследований, а полученные при этом параметры, характеризующие положение переходной области на поверхности затупления, приведены в табл. 2.

Расчет изменения коэффициента перемежаемости Γ внутри переходной зоны от 0 до 1 производится по кубической полиномиальной зависимости.

Так как величина шероховатости поверхности испытанных моделей ≈ 5 мкм, то в [10] сделан вывод о том, что в данном случае, согласно [4], усилением теплообмена за счет шероховатости стенки можно пренебречь.

Нижеследующий анализ экспериментальных данных ограничен только случаем осесимметричного обтекания модели газовым потоком, которое было реализовано только в одном испытании для каждого из трех указанных в табл. 1 режимов. На каждой модели датчики, использовавшиеся для определения удельного теплового потока, были установлены на семи образующих конуса в 13 сечениях по координате s . Благодаря этому измерения тепловых потоков не являлись единичными.

Таблица 2. Параметры, характеризующие положение переходной области на поверхности модели

№	b_{Tr} , мкм	$Re_{e,\vartheta,L}$	s_L	$Re_{e,\vartheta,T}$	s_T
I	3.0	158	0.185	314	0.373
II	4.5	178	0.339	348	0.701
III	9.0	119	0.288	234	0.589

Примечание. s_L, s_T – значения координаты s , соответствующие началу и концу переходной области; $Re_{e,\vartheta,L}, Re_{e,\vartheta,T}$ – значения числа Рейнольдса, соответствующие началу и концу переходной области и рассчитанные по параметрам течения газа на внешней границе ламинарного пограничного слоя и толщине потери импульса в этом слое.

В табл. 3 приведена предварительная информация о тепловом потоке q_w , полученная в результате данной серии экспериментальных исследований. Здесь $q_{w,m}$ – среднеквадратическая величина теплового потока q_w ; σ – среднеквадратическое отклонение, %; N_D – число сработавших датчиков при фиксированном значении координаты s .

Из 183 показаний тепловых датчиков, приведенных в [12], отбракованы как выбросы только два измерения из них. При этом оставшиеся 181 измерения характеризуются столь низкими среднеквадратическими отклонениями, что делают обоснованным применение среднеквадратических значений удельного теплового потока $q_{w,m}$ для сопоставления расчетных и экспериментальных данных.

Результаты такого сопоставления приведены на рис. 1.

Значения координаты s и удельного теплового потока q_w к холодной стенке измеряются соответственно в калибрах от параметров R_0 и $q_{w,0}$.

Дорожками кривых различного типа на графики нанесены расчетные данные, полученные в рамках однослойной и двухслойной алгебраи-

Таблица 3. Экспериментальные данные по тепловому потоку

s	$q_{w,m}$	σ	N_D	$q_{w,m}$	σ	N_D	$q_{w,m}$	σ	N_D
0	0	0	0	0.903	0	1	1.01	0	1
0.15	0.974	0	3	1.010	1.46	3	1.01	1.57	3
0.30	0	0	0	0.838	1.97	4	0.87	5.07	5
0.45	2.210	4.70	3	1.883	4.38	3	1.24	2.86	2
0.60	2.480	3.58	2	1.580	5.20	3	1.59	3.67	6
0.75	2.070	0.27	2	1.810	0.30	3	1.46	0.94	3
0.90	1.910	1.99	4	1.790	2.19	3	1.38	3.38	6
1.05	1.540	0.63	2	1.380	0.15	3	1.08	0.80	5
1.30	1.140	1.64	3	0.849	5.35	7	0.784	5.80	6
1.50	0.699	3.58	3	0.526	3.2	6	0.456	0.56	6
2.00	0.703	0	1	0.505	3.06	4	0.455	5.75	5
3.50	0.549	8.85	2	0.438	4.17	7	0.371	4.79	7
5.25	0.515	7.45	2	0.371	3.57	7	0.322	2.38	7

ческих моделей кажущейся турбулентной вязкости, а значками различного типа – экспериментальные данные.

При этом верхняя граница дорожки расчетных данных относится к однослойной модели кажущейся турбулентной вязкости.

В рамках обоих расчетных подходов использовалась одинаковая формулировка (1), (2) модифицированной формулы Прандтля–Ван-Дриеста с одинаковыми значениями 0.25 и 0.3 коэффициентов K_{\max} и n , применение которых позволяет обеспечить удовлетворительное качество согласования расчетных и экспериментальных данных для всех рассмотренных режимов экспериментальной отработки.

Однако в одном случае данная формула применяется во всем пограничном слое, а во втором – только в его внутренней части. Для расчета же кажущейся турбулентной вязкости во внешней части пограничного слоя использовался тот же подход, что и в классической формулировке метода Себечи–Смита [5].

Как следует из приведенной на рис. 1 информации, в рассмотренных условиях экспериментальной отработки роль течения газа в конвективном теплообмене во внешней области пограничного слоя оказывается крайне незначительной.

Это обстоятельство в сочетании с отсутствием данных о корректности использования в данных условиях существующих моделей кажущейся турбулентной вязкости для внешней части пограничного слоя свидетельствует об обоснованности применения в данном случае однослойной модели кажущейся турбулентной вязкости.

В свою очередь предложенная модификация формулы Прандтля–Ван-Дриеста может найти применение и при проведении исследований в условиях, в которых нельзя пренебречь течением газа во внешней части пограничного слоя.

В заключение необходимо подчеркнуть, что на сегодняшний день не существует альтернативы использованию указанных экспериментальных данных для решения задач, связанных с апробацией расчетных методов решения уравнений ламинарно-турбулентного пограничного слоя.

Это объясняется прежде всего следующими причинами, учтенными только в работах [11, 12].

Во-первых, апробация должна проводиться в условиях наличия информации о месторасположении переходной области на поверхности модели, что представляется возможным только на ее затуплении при экстремально высоких значениях числа Рейнольдса.

Во-вторых, в этих условиях шероховатость стенки оказывает влияние не только на месторасположение переходной области на поверхности модели, но и на интенсивность конвективного теплообмена. Поэтому необходима тщательная полировка поверхности модели, позволяющая исключить

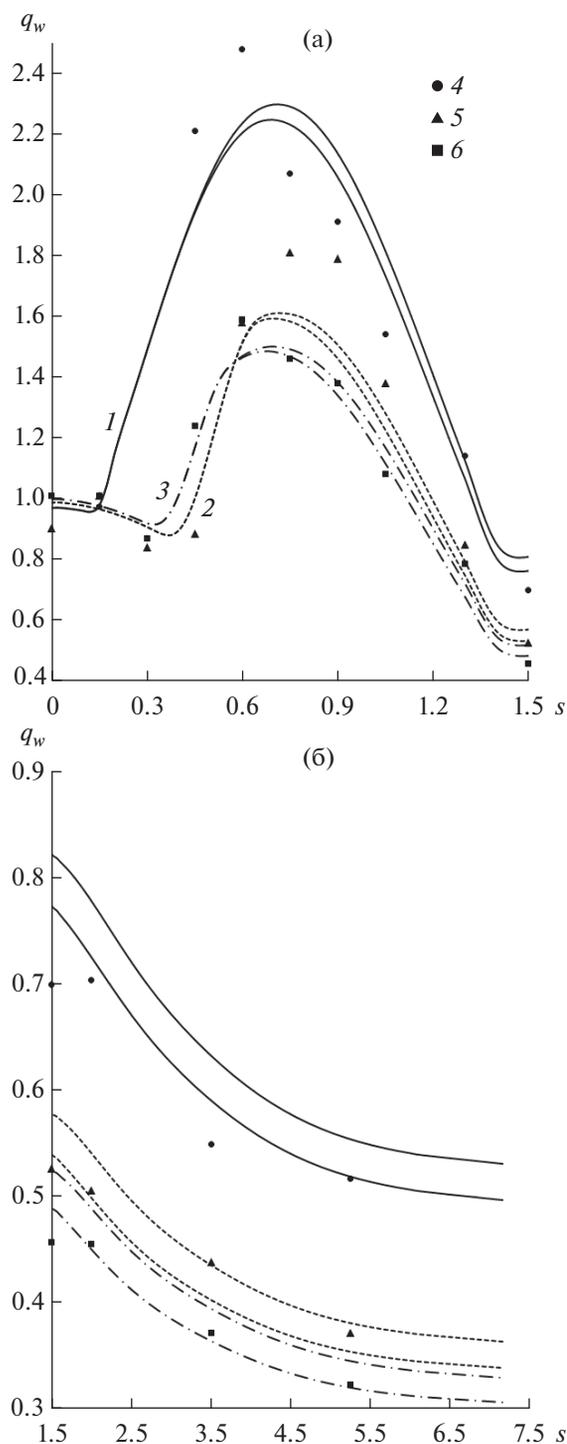


Рис. 1. Сопоставление расчетных (кривые) и экспериментальных (маркеры) данных по теплообмену на затуплении (а) и на боковой поверхности (б) конуса: 1, 4 – для режима I; 2, 5 – II; 3, 6 – III.

из рассмотрения учет усиления теплообмена за счет шероховатости стенки.

Как уже отмечено выше в инженерной практике широкое применение имеет метод эффективной длины [4].

Удовлетворительное качество описания в рамках этого метода ламинарного теплообмена по отношению как к экспериментальным данным, так и к результатам строгого численного интегрирования дифференциальных уравнений пограничного слоя для широкого круга прикладных задач [4], свидетельствует о физической обоснованности допущений, лежащих в основе данного метода.

В то же время можно предположить, что отсутствие аналогичного удовлетворительного согласования для ламинарно-турбулентного теплообмена, наблюдаемого при экстремально высоких числах Рейнольдса, является следствием двух основных причин:

- применение метода эффективной длины для расчета суммарного теплового потока, а не его составляющей, обусловленной турбулентными пульсациями в пограничном слое;
- апробацией этого метода только на экспериментальных данных, полученных при недостаточно высоких числах Рейнольдса.

С целью устранения в первом приближении этих причин производится модернизация классического метода эффективной длины, включающая в себя

- запись уравнения для расчета удельного теплового потока в форме

$$q_w(s) = q_{w,Lam}(s) + q_{w,Turb}(s)\Gamma(s);$$

$$q_{Turb}(s) = A_{Turb} Pr^{-0.6} B_{Turb}(s) / x_{Eff,Turb}^{0.2}(s);$$

$$B_{Turb}(s) = [\rho_{Ecc}(s) u_e(s)]^{0.8} \times$$

$$\times \mu_{Ecc}^{0.2}(s) [h_{r,Turb}(s) - h_w(s)];$$

$$h_{r,Turb} = h_e + (h_{00} - h_e) \sqrt[3]{Pr};$$

$$x_{Eff,Turb}(s) = \int_0^s [r(s') B_{Turb}(s')]^{1.25} \times$$

$$\times ds' / [r(s) B_{Turb}(s)]^{1.25};$$

- рассмотрение параметра A_{Turb} как единственного элемента рассогласования расчетных и экспериментальных данных по величине суммарного теплового потока q_w .

Здесь ρ , μ , h – плотность (кг/м³), коэффициент динамической вязкости (кг/(м с)) и энтальпия (Дж/кг); Pr – число Прандтля; индексы w , e относятся к стенке и внешней границе пограничного слоя; индексы Lam , $Turb$ относятся к ламинарной и турбулентной составляющей суммарной тепловой нагрузки; индекс Ecc относится к свойствам газа, соответствующим энтальпии Эккерта [15]; индексы 00 , r относятся к энтальпиям торможения и восстановления газового потока.

Решение данной оптимизационной задачи производится на базе тех же экспериментальных данных, описанных выше, а полученные при этом

результаты сопоставления расчетных и экспериментальных данных, соответствующие оптимальному значению параметра A_{Turb} , равному 0.018, приведены на рис. 2.

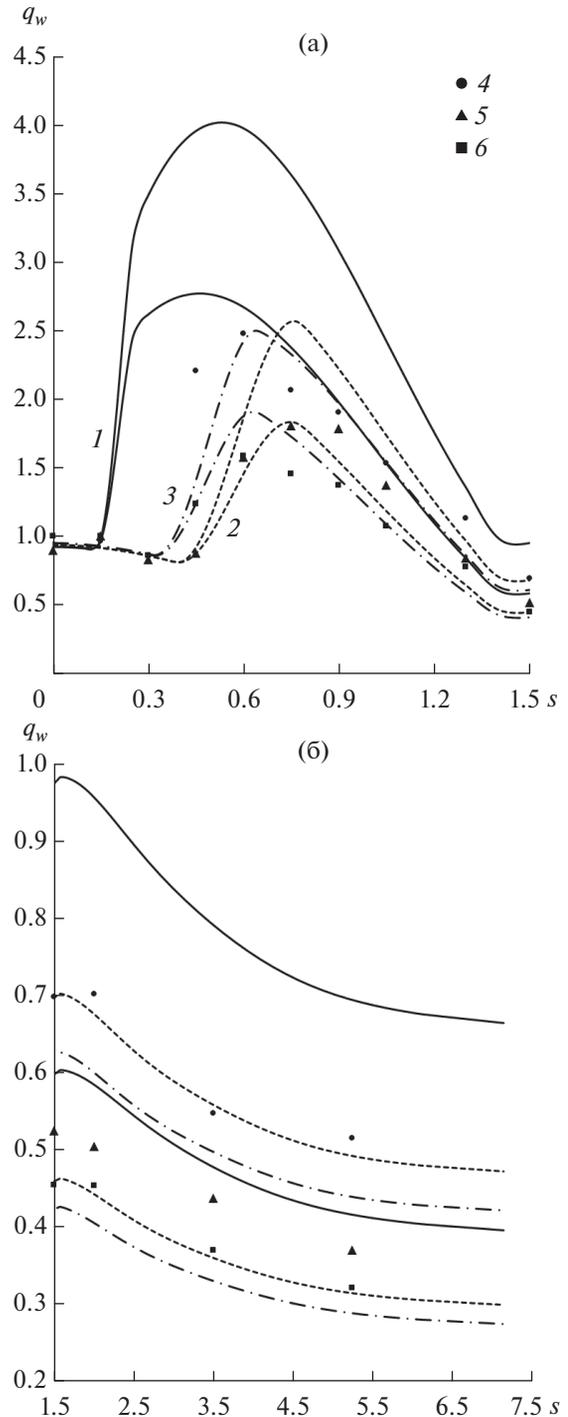


Рис. 2. Сопоставление расчетных (кривые) и экспериментальных (маркеры) данных по теплообмену на затуплении (а) и на боковой поверхности (б) конуса: 1, 4 – для режима I; 2, 5 – II; 3, 6 – III.

Дорожкой кривых различного типа на графики нанесены расчетные данные, полученные в рамках классического и модернизированного методов эффективной длины, а значками различного типа — экспериментальные данные.

При этом верхняя граница дорожки расчетных данных относится к классическому методу эффективной длины.

В рассмотренных условиях экспериментальной обработки применение модифицированного метода эффективной длины действительно позволяет добиться удовлетворительного качества согласования расчетных и экспериментальных данных. При этом имеет место существенное различие между результатами проведенных расчетных исследований, полученных в рамках различных подходов к решению данной задачи из числа рассмотренных не только на затуплении конуса, но и на его боковой поверхности.

Это свидетельствует об обоснованности применения предложенного метода расчета ламинарно-турбулентного теплообмена при решении широкого круга практических задач.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Сформулирована однослойная модель кажущейся турбулентной вязкости, и на основе ее применения получена модификация формулы Прандтля—Ван-Дриеста, обеспечивающая удовлетворительное качество описания экспериментальных данных по конвективному теплообмену на затупленных конусах при экстремально высоких значениях числа Рейнольдса.

2. Показана обоснованность применения этой модели в рассмотренных условиях обтекания модели потоком газа.

3. Отмечена возможность применения предложенной модификации формулы Прандтля—Ван-Дриеста для расчета кажущейся турбулентной вязкости во внутренней части пограничного слоя в тех случаях, когда течением газа во внешней области этого слоя пренебречь нельзя.

4. Предложена модификация классического метода эффективной длины, применение которой позволяет качественно снизить рассогласование между расчетными и экспериментальными данными.

5. В рамках модифицированного метода эффективной длины удовлетворительно описывается широкий круг экспериментальных данных, полученных при экстремально высоких значениях числа Рейнольдса.

6. Представляется обоснованным применение предложенного метода для решения широкого круга прикладных задач.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Алексин А.В.* Моделирование турбулентных пристенных сжимаемых течений. В кн.: Гиперзвуковая аэродинамика и теплообмен спускаемых космических аппаратов и планетных зондов. М.: Физматлит, 2011. С. 458.
2. *Клаузер Ф.* Турбулентный пограничный слой. В сб. Проблемы механики. Вып. 2. М.: Изд-во иностр. лит., 1959. С. 297.
3. *Coles D.* The Law of the Wake in Turbulent Boundary Layer // *J. Fluid Mech.* 1956. V. 1. № 2. P. 191.
4. *Землянский Б.А., Лунев В.В., Власов В.И. и др.* Конвективный теплообмен летательных аппаратов / Под ред. Землянского Б.А. М.: Физматлит, 2014. 377 с.
5. *Baldwin B.S., Lomax H.* The Layer Approximation and Algebraic Model of Separated Turbulent Flow // *AIAA Paper* 78-0257. 1978.
6. *Cebeci T., Smith A.M.O.* Analysis of Turbulent Boundary Layers. N.Y.—San Francisco—London: Acad. Press, 1974. 404 p.
7. *Van Driest E.R.* On Turbulent Flow near Wall // *J. Aeronaut. Sci.* 1956. V. 23. № 11. P. 1007.
8. *Горский В.В., Пугач М.А.* Сопоставление расчетных и экспериментальных данных по ламинарно-турбулентному теплообмену на поверхности полусферы, обтекаемой сверхзвуковым потоком воздуха // *ТВТ.* 2015. Т. 53. № 2. С. 231.
9. *Горский В.В.* Методика численного решения уравнений двумерного ламинарно-турбулентного пограничного слоя на проникающей стенке затупленного тела вращения // *Космонавтика и ракетостроение.* 2017. № 3(96). С. 90.
10. *Горский В.В.* Теоретические основы расчета абляционной тепловой защиты. М.: Научный мир, 2015. 688 с.
11. *Уидхопф Дж.Ф., Холл Р.* Измерение теплопередачи на затупленном конусе под углом атаки при переходном и турбулентном режиме течения // *Ракетная техника и космонавтика.* 1972. Т. 10. № 10. С. 71.
12. *Widhopf G.F.* Laminar, Transitional, and Turbulent Heat Transfer Measurement on a Yawed Blunt Conical Nose Tip. TR-0172 (S2816-60). Aerospace Corp. San Bernardino, California, 1972.
13. *Фэй Дж., Ридделл Ф.* Теоретический анализ теплообмена в лобовой точке, омываемой диссоциированным воздухом. В кн.: Проблемы движения головной части ракет дальнего действия. М.: Изд-во иностр. лит., 1959. С. 217.
14. *Anderson A.D.* Surface Roughness Effect. Boundary Layer Transition Data Correlation and Analysis // *Passive Nose Tip Technology (PANT) Program.* 1974. Part III. SAMSO TR-74-86.
15. *Эккерт Е.* Инженерные методы расчета ламинарного и турбулентного пограничного слоя при обтекании поверхностей с постоянным давлением и температурой потоком газа большой скорости // *Вопросы ракетной техники.* 1957. № 4. С. 3.

УДК 532.329;532.2.532

ОБ ИНИЦИИРОВАНИИ ПУЗЫРЬКОВОЙ ДЕТОНАЦИИ ВОЛНАМИ МАЛОЙ АМПЛИТУДЫ

© 2022 г. И. К. Гималтдинов¹, С. А. Лепихин^{2, 3, 4, *}¹Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, Россия²Сургутский государственный педагогический университет, Сургут, Россия³Тюменский индустриальный университет, Тюмень, Россия⁴Сургутский государственный университет, Сургут, Россия

*E-mail: sg81@bk.ru

Поступила в редакцию 26.01.2021 г.

После доработки 10.05.2021 г.

Принята к публикации 19.05.2021 г.

С помощью численного моделирования исследуется возможность инициирования детонационных волн в пузырьковых жидкостях с воспламеняющейся газовой фазой волнами давления малой амплитуды. Рассмотрены случаи предварительного снижения начального давления на границе среды перед воздействием импульса сжатия и воздействия на границу жидкости двумя последовательными волнами давления, каждая из которых по отдельности не способна инициировать детонационную волну. В первом случае проанализировано влияние параметров предварительной волны разрежения (степени снижения давления, длительности фазы разрежения), а также начальной концентрации пузырьков на минимальную амплитуду импульса сжатия, способного инициировать пузырьковую детонацию в среде. Во втором случае показана возможность инициирования детонационных волн не на границе, а внутри пузырьковой системы. Выявлено, что в зависимости от начального газосодержания среды и амплитуды воздействующих волн распространение детонационной волны от очага воспламенения может происходить как в обоих направлениях (первоначальном и обратном направлении движения инициирующей волны), так и только в первоначальном направлении.

DOI: 10.31857/S0040364422020107

ВВЕДЕНИЕ

Пузырьковая детонация — явление возникновения и распространения детонационных волн (ДВ) в жидкости, содержащей пузырьки воспламеняющегося газа [1, 2]. Она обладает общими признаками детонационного процесса, но имеет индивидуальные особенности, выражающиеся в механизме распространения, структуре и свойствах ДВ [3]. В общем, детонация — универсальное явление, представляющее собой самоподдерживающийся процесс, который может протекать во всех химически активных средах. Инициализация и распространение детонационных волн в таких средах обусловлены высвобождением ДВ химической энергии среды, которая компенсирует энергетические затраты волны, связанные с потерями энергии в диссипативной пузырьковой среде. В большинстве работ, посвященных пузырьковой детонации, изучаются параметры, свойства и структура ДВ в зависимости от физико-химических свойств и начальных параметров пузырьковых газожидкостных сред [4–13]. Распространение ДВ в многокомпонентных пузырьковых жидкостях и в средах с неоднородным объемным распределением газовой фазы и с возможным пе-

реходом в область “чистой” жидкости рассмотрены в [14–18]. Взаимодействию ДВ друг с другом и с волнами малой амплитуды посвящены работы [9, 19]. В [9], в частности, отмечена возможность инициирования детонации в пузырьковой жидкости только волнами разрежения при их столкновении.

Возбуждение ДВ в экспериментах, как правило, производится путем воздействия на поверхность пузырьковой жидкости импульсом повышенного давления (подрывом горючей газовой смеси в камере высокого давления ударной трубы) [1–5] или “микровзрывом” проволоочки, находящейся в пузырьковой среде [6, 7]. Из экспериментов известно, что критическая амплитуда воздействия на пузырьковую среду, способная инициировать детонацию на ее границе, находится в диапазоне 15–20 атм. В теоретических работах [18, 20, 21] показана возможность инициирования детонации волнами малой амплитуды “изнутри” пузырьковой среды, например, при отражении волн давления от жестких стенок и границ разделов сред с различными физическими свойствами, а также при распространении волн в сужающихся каналах, в которых из-за формы канала происхо-

дит возрастание амплитуды волны до критических значений, вызывающих детонацию.

В данной работе рассматриваются другие способы инициирования ДВ в пузырьковой жидкости, заключающиеся в предварительном снижении начального давления на границе среды и в воздействии на границу этой жидкости серией из двух последовательных волн постоянного давления, каждая из которых не способна вызвать детонацию непосредственно на границе жидкости.

ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассматривается газожидкостная система, содержащая равномерно распределенные по объему жидкости одинаковые по размеру пузырьки с горючим газом (например, смесь ацетилена с кислородом). В предположении что при распространении волновых возмущений в среде пузырьки газа не дробятся и не слипаются, для этой системы записываются уравнения волнового движения, являющиеся законами сохранения масс и концентрации пузырьков, а также уравнение сохранения импульсов с учетом относительного движения фаз [22]:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_i}{dt} + \rho_i \frac{\partial v_l}{\partial x} &= 0 \quad (i = l, g), \quad \rho_i = \rho_i^0 \alpha_i; \\ \frac{dn}{dt} + n \frac{\partial v_l}{\partial x} &= 0, \quad \rho_l^0 \frac{dv_l}{dt} + \frac{\partial p_l}{\partial x} = 0, \\ 3 \frac{dv_l}{dt} - \frac{dv_g}{dt} + \frac{3}{a} w v_{lg} + \frac{3f}{2\pi a^3 \rho_l^0} &= 0, \\ v_{lg} = v_l - v_g, \quad \alpha_l + \alpha_g &= 1, \quad \alpha_g = \frac{4}{3} \pi a^3 n, \end{aligned}$$

где ρ_i^0 – истинная плотность; v_i – скорость; α_i – объемное содержание i -й фазы ($i = l$ – жидкой, $i = g$ – газообразной); p_l – давление несущей жидкости; a, n – радиус и концентрация пузырьков; w – радиальная скорость пузырьков; v_{lg} – скорость относительного движения фаз.

Сила вязкого трения задана через относительную скорость фаз:

$$f = \frac{1}{2} C_D \pi a^3 v_{lg} |v_{lg}|,$$

где C_D – коэффициент сопротивления, для которого, согласно [23], принято

$$\begin{aligned} C_D &= \frac{48}{\text{Re}}, \quad 0 \leq \text{Re} < 180, \\ C_D &= \frac{\text{Re}^{4/3}}{10^{3.6}}, \quad \text{Re} > 180, \end{aligned} \quad \text{Re} = \frac{2a |v_{lg}|}{v_l}$$

Здесь Re – критерий Рейнольдса, v_l – кинематическая вязкость жидкости.

Скорость радиального движения пузырьков, согласно приведенному в [24] уточнению, имеет

вид $w = w_R + w_A$, где первое слагаемое w_R описывается уравнением Рэлея–Ламба

$$a \frac{dw_R}{dt} + \frac{3}{2} w_R^2 - \frac{v_{lg}^2}{4} + 4v_l \frac{w_R}{a} = \frac{p_g - p_l}{\rho_l^0},$$

а второе w_A следует из решения задачи о сферической разгрузке на сфере радиуса a в несущей жидкости в акустическом приближении

$$w_A = \frac{p_g - p_l}{\rho_l^0 C_l \alpha_g^{1/3}},$$

где C_l – скорость звука в “чистой” жидкости.

Для давления в газовой фазе уравнение записывается в виде [22]

$$\frac{dp_g}{dt} = -\frac{3\gamma p_g}{a} w - \frac{3(\gamma - 1)}{a} q, \quad w = \frac{da}{dt}.$$

Здесь γ – коэффициент Пуассона для газа, q – межфазный тепловой поток (от газа к жидкости) через единицу площади контактной поверхности.

Жидкость принимается акустически сжимаемой, газ – калорически совершенным:

$$p_l = p_0 + C_l^2 (\rho_l^0 - \rho_l), \quad p_g = \rho_g^0 B T_g,$$

где B – газовая постоянная. Дополнительным нижним индексом 0 снабжаются параметры, характеризующие начальное невозмущенное состояние среды.

Согласно [23], интенсивность межфазного теплообмена задается в виде

$$\begin{aligned} q &= \text{Nu}_l \lambda_l \frac{T_g - T_0}{2a}, \quad \frac{T_g}{T_0} = \frac{p_g}{p_0} \left(\frac{a}{a_0} \right)^3, \\ \text{Nu}_l &= 0.65 \sqrt{\text{Pe}_l}, \quad \text{Pe}_l = \frac{2a |v_{lg}|}{k_l}, \quad k_l = \frac{\lambda_l}{\rho_l^0 c_l}, \end{aligned}$$

где $T_0 = \text{const}$ – температура несущей жидкости; Nu_l и Pe_l – критерии Нуссельта и Пекле для фаз; λ_l, c_l и k_l – теплопроводность, теплоемкость и коэффициент температуропроводности фаз ($i = l, g$).

В качестве газовой фазы принята ацетиленокислородная стехиометрическая смесь $\text{C}_2\text{H}_2 + 2.5\text{O}_2$, а в качестве жидкости – смесь глицерина с водой с объемной концентрацией глицерина 0.5. Процесс воспламенения и сгорания газа внутри пузырьков считается мгновенным. Воспламенение происходит по достижении некоторой критической температуры T^* и сопровождается повышением температуры газа на величину ΔT , которая определяется исходя из теплотворной способности газа [25]. Данная схема воспламенения обоснована тем, что период протекания химических реакций горения газа значительно меньше характерного времени пульсации пузырьков.

Методика численного расчета представлена в [11]. В ней реализован метод сквозного счета, поз-

воляющий проводить численные расчеты без выделения границ раздела, т.е. без решения задачи о падении волны детонации на границу раздела сред.

ИНИЦИИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИОННЫХ ВОЛН ПРИ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОМ СНИЖЕНИИ ДАВЛЕНИЯ НА ГРАНИЦЕ ПУЗЫРЬКОВОЙ ЖИДКОСТИ

Рассмотрена ситуация, когда на границу газожидкостной среды вначале воздействует импульс, вызывающий растягивающее напряжение, а потом сразу импульс сжатия. Для параметров жидкости приняты значения: $\rho_l^0 = 1130 \text{ кг/м}^3$, $\nu_l = 6 \times 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$, $c_l = 3.3 \text{ кДж/(кг К)}$, $\lambda_l = 0.42 \text{ Вт/(м К)}$, $C_l = 1700 \text{ м/с}$, $T_0 = 293 \text{ К}$; для параметров газовой фазы: $a_0 = 1.25 \text{ мм}$, $\rho_g^0 = 1.26 \text{ кг/м}^3$, $\lambda_g = 2.49 \times 10^{-2} \text{ Вт/(м К)}$, $\gamma = 1.35$, $c_g = 1.14 \text{ кДж/(кг К)}$, $T_* = 1000 \text{ К}$, $\Delta T = 3200 \text{ К}$.

Граничное условие, определяющее внешнее воздействие на границу жидкости при $x = 0$, имеет вид

$$p_l = \begin{cases} p_0 - \Delta p_{01}, & t > t_1, \\ p_0 + \Delta p_{02}, & t_1 < t < t_2, \\ p_0, & t > t_2. \end{cases}$$

На рис. 1 показан профиль воздействующего сигнала для случая, когда на границе в течение $\Delta t_1 = 100 \text{ мкс}$ поддерживается разрежение пузырьковой системы ($\Delta p_{01} = 0.05 \text{ МПа}$), после чего происходит мгновенное увеличение амплитуды импульса давления до $\Delta p_{02} = 0.7 \text{ МПа}$. Фаза сжатия длится $\Delta t_2 = 50 \text{ мкс}$.

На рис. 2 представлены эпюры давления в жидкости, температуры газовой фазы и радиусов пузырьков, иллюстрирующие инициирование детонационной волны от сигнала, профиль которого изображен на рис. 1.

Проникновение в глубь жидкости зоны пониженного давления происходит с конечной скоростью, не превышающей скорость звука в среде. При этом в течение всей фазы разрежения происходит постепенное снижение давления во всех точках среды, до которых доходит волна разрежения. В момент времени $t = 100 \text{ мкс}$ профиль давления в разреженной области имеет вид выпуклой вверх плавной кривой, которая по мере распространения волны разрежения удлиняется, а крутизна ее уменьшается. Постоянное снижение давления в среде в течение всей фазы разрежения приводит к первичному росту пузырьков (без перехода их в пульсационное движение), сопровождаемому уменьшением температуры в них.

Далее на границу жидкости действует импульс сжатия, под действием которого пузырьки газа коллапсируют. Из-за первоначального разрежения пузырьковой жидкости поджатие пузырьков на границе среды происходит до размеров, при

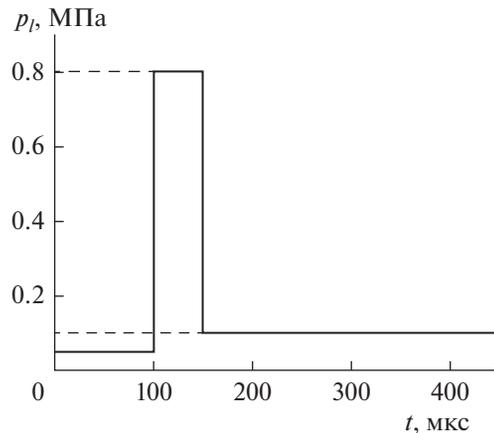


Рис. 1. Профиль импульса давления, действующего на границу жидкости.

которых в них достигается температура воспламенения горючего газа ($t = 150 \text{ мкс}$). В результате на границе жидкости ($x = 0$) инициируется детонация и в глубь жидкости распространяется детонационная волна (моменты времени 180 и 250 мкс). Принятые в работе значения параметров газожидкостной среды, в частности объемного газосодержания, находятся в пределах установленной в [4] зоны детонации пузырьковой жидкости, в которой воспламенение газовых пузырьков в обязательном порядке инициирует детонационный процесс. Поэтому воспламенение газовой фазы в рассматриваемой модели считается необходимым и достаточным условием инициирования детонационной волны. При этом формирование детонационного солитона, т.е. достижение основными параметрами ДВ (амплитудой, скоростью, протяженностью солитона) значений, соответствующих наблюдаемым в экспериментах [1–5], происходит в процессе эволюции ДВ на расстоянии нескольких сантиметров. В частности, в момент времени 180 мкс детонационная волна еще не сформировалась, хотя взрыв горючей смеси уже произошел, а на 250 мкс детонационная волна выходит на стационарный режим, в котором параметры ДВ уже хорошо согласуются с результатами экспериментов (рис. 2).

На рис. 3 представлена ситуация, когда на границу пузырьковой жидкости действует только импульс сжатия с такими же параметрами (амплитуда $\Delta p_0 = 0.7 \text{ МПа}$, длительность $\Delta t = 50 \text{ мкс}$), как на рис. 2. В этом случае характеристики импульса сжатия такие, что он не способен инициировать детонацию, и детонационная волна в среде не возникает, т.е. в данном случае волна в пузырьковой жидкости затухает.

Таким образом, предварительное разрежение на границе перед действием импульса сжатия является фактором снижения критической амплитуды

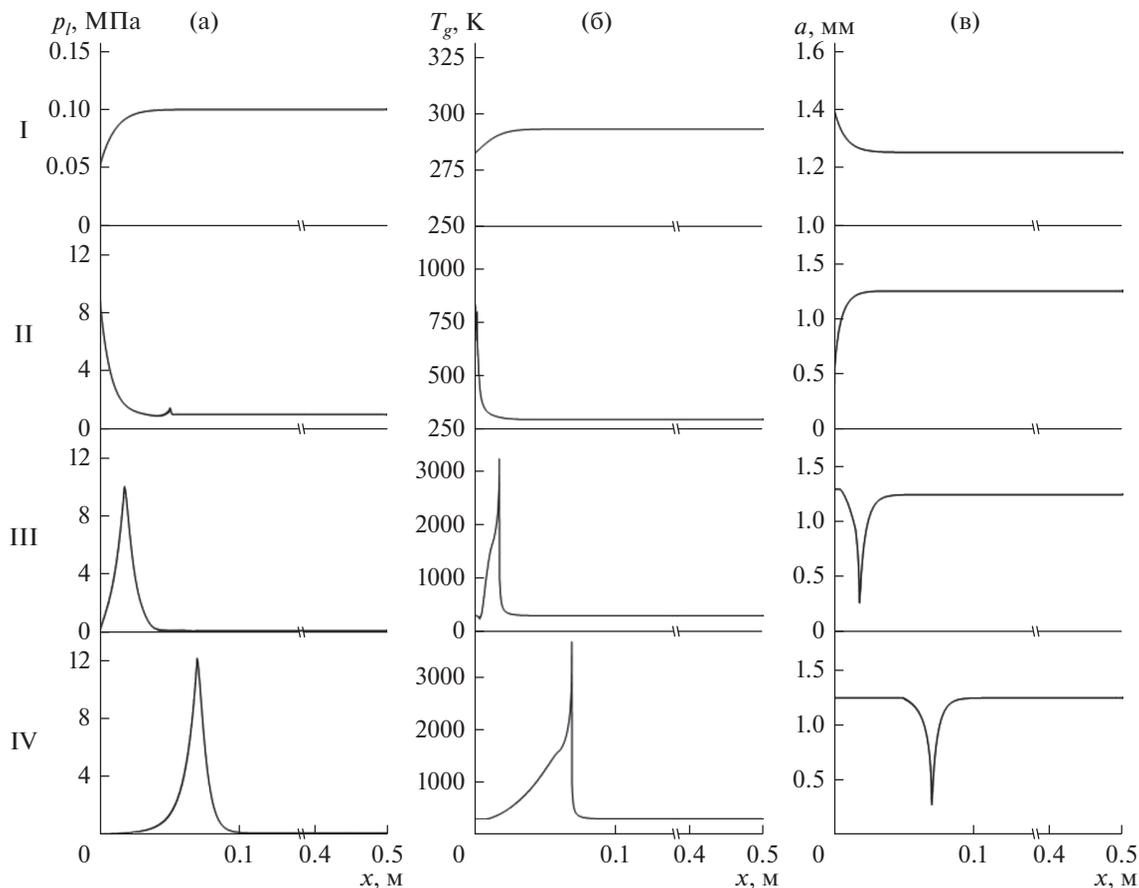


Рис. 2. Иницирование детонационной волны волной давления малой амплитуды после предварительного разрежения пузырьковой жидкости при параметрах пузырьковой системы: $p_0 = 0.1$ МПа, $\alpha_{g0} = 0.01$: (а) – давление в жидкости, (б) – температура газовой фазы, (в) – радиусы пузырьков; I – $t = 100$ мкс, II – 150, III – 180, IV – 250.

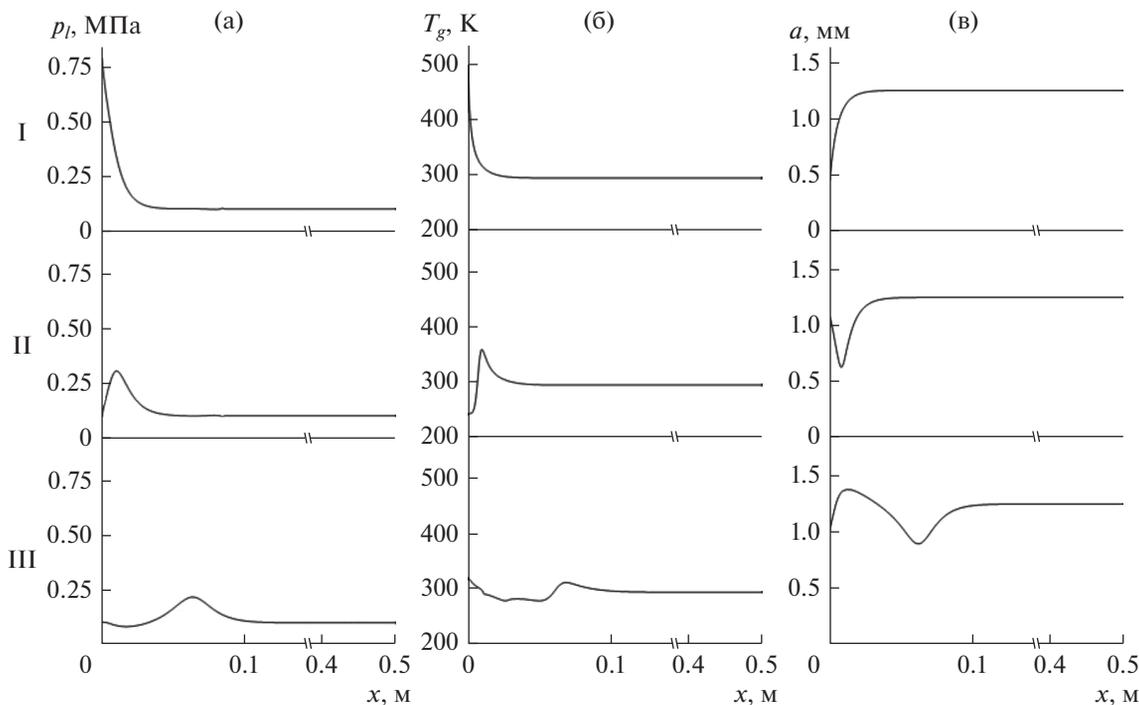


Рис. 3. Эпюры давления в жидкости (а), температуры газовой фазы (б) и радиуса пузырьков (в) при воздействии на пузырьковую жидкость только импульсом сжатия при параметрах рис. 2: I – $t = 50$ мкс, II – 100, III – 500.

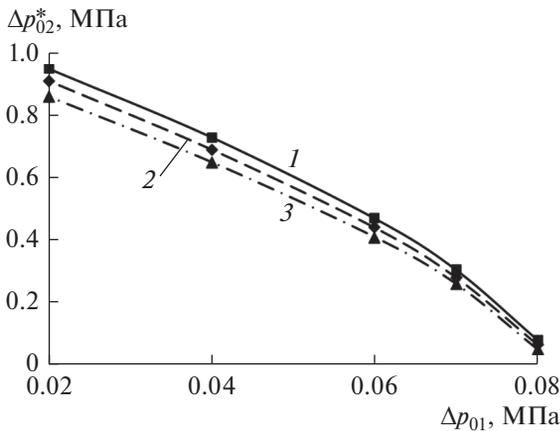


Рис. 4. Зависимость амплитуды фазы сжатия, способной инициировать пузырьковую детонацию, от степени предварительного снижения давления на поверхности жидкости при $p_0 = 0.1$ МПа: 1 – $\alpha_{g0} = 0.01$, 2 – 0.02, 3 – 0.04.

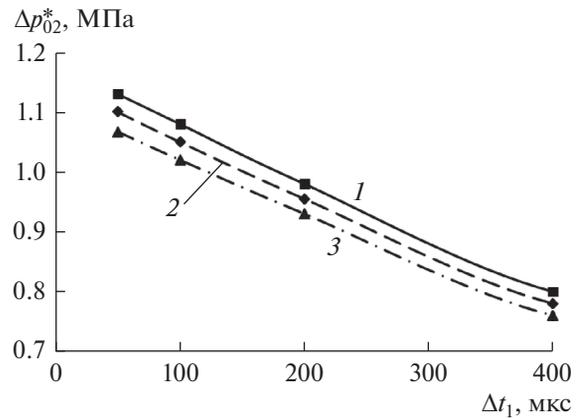


Рис. 5. Зависимость критической амплитуды Δp_{02}^* от времени фазы предварительного разрежения Δt_1 ; параметры пузырьковой системы – как на рис. 2; 1–3 – см. рис. 4.

импульса сжатия способного инициировать пузырьковую детонацию. Снижение амплитуды инициирующего детонацию импульса сжатия связано с тем, что в фазе разрежения происходит увеличение радиусов пузырьков. Как следует из [27], если предварительно расширить пузырек, увеличив его размеры, то на стадии сжатия он сжимается сильнее. Эти эффекты наблюдаются на рис. 2 и 3.

На рис. 4 показана зависимость критической амплитуды фазы сжатия Δp_{02}^* от амплитуды фазы разрежения Δp_{01} при различных значениях начальной объемной концентрации пузырьков α_{g0} . Длительность фазы разрежения составляет $\Delta t_1 = 100$ мкс, фазы сжатия $\Delta t_2 = 50$ мкс. С увеличением степени предварительного разрежения жидкости критическая амплитуда фазы сжатия уменьшается практически линейным образом. Это обусловлено ростом газовых пузырьков в период фазы разрежения, вследствие чего для поджатия пузырьков до критических размеров, при которых в газовой фазе достигается температура воспламенения, требуется меньшая амплитуда (энергия) фазы сжатия. При существенном снижении давления в пузырьковой жидкости ($\Delta p_{01} \geq 0.8 p_0$) инициализация детонации возможна последующими импульсами сжатия малой амплитуды, соизмеримой с начальным давлением системы ($\Delta p_{02}^* \cong p_0$).

Линии на рис. 4 расположены близко друг к другу, что свидетельствует о слабой зависимости критической амплитуды фазы сжатия Δp_{02}^* от начального объемного газосодержания пузырьковой жидкости.

Также исследовано влияние на критическую амплитуду фазы сжатия, которая способна инициировать детонационную волну в среде, време-

ни Δt_{01} , в течение которого на границе жидкости выдерживается пониженное давление.

На рис. 5 показана зависимость $\Delta p_{02}^*(\Delta t_1)$ при амплитуде фазы разрежения $\Delta p_{01} = 0.05$ МПа и времени действия фазы сжатия $\Delta t_2 = 50$ мкс. Видно, что с увеличением длительности фазы разрежения Δt_{01} с 50 до 400 мкс критическая амплитуда фазы сжатия линейно уменьшается. Однако, как показывает расчет, снижение критической амплитуды Δp_{02}^* с увеличением длительности фазы разрежения наблюдается до некоторого критического значения Δt_1^* (в условиях численного эксперимента $\Delta t_1^* \approx 600$ мкс), где Δp_{02}^* достигает своего минимального значения.

Таким образом, критическая (т.е. минимальная) амплитуда фазы сжатия Δp_{02}^* , способная инициировать ДВ в пузырьковой жидкости, значительно зависит от времени существования Δt_1 и амплитуды Δp_{01} фазы предварительного разрежения и практически не зависит от начального объемного газосодержания.

Также проанализировано влияние на критическую амплитуду Δp_{02}^* длительности фазы сжатия Δt_2 . Как видно из рис. 6, с увеличением длительности фазы сжатия с 20 до 100 мкс амплитуда Δp_{02}^* , вызывающая детонацию в пузырьковой жидкости, нелинейно уменьшается, достигая своего минимального значения, и после этого не изменяется.

Так как Δp_{02}^* практически не зависит от начальной концентрации газовой фазы, то на рис. 6 представлена только одна кривая при $\alpha_{g0} = 0.01$.

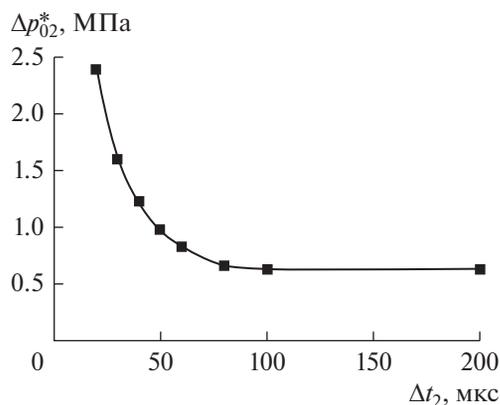


Рис. 6. Зависимость критической амплитуды Δp_{02}^* от времени фазы сжатия при $p_0 = 0.1$ МПа, $\alpha_{g0} = 0.01$; параметры сигнала: “амплитуда” фазы разрежения $\Delta p_{01} = 0.5$ МПа, время фазы разрежения $\Delta t_2 = 200$ мкс.

ИНИЦИИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИОННЫХ ВОЛН ДВУМЯ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫМИ ВОЛНАМИ ДАВЛЕНИЯ

Рассматривается ситуация, когда на границу пузырьковой системы ($x = 0$) последовательно через некоторый временной интервал действуют две волны давления типа “ступенька”. При этом амплитуда каждого импульса сжатия не способна инициировать пузырьковую детонацию на границе среды. Граничное условие для такого случая имеет вид

$$p_l = \begin{cases} p_0 + \Delta p_{01}, & 0 < t < t_*, \\ p_0 + \Delta p_{02}, & t > t_*. \end{cases}$$

На рис. 7 показана эволюция таких волн при $\Delta p_{01} = 0.7$ МПа, $\Delta p_{02} = 2.7$ МПа, $t_* = 1.5$ мс. Начальные параметры пузырьковой жидкости: $p_0 = 0.1$ МПа, $\alpha_{g0} = 0.04$. Остальные параметры среды такие же, как на рис. 2. В момент времени $t = 1.0$ мс в жидкости распространяется только первая вол-

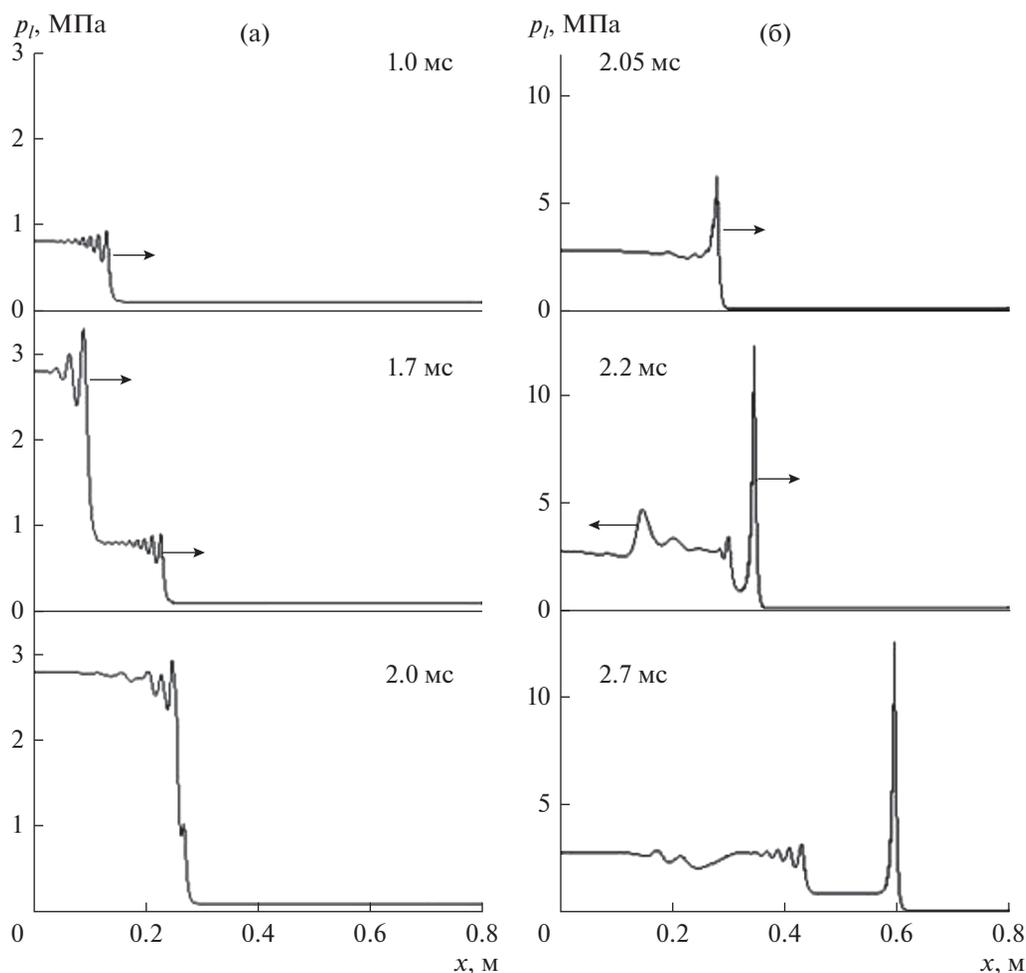


Рис. 7. Эволюция волн в жидкости и инициирование детонационной волны; на графиках указаны моменты времени; амплитуды волн: $\Delta p_{01} = 0.7$ МПа, $\Delta p_{02} = 2.7$ МПа, $\alpha_{g0} = 0.04$.

на давления. Ее амплитуда такова, что детонация в системе не возникает, а сама волна распространяется как волна давления в “неактивной” пузырьковой жидкости, например в водовоздушной смеси. Эта волна имеет осцилляционную структуру, связанную с радиальной инерцией пузырьковой жидкости. При $t = 1.5$ мс вслед за первой волной начинает распространяться вторая волна давления. Амплитуда второй волны (относительно начального давления среды) такова, что при отсутствии первой волны вторая волна могла бы инициировать детонационную волну в пузырьковой среде. Так как вторая волна распространяется в области поджатой пузырьковой жидкости с более высоким начальным давлением, то ее амплитуда оказывается недостаточной для инициирования детонации в пузырьковой жидкости ($t = 1.7$ мс). Обладая более высокой амплитудой и, следовательно, скоростью, она достаточно быстро догоняет первую волну. При этом значения скоростей как первой, так и второй волны хорошо согласуются с величинами, приведенными для подобных ситуаций в [9, 20]. В момент времени 2.0 мс вторая волна практически достигает фронта первой волны. В следующий момент вторая волна опережает первую и распространяется в области пузырьковой жидкости с первоначальным давлением. Так как при этом амплитуда волны достаточна для инициирования детонации в среде (1.5–2.0 МПа), то в сжимающихся под воздействием этой волны пузырьках достигается температура воспламенения газа – в жидкости возникает очаг детонации, волна давления инициирует детонационную волну ($t = 2.05$ мс), которая продолжает эволюционировать в невозмущенной среде. В обратном направлении от очага распространяется волна давления с амплитудой, в 1.5–2 раза превышающей амплитуду Δp_{02} ($t = 2.2$ мс).

На рис. 8 показано инициирование детонационной волны при начальном газосодержании в пузырьковой жидкости $\alpha_{g0} = 0.06$ и амплитуде второй волны $\Delta p_{02} = 1.7$ МПа. Остальные параметры газожидкостной системы и волн давления такие же, как на рис. 7.

На начальном этапе распространение волн происходит аналогично случаю, представленному на рис. 7. При этом волны обладают меньшими скоростями из-за большей концентрации газовой фазы [9, 22]. Скорость у первой волны, распространяющейся в невозмущенной среде с первоначальным давлением p_0 , меньше, чем у второй волны, распространяющейся по поджатой пузырьковой жидкости, аналогично ситуации на рис. 7. Как следствие, вторая волна догоняет первую к моменту $t = 2.15$ мс. После проникновения второй волны в область жидкости с исходным первоначальным состоянием и восстановления давления за фронтом волны в среде возникает очаг детона-

ции. При этом излучаемая в очаге энергия оказывается достаточной для инициирования ДВ и в поджатой части пузырьковой жидкости. Распространение ДВ от очага воспламенения происходит в обоих направлениях ($t = 3.48$ мс). Причем амплитуда детонационной волны, эволюционирующей в поджатой части жидкости, может в несколько раз превосходить амплитуду ДВ в области среды с первоначальным состоянием ($t = 3.55$ и 3.7 мс). В реальности более высокая амплитуда “обратной” ДВ может быть обусловлена как большим давлением в возмущенной части среды, так и уменьшением размеров пузырьков из-за их дробления на фронте инициирующей волны давления. В свою очередь дробление пузырьков, происходящее на фронте падающей волны, может быть фактором, ограничивающим возможность развития “обратной детонации” в пузырьковой жидкости. Представленный случай “двусторонней детонации” является теоретическим решением, допускаемым предложенной в работе математической моделью. Данный случай может представлять интерес для анализа возможных режимов протекания детонации в пузырьковых системах.

Как показывают расчеты, возникновение “двусторонней” детонации в пузырьковой жидкости возможно только при высокой концентрации газовой фазы ($\alpha_{g0} > 0.05$), определяющей высокую сжимаемость пузырьковой жидкости. При этом достижение условий детонации зависит от амплитуды исходных волн и начального состояния системы. В дальнейшем гипотеза о “двусторонней детонации” может быть скорректирована проведением соответствующих экспериментов.

На рис. 9 приведена картина, иллюстрирующая возможные режимы детонации в пузырьковой жидкости в случае инициирования двумя последовательными волнами давления типа “ступенька” при разных значениях начальной концентрации газовой фазы. По вертикальной оси отложена суммарная амплитуда волн $\Delta P_0 = \Delta p_{01} + \Delta p_{02}$, где $\Delta p_{01} = \text{const}$. Проанализирован случай $\Delta p_{01} = 0.7$ МПа. Параметры газожидкостной системы такие же, как на рис. 7.

На рис. 9 показаны три области, каждая из которых характеризуется определенным типом развития пузырьковой детонации или ее отсутствием. В нижней области, обозначенной цифрой 0, ДВ не возникает. Максимальная суммарная амплитуда волн здесь ниже критической амплитуды детонации ($\Delta P_0 < \Delta P_0^*$), вследствие чего температура воспламенения в поджатых волной пузырьках не достигается. Небольшая область справа, расположенная между штриховыми линиями, при $\alpha_{g0} \geq 0.05$ и обозначенная цифрой 2, соответствует условиям возбуждения “двусторонней” детонационной волны в системе. В данном случае амплитуда давления в очаге взрыва является доста-

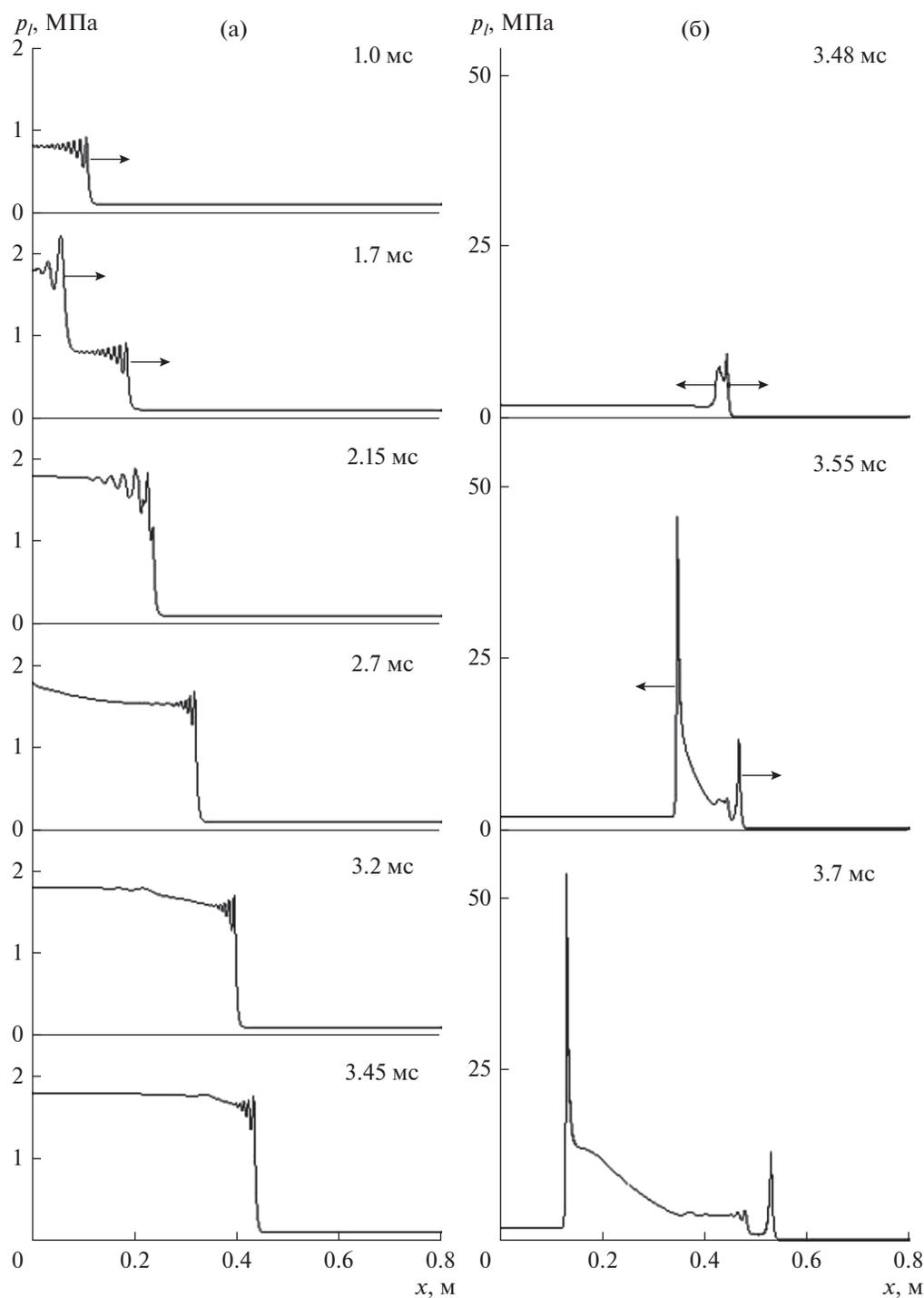


Рис. 8. Эволюция волн в жидкости и инициирование детонационной волны; на графиках указаны моменты времени; амплитуды волн: $\Delta p_{01} = 0.7$ МПа, $\Delta p_{02} = 1.7$ МПа, $\alpha_{g0} = 0.06$.

точной для инициирования детонационного процесса не только в области пузырьковой жидкости с первоначальным давлением, но и в поджатой части среды с высоким давлением. Область 2 ограничена снизу зоной отсутствия детонации в пузырьковой жидкости, а сверху областью 1, которая определяет условия возникновения “одно-

сторонней” ДВ, характеризующейся распространением детонационного процесса только в первоначальном направлении в область неподжатой пузырьковой жидкости. Существование зоны с “двусторонней” волной детонации определяется высокой сжимаемостью пузырьковой жидкости при больших значениях начальной концен-

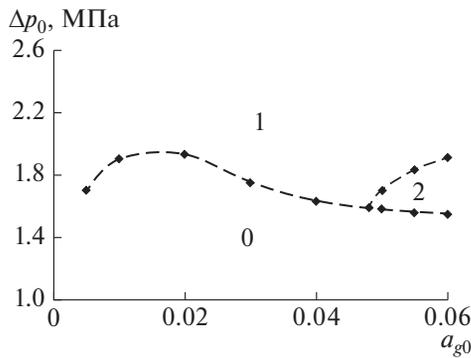


Рис. 9. Режимы детонации в пузырьковой жидкости при воздействии последовательными волнами давления при $p_0 = 0.1$ МПа, амплитуде первой волны $\Delta p_{01} = 0.7$ МПа.

трации газовой фазы. Возникает зона при суммарной амплитуде волн равной или незначительно превосходящей критическую амплитуду детонации для области жидкости в первоначальном состоянии ($\Delta P_0 \geq \Delta P_0^*$). Если суммарная амплитуда волн при проникновении второй волны во фронт первой волны в область невозмущенной жидкости оказывается заметно выше критической амплитуды инициирования детонации в этой части жидкости ($\Delta P_0 \geq \Delta P_0^*$), то ДВ в обратном направлении не возникает из-за сильной поджатости среды изначальными волнами, т.е. ДВ эволюционирует только в первоначальном направлении.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе на основе численного эксперимента исследована возможность возбуждения детонационных волн в химически активной пузырьковой жидкости волнами малой амплитуды, которые при обычных условиях не способны инициировать пузырьковую детонацию.

Показано, что одним из таких способов может быть предварительное снижение давления на границе жидкости с последующим воздействием на среду волной сжатия. В данном случае амплитуда воздействующего импульса давления, способного инициировать детонационную волну в пузырьковой системе, может быть в несколько раз меньше критической амплитуды, обеспечивающей пузырьковую детонацию в “обычных” условиях.

Выявлено, что минимальная амплитуда волны сжатия, вызывающая детонационную волну в предварительно разреженной жидкости, существенным образом зависит от параметров воздействующего сигнала: степени снижения давления и длительности фаз разрежения и сжатия. В частности, показано, что при предварительном снижении начального давления на границе пузырьковой жидко-

сти импульсом разрежения, амплитуда которого составляет 0.8 от начального давления, инициализация пузырьковой детонации в системе возможна волной сжатия малой амплитуды, которая может не превышать начального давления среды.

Другим способом возбуждения детонации в пузырьковой жидкости с воспламеняющимся газом является воздействие на ее границу двумя последовательными волнами сжатия, каждая из которых не способна вызвать детонацию на поверхности жидкости. Если вторая волна обладает большей амплитудой, чем первая, то, распространяясь с большей скоростью, она догоняет первую волну и, проникая через ее фронт, может инициировать детонационную волну в области невозмущенной жидкости. В таком случае детонационный процесс развивается не от поверхности, а изнутри пузырьковой системы.

Выявлено, что в зависимости от начального объемного газосодержания пузырьковой жидкости и амплитуды исходных волн эволюция детонационной волны в системе может происходить в обе стороны от очага воспламенения или только в направлении первоначального распространения волн. В частном случае построена картина, иллюстрирующая условия, при которых формируется тот или иной вид детонационной волны.

Работа выполнена в рамках госзадания в сфере научной деятельности № FEUR-2020-0004 (наименование проекта “Решение актуальных задач и исследование процессов в нефтехимических производствах, сопровождающихся течениями многофазных сред”).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сычев А.И. Волна детонации в системе жидкость—пузырьки газа // ФГВ. 1985. Т. 21. № 3. С. 103.
2. Сычев А.И., Пинаев А.В. Самоподдерживающаяся детонация в жидкостях с пузырьками взрывчатого газа // ПМТФ. 1986. № 1. С. 133.
3. Пинаев А.В., Сычев А.И. Структура и свойства детонации в системах жидкость—пузырьки газа // ФГВ. 1986. Т. 22. № 3. С. 109.
4. Пинаев А.В., Сычев А.И. Влияние физико-химических свойств газа и жидкости на параметры и условия возникновения детонационных волн в системах жидкость—пузырьки газа // ФГВ. 1987. Т. 23. № 6. С. 76.
5. Сычев А.И. Влияние размера пузырьков на характеристики волн детонации // ФГВ. 1995. Т. 31. № 5. С. 83.
6. Кочетков И.И., Пинаев А.В. Ударные и детонационные волны в жидкости и пузырьковых средах при взрыве проволоки // ФГВ. 2012. Т. 48. № 2. С. 124.
7. Кочетков И.И., Пинаев А.В. Ударно-волновые процессы при взрыве проводников в воде и пузырьковых средах // ФГВ. 2015. Т. 51. № 6. С. 109.
8. Ждан С.А. О стационарной детонации в пузырьковой среде // ФГВ. 2002. Т. 38. № 3. С. 85.

9. *Кедринский В.К.* Гидродинамика взрыва: эксперимент и модели. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000. 435 с.
10. *Сычев А.И.* Влияние начального давления пузырьковых сред на характеристики волн детонации // *ЖТФ*. 2015. Т. 85. № 4. С. 126.
11. *Гималтдинов И.К., Лепихин С.А.* Особенности влияния скольжения фаз и начального давления на динамику детонационных волн в пузырьковой жидкости // *ТВТ*. 2019. Т. 57. № 3. С. 459.
12. *Сычев А.И.* Управляемая пузырьковая детонация // *ТВТ*. 2019. Т. 57. № 2. С. 291.
13. *Tukhvatullina R.R., Frolov S.M.* Numerical Simulation of Shock and Detonation Waves in Bubbly Liquids // *Shock Waves*. 2020. V. 30. Iss. 3. P. 263.
14. *Сычев А.И.* Ударные волны в многокомпонентных средах “жидкость–пузырьки газа–капли жидкости” // *ТВТ*. 2011. Т. 49. № 3. С. 409.
15. *Ляпидевский В.Ю.* Структура детонационных волн в многокомпонентных пузырьковых средах // *ФГВ*. 1997. Т. 33. № 3. С. 104.
16. *Гималтдинов И.К., Кучер А.М.* Детонационные волны в многокомпонентной пузырьковой жидкости // *ТВТ*. 2014. Т. 52. № 3. С. 423.
17. *Гималтдинов И.К., Арсланбекова Р.Р., Левина Т.М.* Особенности динамики постдетонационных волн // *Теплофизика и аэромеханика*. 2016. Т. 23. № 3. С. 371.
18. *Гималтдинов И.К., Левина Т.М.* Особенности динамики детонационных волн в пузырьковой жидкости при прохождении границы “водоглицериновый раствор – масло” // *Изв. ТПУ. Инжиниринг ресурсов*. 2017. Т. 328. № 8. С. 55.
19. *Сычев А.И.* Столкновение детонационных волн в пузырьковых средах // *ЖТФ*. 2019. Т. 89. № 2. С. 179.
20. *Лепихин С.А., Галимзянов М.Н., Гималтдинов И.К.* Иницирование детонационных волн в каналах переменного сечения, заполненных жидкостью с пузырьками горючего газа // *ТВТ*. 2010. Т. 48. № 2. С. 234.
21. *Топольников А.С., Гималтдинов И.К.* Динамика детонационных волн в каналах переменного сечения, заполненных пузырьковой жидкостью // *Теплофизика и аэромеханика*. 2014. Т. 21. № 4. С. 509.
22. *Нигматулин Р.И.* Динамика многофазных сред. Т. 1. М.: Наука, 1987. 464 с.
23. *Шаганов В.Ш., Абдрашитов Д.В.* Структура волн детонации в пузырьковой жидкости // *ФГВ*. 1992. Т. 28. № 6. С. 89.
24. *Нигматулин Р.И., Шаганов В.Ш., Вахитова Н.К.* Проявление сжимаемости несущей фазы при распространении волн в пузырьковой среде // *ДАН СССР*. 1989. Т. 304. № 5. С. 1077.
25. *Шаганов В.Ш., Вахитова Н.К.* Волны в пузырьковой системе при наличии химических реакций в газовой фазе // *ФГВ*. 1989. Т. 25. № 6. С. 14.
26. *Самарский А.А., Попов Ю.П.* Разностные схемы газовой динамики. М.: Наука, 1973. 496 с.
27. *Аганин А.А., Ильгамов М.А.* Динамика газового пузырька при возбуждении импульсами сжатия и разрежения в жидкости // *Докл. РАН*. 2002. Т. 382. № 2. С. 176.

УДК 536.2.001.24

КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО ТИПА В НЕЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ОБЛАСТЯХ

© 2022 г. Э. М. Карташов*

*МИРЭА – Российский технологический университет
(Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова), Москва, Россия*

*E-mail: kartashov@mitht.ru

Поступила в редакцию 09.08.2021 г.

После доработки 05.09.2021 г.

Принята к публикации 28.09.2021 г.

Развита математическая теория построения интегральных соотношений нового вида в аналитических решениях краевых задач для уравнений параболического типа в областях с границами, перемещающимися во времени (нецилиндрические области). Для равномерного закона перемещения границы предложена модификация метода обобщенных тепловых потенциалов простого и двойного слоя, что приводит к функциональным соотношениям нового (простейшего) вида по сравнению с результатами, известными ранее, основанными на переходе и дальнейшем решении интегральных уравнений Вольтерра при нахождении неизвестной плотности потенциалов. Развитый метод основан на предварительном нахождении операционной (по Лапласу) форме плотности потенциала, что значительно сокращает громоздкости и вычислительные трудности, имеющие место при традиционном применении тепловых потенциалов для решений уравнений параболического типа в нецилиндрических областях. Рассмотрены многочисленные случаи для ограниченной и частично ограниченной областей, представляющие практический интерес для многих приложений. Развита теория метода функций Грина для нецилиндрических областей. Предложены интегральные соотношения для записи аналитических решений краевых задач для уравнений параболического типа через краевые функции в исходной постановке задачи и соответствующих функций Грина. Изучен случай корневой зависимости движущейся границы. Выявлен ряд специфических особенностей модельных представлений нестационарного теплопереноса в областях с движущимися границами.

DOI: 10.31857/S004036442204007X

ВВЕДЕНИЕ

Изучение тепловой реакции областей, границы которых перемещаются во времени, относятся к числу труднейших разделов аналитической теории теплопроводности твердых тел [1]. Для уравнения параболического типа такого рода краевые задачи являются предметом практически необозримого числа исследований. С годами их поток не уменьшается, охватывая все новые содержательные математические объекты и все большее число самых разнообразных приложений. Подобные задачи возникают в проблемах атомной энергетики и безопасности атомных реакторов; при изучении процесса горения в твердотопливных ракетных двигателях; при использовании электрических разрядов, в явлениях электрического взрыва проводников и других процессах, характеризующихся высокой температурой (плавящиеся электрические контакты, воздействие электрической дуги в контактах, эрозия электрических контактов); в ряде проблем экологии и медицины; при лазерном воздействии на твердые тела; при фазовых превращениях (задача Стефана и задача Веригина (в гидромеханике) с более сложными

граничными условиями, а также более общая краевая задача для уравнения параболического типа со свободной границей), в том числе при замораживании грунта и твердении бетона, при промерзании растворов и пористых тел; в процессах сублимации при замораживании, плавлении; в кинетической теории роста кристаллов; в ряде проблем термомеханики (при тепловом ударе, термическом разложении, тепловой защите космических аппаратов); в теории оптимизации и вычислительном эксперименте; в плазмодинамике и при плазменном покрытии; в ряде вопросов гидромеханики, фильтрации, абляции, прочности твердых тел, электродинамики, упругости и т.д. (ссылки в [1]).

С точки зрения математической физики краевые задачи для уравнения параболического типа в области с движущейся границей принципиально отличны от классических (для областей цилиндрического вида). Вследствие зависимости границы области от времени к этому классу задач в общем случае неприменимы методы разделения переменных и интегральных преобразований Фурье–Ханкеля–Лапласа [2], поскольку, оставаясь

в рамках классических методов математической физики, не удается согласовать решение уравнения теплопроводности с движением границы области теплопереноса. Развитие этой проблемы шло, по-видимому, следующим образом. С одной стороны, точные решения задач подобного типа удалось получить при помощи удачных догадок, искусственных приемов, причем для весьма ограниченного числа случаев движения границы (в начале линейного движения в области $x > l + vt$, $t > 0$, затем параболического – $x > \beta\sqrt{t}$, $t > 0$ [2]) и для частного вида граничных условий: постоянных и первого рода. С другой стороны, на этих задачах при весьма общей их постановке отрабатывались классические методы решения краевых задач для дифференциальных уравнений математической физики: методы тепловых потенциалов; контурного интегрирования; продолжений; функций Грина; вариационные; разложения искомой функции в ряд по обобщенным степеням; обобщения конечных интегральных преобразований на нецилиндрические области; функциональных преобразований Гринберга, а также методы, основанные на использовании интегральных, интегродифференциальных или обыкновенных дифференциальных уравнений: разностные, асимптотические и численные. Объясним был и тот факт, что для решения одного и того же класса задач применялись различные подходы. Так, решение одной и той же тепловой задачи можно искать в различных классах функций, определяемых аналитическим подходом при решении задачи. Эти функции должны быть таковыми, чтобы они, во-первых, достаточно легко находились и, во-вторых, обеспечивали сходимость процесса настолько хорошо, чтобы можно было сделать требуемые в задаче заключения о свойствах полученного решения. Представление аналитического решения задачи в эквивалентных функциональных формах (тождественных в смысле числа) имеет большую практическую ценность, так как позволяет варьировать решение в зависимости от постановки задачи: например, решение в форме ряда типа Фурье, удобной для больших времен (находится интегральным преобразованием Фурье), или в виде формулы суммирования Пуассона, более подходящей для малых времен (находится операционным методом). Для областей с движущимися границами это обстоятельство имеет особенно важное значение с учетом широкого применения задач такого класса, отмеченного выше. В то же время следует подчеркнуть, что, несмотря на хорошо развитую аналитическую теорию нестационарного теплопереноса и близких направлений (ссылки в [1]), достигнутые за последние два десятилетия успехи в нахождении точных аналитических решений задач для различных законов движения границы весьма незначительны. По-видимому, одной из

причин такого положения являются технические трудности вычислительного характера при нахождении точного аналитического решения задачи и ослабленное внимание к этой области аналитической теории переноса. В известном обзоре [3] академик Лыков А.В. коснулся проблемы распространения классических методов математической физики на области с границами, движущимися во времени, в частности, на применение наиболее употребительных методов функций Грина и тепловых потенциалов в нецилиндрических областях. В [3] отмечалась “сложность и громоздкость этих методов, хотя для областей с подвижными границами они, возможно, незаменимы”. Излагаемая ниже модифицированная теория тепловых потенциалов не связана с необходимостью решения интегральных уравнений в рамках общепринятого классического подхода при применении тепловых потенциалов обобщенного типа простого и двойного слоя в нецилиндрических областях [4]. При использовании развитой теории для нахождения соответствующих функций Грина получаются функциональные конструкции нового вида, весьма удобные для проведения числовых экспериментов.

ПОСТАНОВКА КРАЕВЫХ ЗАДАЧ

Пусть Ω_t – нецилиндрическая область в фазовом пространстве $(n + 1)$ измерений, сечение которой плоскостью-характеристикой $t = \text{const} \geq t_0 > 0$ есть выпуклая область $D_t (D_t \in R^n)$ изменения $M(x_1, x_2, \dots, x_n)$; S_t – кусочно-гладкая поверхность, зависящая от времени ($t \geq 0$) и ограничивающая область D_t ; \mathbf{n} – внешняя нормаль к S_t , вектор, непрерывный в точках S_t , так что $\Omega_t = \{M \in \bar{D}_t = D_t + S_t, t \geq 0\}$. Пусть $T(M, t)$ – температурная функция, удовлетворяющая условиям задачи

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a\Delta T(M, t) + f(M, t), \quad M \in D_t, \quad t > 0; \quad (1)$$

$$T(M, t)|_{t=0} = \Phi_0(M), \quad M \in \bar{D}_{t=0}; \quad (2)$$

$$\beta_1 \frac{\partial T(M, t)}{\partial n} + \beta_2 T(M, t) = \varphi(M, t), \quad (3)$$

$$M \in S_t, \quad t \geq 0.$$

Краевые функции в (1)–(3) принадлежат классу решений

$$f(M, t) \in C^0(\bar{\Omega}_t); \quad \Phi_0(M) \in C^1(\bar{\Omega}_t);$$

$$\varphi(M, t) \in C^0(S_t, t \geq 0); \quad \beta_1^2 + \beta_2^2 > 0.$$

Искомое решение:

$$T(M, t) \in C^2(\Omega_t) \cap C^0(\bar{\Omega}_t),$$

$$\text{grad}_M T(M, t) \in C^0(\bar{\Omega}_t).$$

В областях с движущимися границами, как и в случае цилиндрических областей, также можно говорить о первой ($\beta_1 = 0$), второй ($\beta_2 = 0$) или третьей ($\beta_i > 0, i = 1, 2$) краевых задачах. Однако указанная эквивалентность в записи граничных условий сохраняется не всегда. В частности, условие теплоизоляции движущейся границы $y(t)$ при $t > 0$, где $y(t)$ — непрерывно дифференцируемая функция с конечными производными любого порядка, имеет вид [2]

$$\left[\frac{\partial T(x, t)}{\partial x} + \frac{v(t)}{a} T(x, t) \right]_{x=y(t)} = 0, \quad t > 0, \quad (4)$$

и для скорости движения $v(t) = \frac{dy(t)}{dt} = 0$ ($y(t) = \text{const}$) выражение (4) совпадает с классической записью тепловой изоляции неподвижной границы, вытекающей из закона Фурье в скалярной форме [2]. Специфические особенности области с движущейся границей проявляются и в постановке краевых задач для соответствующих функций Грина. Здесь следует проявить особое внимание при нахождении функций Грина для второй и третьей краевых задач (см. ниже).

В отношении каждой из краевых функций (1)–(3) возникают вопросы корректности их постановки: существование решения, единственность решения, устойчивость решения. Эти вопросы рассматриваются в качественной теории уравнений параболического типа в областях с криволинейными границами [5]. Задачи, не удовлетворяющие перечисленным требованиям, называются некорректно поставленными. В 1962 г. А.Н. Тихонов разработал новые подходы к решению некорректно поставленных задач, в основе которых лежало фундаментальное понятие регуляризирующего оператора (ссылки в [1]). Изучаемые ниже математические модели корректны по постановке. При этом предполагается, что краевые функции в (1)–(3) и законы перемещения границы — гладкие функции, для которых существуют все преобразования, вытекающие по ходу действия. Эти функции задаются практикой многочисленных приложений математических моделей (1)–(3). В 1930-х гг. С.Л. Соболев разработал теорию обобщенных решений для уравнений в частных производных. В дальнейшем получили развитие качественная теория краевых задач для параболических уравнений в обобщенной постановке в пространствах Соболева и других функциональных пространствах и теория этих пространств для решения задач (теоремы вложения; теоремы о следах; компактность вложения и теория усреднения и т.д.) и др. (ссылки в [1]). Эти во-

просы детально рассмотрены в недавно вышедшей книге [6].

МЕТОД ФУНКЦИЙ ГРИНА ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО ТИПА В НЕЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ОБЛАСТЯХ

Для областей с движущимися границами (нецилиндрические области) метод функций Грина является одним из наиболее эффективных. Метод предполагает предварительное рассмотрение более простой модели при нахождении соответствующей функции влияния (функции Грина) и позволяет получить интегральное представление аналитических решений обширного класса задач нестационарного переноса в зависимости от неоднородностей в исходной постановке задачи. Однако для нецилиндрических областей появляются особенности, свойственные при наличии движущихся границ. Следует кратко остановиться на указанном методе для цилиндрических (классических) областей.

Пусть D — конечная или частично ограниченная выпуклая область изменения $M(x, y, z)$; S — кусочно-гладкая поверхность, ограничивающая область D ; \mathbf{n} — внешняя нормаль к S ; $\Omega = (M \in D, t > 0)$ — цилиндрическая область в фазовом пространстве (x, y, z, t) с основанием D при $t = 0$; $T(M, t)$ — температурная функция, удовлетворяющая условиям задачи:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \Delta T(M, t) + f(M, t), \quad M \in D, \quad t > 0; \quad (5)$$

$$T(M, t)|_{t=0} = \Phi_0(M), \quad M \in \bar{D}; \quad (6)$$

$$\beta_1 \frac{\partial T(M, t)}{\partial n} + \beta_2 T(M, t) = \varphi(M, t), \quad (7)$$

$$M \in S, \quad t \geq 0.$$

Здесь

$$f(M, t) \in C^0(\bar{\Omega}); \quad \Phi_0(M) \in C^1(\bar{\Omega});$$

$$\varphi(M, t) \in C^0; \quad (St \geq 0);$$

$$\bar{D} = D + S; \quad \bar{\Omega} = (M \in \bar{D}, t \geq 0).$$

Искомое решение:

$$T(M, t) \in C^2(\Omega) \cap C^0(\bar{\Omega}),$$

$$\text{grad}_M T(M, t) \in C^0(\bar{\Omega}), \quad \beta_1^2 + \beta_2^2 > 0.$$

В силу принципа суперпозиции, справедливо для линейных задач переноса, можно записать интегральное представление для $T(M, t)$ в виде [2]

$$T(M, t) = \iiint_D \Phi_0(P) G(M, P, t, \tau) \Big|_{\tau=0} dV_p + \\ + a \iiint_S \left(G \frac{\partial T}{\partial n_p} - T \frac{\partial G}{\partial n_p} \right) \Big|_{P \in S} d\tau d\sigma_p + \\ + \int_0^t \iiint_D f(P, \tau) G(M, t, P, \tau) d\tau dV_p, \quad (8)$$

если известна соответствующая функция Грина $G(M, t, P, \tau)$ для данной области как решение более простой задачи для однородного уравнения (5) с однородными граничными условиями того же вида, что и (7):

$$\frac{\partial G}{\partial t} = a \Delta_M G(M, t, P, \tau), \quad M \in D, \quad t > \tau; \quad (9)$$

$$G(M, t, P, \tau) \Big|_{t=\tau} = \delta(M, P), \quad M \in D, \quad P \in D; \\ \beta_1 \frac{\partial G(M, t, P, \tau)}{\partial n_M} + \beta_2 G(M, t, P, \tau) = 0, \quad (10) \\ M \in S, \quad t > \tau.$$

Здесь $\delta(M, P)$ – дельта-функция Дирака. Если рассматривать $G(M, t, P, \tau)$ как функцию точки P и времени τ , то для нахождения G следует решать эквивалентную задачу для сопряженного с (9) уравнения

$$\frac{\partial G}{\partial \tau} + a \Delta_p G(M, t, P, \tau) = 0, \quad P \in D, \quad \tau < t; \quad (11)$$

$$G(M, t, P, \tau) \Big|_{\tau=t} = \delta(P, M), \quad P \in D, \quad M \in D; \quad (12)$$

$$\beta_1 \frac{\partial G(M, t, P, \tau)}{\partial n_p} + \beta_2 G(M, t, P, \tau) = 0, \quad (13) \\ P \in S, \quad \tau < t.$$

Если область D ограничена, то функция Грина G имеет вид [2]

$$G(M, t, P, \tau) = G(M, t - \tau, P) = \\ = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Psi_n(M) \Psi_n(P)}{\|\Psi_n\|^2} \exp\left[-(\sqrt{a}\gamma_n)^2 (t - \tau)\right],$$

где $\Psi_n(M)$ и γ_n^2 – собственные функции и собственные значения соответствующей (5)–(8) однородной задачи

$$\Delta \Psi(M) + \gamma^2 \Psi(M) = 0, \quad M \in D; \\ \beta_1 \frac{\partial \Psi(M)}{\partial n} + \beta_2 \Psi(M) = 0, \quad M \in S.$$

Здесь $\|\Psi_n\|^2$ – квадрат нормы собственных функций

$$\|\Psi_n\|^2 = \iiint_D \Psi_n^2(M) dV_M.$$

Пусть теперь Ω_t – нецилиндрическая область, т.е. сечение Ω_t плоскостью-характеристикой $t = \text{const} \geq t_0 \geq 0$ есть область D_t с границей S_t , зависящей от времени t . Следует выяснить, что меняется в постановках краевых задач (9), (10) и (11)–(13) относительно функции Грина $G(M, t, P, \tau)$ по переменным (M, t) и (P, τ) (для цилиндрических областей формулировка граничных условий остается неизменной, уравнение (9) заменяется на сопряженное (11)).

Рассмотрим область $\Omega_t = \{y_1(t) < x < y_2(t), t > 0\}$, где $y_i(t)$ – непрерывно дифференцируемые функции, в которой $T(x, t)$ удовлетворяет условиям

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + f(x, t), \quad y_1(t) < x < y_2(t), \quad t > 0; \quad (14)$$

$$T(x, 0) = \Phi_0(x), \quad y_1(0) \leq x \leq y_2(0), \\ y_i(0) \geq 0, \quad i = 1, 2; \quad (15)$$

$$\left[\beta_{i1} \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} + \beta_{i2} T(x, t) \right]_{x=y_i(t)} = \beta_{i3} \Phi_i(t), \quad (16) \\ t \geq 0, \quad i = 1, 2.$$

Характерным для данной задачи является наличие движущихся во времени границ и, следовательно, то обстоятельство, что функция Грина $G(x, t, x', \tau)$ в силу ее физического смысла (тепловой импульс мощностью $Q = c\rho$ [4]) зависит не от разности $(t - \tau)$, а от t и τ , так как определяющим будет не только время действия $(t - \tau)$, но и момент τ возникновения импульса. Представим $G(x, t, x', \tau)$ в виде [7]

$$G(x, t, x', \tau) = \frac{1}{2\sqrt{\pi a(t - \tau)}} \exp\left[-\frac{(x - x')^2}{4a(t - \tau)}\right] + \\ + q(x, t, x', \tau) = G_0 + q, \quad \tau < t, \quad (17)$$

где G_0 – фундаментальное решение уравнения (14) (при $f = 0$). Функция G_0 удовлетворяет однородному уравнению (14) по переменным (x, t) и сопряженному с (14) (при $f = 0$) по переменным (x', τ) . Функция q – регулярная составляющая функции Грина (17), выбирается так, чтобы удовлетворялись уравнение

$$\frac{\partial q}{\partial \tau} = -a \frac{\partial^2 q}{\partial x'^2}$$

и начальное условие $q(x, t, x', \tau = t) = 0$. Отсюда имеем для функции $G(x, t, x', \tau)$ в соответствии с (11), (12)

$$\frac{\partial G}{\partial \tau} = -a \frac{\partial^2 G}{\partial x'^2}, \quad y_1(\tau) < x' < y_2(\tau), \quad \tau < t; \quad (18)$$

$$G(x, t, x', \tau)|_{\tau=t} = \delta(x' - x), \quad y_1(t) < x' < y_2(t). \quad (19)$$

Рассмотрим равенство

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} [T(x', \tau) G(x, t, x', \tau)] &= G \frac{\partial T}{\partial \tau} + T \frac{\partial G}{\partial \tau} = \\ &= a \left(G \frac{\partial^2 T}{\partial x'^2} - T \frac{\partial^2 G}{\partial x'^2} \right) + G f(x', \tau). \end{aligned}$$

Проинтегрируем данное равенство по $x' \in [y_1(\tau), y_2(\tau)]$:

$$\begin{aligned} \int_{y_1(\tau)}^{y_2(\tau)} \frac{\partial}{\partial \tau} [TG] dx' &= a \left(G \frac{\partial T}{\partial x'} - T \frac{\partial G}{\partial x'} \right)_{x'=y_1(\tau)}^{x'=y_2(\tau)} + \\ &+ \int_{y_1(\tau)}^{y_2(\tau)} G(x, t, x', \tau) f(x', \tau) dx'. \end{aligned} \quad (20)$$

Соотношение (20) справедливо при всех $\tau < t$ и, следовательно, его можно проинтегрировать по τ для $0 < \tau < t - \varepsilon$, где $\varepsilon > 0$ – сколь угодно малое число (при $0 < \tau < t - \varepsilon$ подынтегральные функции в (20) достаточно регулярны, так как исключена особенность у функции G в точке $x = x'$ при $\tau = t$). Получаем

$$\begin{aligned} \int_0^{t-\varepsilon} d\tau \int_{y_1(\tau)}^{y_2(\tau)} \frac{\partial}{\partial \tau} (TG) dx' &= a \int_0^{t-\varepsilon} \left(G \frac{\partial T}{\partial x'} - T \frac{\partial G}{\partial x'} \right)_{x'=y_2(\tau)} d\tau - \\ &- a \int_0^{t-\varepsilon} \left(G \frac{\partial T}{\partial x'} - T \frac{\partial G}{\partial x'} \right)_{x'=y_1(\tau)} d\tau + \\ &+ \int_0^t d\tau \int_{y_1(\tau)}^{y_2(\tau)} G(x, t, x', \tau) f(x', \tau) dx'. \end{aligned}$$

Вынося слева оператор $\partial/\partial\tau$ за знак определенного интеграла и переходя к пределу при $\varepsilon \rightarrow 0$, учитывая (19) и равенство

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow \infty} \int_{y_1(t-\varepsilon)}^{y_2(t-\varepsilon)} T(x', t-\varepsilon) G(x, t, x', \tau) \Big|_{\tau=t-\varepsilon} dx' &= \\ = \int_{y_1(t)}^{y_2(t)} T(x', t) \delta(x - x') dx' &= T(x, t), \end{aligned}$$

получаем основную интегральную формулу, дающую представление произвольных решений уравнения (14) в области с движущимися границами:

$$\begin{aligned} T(x, t) &= \int_{y_1(0)}^{y_2(0)} T(x', 0) G(x, t, x', 0) dx' + \\ &+ a \int_0^t \left[G \frac{\partial T}{\partial x'} - T \left(\frac{\partial G}{\partial x'} - \frac{1}{a} \frac{dy_2}{d\tau} G \right) \right]_{x'=y_2(\tau)} d\tau - \\ &- a \int_0^t \left[G \frac{\partial T}{\partial x'} - T \left(\frac{\partial G}{\partial x'} - \frac{1}{a} \frac{dy_1}{d\tau} G \right) \right]_{x'=y_1(\tau)} d\tau + \\ &+ \int_0^t \int_{y_1(\tau)}^{y_2(\tau)} G(x, t, x', \tau) f(x', \tau) dx' d\tau. \end{aligned} \quad (21)$$

Предполагается, что в (16) заданы граничные условия: а) либо первого рода ($\beta_{i1} = 0, \beta_{i2} = \beta_{i3} = 1$); б) либо второго рода ($\beta_{i2} = 0, \beta_{i1} = \beta_{i3} = 1$); в) либо третьего рода ($\beta_{i1} = 1, \beta_{i2} = \beta_{i3} = (-1)^i h_i$, где h_i – относительный коэффициент теплообмена). Если функцию $G(x, t, x', \tau)$ выбрать так, чтобы удовлетворялись граничные условия в случаях

а) первой краевой задачи

$$G(x, t, x', \tau)|_{x'=y_i(\tau)} = 0, \quad \tau < t, \quad i = 1, 2; \quad (22)$$

б) второй краевой задачи

$$\left(\frac{\partial G}{\partial x'} - \frac{1}{a} \frac{\partial y_i}{\partial \tau} G \right) \Big|_{x'=y_i(\tau)} = 0, \quad \tau < t, \quad i = 1, 2; \quad (23)$$

в) третьей краевой задачи

$$\left(\frac{\partial G}{\partial x'} + (-1)^i \left[h_i + (-1)^{i-1} \frac{1}{a} \frac{\partial y_i}{\partial \tau} \right] G \right) \Big|_{x'=y_i(\tau)} = 0, \quad \tau < t, \quad i = 1, 2; \quad (24)$$

то из (20) получаем искомые интегральные представления для $T(x, t)$ в виде:

а) первая краевая задача

$$\begin{aligned} T(x, t) &= \int_{y_1(0)}^{y_2(0)} [T(x', \tau) G(x, t, x', \tau)]_{\tau=0} dx' + \\ &+ a \int_0^t \left[T(x', \tau) \frac{\partial G}{\partial x'} \right]_{x'=y_1(\tau)} d\tau - \\ &- a \int_0^t \left[T(x', \tau) \frac{\partial G}{\partial x'} \right]_{x'=y_2(\tau)} d\tau + \\ &+ \int_0^t \int_{y_1(\tau)}^{y_2(\tau)} f(x', \tau) G(x, t, x', \tau) dx' d\tau; \end{aligned}$$

б) вторая краевая задача

$$T(x, t) = \int_{y_1(0)}^{y_2(0)} [T(x', \tau) G(x, t, x', \tau)]_{\tau=0} dx' - a \int_0^t \left[\frac{\partial T(x', \tau)}{\partial x'} G(x, t, x', \tau) \right]_{x'=y_1(\tau)} d\tau + a \int_0^t \left[\frac{\partial T(x', \tau)}{\partial x'} G(x, t, x', \tau) \right]_{x'=y_2(\tau)} d\tau + \int_0^t \int_{y_1(\tau)}^{y_2(\tau)} f(x', \tau) G(x, t, x', \tau) d\tau dx';$$

в) третья краевая задача

$$T(x, t) = \int_{y_1(0)}^{y_2(0)} [T(x', \tau) G(x, t, x', \tau)]_{\tau=0} dx' - a \int_0^t \left[\left(\frac{\partial T(x', \tau)}{\partial x'} - h_1 T(x', \tau) \right) G(x, t, x', \tau) \right]_{x'=y_1(\tau)} d\tau + a \int_0^t \left[\left(\frac{\partial T(x', \tau)}{\partial x'} + h_2 T(x', \tau) \right) G(x, t, x', \tau) \right]_{x'=y_2(\tau)} d\tau + \int_0^t \int_{y_1(\tau)}^{y_2(\tau)} f(x', \tau) G(x, t, x', \tau) d\tau dx'.$$

Остановимся подробнее на рассмотрении функции $G(x, t, x', \tau)$ в виде (17), которая удовлетворяет (18), (19) и одному из граничных условий (22)–(24) в зависимости от типа краевой задачи (14)–(16).

Рассмотрим функцию $\bar{G}(x, t, x', \tau)$, определяемую условиями

$$\frac{\partial \bar{G}}{\partial t} = a \frac{\partial^2 \bar{G}}{\partial x^2}, \quad y_1(t) < x < y_2(t), \quad t > \tau; \quad (25)$$

$$\bar{G}(x, t, x', \tau)|_{t=\tau} = \delta(x - x'), \quad y_1(\tau) < x' < y_2(\tau); \quad (26)$$

$$\left[\beta_{i1} \frac{\partial \bar{G}}{\partial x} + \beta_{i2} \bar{G} \right]_{x=y_i(t)} = 0, \quad t > \tau, \quad i = 1, 2, \quad (27)$$

где (как и в (16)) $\beta_{i1} = 0$ в случае первой краевой задачи, $\beta_{i2} = 0$ – второй и $\beta_{i1} = 1, \beta_{i2} = \beta_{i3} = (-1)^i h_i$ для третьей краевой задачи. Покажем, что $G(x, t, x', \tau) = \bar{G}(x, t, x', \tau)$. Доказательство проводится для второй краевой задачи, остальные случаи могут быть рассмотрены аналогично.

Проинтегрируем выражение

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \theta} [\bar{G}(x'', \theta, x', \tau) G(x, t, x'', \theta)] &= \\ &= a \left(G \frac{\partial^2 \bar{G}}{\partial x''^2} - \bar{G} \frac{\partial^2 G}{\partial x''^2} \right) \end{aligned}$$

по x'' в интервале от $y_1(\theta)$ до $y_2(\theta)$, где $t > \theta > \tau$. Получаем, учитывая граничные условия, для \bar{G} и G

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \int_{y_1(\theta)}^{y_2(\theta)} \bar{G} G dx'' = 0. \quad (28)$$

Проинтегрируем далее (28) в промежутке $[\theta, t - \varepsilon]$, где $\varepsilon > 0$ – сколь угодно малое число. Повторяя предыдущие рассуждения (как и при выводе соотношения (21)), находим

$$\begin{aligned} \int_{y_1(t-\varepsilon)}^{y_2(t-\varepsilon)} \bar{G}(x'', t - \varepsilon, x', \tau) [G(x, t, x'', \theta)]_{\theta=t-\varepsilon} dx'' &= \\ &= \int_{y_1(\theta)}^{y_2(\theta)} \bar{G}(x'', \theta, x', \tau) [G(x, t, x'', \theta)]_{\theta=t-\varepsilon} dx''. \end{aligned}$$

Переходя к пределу при $\varepsilon \rightarrow 0$, получаем

$$\begin{aligned} \int_{y_1(\theta)}^{y_2(\theta)} \bar{G}(x'', \theta, x', \tau) G(x, t, x'', \theta) dx'' &= \\ &= \int_{y_1(t)}^{y_2(t)} \bar{G}(x'', t, x', \tau) \delta(x'' - x) dx'' = \bar{G}(x, t, x', \tau). \end{aligned} \quad (29)$$

С другой стороны, интегрируя (28) в промежутке $[t + \varepsilon, \theta]$, что дает

$$\begin{aligned} \int_{y_1(t+\varepsilon)}^{y_2(t+\varepsilon)} G(x, t, x'', \tau + \varepsilon) [\bar{G}(x'', \theta, x', \tau)]_{\theta=t+\varepsilon} dx'' &= \\ &= \int_{y_1(\theta)}^{y_2(\theta)} G(x, t, x'', \theta) \bar{G}(x'', \theta, x', \tau) dx'', \end{aligned}$$

и устремляя $\varepsilon \rightarrow 0$, приходим к выражению

$$\begin{aligned} \int_{y_1(\theta)}^{y_2(\theta)} G(x, t, x'', \theta) \bar{G}(x'', \theta, x', \tau) dx'' &= \\ &= \int_{y_1(\tau)}^{y_2(\tau)} G(x, t, x'', \tau) \delta(x'' - x') dx'' = G(x, t, x', \tau). \end{aligned} \quad (30)$$

Сравнение (29) и (30) показывает, что $G(x, t, x', \tau) \equiv \bar{G}(x, t, x', \tau)$. Используя подходы [5, 6], можно доказать существование и единственность решения задачи (25)–(27), если каждая кривая $y_i(t), i = 1, 2$, дифференцируема и производные $\frac{\partial y_i}{\partial t}$ удовлетворяют условию Гельдера порядка $\gamma > 1/2$.

Таким образом, функция $G(x, t, x', \tau)$ может быть найдена как решение эквивалентных задач (18), (19), (22)–(23) и (25)–(27), и в областях с движущимися границами не сохраняется эквивалентность в записи граничных условий в поста-

новках задач по (x, t) и (x', τ) в отличие от цилиндрических областей (см. (10) и (13)). В этих случаях следует проявлять особое внимание при нахождении функций Грина для второй и третьей краевых задач, а также и при наличии смешанных граничных условий на движущихся границах. Всякий случай нахождения функции Грина соответствующей краевой задаче для той или иной области весьма важен, так как содержит в себе обширную информацию, позволяя выписать большое число аналитических решений в зависимости от неоднородностей в (14)–(16). Здесь, как и в случае цилиндрических областей, также можно говорить о первой, второй или третьей краевых задачах при соответствующих значениях коэффициентов $\beta_{ij} = \text{const}$ в (16). Однако указанная эквивалентность в записи граничных условий сохраняется не всегда. В частности, как показано выше в (4), условие теплоизоляции движущейся границы области $x \in [0, y(t)]$, $t \geq 0$, где $y(t)$ при $t > 0$ – непрерывно дифференцируемая функция с конечными производными любого порядка, имеет вид [2]

$$\left[\frac{\partial T(x, t)}{\partial x} + \frac{v(t)}{a} T(x, t) \right]_{x=y(t)} = 0, \quad t > 0, \quad (31)$$

и для скорости движения $v(t) = dy(t)/dt = 0$ ($y(t) = \text{const}$) выражение (31) совпадает с классической записью тепловой изоляции неподвижной границы

$$\left. \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right|_{y=\text{const}} = 0.$$

МОДИФИКАЦИЯ МЕТОДА ТЕПЛОВЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ДЛЯ ОБЛАСТЕЙ С РАВНОМЕРНО ДВИЖУЩЕЙСЯ ГРАНИЦЕЙ $[0, l + vt]$, $[l + vt, \infty)$, $t \geq 0$

В обзоре [3] и книгах [4, 7] описаны обобщенные тепловые потенциалы простого и двойного слоя как один из возможных аналитических методов решения краевых задач (5)–(7).

Модифицированный метод оказался особенно эффективным для областей с равномерно движущейся границей, имеющей многочисленные практические приложения, причем как при решении задач в исходной постановке (14)–(16) (при $f = 0$ или $f = f(t)$), так и при построении соответствующей функции Грина. Получаемые при этом аналитические решения задачи имеют новую (простейшую) интегральную форму, отличную от известных ранее.

Для сокращения выкладок рассмотрим в (14)–(16) область: $x \in [0, l + vt]$, $t \geq 0$, т.е. случай $y_1(t) = 0$, $y_2(t) = l + vt$ ($l, v = \text{const}$); пусть также $\beta_{i1} = 0$, $\beta_{i2} = \beta_{i3} = 1$; $f(x, t) = 0$, $\Phi_0(x) = 0$. Нали-

чие неоднородностей в (14), (15) рассмотрено ниже. Следует заметить, что область $x \in [l_1 + v_1t, l_2 + v_2t]$, $t \geq 0$ для $T(x, t)$ (14)–(16) легко сводится к рассматриваемому случаю, т.е. к области $x \in [0, l + vt]$, $t \geq 0$ с помощью преобразований

$$z = x - (l_1 + v_1t), \quad T(x, t) \equiv W(z, t), \\ W(z, t) = \Theta(z, t) \exp(-v_1z/2a - v_1^2t/4a).$$

Решение $T(x, t)$ ищем в виде суммы тепловых потенциалов [1]:

$$T(x, t) = \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{\Psi_1(\tau)}{\sqrt{t-\tau}} \exp\left[-\frac{x^2}{4a(t-\tau)}\right] d\tau + \\ + \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{\Psi_2(\tau)}{\sqrt{t-\tau}} \exp\left[-\frac{(x-l-v\tau)^2}{4a(t-\tau)}\right] d\tau, \quad (32)$$

где $\Psi_1(t)$ и $\Psi_2(t)$ – искомые неизвестные плотности потенциалов. Выражение (32) запишем в пространстве изображений по Лапласу:

$$\bar{T}(x, p) = \int_0^\infty \exp(-pt) T(x, t) dt, \\ \text{Re } p \geq \beta > 0, \quad |\arg p| < \frac{\pi}{2}; \quad (33)$$

$$\bar{T}(x, p) = \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{p}} \exp\left[-\frac{x}{\sqrt{a}}\sqrt{p}\right] \bar{\Psi}_1(p) + \\ + \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{p}} \exp\left[-\frac{(l-x)}{\sqrt{a}}\sqrt{p}\right] \bar{\Psi}_3\left[(\sqrt{p} + \gamma)^2\right],$$

где $\Psi_3(t) = \Psi_2(t) \exp(\gamma^2 t)$, $\gamma^2 = \frac{v^2}{4a}$.

Таким образом, для нахождения оригинала $T(x, t)$ из (33) необходимо искать изображения плотностей относительно $\bar{\Psi}_1(p)$ и $\bar{\Psi}_3\left[(\sqrt{p} + \gamma)^2\right]$. Удовлетворяя в (32) граничным условиям (16) (при $\beta_{i1} = 0$, $\beta_{i2} = \beta_{i3} = 1$), находим

$$\left. \begin{aligned} & \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{\Psi_1(\tau)}{\sqrt{t-\tau}} d\tau + \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{\pi}} \times \\ & \times \int_0^t \frac{\Psi_2(\tau)}{\sqrt{t-\tau}} \exp\left[-\frac{(l+v\tau)^2}{4a(t-\tau)}\right] d\tau = \Phi_1(t), \\ & \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{\Psi_1(\tau)}{\sqrt{t-\tau}} \exp\left[-\frac{(l+vt)^2}{4a(t-\tau)}\right] d\tau + \\ & + \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{\Psi_2(\tau)}{\sqrt{t-\tau}} \exp\left[-\frac{v^2}{4a}(t-\tau)\right] d\tau = \Phi_2(t). \end{aligned} \right\} \quad (34)$$

В пространстве изображений система интегральных уравнений (34) принимает вид

$$\left. \begin{aligned} & \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{p}} \bar{\Psi}_1(p) + \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{p}} \exp\left[-\frac{l}{\sqrt{a}}\sqrt{p}\right] \times \\ & \quad \times \bar{\Psi}_3\left[(\sqrt{p} + \gamma)^2\right] = \bar{\Phi}_1(p), \\ & \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{p}} \exp\left[-\frac{l}{\sqrt{a}}(\sqrt{p} + \gamma)\right] \times \\ & \times \bar{\Psi}_1\left[(\sqrt{p} + \gamma)^2\right] + \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{p}} \bar{\Psi}_3(p) = \bar{\Phi}_3(p), \end{aligned} \right\} (35)$$

где $\Phi_3(t) = \Phi_2(t) \exp(\gamma^2 t)$. Исключая из системы функциональных уравнений (35) вначале $\bar{\Psi}_3(p)$, а затем $\bar{\Psi}_1(p)$, найдем

$$\left. \begin{aligned} & \exp\left[-\frac{l}{\sqrt{a}}(\sqrt{p} + 2\gamma)\right] \bar{\Psi}_1\left[(\sqrt{p} + 2\gamma)^2\right] - \\ & \quad - \exp\left[-\frac{l}{\sqrt{a}}\sqrt{p}\right] \bar{\Psi}_1(p) = \\ & = \frac{2(\sqrt{p} + \gamma)}{\sqrt{a}} \bar{\Phi}_3\left[(\sqrt{p} + \gamma)^2\right] - \\ & \quad - \frac{2\sqrt{p}}{\sqrt{a}} \exp\left[-\frac{l}{\sqrt{a}}\sqrt{p}\right] \bar{\Phi}_1(p), \\ & \exp\left[-\frac{l}{\sqrt{a}}(\sqrt{p} + \gamma)\right] \bar{\Psi}_3\left[(\sqrt{p} + 2\gamma)^2\right] - \\ & \quad - \exp\left[-\frac{l}{\sqrt{a}}(\sqrt{p} + \gamma)\right] \bar{\Psi}_3(p) = \\ & = \frac{2(\sqrt{p} + \gamma)}{\sqrt{a}} \bar{\Phi}_1\left[(\sqrt{p} + \gamma)^2\right] - \\ & \quad - \frac{2\sqrt{p}}{\sqrt{a}} \exp\left[-\frac{l}{\sqrt{a}}(\sqrt{p} + \gamma)\right] \bar{\Phi}_3(p). \end{aligned} \right\} (36)$$

Обозначим

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}_1(p^2) &= \bar{A}_1(p), \quad \bar{\Psi}_3(p^2) = \bar{A}_3(p), \\ \bar{\Phi}_3(p^2) &= \bar{F}_3(p), \quad \bar{\Phi}_1(p^2) = \bar{F}_1(p) \end{aligned} \quad (38)$$

и перепишем (36), (37) в виде

$$\begin{aligned} & \exp\left(-\frac{2l\gamma}{\sqrt{a}}\right) \bar{A}_1(p + 2\gamma) - \exp\left(\frac{2l}{\sqrt{a}}p\right) \bar{A}_1(p) = \\ & = \frac{2}{\sqrt{a}} \left[(p + \gamma) \exp\left(\frac{l}{\sqrt{a}}p\right) \bar{F}_3(p + \gamma) - \right. \\ & \quad \left. - p \exp\left[\frac{2l}{\sqrt{a}}p\right] \bar{F}_1(p) \right], \end{aligned} \quad (39)$$

$$\begin{aligned} & \exp\left(-\frac{2l\gamma}{\sqrt{a}}\right) \bar{A}_3(p + 2\gamma) - \exp\left(\frac{2l}{\sqrt{a}}p\right) \bar{A}_3(p) = \\ & = \frac{2}{\sqrt{a}} \left[(p + \gamma) \exp\left(\frac{l}{\sqrt{a}}(p - \gamma)\right) \bar{F}_1(p + \gamma) - \right. \\ & \quad \left. - p \exp\left(\frac{2l}{\sqrt{a}}p\right) \bar{F}_3(p) \right]. \end{aligned} \quad (40)$$

С помощью подстановки [2]

$$\bar{A}_i(p) = \exp\left(\frac{l}{2\sqrt{a}\gamma} p^2\right) \bar{B}_i(p), \quad i = 1, 3, \quad (41)$$

уравнения (39) и (40) приводятся к уравнению с постоянными коэффициентами

$$\begin{aligned} & \bar{B}_1(p + 2\gamma) - \bar{B}_1(p) = \frac{2}{\sqrt{a}} \exp\left(-\frac{l}{2\sqrt{a}\gamma} p^2\right) \times \\ & \times \left[(p + \gamma) \exp\left(-\frac{l}{\sqrt{a}}p\right) \bar{F}_3(p + \gamma) - p \bar{F}_1(p) \right], \end{aligned} \quad (42)$$

$$\begin{aligned} & \bar{B}_3(p + 2\gamma) - \bar{B}_3(p) = \frac{2}{\sqrt{a}} \exp\left(-\frac{l}{2\sqrt{a}\gamma} p^2\right) \times \\ & \times \left[(p + \gamma) \exp\left(-\frac{l}{\sqrt{a}}(p + \gamma)\right) \bar{F}_1(p + \gamma) - p \bar{F}_3(p) \right]. \end{aligned} \quad (43)$$

Непосредственной проверкой можно убедиться, что искомым частным решением функционального уравнения $\bar{B}(p + 2\gamma) - \bar{B}(p) = \bar{\Theta}(p)$ является функция $\bar{B}(p) = -\sum_{n=0}^{\infty} \bar{\Theta}(p + 2n\gamma)$, если этот ряд сходится. Но ряд типа $\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left[-\left(\frac{l}{2\sqrt{a}\gamma}\right)(n + \bar{d}(p))^2\right]$, к которому приводятся решения уравнений (42) и (43), сходится, так как $\frac{l}{2\sqrt{a}\gamma} > 0$. Находим $\bar{B}_i(p)$, $i = 1, 3$, и далее из (38) и (41) искомые изображения плотностей потенциалов (32) в виде (33):

$$\begin{aligned} & \bar{\Psi}_1\left[(\sqrt{p} + \gamma)^2\right] = \\ & = -\frac{2}{\sqrt{a}} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{2l\gamma}{\sqrt{a}}n(n+1) - \frac{(2n+1)l}{\sqrt{a}}\sqrt{p}\right) \times \right. \\ & \quad \times (\sqrt{p} + 2(n+1)\gamma) \bar{\Phi}_3\left[(\sqrt{p} + 2(n+1)\gamma)^2\right] + \end{aligned} \quad (44)$$

$$\begin{aligned} & \left. + \frac{2}{\sqrt{a}} \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left[-\frac{2l\gamma}{\sqrt{a}}n^2 - \frac{2nl}{\sqrt{a}}\sqrt{p}\right] \times \right. \\ & \quad \times (\sqrt{p} + 2n\gamma) \bar{\Phi}_1\left[(\sqrt{p} + 2n\gamma)^2\right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \bar{\Psi}_3\left[(\sqrt{p} + \gamma)^2\right] = \\ & = -\frac{2}{\sqrt{a}} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{2l\gamma}{\sqrt{a}}(n+1)^2 - \frac{(2n+1)l}{\sqrt{a}}\sqrt{p}\right) \times \right. \\ & \quad \times (\sqrt{p} + 2(n+1)\gamma) \bar{\Phi}_1\left[(\sqrt{p} + 2(n+1)\gamma)^2\right] + \end{aligned} \quad (45)$$

$$\begin{aligned} & \left. + \frac{2}{\sqrt{a}} \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left[-\frac{2l\gamma}{\sqrt{a}}n(n+1) - \frac{2nl}{\sqrt{a}}\sqrt{p}\right] \times \right. \\ & \quad \times (\sqrt{p} + (2n+1)\gamma) \bar{\Phi}_3\left[(\sqrt{p} + (2n+1)\gamma)^2\right]. \end{aligned}$$

Выражения (33), (44), (45) дают операционное решение задачи

$$\begin{aligned} \bar{T}(x, p) = & \bar{\varphi}_1(p) \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{p}} \exp\left[-\frac{x}{\sqrt{a}}\sqrt{p}\right] + \\ & + \frac{1}{\sqrt{p}} \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left[-\frac{2l\gamma}{\sqrt{a}}n^2\right] (\sqrt{p} + 2n\gamma) \times \\ & \times \left\{ \exp\left[-\frac{(2nl+x)}{\sqrt{a}}\sqrt{p}\right] - \exp\left[-\frac{(2nl-x)}{\sqrt{a}}\sqrt{p}\right] \right\} \times \\ & \times \bar{\varphi}_1\left[(\sqrt{p} + 2n\gamma)^2\right] + \frac{1}{\sqrt{p}} \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left[-\frac{2l\gamma}{\sqrt{a}}n(n+1)\right] \times \\ & \times (\sqrt{p} + (2n+1)\gamma) \left\{ \exp\left[-\frac{((2n+1)l-x)}{\sqrt{a}}\sqrt{p}\right] - \right. \\ & \left. - \exp\left[-\frac{((2n+1)l+x)}{\sqrt{a}}\sqrt{p}\right] \right\} \bar{\varphi}_3\left[(\sqrt{p} + (2n+1)\gamma)^2\right]. \end{aligned} \quad (46)$$

Переходя в пространство оригиналов, получаем искомое интегральное представление аналитического решения $T(x, t)$:

$$\begin{aligned} T(x, t) = & \frac{1}{2\sqrt{a\pi}} \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \int_0^t \frac{[x + 2n(l + vt)]}{(t - \tau)^{3/2}} \varphi_1(\tau) \times \\ & \times \exp\left\{-\frac{v(l + v\tau)}{a}n^2 - \frac{[x + 2n(l + v\tau)]^2}{4a(t - \tau)}\right\} d\tau - \\ & - \frac{1}{2\sqrt{a\pi}} \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \int_0^t \frac{[x + (2n+1)(l + vt)]}{(t - \tau)^{3/2}} \varphi_2(\tau) \times \\ & \times \exp\left\{-\frac{v(l + v\tau)}{a}n(n+1) - \right. \\ & \left. - \frac{[x + (2n+1)(l + v\tau)]^2}{4a(t - \tau)}\right\} d\tau. \end{aligned}$$

Соотношение (46) позволяет рассмотреть ряд интересных приложений. Одно из них – построение функции Грина $G(x, t, x', \tau)$ первой краевой задачи для уравнения (14) с начальным условием (15) в рассматриваемой области. Функция G для этого случая удовлетворяет условиям

$$\frac{\partial G}{\partial t} = a \frac{\partial^2 G}{\partial x^2}, \quad 0 < x < l + vt, \quad t > \tau, \quad (47)$$

$$G|_{t=\tau} = \delta(x - x'), \quad 0 < x < l_0, \quad l_0 = l + v\tau, \quad (48)$$

$$G|_{x=0} = G|_{x=l+vt} = 0, \quad t > \tau. \quad (49)$$

Представим $G(x, t, x', \tau)$ в виде [2]

$$\begin{aligned} G(x, t, x', \tau) = & \frac{1}{2\sqrt{\pi a(t - \tau)}} \exp\left[-\frac{(x - x')^2}{4a(t - \tau)}\right] + \\ & + q(x, t, x', \tau) = G_0(x, t, x', \tau) + q(x, t, x', \tau), \end{aligned}$$

где G_0 – фундаментальное решение уравнения теплопроводности, q – регулярная составляющая функции Грина. Переходя в (47)–(49) к функции q при $t' = t - \tau$, находим

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t'} = a \frac{\partial^2 q}{\partial x'^2}, \quad 0 < x < l + vt', \quad t' > 0; \\ q|_{t'=0} = 0, \quad 0 < x < l_0; \end{aligned} \quad (50)$$

$$q|_{x=0} = \frac{1}{2\sqrt{\pi a t'}} \exp\left[-\frac{x'^2}{4a t'}\right] = \varphi_1(t'), \quad t' > 0;$$

$$\begin{aligned} q|_{x=l_0+vt'} = \frac{1}{2\sqrt{\pi a t'}} \times \\ \times \exp\left[-\frac{(l_0 - x' + vt')^2}{4a t'}\right] = \varphi_2(t'), \quad t' > 0. \end{aligned} \quad (51)$$

Изображение $\bar{q}(x, p, x', \tau)$ может быть выписано непосредственно с помощью соотношения (46), если учесть, что в случае (50), (51) операционное изображение функций, входящих в (46), имеет вид

$$\begin{aligned} \bar{\varphi}_1(p) = & -\frac{1}{2\sqrt{a p}} \exp\left(-\frac{x'}{\sqrt{a}}\sqrt{p}\right); \\ \bar{\varphi}_1\left[(\sqrt{p} + 2\gamma n)^2\right] = & -\frac{1}{2\sqrt{a}(\sqrt{p} + 2\gamma n)} \times \\ \times \exp\left(-\frac{x'}{\sqrt{a}}(\sqrt{p} + 2\gamma n)\right); \quad \bar{\varphi}_3\left[(\sqrt{p} + (2n+1)\gamma)^2\right] = \\ = & -\frac{1}{2\sqrt{a}(\sqrt{p} + (2n+1)\gamma)} \times \\ \times \exp\left(-\frac{(l_0 - x')}{\sqrt{a}}(\sqrt{p} + (2n+1)\gamma)\right). \end{aligned}$$

Подставляя эти функции в (46) и переходя к оригиналам, находим искомое выражение для функции Грина $G(x, t, x', \tau)$:

$$\begin{aligned} G(x, t, x', \tau) = & \frac{1}{2\sqrt{a\pi(t - \tau)}} \times \\ \times \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \exp\left(-\frac{2l_0\gamma}{\sqrt{a}}n^2 - \frac{2\gamma x'}{\sqrt{a}}n\right) \times \\ \times \left\{ \exp\left[-\frac{(2nl_0 + x' - x)^2}{4a(t - \tau)}\right] - \right. \\ \left. - \exp\left[-\frac{(2nl_0 + x' + x)^2}{4a(t - \tau)}\right] \right\}, \end{aligned} \quad (52)$$

где $l_0 = l + v\tau$, $\gamma = \frac{v}{2\sqrt{a}}$. Исследуя полученное выражение, объединим экспоненты, содержащие в показателе n^2 . Тогда под знаком ряда появится множитель $\exp\left[-l_0 n^2 (l + v\tau)/a(t - \tau)\right]$. Отсюда следует, что ряд (52) сходится и для отрицательных значений v , если $\tau < t < -\frac{l}{v}$. Но при $t = -\frac{l}{v}$ ($v < 0$) заданная область исчезает. Следовательно, выражение (52) можно использовать для любых значений v .

Теперь можно учесть неоднородности в (14), (15) и написать соответствующее интегральное представление аналитического решения первой краевой задачи через функцию Грина (52) [2]:

$$T(x, t) = \int_0^l \Phi_0(x') G(x, t, x', \tau) \Big|_{\tau=0} dx' + a \int_0^t \Phi_1(\tau) \frac{\partial G}{\partial x'} \Big|_{x'=0} d\tau - a \int_0^t \Phi_2(\tau) \frac{\partial G}{\partial x'} \Big|_{x'=l+v\tau} d\tau + \int_0^{l+v\tau} \int_0^t F(x', \tau) G(x, t, x', \tau) d\tau dx'.$$

Выражение (52) позволяет записать $G(r, t, r', \tau)$ первой краевой задачи для центрально-симметрической области $r \in [0, R + v\tau]$, $t \geq 0$, если учесть, что с помощью подстановки $\Theta = rG$ этот случай сводится к изученному в декартовой системе координат (r, t) . Находим

$$G(r, t, r', \tau) = \frac{1}{8\pi r r' \sqrt{a\pi(t - \tau)}} \times \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \exp\left(-\frac{R_0 v}{a} n^2 - \frac{r' v}{a} n\right) \times \sum_{k=1}^2 (-1)^{k+1} \exp\left[-\frac{(2nR_0 + r' + (-1)^k r)^2}{4a(t - \tau)}\right],$$

где $R_0 = R + v\tau$. Для других граничных условий специфические особенности метода заключаются лишь в решении конечно-разностного уравнения и переходе к оригиналу. Так, для граничных условий смешанного типа в (16) $\beta_{11} = \beta_{22} = 0$, $\beta_{12} = \beta_{13} = \beta_{23} = \beta_{21} = 1$ при $y(t) = vt$ ($v > 0$) соответствующая функция Грина имеет вид

$$G(x, t, x', \tau) = \frac{1}{2\sqrt{a\pi(t - \tau)}} \times \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} (-1)^n \exp\left(-\frac{v^2 \tau}{a} n^2 - \frac{v x'}{a} n\right) \times \left\{ \exp\left[-\frac{(2nv\tau - x + x')^2}{4a(t - \tau)}\right] - \exp\left[-\frac{(2nv\tau + x + x')^2}{4a(t - \tau)}\right] \right\} + \frac{v}{2a} \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} (-1)^n n \exp\left(-\frac{v^2 \tau}{a} n^2 - \frac{v x'}{a} n\right) \times \left[\Phi\left(\frac{2nv\tau + x + x'}{2\sqrt{a(t - \tau)}}\right) - \Phi\left(\frac{2nv\tau + x' - x}{2\sqrt{a(t - \tau)}}\right) \right],$$

где $\Phi(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-y^2) dy$ – функция Лапласа.

Метод может быть распространен также на некоторые другие области и законы движения границы. Особенно эффективным метод становится для области $x \geq l + vt$, $t \geq 0$. Решение задачи

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad x > l + vt, \quad t > 0; \tag{53}$$

$$T(x, 0) = 0, \quad x \geq l; \tag{54}$$

$$(\beta_1 \partial T / \partial x + \beta_2 T)_{x=l+v\tau} = \beta_3 \varphi(t), \quad t \geq 0;$$

$$|T(x, t)| < +\infty, \quad x \geq l + vt, \quad t \geq 0, \tag{55}$$

записывается в виде обобщенного теплового потенциала простого слоя по кривой $x = l + vt$

$$T(x, t) = \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{\Psi(\tau)}{\sqrt{(t - \tau)}} \exp\left[-\frac{(x - l - v\tau)^2}{4a(t - \tau)}\right] d\tau. \tag{56}$$

Здесь $\Psi(t)$ – неизвестная плотность потенциала, подлежащая нахождению из граничного условия (54). В пространстве изображений по Лапласу $\bar{T}(x, p) = \int_0^\infty T(x, t) \exp(-pt) dt$, $\text{Re } p \geq \beta > 0$,

$|\arg p| < \frac{\pi}{2}$ выражение (56) принимает вид

$$\bar{T}(x, p) = \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{p}} \exp[-(x - l)\sqrt{p/a}] \bar{\Psi}(p - v\sqrt{p/a}).$$

Отсюда следует, что неизвестную плотность следует искать относительно вида $\bar{\Psi}(p - v\sqrt{p/a})$. Конечное операционное (базовое) решение задачи (53)–(55) имеет вид

$$\bar{T}(x, p) = \bar{\Theta}(p) \left(1 - \frac{v/(2a)}{\sqrt{p/a}}\right) \times \exp[-(x - l)\sqrt{p/a}] \bar{\varphi}(p - v\sqrt{p/a}), \tag{57}$$

$$\text{где } \bar{\Theta}(p) = \begin{cases} 1 & (\beta_1 = 0, \beta_2 = \beta_3 = 1) \text{ для 1-й краевой задачи;} \\ -1/\sqrt{p/a} & (\beta_2 = 0, \beta_1 = \beta_3 = 1) \text{ для 2-й краевой задачи;} \\ h/(h + \sqrt{p/a}) & (\beta_1 = 0, \beta_2 = \beta_3 = -h) \text{ для 3-й краевой задачи.} \end{cases}$$

Выражение (57) включает в себя многочислен-
ные частные случаи граничной функции $\varphi(t)$ в
(54), представляющие практический интерес: од-
нородные, импульсные, пульсирующие, перио-
дические и т.д. Переход к оригиналам происходит
по известным правилам операционного исчисле-
ния и приводит к аналитическим решениям весь-
ма компактного вида. Так,

для первой краевой задачи $(T(x,t)|_{x=l+vt} = \varphi(t))$

$$T(x,t) = \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{x - (l + vt)}{(t - \tau)^{3/2}} \varphi(\tau) \times \\ \times \exp\left[-\frac{(x - l - v\tau)^2}{4a(t - \tau)}\right] d\tau;$$

для второй краевой задачи $\left(\frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x=l+vt} = \varphi(t)\right)$

$$T(x,t) = \frac{v}{a} \int_0^t \varphi(\tau) \Phi^* \left(-\frac{x - l - v\tau}{2\sqrt{a(t - \tau)}}\right) d\tau - \\ - \frac{\sqrt{a}}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{\varphi(\tau)}{\sqrt{t - \tau}} \exp\left[-\frac{(x - l - v\tau)^2}{4a(t - \tau)}\right] d\tau;$$

для третьей краевой задачи $\left(\frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x=l+vt} = \right. = \\ \left. = h(T|_{x=l+vt} - \varphi(t))\right)$

$$T(x,t) = \frac{h\sqrt{a}}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{\varphi(\tau)}{\sqrt{t - \tau}} \exp\left[-\frac{(x - l - v\tau)^2}{4a(t - \tau)}\right] d\tau - \\ - ah\left(h + \frac{v}{a}\right) \int_0^t \varphi(\tau) \Phi^* \times \\ \times \left(-\frac{x - l - v\tau}{2\sqrt{a(t - \tau)}} + h\sqrt{a(t - \tau)}\right) \times \\ \times \exp\left[-(x - l - v\tau)h + ah^2(t - \tau)\right] d\tau,$$

где $\Phi^*(z) = 1 - \Phi(z)$.

Все рассуждения сохраняются и при наличии в
(53) однородного нестационарного источника $f(t)$.
В этом случае справа в (56) появляется слагаемое
 $\int_0^t f(\tau) d\tau$, незначительно усложняющее выкладки.

ФУНКЦИИ ГРИНА ДЛЯ ЧАСТИЧНО ОГРАНИЧЕННОЙ ОБЛАСТИ

Наиболее сложный случай — нахождение аналити-
ческого решения задачи в $\bar{\Theta}_t = \{x \in [l + vt, \infty), t \geq 0\}$
при наличии в исходной постановке неоднородных и
нестационарных краевых функций:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + f(x,t), \quad x > l + vt, \quad t > 0; \quad (58)$$

$$T(x,t)|_{t=0} = \Phi_0(x), \quad x \geq l; \quad (59)$$

$$\left(\beta_1 \frac{\partial T}{\partial x} + \beta_2 T\right)\Big|_{x=l+vt} = \beta_3 \varphi(t), \quad t > 0; \quad (60)$$

$$|T(x,t)| < +\infty, \quad x \geq l + vt, \quad t \geq 0. \quad (61)$$

Здесь $f(x,t) \in C^0(\bar{\Omega}_t)$, $\Phi_0(x) \in C^1(\bar{\Omega}_t)$, $\varphi(t) \in C^0[0; +\infty)$ — искомое решение $T(x,t) \in C^2(\Omega_t) \cap C^0(\bar{\Omega}_t)$; $\text{grad}_x T(x,t) \in C^0(\bar{\Omega}_t)$. В этом случае целесообразно записать интегральное представление решения задачи через функцию Грина $G(x,t,x',\tau)$. Выражение (57) позволяет это сделать с минимальными выкладками. Рассмотрим последнее подробно.

Согласно (47)–(49), функция Грина для крае-
вой задачи (58)–(61) находится из условий

$$\frac{\partial G}{\partial t} = a \frac{\partial^2 G}{\partial x^2}, \quad x > l + vt, \quad t > \tau; \\ G(x,t,x',\tau)\Big|_{t=\tau} = \delta(x - x'), \\ x > l + v\tau, \quad x' > l + v\tau; \quad (62)$$

$$\left(\beta_1 \frac{\partial G}{\partial x} + \beta_2 G\right)\Big|_{x=l+vt} = 0, \quad t > \tau;$$

$$|G(x,t,x',\tau)| < +\infty, \quad x \geq l + vt, \quad t \geq \tau;$$

где $\beta_1 = 0, \beta_2 = 1$ в случае первой краевой зада-
чи; $\beta_1 = 1, \beta_2 = 0$ — второй краевой задачи;
 $\beta_1 = 1, \beta_2 = -h$ — третьей краевой задачи. Найдем
 G для третьей краевой задачи, так как остальные
случаи вытекают из последнего. Согласно (17),
функцию Грина нужно искать в виде суммы фун-

даментального решения уравнения (62) и регулярной составляющей

$$G(x, t, x', \tau) = \frac{1}{2\sqrt{\pi a(t-\tau)}} \times \exp\left[-\frac{(x-x')^2}{4a(t-\tau)}\right] + q(x, t, x', \tau). \tag{63}$$

В случае третьей краевой задачи, согласно (63), имеем для функции $q(x, t', x', \tau)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t'} &= a \frac{\partial^2 q}{\partial x^2}, \quad x > l_0 + vt', \quad t' > 0; \\ q(x, t', x', \tau)|_{t'=0} &= 0, \quad x > l_0; \\ \frac{\partial q}{\partial x}|_{x=l_0+vt'} &= h \left\{ q|_{x=l_0+vt'} - \frac{(x'-l_0) - (v+2ah)t'}{4h\sqrt{\pi}(at')^{3/2}} \times \right. \\ &\times \exp\left[-\frac{(l_0+vt'-x')^2}{4at'}\right] \left. \right\}, \quad t' > 0; \\ |q(x, t', x', \tau)| &< +\infty, \quad x > l_0 + vt', \quad t' \geq 0, \end{aligned} \tag{64}$$

где $l_0 = l + v\tau$, $t' = t - \tau$. Теперь в соответствии с подходом (57) в граничном условии (64) выделяется функция

$$\varphi(t') = \frac{(x'-l_0) - (v+2ah)t'}{4h\sqrt{\pi}(at')^{3/2}} \exp\left[-\frac{(l_0+vt'-x')^2}{4at'}\right],$$

находится ее изображение в виде, указанном в (57):

$$\begin{aligned} \bar{\varphi}\left(p - \frac{v}{\sqrt{a}}\sqrt{p}\right) &= \frac{\sqrt{p} - \left(\frac{v}{\sqrt{a}} + h\sqrt{a}\right)}{2ah\left(\sqrt{p} - \frac{v}{2\sqrt{a}}\right)} \times \\ &\times \exp\left[-\frac{x'-l_0}{\sqrt{a}}\sqrt{p} + \frac{v}{a}(x'-l_0)\right], \end{aligned}$$

и выполняется переход с помощью (57) к изображению для $\bar{q}(x, p, x', \tau)$

$$\begin{aligned} \bar{q} &= \frac{1}{2\sqrt{a}} \frac{\sqrt{p} - \left(\frac{v}{\sqrt{a}} + h\sqrt{a}\right)}{\sqrt{p}\left(\sqrt{p} + h\sqrt{a}\right)} \times \\ &\times \exp\left[-\frac{x+x'-2l_0}{\sqrt{a}}\sqrt{p} + \frac{v}{a}(x'-l_0)\right]. \end{aligned} \tag{65}$$

Обращаясь в (65) к оригиналам и учитывая (63), находим функцию Грина для третьей краевой задачи в области $x > l + vt, t > 0$:

$$\begin{aligned} G(x, t, x', \tau) &= \frac{1}{2\sqrt{\pi a(t-\tau)}} \left\{ \exp\left[-\frac{(x-x')^2}{4a(t-\tau)}\right] + \right. \\ &+ \exp\left[-\frac{(x+x'-2(l+v\tau))^2}{4a(t-\tau)} + \frac{v}{a}(x'-(l+v\tau))\right] \left. \right\} - \\ &- \left(h + \frac{v}{2a}\right) \exp\left\{[x+x'-2(l+v\tau)h] + \right. \\ &+ ah^2(t-\tau) + \frac{v}{a}[x'-(l+v\tau)] \left. \right\} \times \\ &\times \Phi^*\left(\frac{x+x'-2(l+v\tau)}{2\sqrt{a(t-\tau)}} + h\sqrt{a(t-\tau)}\right). \end{aligned}$$

Полагая в (65) $h = 0$, находим функцию Грина для второй краевой задачи

$$\begin{aligned} G(x, t, x', \tau) &= \frac{1}{2\sqrt{\pi a(t-\tau)}} \left\{ \exp\left[-\frac{(x-x')^2}{4a(t-\tau)}\right] + \right. \\ &+ \exp\left[-\frac{(x+x'-2(l+v\tau))^2}{4a(t-\tau)} + \frac{v}{a}(x'-(l+v\tau))\right] \left. \right\} - \\ &- \frac{v}{2a} \exp\left[\frac{v}{a}(x'-(l+v\tau))\right] \Phi^*\left(\frac{x+x'-2(l+v\tau)}{2\sqrt{a(t-\tau)}}\right). \end{aligned}$$

Предельный переход при $(1/h) \rightarrow 0$ в (65) приводит к функции Грина для первой краевой задачи:

$$\begin{aligned} G(x, t, x', \tau) &= \frac{1}{2\sqrt{\pi a(t-\tau)}} \left\{ \exp\left[-\frac{(x-x')^2}{4a(t-\tau)}\right] - \right. \\ &- \exp\left[-\frac{(x+x'-2(l+v\tau))^2}{4a(t-\tau)} + \frac{v}{a}(x'-(l+v\tau))\right] \left. \right\}. \end{aligned}$$

Интегральная запись аналитического решения задачи (58)–(62), согласно (8), имеет вид

$$\begin{aligned} T(x, t) &= \int_l^\infty \Phi_0(x') G(x, t, x', 0) dx' + \\ &+ a \int_0^t \left(\gamma_1 \frac{\partial G}{\partial x'} - \gamma_2 G \right)_{x'=l+v\tau} \varphi(\tau) d\tau + \\ &+ \int_0^t \int_{l+v\tau}^\infty f(x', \tau) G(x, t, x', \tau) d\tau dx', \end{aligned} \tag{66}$$

где $\gamma_1 = 1, \gamma_2 = 0$ в случае первой краевой задачи; $\gamma_1 = 0, \gamma_2 = 1$ – второй краевой задачи; $\gamma_1 = 0, \gamma_2 = -h$ – третьей краевой задачи. Движущиеся границы вызывают эффекты, которые проявляются при графическом изображении температурных функций. С этой целью в (58)–(61) рассмотрим первую краевую задачу ($\beta_1 = 0, \beta_2 = \beta_3 = 1$) при $f(x, t) = f(t), \Phi_0(x) = T_0$.

В безразмерных переменных

$$z = \frac{x}{l}; \quad Fo = \frac{at}{l^2}; \quad Pe = \frac{vl}{a}; \quad \varphi(Fo) = \frac{\varphi(t)}{T_0};$$

$$q(Fo) = \frac{f(t)l^2}{ac\rho}; \quad W(z, Fo) = \frac{T(x, t)}{T_0},$$

решение такой задачи при $\varphi(Fo) = \varphi_0 = \text{const}$, $q(Fo) = q_0 = \text{const}$ на основании (66) имеет следующий вид:

$$W(z, Fo) = \frac{\varphi_0}{2} \left\{ \Phi^* \left(\frac{z-1}{2\sqrt{Fo}} \right) + \right.$$

$$+ \exp[-Pe(z-1 - Pe\sqrt{Fo})] \times$$

$$\times \Phi^* \left(\frac{z-1}{2\sqrt{Fo}} - Pe\sqrt{Fo} \right) \left. \right\} -$$

$$- \frac{q_0(z-1)}{2\sqrt{Pe}} \Phi^* \left(\frac{z-1}{2\sqrt{Fo}} \right) + \frac{q_0(z-1 - 2PeFo)}{2Pe} \times$$

$$\times \exp[-Pe(z-1 - PeFo)] \times$$

$$\times \Phi^* \left(\frac{z-1}{2\sqrt{Fo}} - Pe\sqrt{Fo} \right) + q_0Fo. \quad (67)$$

На рис. 1 приведены построенные по соотношению (67) зависимости $T(z, Fo)$ от Fo в сечении $z = 2$ при $Pe = 0$, $\varphi_0 = 1$ и различных значениях q_0 . Характер кривых на рисунке является типичным для теплообмена в области $z > 1$ с внутренним однородным источником теплоты. Однако с появлением движения границы ситуация резко меняется, что отражено на рис. 2, построенном также по соотношению (67) при тех же условиях. При $z > 1 + PeFo$ для сечения $z = \text{const}$ имеем $0 < Fo < (z-1)/Pe$ и при $z = 2$ в интервале $Fo \in (0, 1/Pe)$ существует момент времени, при котором температура достигает максимального значения. Последнее обстоятельство имеет важное прикладное значение в термомеханике при изучении теплового удара [8],

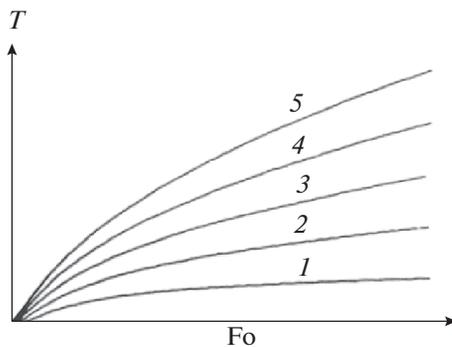


Рис. 1. Зависимости температурной функции $T(z, Fo)$ от безразмерного времени Fo в случае нагрева с постоянной температурой на границе и источником теплоты постоянной мощности в сечении $z = 2$ при $\varphi_0 = 1$, $Pe = 0$ и различных значениях мощности источника: 1 – $q_0 = 0$, 2 – 0.5, 3 – 1, 4 – 2, 5 – 3.

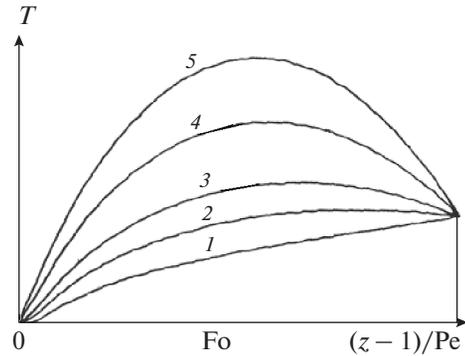


Рис. 2. Зависимости температурной функции $T(z, Fo)$ от безразмерного времени Fo в случае нагрева с постоянной температурой на границе и источником теплоты постоянной мощности в сечении $z = 2$ при $\varphi_0 = 1$, $Pe = 0.35$ и различных значениях мощности источника: 1 – $q_0 = 0$, 2 – 0.5, 3 – 1, 4 – 2, 5 – 3.

приводящего к разрывам сплошности во внутренних слоях твердого тела.

Метод тепловых потенциалов можно эффективно использовать при нахождении аналитических решений сравнительно новых задач теплопроводности с интегральным граничным условием, встречающихся при моделировании ряда процессов экологии, биологии, физики плазмы, термомеханики [1]. Здесь могут быть получены результаты, представляющие существенный интерес. Например, решение задачи

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad x > 2\sqrt{ay}(t), \quad t > 0;$$

$$T(x, 0) = 0, \quad x \geq 0, \quad (68)$$

$$|T(x, t)| < +\infty, \quad x \geq 0, \quad t \geq 0;$$

$$\int_{2\sqrt{ay}(t)}^{\infty} T(x, t) dx = 2\sqrt{ay}(t), \quad (69)$$

где $y(t)$ – известная функция времени, следует записать в виде теплового потенциала

$$T(x, t) = \int_0^t \frac{\Psi(\tau)}{\sqrt{t-\tau}} \exp \left\{ -\frac{[x - 2\sqrt{ay}(\tau)]^2}{4a(t-\tau)} \right\} d\tau.$$

Неизвестная плотность $\Psi(\tau)$ данного потенциала находится из граничного условия (69), что приводит к уравнению

$$\int_0^1 \Psi(z\tau) \left[1 - \Phi \left(\frac{y(t) - y(zt)}{\sqrt{t(1-z)}} \right) \right] dz = 2y(t)/\sqrt{\pi t}. \quad (70)$$

Пусть в (68) $y(t) = \beta t$. Операционное решение интегрального уравнения (70) имеет вид

$$\Psi(t) = \frac{2\beta}{\sqrt{\pi}} \left[1 + \beta^2 t + \left(\beta^2 t + \frac{1}{2} \right) \times \right. \\ \left. \times \Phi(\beta\sqrt{t}) \frac{\beta\sqrt{t}}{\sqrt{\pi}} \exp(-\beta^2 t) \right].$$

Пусть $y(t) = \beta\sqrt{t}$, тогда уравнение (70) имеет решение

$$\Psi(t) = \frac{2\beta}{\sqrt{\pi\gamma t}}; \quad \gamma = [1 + \Phi(\beta)] \times \\ \times [1 - \sqrt{\pi}\beta \exp(\beta^2) \Phi^*(\beta)].$$

КОРНЕВАЯ ЗАВИСИМОСТЬ

Как отмечалось выше, искусственные приемы, подстановки, преобразования могут в ряде случаев оказаться весьма эффективными при нахождении аналитических решений уравнений параболического типа в нецилиндрических областях. Рассмотрим один из таких приемов для области с границей, движущейся по корневой зависимости:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad x > \gamma\sqrt{2at}, \quad t > 0, \quad (71)$$

$$T(x, 0) = 0, \quad x \geq 0, \quad (72)$$

$$T(x, t) \Big|_{x=\gamma\sqrt{2at}} = \varphi(t), \quad t > 0, \quad (73)$$

$$|T(x, t)| < \infty, \quad x \geq \gamma\sqrt{2at}, \quad t \geq 0. \quad (74)$$

Вместо независимой переменной x вводится новая переменная $\xi = i(x/\sqrt{2at})$ (i – мнимая единица), а вместо функции $T(x, t)$ – последовательно новые функции Θ ($\xi, t) \equiv T(x, t)$, $W(\xi, t) = \exp(-\xi^2/4)\Theta(\xi, t)$. Тогда задача (71)–(74) принимает вид

$$\frac{\partial^2 W}{\partial \xi^2} + (1/2 - \xi^2/4)W + 2t \frac{\partial W}{\partial t} = 0, \quad (75)$$

$$\xi > i\gamma, \quad t > 0,$$

$$W(\xi, 0) = 0, \quad \xi \geq i\gamma, \quad (76)$$

$$W(\xi, t) \Big|_{\xi=i\gamma} = \exp(\gamma^2/4)\varphi(t), \quad t > 0, \quad (77)$$

$$|W(\xi, t)| < \infty, \quad \xi \geq i\gamma, \quad t \geq 0.$$

Пусть граничная функция $\varphi(t)$ раскладывается в ряд вида $\varphi(t) = \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} c_{k/m} t^{k/m}$, где m – произвольное число. Решение преобразованной задачи нужно искать в виде функционального ряда того же вида, но с неизвестными коэффициентами:

$$W(\xi, t) = \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} M_{k/m} t^{k/m}.$$

Уравнение (75) с условиями (76), (77) приводит к уравнению Вебера для функций параболического цилиндра $D_p(z)$:

$$d^2 M_{k/m} / d\xi^2 + (2k/m + 1/2 - \xi^2/4) M_{k/m} = 0, \\ \xi > i\gamma, \quad M_{k/m}(i\gamma) = \exp(\gamma^2/4) c_{k/m}, \\ |M_{k/m}(\xi)| < \infty, \quad \xi \geq i\gamma,$$

откуда находим $M_{k/m}(\xi) = c_{k/m} \exp(\gamma^2/4) \times D_{-2k/m-1}(-i\xi) / D_{-2k/m-1}(\gamma)$. Искомое решение в системе координат (x, t) будет иметь вид

$$T(x, t) = \exp\left(-\frac{x^2}{8at} + \gamma^2/4\right) \times \\ \times \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} c_{k/m} \frac{D_{-2k/m-1}\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right)}{D_{-2k/m-1}(\gamma)}. \quad (78)$$

Выражение (78) включает ряд частных случаев, известных в литературе. Например, пусть $\varphi(t) = T_0 = \text{const}$, тогда можно воспользоваться полученным специально для этого случая преобразованием

$$D_{-2s-1}(z) = 2^s \sqrt{\pi/2} \exp(z^2/4) i^{2s} \Phi^*(z/\sqrt{2}), \quad (79)$$

где $i^{2s} \Phi^*(z) = \int_z^\infty i^{2s-1}(y) dy$, $\Phi^*(z) = 1 - \Phi(z)$, $\Phi(z)$ – функция Лапласа.

Следует заметить, что соотношение (79) может представлять интерес для теории специальных функций. Решение (78) приводится к виду

$$T(x, t) / T_0 = \Phi^*\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right) / \Phi^*(\gamma/\sqrt{2}),$$

полученному в [8]. Если $\varphi(t) = T_0 t$, то аналогично можно найти известное решение [2]

$$\frac{T(x, t)}{T_0} = \\ = \frac{\sqrt{\pi/2} \left(1 - \frac{x^2}{2at}\right) \Phi^*\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right) - \frac{x}{\sqrt{2at}} \exp\left(-\frac{x^2}{4at}\right)}{(1 - \gamma^2) \sqrt{\pi/2} \Phi^*(\gamma/\sqrt{2}) - \gamma \exp(-\gamma^2/4)}.$$

Изложенный прием дает возможность получить более значимый результат, а именно функцию Грина первой краевой задачи для уравнения (71). Опуская длительные выкладки, приведем конечный результат

Значения нецелых корней уравнения $D_{-p-1}(z) = 0$

p_n при $z = 0.5$	p_n при $z = 1/\sqrt{2}$
-2.4486867	-2.6643553
-4.6490658	-4.9479469
-6.7988093	-7.1597082
-8.9235111	-9.3360379
-11.0326029	-11.4902931
-13.1307779	-13.6291133
-15.2207688	-15.7563625
-17.3043307	-17.8745224
-19.3826696	-19.9852978
-21.4566563	-22.0899199

$$G(x, t, x', \tau) = -\frac{e^{\frac{1}{8a} \left(\frac{x'^2}{\tau} - \frac{x^2}{t} \right)}}{2\sqrt{a\pi\tau}} \sum_{n=1}^{\infty} \Gamma(p_n + 1) \times$$

$$\times \frac{D_{-p_n-1} \left(-\frac{\beta}{\sqrt{2a}} \right)}{\frac{\partial}{\partial p} \left[D_{-p-1} \left(\frac{\beta}{\sqrt{2a}} \right) \right]_{p=p_n}} D_{-p_n-1} \left(\frac{x'}{\sqrt{2a\tau}} \right) D_{-p_n-1} \left(\frac{x}{\sqrt{2at}} \right) \left(\frac{t}{\tau} \right)^{\frac{p_n}{2}},$$

где p_n — нецелые корни уравнения $D_{-p_n-1} \left(-\frac{\beta}{\sqrt{2a}} \right) = 0$.

В таблице приводятся полученные численными методами нецелые корни уравнения $D_{-p-1}(z) = 0$ при различных фиксированных значениях аргумента z функции параболического цилиндра.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Несмотря на кажущуюся простоту математических моделей нестационарного теплопереноса в областях с движущимися во времени границами, приведенные задачи являются далеко не тривиальными для получения их точного аналитического решения. Практически изучены простейшие случаи для линейного, параболического (корневого), квадратичного законов движения границы, хотя и для этих случаев (в декартовой системе координат) аналитическая теория теплопроводности находится лишь в начале своего развития. Что касается более сложных законов движения границы как в декартовой, так и в цилиндрической (радиальный поток) и сферической (центральная симметрия) системах координат, то в [1] намечены лишь возможные пути изучения теплопереноса в такого рода областях, и предстоит большая работа по нахождению аналитических решений соответствующих задач теплопроводности, изучению свойств этих решений и

построению температурных номограмм. Как показывает анализ литературных источников в [1], при решении такого рода задач возникает большой круг проблем вычислительной математики, теории специальных функций, методов математической физики. Ситуация еще более усложняется при переносе движения границ на краевые задачи нестационарной теплопроводности для уравнений гиперболического типа на основе гипотезы А.В. Лыкова о конечной скорости распространения тепла [9–11], на деформируемые среды с учетом эффекта связанности поля температуры и деформаций в уравнении теплопроводности [12], на задачи напыления высокотемпературного теплозащитного покрытия [13] и др. Указанные случаи представляют собой практически не разработанный область аналитической теории теплопроводности твердых тел.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Карташов Э.М.* Аналитические методы решения краевых задач нестационарной теплопроводности в областях с движущимися границами (Обзор, посвященный 275-летию АН СССР) // ИФЖ. 2001. Т. 74. № 2. С. 171.
2. *Карташов Э.М.* Аналитические методы в теории теплопроводности твердых тел. М.: Высшая школа, 2001. 540 с.
3. *Лыков А.В.* Некоторые аналитические методы решения задач нестационарной теплопроводности (Обзор) // Изв. АН СССР. Энергетика и транспорт. 1969. № 2. С. 3.
4. *Положий Г.Н.* Уравнения математической физики. М.: Высшая школа, 1964. 560 с.
5. *Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уральцева Н.Н.* Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. М.: Наука, 1967. 736 с.
6. *Масленникова В.Н.* Дифференциальные уравнения в частных производных. М.: Изд-во РУДН, 1997. 446 с.
7. *Тихонов А.Н., Самарский А.А.* Уравнения математической физики. М.: Наука, 1966. 724 с.
8. *Карташов Э.М., Кудинов В.А.* Аналитическая теория теплопроводности и прикладной термоупругости. М.: URSS, 2012. 656 с.
9. *Лыков А.В.* Применение методов термодинамики необратимых процессов к исследованию тепло- и массообмена // ИФЖ. 1965. Т. 9. № 3. С. 287.
10. *Карташов Э.М.* Оригиналы операционных изображений для обобщенных задач нестационарной теплопроводности // Тонкие химические технологии. 2019. Т. 14. № 24. С. 77.
11. *Формалев В.Ф.* Уравнения математической физики. М.: URSS, 2020. 646 с.
12. *Колпациков В.А., Яновский С.Ю.* Связанная динамическая задача термоупругости для полупространства с учетом тепловой памяти // ИФЖ. 1979. Т. 36. № 6. С. 1093.
13. *Формалев В.Ф., Дегтяренко Р.А., Гарибян Б.А., Колесник С.А.* Моделирование тепломассопереноса при периодическом напылении высокотемпературного теплозащитного покрытия // ТВТ. 2021. Т. 59. № 4. С. 566.

УДК 537.21;536.2.02

О ФУНДАМЕНТАЛЬНОМ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ ЭЛЕКТРОСТАТИКИ И ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ДЛЯ ПЛОСКОСЛОИСТЫХ СРЕД

© 2022 г. А. Б. Петрин*

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*E-mail: a_petrin@mail.ru

Поступила в редакцию 05.07.2021 г.

После доработки 27.08.2021 г.

Принята к публикации 28.09.2021 г.

Исследуется электростатическое поле от точечного заряда, расположенного внутри или снаружи плоскостойкой среды (фундаментальное решение задачи электростатики для плоскостойких сред). Для произвольных плоскостойких сред решение задачи получено в виде одномерного интеграла. На основе аналогии между электростатикой и теплопроводностью рассматривается применение полученных электростатических решений к задачам теплопроводности.

DOI: 10.31857/S0040364422040056

ВВЕДЕНИЕ

Во многих современных технических приложениях возникает необходимость анализа электромагнитных полей и теплообмена в плоскостойких структурах. В задачах теплопроводности в слоистых средах используется матричный метод [1–4], который, как правило, применяется для решения двумерных задач. Подобные матричные методы успешно применяются в задачах излучения и распространения электромагнитных полей в плоскостойких средах [5]. В работах [6–8] предложен оригинальный вариант строгой электромагнитной теории излучения элементарного диполя, расположенного на границе или внутри плоскостойкой структуры, являющийся развитием работ [9, 10]. В частности, в [6–8] продемонстрирован метод аналитического упрощения решения, имеющий потенциально важное общетеоретическое значение. Обобщение данного метода для случая произвольного количества пленок в плоскостойкой структуре [11] позволило привести формулы для излучаемых полей к одномерным интегралам, что существенно упростило анализ задачи и ускорило численные расчеты.

В данном исследовании методы работ [6–8, 11] применяются сначала к нахождению трехмерного фундаментального решения электростатики в плоскостойких средах (нахождению поля точечного заряда), а затем к аналогичной задаче – нахождению трехмерного фундаментального решения задачи теплопроводности в плоскостойких средах (нахождению распределения поля температуры от точечного источника тепла в таких средах).

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ. ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ ТОЧЕЧНОГО ЗАРЯДА, РАСПОЛОЖЕННОГО ВНУТРИ ПЛОСКОСЛОИСТОЙ СТРУКТУРЫ

Рассматривается задача нахождения электростатического поля от заряда, расположенного внутри плоскостойкой структуры. Пусть для общности этот заряд расположен внутри плоской слоистой структуры, состоящей из нескольких пленок и из окружающих слоистую структуру двух полупространств. Для определенности сначала считается, что заряд расположен в одной из пленок, после чего задача обобщается на случай, когда заряд расположен на их границе или в одном из полупространств.

Пусть общее число пленок N_f , толщина m -й пленки d_m , тогда полная толщина слоистой структуры $d_{\text{tot}} = \sum_{m=1}^{N_f} d_m$. Общее число границ между пленками и между пленками и полупространствами $N = N_f + 1$. Области пространства пронумерованы $j = 1, \dots, (N + 1)$ (на рис. 1 показана для примера задача с $N = 4$ и $N_f = 3$). Предположим, что пленки имеют абсолютные диэлектрические проницаемости, равные ϵ_j , а перед и за слоистой структурой находятся однородные полупространства с проницаемостями ϵ_1 и ϵ_{N+1} . Координаты N границ пленок по оси Z обозначены следующим образом: $z_1 = 0$, $z_j = \sum_{m=1}^{j-1} d_m$ при $j = 2, \dots, N$.

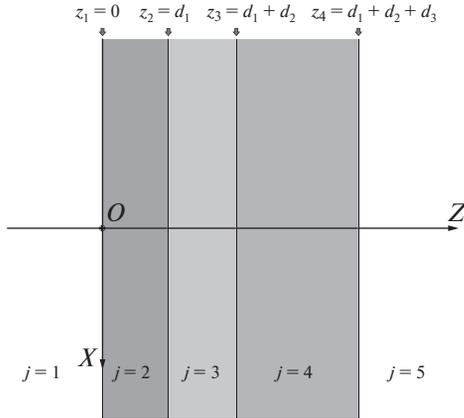


Рис. 1. Геометрия плоскостной структуры, состоящей из трех пленок.

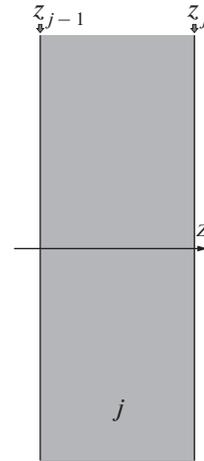


Рис. 2. Пленка с номером j , расположенная между границами z_{j-1} и z_j .

Уравнение электростатики (или квазиэлектростатики) в области с номером j можно записать с помощью электрического потенциала ϕ_j в виде

$$\Delta\phi_j = -\frac{\rho}{\epsilon_j}, \quad (1)$$

где Δ – оператор Лапласа, ϵ_j – абсолютная диэлектрическая проницаемость j -й области, ρ – объемная плотность заряда.

Решая уравнения Лапласа в каждой области с учетом граничных условий, найдем электрическое поле во всех областях. Рассмотрим сначала следующую вспомогательную задачу.

ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ В СЛОЕ, СВОБОДНОМ ОТ ЗАРЯДОВ

Пусть в области с номером j нет сторонних зарядов между границами z_{j-1} и z_j (рис. 2). Диэлектрическая проницаемость среды в этой пленке равна ϵ_j .

Электрический потенциал можно представить в виде фурье-разложения

$$\phi_j(x, y, z) = (2\pi)^{-2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta e^{i\xi x + i\eta y} \hat{\phi}_j(\xi, \eta, z). \quad (2)$$

Подставим в уравнение (1) потенциал в виде (2), тогда в рассматриваемой области можно записать

$$\frac{d^2 \hat{\phi}_j}{dz^2} - \gamma^2 \hat{\phi}_j = 0, \quad (3)$$

где $\gamma = \sqrt{\xi^2 + \eta^2}$.

Уравнения (3) при фиксированных значениях ξ и η – обыкновенные дифференциальные уравнения относительно переменной z . Задача состо-

ит в нахождении из (3) функции $\hat{\phi}_j$ в рассматриваемой области.

Линейно независимые решения уравнений (3) можно записать в виде

$$\phi_j^\pm(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\phi}_j^\pm e^{\mp\gamma z} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta. \quad (4)$$

Тогда общее решение уравнений (3) в области $[z_{j-1}, z_j]$ имеет вид

$$\begin{aligned} \phi_j(x, y, z) = & \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\phi}_j^+ e^{-\gamma(z-z_{j-1})} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta + \\ & + \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\phi}_j^- e^{\gamma(z-z_j)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta, \end{aligned} \quad (5)$$

где $\hat{\phi}_j^+$ и $\hat{\phi}_j^-$ – функции только от ξ и η .

Следует особо отметить следующую принципиально важную идею: общее решение уравнения Лапласа, состоящее из линейной комбинации решений (4), должно быть записано таким образом, чтобы существовали обратные преобразования Фурье. Поэтому форма записи общего решения для поля в слое (5) не случайна, она выделяет физически верное решение. Первое слагаемое справа в формуле (5) представляет собой поле от источников, находящихся слева от левой границы слоя. При этом поле будет уменьшаться при удалении вправо (при удалении от источников слева от слоя). Второе слагаемое справа в (5) представляет собой поле от источников, находящихся справа от правой границы слоя (внутри слоя источников нет по условию). Это поле будет уменьшаться при удалении влево (от источников справа от слоя).

Из (5) найдем фурье-образ электрического потенциала и нормальную компоненту индукции электрического поля в границах области j :

$$\begin{pmatrix} \hat{\Phi}_j \\ \hat{D}_{j,z} \end{pmatrix} \Big|_{z=z_{j-1}} = \begin{pmatrix} 1 & e^{-\gamma d_{j-1}} \\ \varepsilon_j \gamma & -\varepsilon_j \gamma e^{-\gamma d_{j-1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\Phi}_j^+ \\ \hat{\Phi}_j^- \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} \hat{\Phi}_j \\ \hat{D}_{j,z} \end{pmatrix} \Big|_{z=z_j} = \begin{pmatrix} e^{-\gamma d_{j-1}} & 1 \\ \varepsilon_j \gamma e^{-\gamma d_{j-1}} & -\varepsilon_j \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\Phi}_j^+ \\ \hat{\Phi}_j^- \end{pmatrix},$$

где $d_{j-1} = z_j - z_{j-1}$.

Вводя вектор-столбец $\hat{\mathbf{F}}_j = (\hat{\Phi}_j^+; \hat{\Phi}_j^-)^T$, запишем полученные выражения в матричном виде

$$\begin{pmatrix} \hat{\Phi}_j \\ \hat{D}_{j,z} \end{pmatrix} \Big|_{z=z_{j-1}} = \mathbf{L}_j \times \hat{\mathbf{F}}_j, \quad (6)$$

$$\begin{pmatrix} \hat{\Phi}_j \\ \hat{D}_{j,z} \end{pmatrix} \Big|_{z=z_j} = \mathbf{R}_j \times \hat{\mathbf{F}}_j, \quad (7)$$

где

$$\mathbf{L}_j = \begin{pmatrix} 1 & e^{-\gamma d_{j-1}} \\ \varepsilon_j \gamma & -\varepsilon_j \gamma e^{-\gamma d_{j-1}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}_j = \begin{pmatrix} e^{-\gamma d_{j-1}} & 1 \\ \varepsilon_j \gamma e^{-\gamma d_{j-1}} & -\varepsilon_j \gamma \end{pmatrix}. \quad (8)$$

ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ В МНОГОСЛОЙНОЙ СТРУКТУРЕ, СВОБОДНОЙ ОТ СТОРОННИХ ЗАРЯДОВ

Рассмотрим теперь многослойную структуру, внутри которой нет сторонних зарядов. Рассмотрим границу $z = z_j$ между областями с номерами j и $j+1$. Непрерывность тангенциальных компонент напряженностей электрического поля ($E_{j,x}$, $E_{j+1,x}$ и $E_{j,y}$, $E_{j+1,y}$) и нормальных компонент электрической индукции ($D_{j,z} = -\varepsilon_j \partial \varphi_j / \partial z$ и $D_{j+1,z} = -\varepsilon_{j+1} \partial \varphi_{j+1} / \partial z$) на этой границе можно записать через соответствующие электрические потенциалы φ_j и φ_{j+1} в виде

$$\varphi_j \Big|_{(x,y,z_j)} - \varphi_{j+1} \Big|_{(x,y,z_j)} = 0,$$

$$\varepsilon_j \frac{\partial}{\partial z} \varphi_j \Big|_{(x,y,z_j)} - \varepsilon_{j+1} \frac{\partial}{\partial z} \varphi_{j+1} \Big|_{(x,y,z_j)} = 0,$$

где электрический потенциал φ_{j+1} в области $j+1$ выражается формулой (5), в которой произведена замена индексов $j \rightarrow j+1$. Так как уравнения электростатики (квазистатики) — линейные, то граничные условия должны выполняться для каждого члена фурье-разложения, т.е. для фурье-образов соответствующих величин

$$\hat{\Phi}_j \Big|_{(\xi,\eta,z_j)} - \hat{\Phi}_{j+1} \Big|_{(\xi,\eta,z_j)} = 0, \quad (9)$$

$$\hat{D}_{j,z} \Big|_{(\xi,\eta,z_j)} - \hat{D}_{j+1,z} \Big|_{(\xi,\eta,z_j)} = 0. \quad (10)$$

Записывая граничные условия (9), (10) с помощью выражений (6), (7), получаем матричное уравнение на границе $z = z_j$

$$\mathbf{R}_j \times \hat{\mathbf{F}}_j = \mathbf{L}_{j+1} \times \hat{\mathbf{F}}_{j+1}, \quad (11)$$

где матрицы \mathbf{R}_j и \mathbf{L}_{j+1} выражаются формулами (8).

Уравнение (11) можно записать для $j = 2, \dots, (N-1)$, где $(N+1)$ — общее число областей, N — число границ, т.е. для всех границ, исключая первую ($j = 1$) и последнюю ($j = N$), или $z_1 = 0$ и $z_N = d_{\text{tot}} = \sum_{m=1}^{N-1} d_m$, где d_{tot} — общая толщина слоистой структуры (сумма толщин пленок, составляющих рассматриваемую структуру).

Общее решение для электрического потенциала в области $j = 1$ (в интервале $(-\infty, z_1]$, где $z_1 = 0$) записывается в виде

$$\varphi_1(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\Phi}_1^+ e^{-\gamma z} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta +$$

$$+ \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\Phi}_1^- e^{\gamma z} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta. \quad (12)$$

Тогда, учитывая, что из (12) следует

$$\begin{pmatrix} \hat{\Phi}_1 \\ \hat{D}_{1,z} \end{pmatrix} \Big|_{z=z_1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon_1 \gamma & -\varepsilon_1 \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\Phi}_1^+ \\ \hat{\Phi}_1^- \end{pmatrix},$$

запишем граничные условия на границе $z_1 = 0$:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon_1 \gamma & -\varepsilon_1 \gamma \end{pmatrix} \times \hat{\mathbf{F}}_1 = \mathbf{L}_2 \times \hat{\mathbf{F}}_2. \quad (13)$$

Аналогично, общее решение для электрического потенциала в области $j = N+1$ (в интервале $[z_N, +\infty)$) имеет вид

$$\varphi_{N+1}(x, y, z) =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\Phi}_{N+1}^+ e^{-\gamma(z-z_N)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta +$$

$$+ \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\Phi}_{N+1}^- e^{\gamma(z-z_N)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta. \quad (14)$$

Тогда, учитывая, что из (14) следует

$$\begin{pmatrix} \hat{\Phi}_{N+1} \\ \hat{D}_{N+1,z} \end{pmatrix} \Big|_{z=z_N} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon_{N+1} \gamma & -\varepsilon_{N+1} \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\Phi}_{N+1}^+ \\ \hat{\Phi}_{N+1}^- \end{pmatrix},$$

запишем граничные условия на границе z_N в виде

$$\mathbf{R}_N \times \hat{\mathbf{F}}_N = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon_{N+1} \gamma & -\varepsilon_{N+1} \gamma \end{pmatrix} \times \hat{\mathbf{F}}_{N+1}. \quad (15)$$

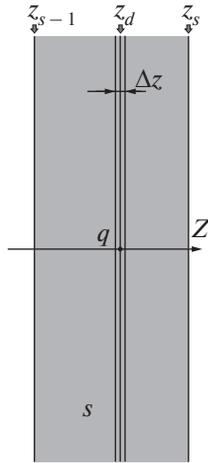


Рис. 3. Точечный заряд q , расположенный в точке $(0, 0, z_d)$ в области с номером s .

Уравнения (11), (13) и (15) позволяют связать вектор-столбцы электрического потенциала в первой и последней областях задачи (в полупространствах, вне плоскостойной структуры):

$$\hat{\mathbf{F}}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \epsilon_1 \gamma & -\epsilon_1 \gamma \end{pmatrix}^{-1} \left[\mathbf{L}_2 \times (\mathbf{R}_2)^{-1} \right] \dots \times \left[\mathbf{L}_N \times (\mathbf{R}_N)^{-1} \right] \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \epsilon_{N+1} \gamma & -\epsilon_{N+1} \gamma \end{pmatrix} \hat{\mathbf{F}}_{N+1},$$

или

$$\hat{\mathbf{F}}_1 = \mathbf{M} \times \hat{\mathbf{F}}_{N+1}, \tag{16}$$

где матрица \mathbf{M} имеет вид $\mathbf{M} = \mathbf{T}_1 \times \left(\prod_{m=2}^N \mathbf{T}_m \right) \times \mathbf{T}_{N+1}$,

$$\mathbf{T}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \epsilon_1 \gamma & -\epsilon_1 \gamma \end{pmatrix}^{-1}, \quad \mathbf{T}_m = \mathbf{L}_m \times (\mathbf{R}_m)^{-1},$$

$$\mathbf{T}_{N+1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \epsilon_{N+1} \gamma & -\epsilon_{N+1} \gamma \end{pmatrix}.$$

Если известен, например, потенциал какого-то известного распределения зарядов в полупространстве $j = 1$, а значит, функция $\hat{\phi}_1^+$ вектор-столбца $\hat{\mathbf{F}}_1$, то из уравнения (16) можно найти функцию $\hat{\phi}_1^-$ и, значит, потенциал в полупространстве $j = 1$ от зарядов, индуцированных в плоскостойной структуре, по формуле

$$\phi_{1,\text{ind}}(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\phi}_1^- e^{\gamma z} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta,$$

функцию $\hat{\phi}_{N+1}^+$ вектор-столбца $\hat{\mathbf{F}}_{N+1}$ и потенциал от зарядов в полупространстве $j = N + 1$, индуцированных в плоскостойной структуре, по формуле

$$\phi_{N+1,\text{ind}}(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\phi}_{N+1}^+ e^{-\gamma(z-z_N)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta.$$

ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ В МНОГОСЛОЙНОЙ СТРУКТУРЕ ОТ ТОЧЕЧНОГО СТОРОННЕГО ЗАРЯДА

Пусть имеется точечный заряд q , расположенный в точке $(0, 0, z_d)$ в области с номером s (рис. 3).

Пусть этот заряд определяется распределением плотности

$$\rho(x, y, z) = q \delta(x) \delta(y) \delta(z - z_d),$$

где $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака. Тогда фурье-образ этого распределения определяется следующим выражением:

$$\hat{\rho}(\xi, \eta, z) = q \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) \delta(y) \delta(z - z_d) \times e^{-i(\xi x + \eta y)} dx dy = q \delta(z - z_d).$$

Пусть этот точечный заряд находится в бесконечно тонком слое $\left(z_d - \frac{\Delta z}{2}, z_d + \frac{\Delta z}{2} \right)$. Тогда уравнения электростатики $\text{rot } \mathbf{E} = 0$ и $\text{div } \mathbf{D} = \rho$, записанные для фурье-образов полей, можно записать (при $\Delta z \rightarrow 0$) в виде

$$\begin{cases} i\eta \hat{E}_{s,z} - \frac{\Delta \hat{E}_{s,y}}{\Delta z} = 0, \\ \frac{\Delta \hat{E}_{s,x}}{\Delta z} - i\xi \hat{E}_{s,z} = 0, \\ i\xi \hat{E}_{s,y} - i\eta \hat{E}_{s,x} = 0, \\ i\xi \hat{D}_{s,x} + i\eta \hat{D}_{s,y} + \frac{\Delta \hat{D}_{s,z}}{\Delta z} = q \delta(z - z_d). \end{cases}$$

Отсюда получаем

$$\begin{cases} \Delta \hat{E}_{s,y} = i\eta \hat{E}_{s,z} \Delta z, \\ \Delta \hat{E}_{s,x} = i\xi \hat{E}_{s,z} \Delta z, \\ \Delta \hat{D}_{s,z} = -(i\xi \hat{D}_{s,x} + i\eta \hat{D}_{s,y}) \Delta z + q \delta(z - z_d) \Delta z. \end{cases}$$

Тогда в пределе $\Delta z \rightarrow 0$ скачок тангенциальных компонент напряженностей электрического поля и нормальной компоненты индукции элект-

трического поля при переходе через бесконечно тонкий слой с зарядом равен

$$\begin{cases} \Delta \hat{E}_{s,y} \xrightarrow{\Delta z \rightarrow 0} 0, \\ \Delta \hat{E}_{s,x} \xrightarrow{\Delta z \rightarrow 0} 0, \\ \Delta \hat{D}_{s,z} \xrightarrow{\Delta z \rightarrow 0} q. \end{cases}$$

В матричном виде эти предельные уравнения можно записать следующим образом:

$$\begin{pmatrix} \hat{E}_{s,x} \\ \hat{E}_{s,y} \\ \hat{D}_{s,z} \end{pmatrix}_{z=z_d+0} - \begin{pmatrix} \hat{E}_{s,x} \\ \hat{E}_{s,y} \\ \hat{D}_{s,z} \end{pmatrix}_{z=z_d-0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ q \end{pmatrix},$$

или в эквивалентном виде через потенциал

$$\begin{pmatrix} \hat{\phi}_s \\ \hat{D}_{s,z} \end{pmatrix}_{z=z_d+0} - \begin{pmatrix} \hat{\phi}_s \\ \hat{D}_{s,z} \end{pmatrix}_{z=z_d-0} = \begin{pmatrix} 0 \\ q \end{pmatrix}. \quad (17)$$

Выразим теперь левую часть граничного условия (17) через вектор-столбцы $\hat{\mathbf{F}}_l$ и $\hat{\mathbf{F}}_r$ полупространств снаружи плоскостойкой структуры. Для этого область с номером s разбивается на две области, обозначенные индексами l и r (левая и правая, см. рис. 3). Введем вектор-столбцы $\hat{\mathbf{F}}_l$ и $\hat{\mathbf{F}}_r$ в этих областях. Тогда члены слева от знака равенства в (17) можно выразить как

$$\begin{pmatrix} \hat{\phi}_s \\ \hat{D}_{s,z} \end{pmatrix}_{z=z_d-0} = \mathbf{R}_l \times \hat{\mathbf{F}}_l, \quad (18)$$

$$\begin{pmatrix} \hat{\phi}_s \\ \hat{D}_{s,z} \end{pmatrix}_{z=z_d+0} = \mathbf{L}_r \times \hat{\mathbf{F}}_r. \quad (19)$$

Кроме того, из (11) следует, что

$$\hat{\mathbf{F}}_l = \mathbf{Q}_L \times \hat{\mathbf{F}}_s, \quad (20)$$

где матрица \mathbf{Q}_L представляется формулой

$$\mathbf{Q}_L = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon_l \gamma & -\varepsilon_l \gamma \end{pmatrix}^{-1} \left[\mathbf{L}_2 \times (\mathbf{R}_2)^{-1} \right] \times \dots \times \left[\mathbf{L}_{s-1} \times (\mathbf{R}_{s-1})^{-1} \right] \times \mathbf{L}_l,$$

в которой

$$\mathbf{L}_l = \begin{pmatrix} 1 & e^{-\gamma(z_d - z_{s-1})} \\ \varepsilon_s \gamma & -\varepsilon_s \gamma e^{-\gamma(z_d - z_{s-1})} \end{pmatrix},$$

а также

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{F}}_r &= \mathbf{Q}_R \times \hat{\mathbf{F}}_{N+1}, \\ \mathbf{Q}_R &= (\mathbf{R}_r)^{-1} \left[\mathbf{L}_{s+1} \times (\mathbf{R}_{s+1})^{-1} \right] \times \dots \times \\ &\times \left[\mathbf{L}_N \times (\mathbf{R}_N)^{-1} \right] \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon_{N+1} \gamma & -\varepsilon_{N+1} \gamma \end{pmatrix} \\ \mathbf{R}_r &= \begin{pmatrix} e^{-\gamma(z_s - z_d)} & 1 \\ \varepsilon_s \gamma e^{-\gamma(z_s - z_d)} & -\varepsilon_s \gamma \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (21)$$

Подставляя (20), (21) в (18), (19) и затем полученные выражения в (17), получаем

$$\mathbf{H}_R \times \hat{\mathbf{F}}_{N+1} = \mathbf{H}_L \times \hat{\mathbf{F}}_l + \mathbf{V}, \quad (22)$$

где $\mathbf{V} = (0, q)^T$ – вектор-столбец, характеризующий возбуждающее воздействие на плоскостойкую систему точечного заряда, а матрицы \mathbf{H}_R и \mathbf{H}_L характеризуют отклик на внешнее возбуждение слоистой структуры справа и слева от заряда и выражаются следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_R &= \begin{pmatrix} 1 & e^{-\gamma(z_s - z_d)} \\ \varepsilon_s \gamma & -\varepsilon_s \gamma e^{-\gamma(z_s - z_d)} \end{pmatrix} \mathbf{Q}_R = \\ &= \mathbf{T}_R \times \left(\prod_{m=s+1}^N \mathbf{T}_m \right) \times \mathbf{T}_{N+1}, \\ \mathbf{H}_L &= \begin{pmatrix} e^{-\gamma(z_s - z_d)} & 1 \\ \varepsilon_s \gamma e^{-\gamma(z_s - z_d)} & -\varepsilon_s \gamma \end{pmatrix} (\mathbf{Q}_L)^{-1} = \\ &= \left(\mathbf{T}_l \times \left(\prod_{m=2}^{s-1} \mathbf{T}_m \right) \times \mathbf{T}_L \right)^{-1}, \end{aligned}$$

где матрицы \mathbf{T}_m при $m \neq s$ выражаются формулой

$$\mathbf{T}_m = \mathbf{L}_m \times (\mathbf{R}_m)^{-1},$$

а матрицы \mathbf{T}_L и \mathbf{T}_R – формулами

$$\mathbf{T}_L = \mathbf{L}_l \times (\mathbf{R}_l)^{-1}, \quad \mathbf{T}_R = \mathbf{L}_r \times (\mathbf{R}_r)^{-1}.$$

Далее в рассматриваемой задаче источник полей (точечный заряд) находится исключительно внутри плоскостойкой структуры. Поэтому в столбцах $\hat{\mathbf{F}}_l$ и $\hat{\mathbf{F}}_{N+1}$ есть только компоненты волн, идущие от плоскостойкой структуры, и эти столбцы имеют вид

$$\hat{\mathbf{F}}_l = (0; \hat{\phi}_l^+)^T, \quad \hat{\mathbf{F}}_{N+1} = (\hat{\phi}_{N+1}^+; 0)^T.$$

Чтобы получить оставшиеся, отличные от нуля, компоненты $\hat{\mathbf{F}}_l$ и $\hat{\mathbf{F}}_{N+1}$ матрицы разделяются на \mathbf{H}_R и \mathbf{H}_L и каждая на элементы H_{RA} , H_{RB} , H_{RC} , H_{RD} и H_{LA} , H_{LB} , H_{LC} , H_{LD} следующим образом:

$$\mathbf{H}_R = \begin{pmatrix} H_{RA} & H_{RB} \\ H_{RC} & H_{RD} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H}_L = \begin{pmatrix} H_{LA} & H_{LB} \\ H_{LC} & H_{LD} \end{pmatrix}.$$

Тогда уравнение (22) принимает вид

$$\begin{pmatrix} H_{RA} & H_{RB} \\ H_{RC} & H_{RD} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\phi}_{N+1}^+ \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{LA} & H_{LB} \\ H_{LC} & H_{LD} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \hat{\phi}_1^- \end{pmatrix} + \mathbf{V}. \quad (23)$$

Если еще учесть, что $\mathbf{V} = (0, q)^T$, то уравнение (23) можно представить следующей системой из двух матричных уравнений:

$$H_{RA}\hat{\phi}_{N+1}^+ = H_{LB}\hat{\phi}_1^-, \quad H_{RC}\hat{\phi}_{N+1}^+ = H_{LD}\hat{\phi}_1^- + q.$$

Полученные уравнения можно снова объединить в одно матричное 2×2 уравнение

$$\begin{pmatrix} -H_{LB} & H_{RA} \\ -H_{LD} & H_{RC} \end{pmatrix} \hat{\mathbf{F}}_{\text{out}} = \begin{pmatrix} 0 \\ q \end{pmatrix}, \quad (24)$$

где введен вектор-столбец $\hat{\mathbf{F}}_{\text{out}} = (\hat{\phi}_1^-; \hat{\phi}_{N+1}^+)^T$.

Решая это уравнение, находим $\hat{\phi}_1^-$ и $\hat{\phi}_{N+1}^+$, а значит и убывающие при удалении от плоскостной структуры поля

$$\hat{\phi}_1^- = \frac{qH_{RA}}{H_{RC}H_{LB} - H_{RA}H_{LD}},$$

$$\hat{\phi}_{N+1}^+ = \frac{H_{LB}q}{H_{RC}H_{LB} - H_{RA}H_{LD}}.$$

Убывающее влево поле (в направлении $z \rightarrow -\infty$) находим по формуле

$$\varphi_1(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\phi}_1^- e^{\gamma z} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta, \quad (25)$$

и убывающее вправо поле ($z \rightarrow +\infty$) – по формуле

$$\varphi_{N+1}(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\phi}_{N+1}^+ e^{-\gamma(z-z_N)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta. \quad (26)$$

Наконец, при необходимости, зная $\hat{\mathbf{F}}_1$ и $\hat{\mathbf{F}}_{N+1}$, можно найти вектор-столбцы потенциалов в любой внутренней области $\hat{\mathbf{F}}_j$, так как они однозначно определяются граничными условиями. После этого электрический потенциал в любой из этих областей может быть найден по формуле (5). Таким образом, электромагнитные поля определяются во всем пространстве.

ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ ТОЧЕЧНОГО ЗАРЯДА, РАСПОЛОЖЕННОГО НА ГРАНИЦЕ ДВУХ ПОЛУПРОСТРАНСТВ

Теперь рассматривается простейшая задача – точечный заряд на границе двух разных однородных полупространств. Тогда $N = 1, z_0 = 0, \mathbf{H}_R = \mathbf{T}_2, \mathbf{H}_L = (\mathbf{T}_1)^{-1}$ и уравнение (22) принимает вид

$$\mathbf{T}_2 \times \hat{\mathbf{F}}_2 = (\mathbf{T}_1)^{-1} \times \hat{\mathbf{F}}_1 + \mathbf{V},$$

где $\mathbf{V} = (0, q)^T, \mathbf{T}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon_1\gamma & -\varepsilon_1\gamma \end{pmatrix}^{-1}, \mathbf{T}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon_2\gamma & -\varepsilon_2\gamma \end{pmatrix}$, т.е.

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon_2\gamma & -\varepsilon_2\gamma \end{pmatrix} \times \hat{\mathbf{F}}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon_1\gamma & -\varepsilon_1\gamma \end{pmatrix} \times \hat{\mathbf{F}}_1 + \mathbf{V}.$$

В рассматриваемой задаче заряд находится на границе, поэтому в столбцах $\hat{\mathbf{F}}_1$ и $\hat{\mathbf{F}}_2$ есть только компоненты волн, идущих от границы полупространств. Данные столбцы имеют вид $\hat{\mathbf{F}}_1 = (0; \hat{\phi}_1^-)^T, \hat{\mathbf{F}}_2 = (\hat{\phi}_2^+; 0)^T$.

Матрицы \mathbf{H}_R и \mathbf{H}_L имеют вид

$$\mathbf{H}_R = \begin{pmatrix} H_{RA} & H_{RB} \\ H_{RC} & H_{RD} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon_2\gamma & -\varepsilon_2\gamma \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H}_L = \begin{pmatrix} H_{LA} & H_{LB} \\ H_{LC} & H_{LD} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon_1\gamma & -\varepsilon_1\gamma \end{pmatrix}.$$

Вводя вектор-столбец $\hat{\mathbf{F}}_{\text{out}} = (\hat{\phi}_1^-; \hat{\phi}_2^+)^T$, уравнение (24) можно записать в виде

$$\begin{pmatrix} -H_{LB} & H_{RA} \\ -H_{LD} & H_{RC} \end{pmatrix} \hat{\mathbf{F}}_{\text{out}} = \begin{pmatrix} 0 \\ q \end{pmatrix},$$

или в явном виде

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ \varepsilon_1\gamma & \varepsilon_2\gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\phi}_1^- \\ \hat{\phi}_2^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ q \end{pmatrix}. \quad (27)$$

Решение уравнения (27) имеет вид

$$\hat{\phi}_1^- = \hat{\phi}_2^+ = \frac{q}{\gamma(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)}.$$

Тогда потенциал поля заряда в первом полупространстве (в области $j = 1$) равен

$$\varphi_1(x, y, z) = \frac{q}{(2\pi)^2(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{\gamma z}}{\gamma} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta,$$

а во втором полупространстве (в области $j = 2$)

$$\varphi_2(x, y, z) = \frac{q}{(2\pi)^2(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\gamma z}}{\gamma} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta.$$

Переходя к полярным координатам в плоскостях (x, y) и (ξ, η) по формулам

$$\begin{aligned} x &= \rho \cos \psi, & y &= \rho \sin \psi, \\ \xi &= \lambda \cos \vartheta, & \eta &= \lambda \sin \vartheta, \end{aligned} \quad (28)$$

получим

$$\begin{aligned} \Phi_1(\rho, \psi, z) &= \frac{q}{(2\pi)^2(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \times \\ &\times \int_0^{+\infty} \left(\int_0^{2\pi} e^{i\rho\lambda \cos(\psi - \vartheta)} d\vartheta \right) \frac{e^{\lambda z}}{\lambda} \lambda d\lambda, \\ \Phi_2(\rho, \psi, z) &= \frac{q}{(2\pi)^2(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \times \\ &\times \int_0^{+\infty} \left(\int_0^{2\pi} e^{i\rho\lambda \cos(\psi - \vartheta)} d\vartheta \right) \frac{e^{-\lambda z}}{\lambda} \lambda d\lambda. \end{aligned}$$

Учитывая, что

$$\int_0^{2\pi} e^{i\rho\lambda \cos(\psi - \vartheta)} d\vartheta = 2\pi J_0(\rho\lambda), \quad (29)$$

находим

$$\Phi_1(\rho, \psi, z) = \frac{q}{2\pi(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \int_0^{+\infty} J_0(\rho\lambda) e^{\lambda z} d\lambda \quad (30)$$

при $z \leq 0$,

$$\Phi_2(\rho, \psi, z) = \frac{q}{2\pi(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \int_0^{+\infty} J_0(\rho\lambda) e^{-\lambda z} d\lambda \quad (31)$$

при $z \geq 0$.

С использованием табличного интеграла $\int_0^{+\infty} J_0(\rho\lambda) e^{-\lambda z} d\lambda = 1/\sqrt{\rho^2 + z^2}$ при $z \geq 0$ интегралы в (30), (31) равны $1/\sqrt{\rho^2 + z^2}$ [12], и получаются известные выражения [13]

$$\Phi_1(\rho, \psi, z) = \frac{q}{2\pi(\epsilon_1 + \epsilon_2)\sqrt{\rho^2 + z^2}} \quad \text{при } z \leq 0,$$

$$\Phi_2(\rho, \psi, z) = \frac{q}{2\pi(\epsilon_1 + \epsilon_2)\sqrt{\rho^2 + z^2}} \quad \text{при } z \geq 0.$$

Если диэлектрические проницаемости полупространств одинаковы ($\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon$), т.е. точечный заряд находится в однородном пространстве, то получается известное выражение для потенциала точечного заряда в цилиндрической системе координат

$$\Phi(\rho, \psi, z) = \frac{q}{4\pi\epsilon\sqrt{\rho^2 + z^2}}.$$

ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ ТОЧЕЧНОГО ЗАРЯДА, РАСПОЛОЖЕННОГО НА НЕКОТОРОМ РАССТОЯНИИ ОТ ГРАНИЦЫ ДВУХ ПОЛУПРОСТРАНСТВ

Рассматривается задача нахождения электрического потенциала от точечного заряда, распо-

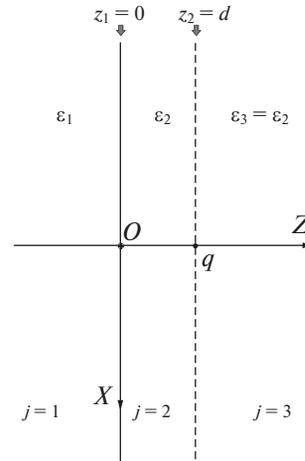


Рис. 4. Точечный заряд q , расположенный на расстоянии d от плоской границы двух полупространств.

ложенного на расстоянии d от плоской границы двух полупространств (рис. 4). Этот случай можно рассмотреть, как задачу нахождения электрического потенциала от точечного заряда, расположенного на поверхности пленки толщины d , причем диэлектрические постоянные этой пленки и полупространства справа равны. Таким образом, имеются три области плоскостной структуры. Индекс $j = 1$ соответствует полупространству с ϵ_1 , $j = 2$ – пленке с ϵ_2 , а $j = 3$ – свободному полупространству с $\epsilon_3 = \epsilon_2$.

Тогда $N = 2$, $z_d = z_2 = d$, $\mathbf{H}_R = \mathbf{T}_3$, $\mathbf{H}_L = (\mathbf{T}_1 \times \mathbf{T}_2)^{-1}$ и уравнение (22) принимает вид

$$\mathbf{T}_3 \times \hat{\mathbf{F}}_3 = (\mathbf{T}_1 \times \mathbf{T}_2)^{-1} \times \hat{\mathbf{F}}_1 + \mathbf{V},$$

где матрицы выражаются следующими формулами:

$$\mathbf{T}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \epsilon_1\gamma & -\epsilon_1\gamma \end{pmatrix}^{-1},$$

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_2 &= \mathbf{L}_2 \times (\mathbf{R}_2)^{-1} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & e^{-\gamma d} \\ \epsilon_2\gamma & -\epsilon_2\gamma e^{-\gamma d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\gamma d} & 1 \\ \epsilon_2\gamma e^{-\gamma d} & -\epsilon_2\gamma \end{pmatrix}^{-1}, \end{aligned}$$

$$\mathbf{T}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \epsilon_3\gamma & -\epsilon_3\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \epsilon_2\gamma & -\epsilon_2\gamma \end{pmatrix},$$

а вектор столбец точечного заряда равен $\mathbf{V} = (0, q)^T$.

Учитывая, что $(\mathbf{T}_1 \times \mathbf{T}_2)^{-1} = \mathbf{T}_2^{-1} \times \mathbf{T}_1^{-1}$, получаем

$$\mathbf{H}_L = \begin{pmatrix} H_{LA} & H_{LB} \\ H_{LC} & H_{LD} \end{pmatrix} = (\mathbf{T}_1 \times \mathbf{T}_2)^{-1} = \mathbf{T}_2^{-1} \times \mathbf{T}_1^{-1} =$$

$$= \begin{pmatrix} e^{-\gamma d} & 1 \\ \varepsilon_2 \gamma e^{-\gamma d} & -\varepsilon_2 \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & e^{-\gamma d} \\ \varepsilon_2 \gamma & -\varepsilon_2 \gamma e^{-\gamma d} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon_1 \gamma & -\varepsilon_1 \gamma \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H}_R = \begin{pmatrix} H_{RA} & H_{RB} \\ H_{RC} & H_{RD} \end{pmatrix} = \mathbf{T}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon_2 \gamma & -\varepsilon_2 \gamma \end{pmatrix}.$$

После введения вектор-столбца $\hat{\mathbf{F}}_{\text{out}} = (\hat{\phi}_1^-; \hat{\phi}_3^+)^T$ уравнение (24) для данной задачи выглядит так

$$\begin{pmatrix} -H_{LB} & 1 \\ -H_{LD} & \varepsilon_2 \gamma \end{pmatrix} \hat{\mathbf{F}}_{\text{out}} = \begin{pmatrix} 0 \\ q \end{pmatrix}. \quad (32)$$

Решая линейное уравнение (32), получаем

$$\hat{\phi}_1^- = \frac{q e^{-\gamma d}}{\gamma(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)}, \quad (33)$$

$$\hat{\phi}_3^+ = \frac{q(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{2\varepsilon_2(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)} \frac{e^{-2\gamma d}}{\gamma} + \frac{q}{2\gamma\varepsilon_2}. \quad (34)$$

Следует отметить, что при $d \rightarrow 0$ получаются формулы для заряда на плоской границе полупространств: $\hat{\phi}_1^- = \hat{\phi}_3^+ = q/\gamma(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$.

Далее из (33), (34) по формулам (25), (26) при $N = 2$ получаем потенциал в полупространствах $j = 1$ и $j = 3$:

$$\varphi_1(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\phi}_1^- e^{\gamma z} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta =$$

$$= \frac{q}{(2\pi)^2 (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{\gamma(z-d)}}{\gamma} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta,$$

$$\varphi_3(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\phi}_3^+ e^{-\gamma(z-d)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{q(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{2\varepsilon_2(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\gamma(z+d)}}{\gamma} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta +$$

$$+ \frac{q}{(2\pi)^2 2\varepsilon_2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\gamma(z-d)}}{\gamma} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta.$$

Переходя к полярным координатам в плоскостях (x, y) и (ξ, η) по формулам (28), приходим к

$$\varphi_1(\rho, \psi, z) = \frac{q}{(2\pi)^2 (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)} \times$$

$$\times \int_0^{+\infty} \left(\int_0^{2\pi} e^{i\rho\lambda \cos(\psi-\vartheta)} d\vartheta \right) \frac{e^{\lambda(z-d)}}{\lambda} \lambda d\lambda,$$

$$\varphi_3(\rho, \psi, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{q(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{2\varepsilon_2(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)} \times$$

$$\times \int_0^{+\infty} \left(\int_0^{2\pi} e^{i\rho\lambda \cos(\psi-\vartheta)} d\vartheta \right) \frac{e^{-\lambda(z+d)}}{\lambda} \lambda d\lambda +$$

$$+ \frac{q}{(2\pi)^2 2\varepsilon_2} \int_0^{+\infty} \left(\int_0^{2\pi} e^{i\rho\lambda \cos(\psi-\vartheta)} d\vartheta \right) \frac{e^{-\lambda(z-d)}}{\lambda} \lambda d\lambda.$$

Снова, учитывая (29), находим

$$\varphi_1(\rho, \psi, z) = \frac{q}{2\pi(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)} \times$$

$$\times \int_0^{+\infty} J_0(\rho\lambda) e^{\lambda(z-d)} d\lambda \text{ при } z \leq 0,$$

$$\varphi_3(\rho, \psi, z) = \frac{q(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{4\pi\varepsilon_2(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)} \times$$

$$\times \int_0^{+\infty} J_0(\rho\lambda) e^{-\lambda(z+d)} d\lambda +$$

$$+ \frac{q}{4\pi\varepsilon_2} \int_0^{+\infty} J_0(\rho\lambda) e^{-\lambda(z-d)} d\lambda \text{ при } z \geq d.$$

Используя табличный интеграл $\int_0^{+\infty} J_0(\rho\lambda) e^{-\lambda\beta} d\lambda = 1/\sqrt{\rho^2 + \beta^2}$ при $\beta \geq 0$, получаем

$$\varphi_1(\rho, \psi, z) = \frac{q}{2\pi(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\sqrt{\rho^2 + (z-d)^2}} \text{ при } z \leq 0,$$

$$\varphi_3(\rho, \psi, z) = \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)q}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)4\pi\varepsilon_2\sqrt{\rho^2 + (z+d)^2}} +$$

$$+ \frac{q}{4\pi\varepsilon_2\sqrt{\rho^2 + (z-d)^2}} \text{ при } z \geq d. \quad (35)$$

Учитывая (13) и выражения $\hat{\mathbf{F}}_1 = (0; \hat{\phi}_1^-)^T$ и $\hat{\mathbf{F}}_2 = (\hat{\phi}_2^+; \hat{\phi}_2^-)^T$, находим потенциал при $0 \leq z \leq d$, т.е. в слое $j = 2$:

$$\begin{pmatrix} 1 & e^{-\gamma d} \\ \varepsilon_2 \gamma & -\varepsilon_2 \gamma e^{-\gamma d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\phi}_2^+ \\ \hat{\phi}_2^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon_1 \gamma & -\varepsilon_1 \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \hat{\phi}_1^- \end{pmatrix}.$$

Подставляя выражение (33) для $\hat{\phi}_1^-$, получаем уравнение

$$\begin{pmatrix} 1 & e^{-\gamma d} \\ \varepsilon_2 \gamma & -\varepsilon_2 \gamma e^{-\gamma d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\phi}_2^+ \\ \hat{\phi}_2^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q e^{-\gamma d} / \gamma (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \\ -q \varepsilon_1 e^{-\gamma d} / (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \end{pmatrix},$$

из которого следует

$$\hat{\phi}_2^+ = \frac{q e^{-\gamma d} \varepsilon_2 - \varepsilon_1}{2\gamma \varepsilon_2 \varepsilon_1 + \varepsilon_2}, \quad (36)$$

$$\hat{\phi}_2^- = \frac{q}{2\gamma \varepsilon_2}. \quad (37)$$

Тогда уравнение (5) для слоя $j = 2$ в рассматриваемой задаче записывается в виде

$$\begin{aligned} \varphi_2(x, y, z) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\phi}_2^+ e^{-\gamma z} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta + \\ &+ \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\phi}_2^- e^{\gamma(z-d)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta. \end{aligned}$$

Подставляя в последнее выражение (36), (37), получаем

$$\begin{aligned} \varphi_2(x, y, z) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{q \varepsilon_2 - \varepsilon_1}{2\varepsilon_2 \varepsilon_1 + \varepsilon_2} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\gamma(z+d)}}{\gamma} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta + \\ &+ \frac{q}{(2\pi)^2} \frac{1}{2\varepsilon_2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{\gamma(z-d)}}{\gamma} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta. \end{aligned}$$

Переходя к полярным координатам в плоскостях (x, y) и (ξ, η) по формулам (28), записываем

$$\begin{aligned} \varphi_2(\rho, \psi, z) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{q \varepsilon_2 - \varepsilon_1}{2\varepsilon_2 \varepsilon_1 + \varepsilon_2} \times \\ &\times \int_0^{+\infty} \left(\int_0^{2\pi} e^{i\rho\lambda \cos(\psi - \vartheta)} d\vartheta \right) e^{-\lambda(z+d)} d\lambda + \\ &+ \frac{q}{(2\pi)^2} \frac{1}{2\varepsilon_2} \int_0^{+\infty} \left(\int_0^{2\pi} e^{i\rho\lambda \cos(\psi - \vartheta)} d\vartheta \right) e^{\lambda(z-d)} d\lambda. \end{aligned}$$

Снова, учитывая (29), получаем

$$\begin{aligned} \varphi_2(\rho, \psi, z) &= \frac{q \varepsilon_2 - \varepsilon_1}{4\pi \varepsilon_2 \varepsilon_1 + \varepsilon_2} \int_0^{+\infty} J_0(\rho\lambda) e^{-\lambda(z+d)} d\lambda + \\ &+ \frac{q}{4\pi \varepsilon_2} \int_0^{+\infty} J_0(\rho\lambda) e^{\lambda(z-d)} d\lambda. \end{aligned}$$

Аналогично предыдущим случаям используется табличный интеграл $\int_0^{+\infty} J_0(\rho\lambda) e^{-\lambda\beta} d\lambda = 1/\sqrt{\rho^2 + \beta^2}$ при $\beta \geq 0$ и получается

$$\begin{aligned} \varphi_2(\rho, \psi, z) &= \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \frac{q}{4\pi \varepsilon_2 \sqrt{\rho^2 + (z+d)^2}} + \\ &+ \frac{q}{4\pi \varepsilon_2 \sqrt{\rho^2 + (z-d)^2}}. \end{aligned}$$

Данное выражение эквивалентно (35) для $\varphi_3(\rho, \varphi, z)$. Т.е. в областях $j = 2$ и $j = 3$ потенциал есть сумма потенциалов исходного точечного заряда в точке $z = d$ и потенциала зарядов, индуцированных на границе полупространств, и тогда

$$\varphi_{\text{ind}}(\rho, \psi, z) = \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \frac{q}{4\pi \varepsilon_2 \sqrt{\rho^2 + (z+d)^2}}.$$

Полученный потенциал эквивалентен потенциалу заряда величины $(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)q/(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$, расположенного в зеркальной точке $z = -d$, что совпадает с результатом решения этой задачи методом зеркальных отражений [13].

ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ ТОЧЕЧНОГО ЗАРЯДА, РАСПОЛОЖЕННОГО НА НЕКОТОРОМ РАССТОЯНИИ ОТ ГРАНИЦЫ ПЛЕНКИ, НАНЕСЕННОЙ НА ГРАНИЦУ ПОЛУПРОСТРАНСТВА

Рассматривается задача нахождения электрического потенциала от точечного заряда, расположенного на расстоянии d от пленки толщиной h с диэлектрической проницаемостью ε_p , которая нанесена на поверхность полупространства (рис. 5). Данную задачу можно рассматривать как задачу нахождения электрического потенциала от точечного заряда, расположенного на поверхности вспомогательной пленки толщины d , причем диэлектрические постоянные этой вспомогательной пленки и полупространства справа равны ε_f . Таким образом, имеется четыре области плоско-слоистой структуры. В предложенной выше нумерации индекс $j = 1$ соответствует полупространству с ε_1 , $j = 2$ – реальной пленке с $\varepsilon_2 = \varepsilon_p$, $j = 3$ – вспомогательной пленке с $\varepsilon_3 = \varepsilon_f$ и толщиной d , равной расстоянию от заряда до пленки, а $j = 4$ – свободному полупространству с $\varepsilon_4 = \varepsilon_f$ (рис. 5).

Тогда $N = 3$, $z_2 = h$, $z_d = z_3 = h + d$, $\mathbf{H}_R = \mathbf{T}_4$, $\mathbf{H}_L = (\mathbf{T}_1 \times \mathbf{T}_2 \times \mathbf{T}_3)^{-1}$ и уравнение (22) выглядит следующим образом:

$$\mathbf{T}_4 \times \hat{\mathbf{F}}_4 = (\mathbf{T}_1 \times \mathbf{T}_2 \times \mathbf{T}_3)^{-1} \times \hat{\mathbf{F}}_1 + \mathbf{V},$$

где матрицы выражаются формулами

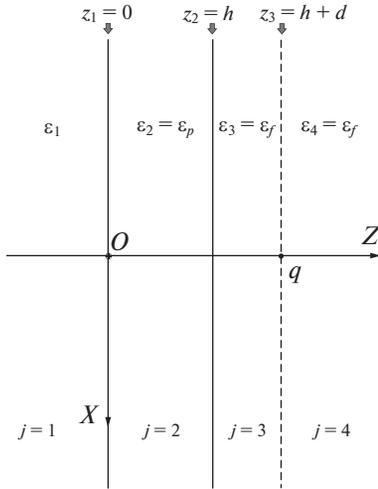


Рис. 5. Точечный заряд q , расположенный на расстоянии d от плоской пленки толщиной h .

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_1 &= \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \epsilon_1 \gamma & -\epsilon_1 \gamma \end{pmatrix}^{-1}, \\ \mathbf{T}_2 &= \mathbf{L}_2 \times (\mathbf{R}_2)^{-1} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & e^{-\gamma h} \\ \epsilon_p \gamma & -\epsilon_p \gamma e^{-\gamma h} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\gamma h} & 1 \\ \epsilon_p \gamma e^{-\gamma h} & -\epsilon_p \gamma \end{pmatrix}^{-1}, \\ \mathbf{T}_3 &= \mathbf{L}_3 \times (\mathbf{R}_3)^{-1} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & e^{-\gamma d} \\ \epsilon_f \gamma & -\epsilon_f \gamma e^{-\gamma d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\gamma d} & 1 \\ \epsilon_f \gamma e^{-\gamma d} & -\epsilon_f \gamma \end{pmatrix}^{-1}, \\ \mathbf{T}_4 &= \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \epsilon_f \gamma & -\epsilon_f \gamma \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

а вектор столбец точечного заряда равен $\mathbf{V} = (0, q)^T$.

Учитывая, что $(\mathbf{T}_1 \times \mathbf{T}_2 \times \mathbf{T}_3)^{-1} = \mathbf{T}_3^{-1} \times \mathbf{T}_2^{-1} \times \mathbf{T}_1^{-1}$, получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_L &= \begin{pmatrix} H_{LA} & H_{LB} \\ H_{LC} & H_{LD} \end{pmatrix} = (\mathbf{T}_1 \times \mathbf{T}_2 \times \mathbf{T}_3)^{-1} = \\ &= \mathbf{T}_3^{-1} \times \mathbf{T}_2^{-1} \times \mathbf{T}_1^{-1} = \begin{pmatrix} e^{-\gamma d} & 1 \\ \epsilon_f \gamma e^{-\gamma d} & -\epsilon_f \gamma \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} 1 & e^{-\gamma d} \\ \epsilon_f \gamma & -\epsilon_f \gamma e^{-\gamma d} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} e^{-\gamma h} & 1 \\ \epsilon_p \gamma e^{-\gamma h} & -\epsilon_p \gamma \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} 1 & e^{-\gamma h} \\ \epsilon_p \gamma & -\epsilon_p \gamma e^{-\gamma h} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \epsilon_1 \gamma & -\epsilon_1 \gamma \end{pmatrix}, \\ \mathbf{H}_R &= \begin{pmatrix} H_{RA} & H_{RB} \\ H_{RC} & H_{RD} \end{pmatrix} = \mathbf{T}_4 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \epsilon_f \gamma & -\epsilon_f \gamma \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

Для данной задачи уравнение (24) можно переписать следующим образом при введении вектор-столбца $\hat{\mathbf{F}}_{\text{out}} = (\hat{\phi}_1^-; \hat{\phi}_4^+)^T$:

$$\begin{pmatrix} -H_{LB} & 1 \\ -H_{LD} & \epsilon_f \gamma \end{pmatrix} \hat{\mathbf{F}}_{\text{out}} = \begin{pmatrix} 0 \\ q \end{pmatrix}.$$

Отсюда следует

$$\hat{\phi}_1^- = \frac{q}{\epsilon_f \gamma H_{LB} - H_{LD}}, \quad \hat{\phi}_4^+ = \frac{H_{LB} q}{\epsilon_f \gamma H_{LB} - H_{LD}}. \quad (38)$$

В явном виде выражения (38) можно получить через гиперболические синусы и косинусы, если в (38) подставить формулы

$$\begin{aligned} H_{LB} &= \text{ch}(-\gamma d) \text{ch}(-\gamma h) + \frac{\epsilon_p}{\epsilon_f} \text{sh}(-\gamma d) \text{sh}(-\gamma h) - \\ &- \frac{\epsilon_1}{\epsilon_p} \text{ch}(-\gamma d) \text{sh}(-\gamma h) - \frac{\epsilon_1}{\epsilon_f} \text{sh}(-\gamma d) \text{ch}(-\gamma h), \\ H_{LD} &= \epsilon_f \gamma \text{sh}(-\gamma d) \text{ch}(-\gamma h) + \epsilon_p \gamma \text{ch}(-\gamma d) \text{sh}(-\gamma h) - \\ &- \epsilon_1 \gamma \frac{\epsilon_f}{\epsilon_p} \text{sh}(-\gamma d) \text{sh}(-\gamma h) - \epsilon_1 \gamma \text{ch}(-\gamma d) \text{ch}(-\gamma h). \end{aligned}$$

Таким образом, можно представить решение в свободном полупространстве с зарядом в виде $\hat{\phi}_4^+ = \mathfrak{F}(\gamma) q$, где алгебраическая функция $\mathfrak{F}(\gamma) = \frac{H_{LB}}{(\epsilon_f \gamma H_{LB} - H_{LD})}$ зависит также от величин $h, d, \epsilon_1, \epsilon_p, \epsilon_f$, и тогда

$$\begin{aligned} \Phi_4(x, y, z) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty-\infty}^{+\infty+\infty} \int_{-\infty-\infty}^{+\infty+\infty} \hat{\phi}_4^+ e^{-\gamma(z-h-d)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta = \\ &= \frac{q}{(2\pi)^2} \int_{-\infty-\infty}^{+\infty+\infty} \int_{-\infty-\infty}^{+\infty+\infty} \mathfrak{F}(\gamma) e^{-\gamma(z-h-d)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta. \end{aligned}$$

Переходя к полярным координатам в плоскостях (x, y) и (ξ, η) по формулам (28), получаем

$$\begin{aligned} \Phi_4(\rho, \psi, z) &= \frac{q}{(2\pi)^2} \times \\ &\times \int_0^{+\infty} \left(\int_0^{2\pi} e^{i\rho\lambda \cos(\psi-\vartheta)} d\vartheta \right) e^{-\lambda(z-h-d)} \mathfrak{F}(\gamma) \lambda d\lambda. \end{aligned}$$

Учитывая представление (29), записываем

$$\Phi_4(\rho, \psi, z) = \frac{q}{2\pi} \int_0^{+\infty} J_0(\rho\lambda) e^{-\lambda(z-h-d)} \mathfrak{F}(\gamma) \lambda d\lambda \quad (39)$$

при $z \geq (h + d)$.

Важно заметить, что для нахождения потенциала индуцированных в плоскостойкой структуре зарядов, по аналогии с предыдущей задачей, нуж-

но вычесть из полного потенциала в этой области потенциал исходного заряда и тогда

$$\begin{aligned}\varphi_{\text{ind}}(x, y, z) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\hat{\phi}_4^+ - \frac{q}{2\gamma\epsilon_f} \right) \times \\ &\quad \times e^{-\gamma(z-h-d)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta = \\ &= \frac{q}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\mathfrak{F}(\gamma) - \frac{1}{2\gamma\epsilon_f} \right) e^{-\gamma(z-h-d)} e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta,\end{aligned}$$

откуда

$$\begin{aligned}\varphi_{\text{ind}}(\rho, \psi, z) &= \frac{q}{2\pi} \int_0^{+\infty} J_0(\rho\lambda) \left(\mathfrak{F}(\gamma) - \frac{1}{2\gamma\epsilon_f} \right) \times \\ &\quad \times e^{-\lambda(z-h-d)} \lambda d\lambda \quad \text{при } z \geq (h+d).\end{aligned}$$

Наконец, отметим, что для задачи с большим числом слоев (например, при описании градиентных структур) найти аналитическое выражение для функции $\mathfrak{F}(\gamma)$ может оказаться затруднительным. В этом случае можно воспользоваться методом работы [14], суть которого заключается в вычислении функции $\mathfrak{F}(\gamma)$ в конечном числе точек, приближения этой функции сплайном с последующим его интегрированием.

ПРИМЕНЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ К СТАЦИОНАРНЫМ ЗАДАЧАМ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ПЛОСКОСЛОИСТЫХ СРЕД

Известно, что существует аналогия между задачами электростатики и стационарными задачами теплопроводности [15]. Аналогичны не только соответствующие уравнения, но и граничные условия [16, 17]. Если в рассмотренных в предыдущих разделах задачах заменить одновременно

потенциал ϕ – на температуру T ;

диэлектрическую проницаемость ϵ – на коэффициент теплопроводности K ;

вектор электрической индукции \mathbf{D} – на плотность потока тепла $\mathbf{h} = -K\nabla T$;

точечный заряд q – на мощность тепловыделения точечного источника Q_h ,

то можно сразу написать решение задач, аналогичных ранее рассмотренным.

Например, распределение температуры в области $j = 4$ в задаче, аналогичной задаче предыдущего раздела, определяется формулой, аналогичной (39):

$$\begin{aligned}T_4(\rho, \psi, z) &= \frac{q}{2\pi} \int_0^{+\infty} J_0(\rho\lambda) e^{-\lambda(z-h-d)} \mathfrak{F}_h(\gamma) \lambda d\lambda \\ &\quad \text{при } z \geq (h+d),\end{aligned}$$

где функция $\mathfrak{F}_h(\gamma)$ получается из функции $\mathfrak{F}(\gamma) = H_{LB}/(\epsilon_f \gamma H_{LB} - H_{LD})$ с помощью перечисленных замен переменных. Аналогичные формулы можно написать для распределения температур в остальных областях задачи.

Таким образом, простой заменой переменных с использованием описанной аналогии получаем теорию нахождения фундаментального решения стационарной задачи теплопроводности в плоскостойких средах.

С помощью предложенной аналогии можно решать и более сложные задачи с распределенными источниками тепла. Примером такой ситуации является использование фундаментального решения для нахождения поля температур от параболоидального острия, имеющего постоянную температуру, расположенного над плоскостойкой структурой. В качестве решения можно использовать решение аналогичной электростатической задачи – металлического острия, находящегося под постоянным потенциалом и расположенного рядом с плоскостойкой структурой, и использовать те же методы, как в задаче работы [18] и [19], примененных при нулевой частоте. Подробности будут изложены в следующих работах автора. В частности, данная работа показывает, как привести двойные интегралы задачи работы [19] к одномерным интегралам и значительно упростить вычисления. Таким образом, можно применять методы, используемые в сложных электростатических задачах, в задачах стационарной теплопроводности.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье предложена оригинальная матричная техника нахождения фундаментального решения оператора Лапласа для плоскостойких сред на примере электростатической задачи. Полученные результаты могут быть применены для аналогичных задач теории теплопроводности твердых тел [20]. Главным преимуществом предложенного метода является представление решения одномерным интегралом, что дает значительное упрощение и ускорение численных расчетов и позволяет во многих практически важных случаях найти аналитические решения. Следует подчеркнуть, что метод решения легко применим для очень большого числа слоев, что практически позволяет решать задачи с непрерывным изменением коэффициента теплопроводности в перпендикулярном слою направлении, а также решать задачи стационарной теплопроводности в соответствующих композитных материалах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Pollack H.N.* Steady State Heat Conduction in Layered Mediums: The Half-space and Sphere // *J. Geophys. Research.* 1965. V. 70. № 22. P. 5645.
2. *Negi J.G., Singh R.N.* A Matrix Method for Heat Conduction in Multi-layered Media // *Pure and Applied Geophysics.* 1969. V. 73. № 1. P. 143.
3. *Negi J.G., Singh R.N.* Heat Transfer in Multi-layered Media with Temperature Dependent Sources // *Pure and Applied Geophysics.* 1968. V. 69. № 1. P. 110.
4. *Matysiak S.J., Perkowski D.M.* Temperature Distributions in a Periodically Stratified Layer with Slant Lamination // *Heat and Mass Transfer.* 2014. V. 50. № 1. P. 75.
5. *Chew W.C.* Waves and Fields in Inhomogeneous Media. N.Y.: IEEE Press, 1995.
6. *Петрин А.Б.* Элементарный излучатель, расположенный на границе или внутри слоистой структуры // *Оптика и спектроскопия.* 2020. Т. 128. № 11. С. 1676.
7. *Петрин А.Б.* Излучение в дальней зоне элементарного излучателя, расположенного на границе плоскостной структуры // *Оптика и спектроскопия.* 2020. Т. 128. № 12. С. 1874.
8. *Петрин А.Б.* Элементарный излучатель на границе плоскостной структуры // *ЖЭТФ.* 2021. Т. 159. № 1. С. 35.
9. *Кинг Р., Смит Г.* Антенны в материальных средах. В 2-х книгах. Пер. с англ. М.: Мир, 1984.
10. *King R.W.P.* The Propagation of Signals Along a Three-layered Region // *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* 1988. V. 36. № 6. P. 1080.
11. *Петрин А.Б.* О теории плоской линзы из материала с отрицательным преломлением // *Оптика и спектроскопия.* 2021. Т. 129. № 1. С. 55.
12. *Градитейн И.С., Рыжик И.М.* Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. 4-е изд. М. Физматгиз, 1963.
13. *Сивухин Д.В.* Общий курс физики. Учеб. пособие для вузов. В 5 т. Т. III. Электричество. 4-е изд., стереот. М.: Физматлит; Изд-во МФТИ, 2004.
14. *Петрин А.Б.* О теории плоской линзы из материала с отрицательным преломлением // *Оптика и спектроскопия.* 2021. Т. 129. № 1. С. 55.
15. *Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М.* Фейнмановские лекции по физике. Т. 5. Электричество и магнетизм. М.: Мир, 1965.
16. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. VI. Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
17. *Карташов Э.М.* Аналитические методы в теории теплопроводности твердых тел. М.: Высшая школа, 2001.
18. *Петрин А.Б.* Метод расчета электрического поля вблизи параболического металлического острия над проводящей плоскостью // *ТВТ.* 2018. Т. 56. № 2. С. 163.
19. *Петрин А.Б.* О нанофокусировке света на вершине металлического микроострия, расположенного над плоскостной структурой // *Успехи прикладной физики.* 2016. Т. 4. № 4. С. 326.
20. *Карташов Э.М., Кудинов В.А., Калашников В.В.* Теория тепломассопереноса: решение задач для многослойных конструкций: учеб. пособие для бакалавриата, специалитета и магистратуры / Под общ. ред. Э.М. Карташова. М.: Юрайт, 2018.

УДК 621.384.32

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ЛОКАЛЬНЫХ ОЦЕНОК К РАСЧЕТУ СИЛЫ ИЗЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СТРУИ

© 2022 г. И. С. Григорьев^{1, 2, *}¹АО “НПО ГИПО”, Казань, Россия²КНИТУ–КАИ, Казань, Россия

*E-mail: gipo@telebit.ru

Поступила в редакцию 24.05.2021 г.

После доработки 07.04.2022 г.

Принята к публикации 07.06.2022 г.

Представлено описание статистических алгоритмов расчета рассеянного излучения по методу Монте-Карло. Акцент сделан на расчете светорассеяния в среде с распределенными объемными источниками излучения, для чего был выбран объект в виде осесимметричного объема газа, имитирующего струю самолетного двигателя с неравномерными распределениями температуры и концентрации рассеивающих частиц. Продемонстрированы теория и реализация на графическом процессоре трех алгоритмов Монте-Карло: прямого метода прослеживания траекторий фотонов и методов, основанных на разложении в ряд Неймана решений прямого и сопряженного уравнений переноса излучения (локальные оценки), с учетом весовых модификаций и различных индикатрис рассеяния. Наглядному сравнению работы алгоритмов способствует представление данных в виде функционала от интенсивности излучения и площади излучающей поверхности (силы излучения).

DOI: 10.31857/S0040364422050052

ВВЕДЕНИЕ

Процесс распространения света можно рассматривать как случайную марковскую цепь столкновений фотонов с веществом, которые приводят либо к рассеянию, либо к поглощению фотонов. Цепь Маркова характеризуется тем, что вероятность наступления каждого события зависит только от состояния, достигнутого в предыдущем событии. Метод Монте-Карло заключается в моделировании траекторий этой цепи на ЭВМ и вычислении статистической оценки для искомых функционалов. Под прямым методом расчета Монте-Карло переноса излучения понимается прослеживание траекторий частиц, испущенных из источника, и регистрация потока частиц на исследуемой поверхности. С использованием данного метода удобно определять полусферический поток излучения через регистрирующую площадку, а также угловое распределение потока, если разыгрывается достаточное число траекторий и размер регистрирующей площадки достаточно велик. Однако при переходе к точечному детектору данный метод становится непригодным, так как вероятность пересечения частицей соответствующей площадки стремится к нулю. Основа применения локальных оценок состоит в представлении некоторого функционала от плотности потока частиц и функции детектора в виде ряда Неймана, который сходится при наличии поглощения в среде или возможности вылета частицы за пределы расчетной области. При ре-

ализации этих расчетов также моделируется марковская траектория частицы, испытывающей поглощение и рассеяние, однако теперь на каждом акте рассеяния высчитывается вклад (локальная оценка), который частица вносит в регистрируемую интенсивность на детекторе, что позволяет проводить расчет с произвольным угловым разрешением. Методы на основе локальных оценок применялись в задачах расчета ядерных реакторов, а в задачах атмосферной оптики они впервые получили сильное развитие в работе [1]. С использованием данных методов реализовано большое количество кодов для расчета яркости атмосферы (с наименованием которых можно ознакомиться в проекте I3RC [2]). Также они широко применяются в задачах лазерной локации при решении уравнения переноса излучения с учетом поляризации [3–6].

Применение метода локальных оценок на основе решения сопряженного уравнения переноса излучения не так широко представлено в печати, как методов, основанных на решении прямого уравнения. Обстоятельством, упрощающим расчет, является рассмотрение вклада только точечных источников, что продемонстрировано в работах [7, 8], хотя в [7] представлены выражения, учитывающие излучение газов. Способ расчета объемных источников при описании излучения высокотемпературных струй с использованием локальных оценок представлен в работах [9, 10]. В [11] продемонстрировано применение метода прямого

расчета Монте-Карло переноса излучения в осесимметричной струе. Особенностью данной работы является применение комбинированной локальной оценки при решении прямого уравнения переноса, а также использование весовых модификаций, заменяющих розыгрыш поглощения и вылет частицы из расчетной области.

Целью данной работы являются апробация методов локальных оценок на основе решения прямого и сопряженного уравнения переноса излучения на задаче расчета силы излучения неоднородной рассеивающей и поглощающей осесимметричной струи газа и сравнение с результатами, полученными по методу прямого расчета.

ОПИСАНИЕ ОБЪЕКТА

Граница струи аппроксимирована параболой $\rho(x)$:

$$\begin{aligned} \rho(x) &= ax^2 + bx + c, \\ y &= \rho \cos(\varphi), \\ z &= \rho \sin(\varphi). \end{aligned}$$

Используется сетка следующего типа (рис. 1): вдоль оси X разбиение равномерное, и оно также равномерно в каждом сечении $x = \text{const}$ с уровня $\rho = 0$ до границы $\rho(x)$.

Задается разбиение по углу φ , в результате чего поверхность струи оказывается покрыта площадками с площадью $dS = \rho d\rho d\varphi$ для плоских сторон и $dS_i = d\varphi \left(a/3(x_{i+1}^3 - x_i^3) + b/2(x_{i+1}^2 - x_i^2) + c(x_{i+1} - x_i) \right)$ в интервалах $[x_i, x_{i+1}]$ для боковой поверхности, образованной параболоидом вращения. Для регистрации покидающего струю излучения над каждой площадкой dS_i строится локальная сферическая система координат, в которой зенитный угол изменяется в диапазоне $[0, \pi/2]$, а азимутальный в $[0, \pi]$ (из-за наличия осевой симметрии). В расчетах использовалась сетка 120×120 для дискретизации сферических систем координат и 19×19 ячеек разбиения по осям X и Y для дискретизации расчетного объема. Ввиду осевой

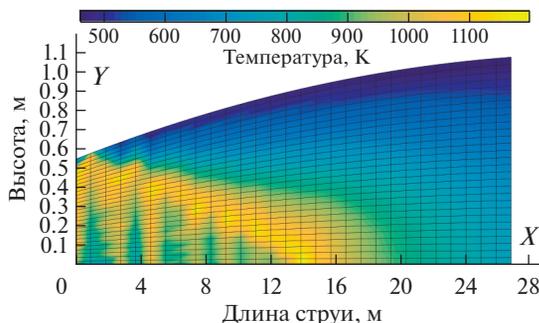


Рис. 1. Расчетная область.

симметрии распределения температур и концентраций примеси излучение от струи также принято осесимметричным. Поэтому запись результатов происходит только на полосе $\varphi = 0$. При использовании методов локальных оценок подразумевается наличие точечного датчика в середине каждой площадки dS_i , а в методе прямого расчета запись в локальную систему координат над dS_i осуществляется со всей осесимметричной поверхности (в интервале $[x_i, x_{i+1}]$) с весом $d\varphi/2\pi$. В качестве рассеивающих частиц использовались псевдочастицы с заданной индикатрисой рассеяния, концентрация которых распределена по объему пропорционально распределению температуры при значении на срезе сопла 10^8 м^{-3} . Предполагается, что дополнительного поглощения данные частицы не вносят. Изменение коэффициента рассеяния производилось путем изменения сечения рассеяния частиц в диапазоне от 0 до $80 \times 10^{-10} \text{ м}^2$.

ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ МОДЕЛИ И ПРИБЛИЖЕНИЯ

Рассмотрим выражение для интенсивности излучения $I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega})$ в точке \mathbf{r} в направлении $\boldsymbol{\omega}$ в поглощающей и рассеивающей среде \mathbb{R} с заданными оптическими характеристиками: коэффициентом ослабления $\sigma_e(\mathbf{r})$, альбедо однократного рассеяния $\varpi(\mathbf{r})$, нормированной фазовой функцией (индикатрисы) рассеяния $P(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}' \rightarrow \boldsymbol{\omega})$ и источниками теплового излучения $B[T(\mathbf{r})]$ (описываемого функцией Планка) с температурой $T(\mathbf{r})$ в состоянии локального термодинамического равновесия:

$$\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}) = \sigma_e(\mathbf{r})(-I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}) + S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega})), \quad \mathbf{r} \in \mathbb{R},$$

где функция источников излучения представлена в виде

$$\begin{aligned} S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}) &= \varpi(\mathbf{r}) \int_{4\pi} P(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}' \rightarrow \boldsymbol{\omega}) I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega}' + \\ &+ (1 - \varpi(\mathbf{r})) B[T(\mathbf{r})]. \end{aligned}$$

На границе расчетной области $\partial\mathbb{R}$ в точке $\mathbf{r}_b \in \partial\mathbb{R}$ могут присутствовать источник внешнего излучения (например, солнечное излучение) $S_0(\mathbf{r}_b, \boldsymbol{\omega})$ или твердая граница, характеризующаяся направляющим вектором $\mathbf{n}(\mathbf{r}_b)$, альбедо отражения плоского слоя $a(\mathbf{r}_b, \boldsymbol{\omega})$, нормированной фазовой функцией отражения $P_s(\mathbf{r}_b, \boldsymbol{\omega}' \rightarrow \boldsymbol{\omega})$, источником теплового излучения $B[T(\mathbf{r}_b)]$ с температурой $T(\mathbf{r}_b)$ и направленной излучательной способностью $\epsilon(\mathbf{r}_b, \boldsymbol{\omega})$. Интенсивность излучения на границе $\partial\mathbb{R}$ может быть записана в виде

$$I(\mathbf{r}_b, \omega) = \int_{\langle \mathbf{n}(\mathbf{r}_b), \omega' \rangle < 0} a(\mathbf{r}_b, \omega') P_s(\mathbf{r}_b, \omega' \rightarrow \omega) I(\mathbf{r}_b, \omega') d\omega' + \varepsilon(\mathbf{r}_b, \omega) B[T(\mathbf{r}_b)] + S_0(\mathbf{r}_b, \omega), \mathbf{r}_b \in \partial\mathbb{R}, \langle \mathbf{n}(\mathbf{r}_b), \omega \rangle > 0.$$

Силу излучения $F(\mathbf{r}_{\text{obs}})$, регистрируемую наблюдателем из положения \mathbf{r}_{obs} от излучающего объекта площадью Σ , можно записать в виде

$$F(\mathbf{r}_{\text{obs}}) = \sum_{\Sigma, \langle \mathbf{n}_0, \mathbf{n}_b \rangle > 0} I(\mathbf{r}_b(dS_i), \mathbf{n}_b(dS_i)) \times \langle \mathbf{n}_0, \mathbf{n}_b \rangle dS_i, \mathbf{n}_0 = \frac{\mathbf{r}_{\text{obs}} - \mathbf{r}_b}{|\mathbf{r}_{\text{obs}} - \mathbf{r}_b|}, \quad (1)$$

где \mathbf{n}_b – вектор внешней нормали к границе струи. На практике данная величина используется для оценки облученности зрочка оптико-электронной системы. Выражение для интенсивности излучения в операторной форме имеет вид

$$I(\mathbf{r}, \omega) = \mathcal{K}I(\mathbf{r}, \omega) + I_0(\mathbf{r}, \omega), \quad (2)$$

где интегральный оператор переноса излучения \mathcal{K} определен как

$$\mathcal{K}f(\mathbf{r}, \omega) = \int_{0, 4\pi}^{\tau_b} \int \overline{\omega}(\mathbf{r}') \sigma_e(\mathbf{r}') P(\mathbf{r}', \omega' \rightarrow \omega) \times \exp(-\tau(\mathbf{r}', \mathbf{r})) f(\mathbf{r}', \omega') d\omega' dr' + \int_{\langle \mathbf{n}(\mathbf{r}_b), \omega' \rangle < 0} a(\mathbf{r}_b, \omega') P_s(\mathbf{r}_b, \omega' \rightarrow \omega) I(\mathbf{r}_b, \omega') \times \exp(-\tau(\mathbf{r}_b, \mathbf{r})) f(\mathbf{r}_b, \omega') d\omega', \tau(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \int_0^{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \sigma_e \left(\mathbf{r} + r'' \left(\frac{\mathbf{r}' - \mathbf{r}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \right) \right) dr'',$$

$\tau(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ – оптическая толщина среды между точками \mathbf{r} и \mathbf{r}' . Вклад нерассеянного (прямого) излучения от объемных источников и внешней подсветки $I_0(\mathbf{r}, \omega)$ имеет вид

$$I_0(\mathbf{r}, \omega) = (\varepsilon(\mathbf{r}_b, \omega) B[T(\mathbf{r}_b)] + S_0(\mathbf{r}_b, \omega)) e^{-\tau(\mathbf{r}_b, \mathbf{r})} + \underbrace{\int_0^{\tau_b} \sigma_e(\mathbf{r}') e^{-\tau(\mathbf{r}', \mathbf{r})} (1 - \overline{\omega}(\mathbf{r}')) B[T(\mathbf{r}')] dr'}_{I_0^V(\mathbf{r}, \omega) - \text{объемные источники}}. \quad (3)$$

Стоит отметить, что на однородном ($\sigma_e(\mathbf{r}), T(\mathbf{r}) = \text{const}$) участке пути длиной s выражение для нерассеянного излучения объемных источников в (3) имеет аналитическое решение

$$I_0^V(\mathbf{r}, s) = (1 - \overline{\omega}(\mathbf{r})) B[T(\mathbf{r})] (1 - \exp(-\sigma_e(\mathbf{r})s)).$$

Решение уравнения (2) представляется в виде ряда Неймана

$$I = \sum_{n=0}^{\infty} I_n, \quad I_n = \mathcal{K}^n I_0 = \mathcal{K} I_{n-1}.$$

Далее индекс n обозначает кратность рассеивания. Функция плотности столкновений частиц $\Phi_n(\mathbf{r}, \omega)$ представляет собой произведение коэффициента ослабления $\sigma_e(\mathbf{r})$ и интенсивности $I_n(\mathbf{r}, \omega)$, а функция плотности источников излучения $\psi(\mathbf{r}, \omega)$ имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}, \omega) = \sigma_e(\mathbf{r}) (1 - \overline{\omega}(\mathbf{r})) B[T(\mathbf{r})], \quad \mathbf{r} \in \mathbb{R}.$$

Функция плотности столкновений n -го порядка записывается как

$$\Phi_n(\mathbf{r}, \omega) = TC\Phi_{n-1}(\mathbf{r}, \omega), \quad \Phi_1(\mathbf{r}, \omega) = T\psi(\mathbf{r}, \omega),$$

где оператор рассеяния частицы

$$Cf(\mathbf{r}, \omega) = \int_{4\pi} \overline{\omega}(\mathbf{r}) P(\mathbf{r}, \omega' \rightarrow \omega) f(\mathbf{r}, \omega') d\omega'$$

представляет собой произведение вероятности частицы выжить (не быть поглощенной средой) $\overline{\omega}(\mathbf{r})$ и вероятности рассеяться из направления ω' в направление ω , а оператор переноса частицы

$$Tf(\mathbf{r}, \omega) = \int_{\mathbb{R}} \sigma_e(\mathbf{r}') \frac{\exp(-\tau(\mathbf{r}', \mathbf{r}))}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \delta \times \left(\omega - \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) f(\mathbf{r}', \omega) d\mathbf{r}',$$

в котором интегрирование происходит по расчетной области, обозначает перенос частицы вдоль вектора ω на длину свободного пробега, имеющую плотность распределения

$$p(\mathbf{r}_n) = \sigma_e(\mathbf{r}_{n-1}) \exp(-\tau(\mathbf{r}_{n-1}, \mathbf{r}_n)) \quad (4)$$

из $(n - 1)$ -й точки \mathbf{r}' в n -ю точку столкновения \mathbf{r} . Сопряженные операторы рассеяния и переноса имеют вид

$$C^\dagger f(\mathbf{r}, \omega) = \int_{4\pi} \overline{\omega}(\mathbf{r}) P(\mathbf{r}, \omega \rightarrow \omega') f(\mathbf{r}, \omega') d\omega', \quad T^\dagger f(\mathbf{r}, \omega) = \int_{\mathbb{R}} \sigma_e(\mathbf{r}') \frac{\exp(-\tau(\mathbf{r}', \mathbf{r}))}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \times \delta \left(\omega + \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) f(\mathbf{r}', \omega) d\mathbf{r}'.$$

ЛОКАЛЬНЫЕ ОЦЕНКИ ПРИ РЕШЕНИИ ПРЯМОГО УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА

Выражения для локальных оценок при решении прямого и сопряженного уравнений переноса излучения представлены в работе [7]. Интенсивность излучения, регистрируемая приемником с функцией отклика $\phi(\mathbf{r}, \omega)$, может быть выражена

через сумму вкладов функционала от плотности столкновений

$$I_\varphi = \sum_{n=1}^{\infty} (\Phi_{n+1}, \varphi / \sigma_e) = \sum_{n=1}^{\infty} ((TC)^{n-1} T \Psi, C^\dagger T^\dagger \varphi / \sigma_e). \quad (5)$$

Суммирование в (5) от единицы подразумевает, что вклад от нерассеянного (прямого) излучения можно посчитать аналитически. Вклад в регистрируемую интенсивность на приемнике в каждом акте рассеяния для прямого метода Монте-Карло, таким образом, представляется выражением

$$\Psi_n^F = C^\dagger T^\dagger \varphi / \sigma_e. \quad (6)$$

Запись (6) наглядно демонстрирует принцип реализации прямого уравнения с помощью локальных оценок: в левой части функционала описана марковская цепь траектории частицы, стартующей из источника излучения, над которой последовательно разыгрывается сначала транспортное ядро, а затем ядро рассеяния. При этом перед розыгрышем ядра рассеяния вычисляется вклад (6), стоящий в правой части функционала (5). Рассматривается точечный детектор в точке \mathbf{r}^* , который фиксирует интенсивность излучения в направлении $\Delta\Omega$. Соответствующая функция отклика детектора имеет вид

$$\varphi_{\Delta\Omega}(\mathbf{r}, \omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^*) \chi_{\Delta\Omega}(\omega), \quad \chi_{\Delta\Omega}(\omega) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta\Omega} & \omega \in \Delta\Omega, \\ 0 & \omega \notin \Delta\Omega. \end{cases} \quad (7)$$

Выпишем явный вид (6) с учетом (7):

$$\Psi_n^{1,F}(\mathbf{r}_n, \omega_n) = \varpi(\mathbf{r}_n) P(\mathbf{r}_n, \omega_n \rightarrow \omega^*) \times \exp(-\tau(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}^*)) / |\mathbf{r}_n - \mathbf{r}^*|^2 \chi_{\Delta\Omega}[(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}^*) / |\mathbf{r}_n - \mathbf{r}^*|].$$

Такая форма вклада в литературе носит название простой локальной оценки [1], согласно которой вклад в направление $\Delta\Omega$ вносится только тогда, когда положение частицы при рассеянии входит в данный телесный угол. При уменьшении угла $\Delta\Omega$ дисперсия такой оценки возрастает. Наряду с простой локальной оценкой существует двойная локальная оценка, строящаяся с использованием дополнительной промежуточной точки $\mathbf{r}' \in \Delta\Omega$, распределенной в $\Delta\Omega$ с плотностью (4), и имеющая вид

$$\Psi_n^{2,F}(\mathbf{r}_n, \omega_n) = \varpi(\mathbf{r}_n) \varpi(\mathbf{r}') \frac{\exp(-\tau(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}'))}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}'|^2} \times P(\mathbf{r}_n, \omega_n \rightarrow \omega') P(\mathbf{r}', \omega' \rightarrow \omega^*), \quad (8)$$

где $\omega' = (\mathbf{r}' - \mathbf{r}_n) / |\mathbf{r}' - \mathbf{r}_n|$, $\omega^* = (\mathbf{r}^* - \mathbf{r}') / |\mathbf{r}^* - \mathbf{r}'|$. Вклад двойной локальной оценки строится для каждого текущего положения (\mathbf{r}_n, ω_n) . Простую и двойную

локальные оценки можно комбинировать, как описано в [5], следующим способом: если $\mathbf{r}_n \notin \Delta\Omega$, то записывается двойная локальная оценка, в противном случае есть два варианта:

- 1) если в предыдущей точке \mathbf{r}_{n-1} вычислялась двойная локальная оценка, то вклада нет;
- 2) если в \mathbf{r}_{n-1} вклада нет или в \mathbf{r}_{n-1} вычислялась простая локальная оценка, то записывается простая локальная оценка.

Комбинируемую оценку для данного метода обозначим просто Ψ_n^F . Выражение для регистрируемой интенсивности в $\Delta\Omega$ имеет вид

$$I_{\Delta\Omega} = PM \left(\sum_{n=1}^{\infty} \Psi_n^F \right), \quad (9)$$

$$P = \sum_q P_q, \quad P_q = 4\pi V_q \sigma_{a,q} B(T_q), \quad (10)$$

где $V_q, \sigma_{a,q}, P_q$ – объем ячейки, коэффициент поглощения, мощность излучения ячейки q (в Вт/мкм); M – математическое ожидание. При построении промежуточной точки $\mathbf{r}' \in \Delta\Omega$ она распределяется с плотностью (4). Однако, если оптическая длина пути вдоль направления $\Delta\Omega$ мала, то с большой долей вероятности разыгрываемые точки окажутся за пределами расчетной области, что обнулит вклад от двойной локальной оценки. Чтобы избежать этого, воспользуемся модифицированной плотностью, учитывающей вылет частицы из расчетной области:

$$\tilde{p}(\mathbf{r}') = \sigma_e(\mathbf{r}') \exp(-\tau(\mathbf{r}^*, \mathbf{r}')) / (1 - \exp(-\tau(\mathbf{r}^*, \mathbf{r}_b))), \quad (\mathbf{r}' - \mathbf{r}^*) / |\mathbf{r}' - \mathbf{r}^*| = (\mathbf{r}_b - \mathbf{r}^*) / |\mathbf{r}_b - \mathbf{r}^*|. \quad (11)$$

При использовании модифицированной плотности распределения промежуточная точка \mathbf{r}' всегда принадлежит расчетной области, но в таком случае у нее появится компенсирующий вес $(1 - \exp[-\tau(\mathbf{r}_{n-1}, \mathbf{r}_b)])$, который также должен учитываться в выражении для двойной локальной оценки (8). Положение точки \mathbf{r}' разыгрывалось на прямой, проходящей из \mathbf{r}^* по середине $\Delta\Omega$. Плотность (11) можно использовать и при моделировании положений (\mathbf{r}_n, ω_n) , что увеличит число столкновений, так как частица теперь не покинет расчетную область. Ограничением на расчет в таком случае является достижение весом частицы некоторого порогового значения (обычно 10^{-5}).

При моделировании марковской траектории частицы (\mathbf{r}_n, ω_n) длина свободного пробега распределена с плотностью (4) или (11). В очередной точке столкновения при этом должны разыгрываться два типа взаимодействия: рассеяние частицы с вероятностью $\varpi(\mathbf{r}_n)$ или поглощение частицы с вероятностью $1 - \varpi(\mathbf{r}_n)$. Для такого розыгрыша

обычно используется метод русской рулетки, при котором случайное число ξ , равномерно распределенное в интервале $(0, 1)$, сравнивается с $\overline{\omega}(\mathbf{r}_n)$. Если $\xi < \overline{\omega}(\mathbf{r}_n)$, то разыгрывается рассеяние, иначе – поглощение. Однако наличие $\overline{\omega}(\mathbf{r}_n)$ в выражениях для простой и двойной локальных оценок показывает, что такой розыгрыш явно не происходит, а во вкладах учитывается сразу все рассеянное излучение. Такой весовой метод называется статистическим весом по поглощению, и с его использованием поглощение не разыгрывается, но вес частицы умножается на альбедо. Данную весовую модификацию можно применять и в методе прямого расчета.

Порядок проведения расчета по прямому уравнению следующий. Расчетная область делится на подобласти с постоянными оптическими характеристиками. Ввиду неравномерности используемых распределений температур и концентраций, а также различных величин объемов подобластей, заключенные в них мощности излучения различны. Выбирается ячейка q с минимальным по области значением испускаемой мощности P_{\min} , и задается число N_{\min} частиц с энергией P_{\min}/N_{\min} , которые испускаются из ячейки q изотропно и из равномерно распределенной в V_q точки пространства. Для остальных ячеек число разыгрываемых частиц рассчитывается как $N_q = N_{\min} E_q/E_{\min}$. Чем большее значение N_{\min} используется, тем статистически точнее результат.

Рассмотрим процедуру вычисления вклада рассеянного излучения при прослеживании траектории одной частицы. Задаются начальный вес $Q = 1$ и положение промежуточной точки \mathbf{r}' по плотности (11) для детектируемого направления $\Delta\Omega$. В рамках прослеживания траектории частицы положение \mathbf{r}' не меняется, но в то же время оно различно для разных частиц. Впрочем положение \mathbf{r}' можно менять при каждом столкновении, но это не приводит к видимым изменениям. Далее последовательно производятся следующие операции:

1) розыгрыш длины свободного пробега по плотности (4) или (11). Если использовалась плотность (11), то вес Q_n умножается на $(1 - \exp[-\tau(\mathbf{r}_{n-1}, \mathbf{r}_b)])$;

2) вычисление вклада Ψ_n^F с использованием комбинации простой и двойной локальных оценок;

3) изменение веса частицы по правилу $Q_n = Q_n \overline{\omega}(\mathbf{r}_n)$, розыгрыш нового направления движения.

Процедура продолжается, пока вес частицы не станет меньше порогового значения. Если в среде высокие значения альбедо, то процедуру расчета можно ограничить максимальным числом актов рассеяния. С учетом весовых методов

выражения для простой и двойной локальных оценок имеют вид

$$\begin{aligned} \Psi_n^{1,F}(\mathbf{r}_n, \omega_n) &= Q_n P(\mathbf{r}_n, \omega_n \rightarrow \omega^*) \chi_{\Delta\Omega} \times \\ &\times ((\mathbf{r}_n - \mathbf{r}^*)/|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}^*|) \exp(-\tau(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}^*)) / |\mathbf{r}_n - \mathbf{r}^*|^2, \\ \Psi_n^{2,F}(\mathbf{r}_n, \omega_n) &= Q_n (1 - \exp[-\tau(\mathbf{r}^*, \mathbf{r}_b)]) \times \\ &\times \overline{\omega}(\mathbf{r}') P(\mathbf{r}_n, \omega_n \rightarrow \omega') P(\mathbf{r}', \omega' \rightarrow \omega^*) \frac{\exp(-\tau(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}'))}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}'|^2}. \end{aligned}$$

Таким образом, для каждого направления $\Delta\Omega$ каждой точки на поверхности \mathbf{r}^* рассчитывается интенсивность (9), по которой затем вычисляется сила излучения (1). В варианте алгоритма прямого расчета Монте-Карло разыгрывается таким же образом распределенное по объему число частиц, но используется только вес по поглощению. В данном методе решение нельзя разделить на прямую и рассеянную компоненты, поэтому сила рассчитывается только для полного излучения. Регистрация вылетающих частиц происходит со всей поверхности, при этом запись осуществляется в локальные системы координат на площадках dS_i при угле $\varphi = 0$ с весом $d\varphi/2\pi$. Получающиеся величины умножаются на энергию одного пакета P_{\min}/N_{\min} и после деления на величину телесного угла детектируемого направления представляют собой силу излучения.

ЛОКАЛЬНЫЕ ОЦЕНКИ ПРИ РЕШЕНИИ СОПРЯЖЕННОГО УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА

При моделировании по данному методу траектория частицы начинается в детекторе. Решение для интенсивности излучения в этом случае представляется в виде

$$I_\varphi = \sum_{n=1}^{\infty} \left((T^B C^B)^{n-1} T^B \varphi, C/\sigma_e T \psi \right), \quad (12)$$

где $C^B = C^\dagger$, а оператор T_n^B определяется выражением

$$\begin{aligned} T_n^B f(\mathbf{r}, \omega) &= \int_{\mathbb{R}} \sigma_e(\mathbf{r}) \frac{\exp(-\tau(\mathbf{r}', \mathbf{r}))}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \times \\ &\times \delta\left(\omega + \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\right) f(\mathbf{r}', \omega) d\mathbf{r}'. \end{aligned}$$

Видно, что оператор T_n^B аналогичен оператору T с заменой направления движения на противоположное. Согласно (12), производится моделирование траекторий, начинающихся в детекторе, с использованием сопряженных операторов переноса и рассеяния, и на каждом шаге после переноса вычисляется вклад

$$\Psi_n^B = C/\sigma_e T \psi. \quad (13)$$

Так как тепловые источники распределены по всей расчетной области, оценка (13) подразумевает интегрирование по всему пространству: в текущей точке столкновения $(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega})$ производится интегрирование по полному телесному углу приходящего нерассеянного излучения со всех направлений с весами $P(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}' \rightarrow \boldsymbol{\omega})$. В это интегрирование входят как распределенные тепловые источники, так и внешняя подсветка. Расчетное выражение имеет вид

$$\Psi_n^B(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}) = Q_n \int_{4\pi} I_0(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}') P(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}' \rightarrow \boldsymbol{\omega}) d\boldsymbol{\omega}'. \quad (14)$$

Также необходимо соблюдать нормировку $\int_{4\pi} P(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}' \rightarrow \boldsymbol{\omega}) d\boldsymbol{\omega}' = 1$, что налагает требования на степень дискретизации полного телесного угла при использовании различных индикатрис рассеяния. Выражение для регистрируемой интенсивности в $\Delta\Omega$ выглядит так

$$I_{\Delta\Omega} = M \left(\sum_{n=1}^{\infty} \Psi_n^B \right). \quad (15)$$

В начале моделирования траектории из положения детектора в определенном направлении $(\mathbf{r}^*, \Delta\Omega)$ задается вес $Q = 1$, а затем последовательно:

- 1) разыгрывается длина свободного пробега по плотности (4) или (11). Если использовалась плотность (11), то вес умножается на $(1 - \exp[-\tau(\mathbf{r}_{n-1}, \mathbf{r}_b)])$;
- 2) рассчитывается вклад Ψ_n^B ;
- 3) изменяется вес частицы по правилу $Q_n = Q_n \varpi(\mathbf{r}_n)$, разыгрывается новое направление движения.

РОЗЫГРЫШ ДЛИНЫ ПРОБЕГА И УГЛА РАССЕЯНИЯ

В однородной среде плотность распределения длины свободного пробега $p(l)$ (4) связана с функцией распределения $F(l)$ свободного пробега соотношением [12]

$$p(l) = dF(l)/dl = [1 - F(l)]\sigma_e.$$

Решение этого уравнения относительно $F(l)$ имеет вид

$$F(l) = 1 - \exp(-\sigma_e l).$$

Функции распределения $F(l)$ соответствует равномерно распределенная на $(0, 1)$ случайная величина γ , что приводит к решению относительно l в виде

$$l = -\sigma_e^{-1} \ln(1 - \gamma) = -\sigma_e^{-1} \ln(\gamma).$$

В неоднородной среде моделируется не длина пробега, а оптическая толщина, по значению которой затем находится соответствующая длина перемещения. Для модифицированной плотности (11) функция распределения имеет вид

$$F(l) = (1 - \exp[-\tau(l)]) / (1 - \exp[-\tau(r_b)]),$$

что приводит к выражению для моделируемой оптической толщины

$$\tau = -\ln[1 - \gamma(1 - \exp(-\tau(r_b)))].$$

Моделирование угла рассеяния для неізотропных индикатрис производится согласно [13]: γ определяет долю от полной площади под графиком индикатрисы, по которой затем находится соответствующий угол рассеяния. Рассеяние описывается в локальной системе координат, связанной с частицей, в которой угол рассеяния θ отсчитывается от направления движения частицы $\boldsymbol{\omega}$. Перевод направляющего вектора частицы в глобальную систему координат осуществлялся по матрице перехода от локальных координат к глобальным.

АРХИТЕКТУРА ВЫЧИСЛЕНИЙ

Расчеты производились на видеокarte Nvidia GeForce GTX 1660 Super на архитектуре CUDA. Введем управляющие величины, описывающие размерность задачи.

1. Количество ячеек внутри расчетной области по оси $X - N_x$ и по оси $Y - N_y$. Так как распределение термодинамических параметров в струе рассчитывалось в стороннем пакете, эти параметры фиксированы и равны 19. При регистрации сигнала интерес представляют ячейки на поверхности на полосе $\varphi = 0$ – количество таких ячеек $N_x + 2N_y$.

2. Количество направлений, на которое разбивается телесный угол в π радиан над каждой внешней ячейкой на полосе $\varphi = 0 - N_{zen}$ и N_{azim} . При этом зенитный угол изменяется в диапазоне $[0, \pi/2]$, а азимутальный – в диапазоне $[0, \pi]$ (что обуславливается осевой симметрией задачи и позволяет произвести дополнительное осреднение по азимутальному углу в случае метода прямого счета). Параметры N_{zen} и N_{azim} равны 120.

3. Совокупный набор направлений регистрации излучения, построенных над всеми внешними ячейками $N_1 = (N_x + 2N_y) N_{zen} N_{azim}$ ($N_1 \approx 820\,800$).

4. Количество фотонов N_{min} , разыгрываемых в ячейке с минимальной энергией, задает полное количество фотонов N_2 ($N_2 \approx 2\,007\,900$ при $N_{min} = 50$, используемых в схеме локальных оценок прямого уравнения, и $N_2 \approx 80\,316\,000$ при $N_{min} = 2000$ для схемы прямого расчета), разыгрываемых в расчетной области при применении методов прямого счета и локальных оценок прямого уравнения.

5. Количество траекторий в случае применения локальных оценок сопряженного уравнения $N_3 \approx 100$.

В случае реализации метода прямого расчета необходимо организовать вычисление в параллельном режиме N_2 траекторий фотонов из внутренней области. В случае метода локальных оценок сопряженного уравнения необходимо рассчитывать $N_1 N_3$ процессов, так как решения для каждого из N_1 направлений являются взаимозависимыми. В случае метода локальных оценок прямого уравнения возможно несколько подходов к организации вычислений. Можно использовать схему как в случае метода прямого счета, моделируя N_2 процессов, и на каждом шаге рассеяния каждого фотона производить N_1 вычислений локальных оценок для всех направлений регистрации. Однако в данном случае таких направлений слишком много, что не позволило организовать эффективный цикл на видеокарте, в том числе при использовании вложенных ядер. Поэтому использовалась схема расчета $N_1 N_2$ процессов, при которой для каждого направления из N_1 запускается свое вычисление на N_2 траекториях из внутренней среды.

Пусть необходимо произвести параллельные вычисления N процессов. Параметры вызова ядра CUDA следующие: используется одномерная сетка и одномерные блоки, количество нитей на блок — 128 (для используемой видеокарты такое количество нитей показало лучшую производительность, чем 256 и 512). Необходимое количество блоков вычисляется по соотношению $(N + 127)/128$. Номер нити `thread` на видеокарте вычисляется как `threadIdx.x + blockIdx.x * blockDim.x`, вычисления осуществляются, если `thread < N`. При этом если полученное количество блоков превышает максимально допустимое, определяемое для каждой видеокарты параметром `maxGridSize[0]`, то необходимо разбивать N на части, организуя цикл на CPU для запуска ядра на видеокарте. Организация глубоких циклов (как в случае суммирования по n в (9) и в (15)) может привести к необходимости уменьшения количества блоков. Математическое ожидание в (9) и (15) рассчитывалось с использованием атомарной операции `atomicAdd` (в CUDA данная операция определена для переменных типа `float`), что не уступает по скорости записи данных в массив с последующим сложением на CPU. Генерация случайных чисел осуществлялась на GPU так, что для каждой из N траекторий фотонов инициировался собственный генератор, порождавший уникальный ряд случайных чисел для реализации трассировки фотона согласно уравнениям (5) и (12).

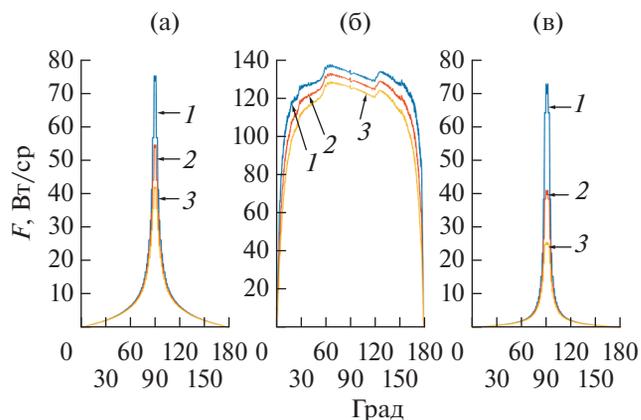


Рис. 2. Влияние альbedo среды на изменение угловой зависимости силы прямого (нерассеянного) излучения I_0 при использовании изотропной индикатрисы рассеяния для поверхностей A (а), B (б), C (в): 1 — $\varpi = 0.021$, 2 — 0.465, 3 — 0.632.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Прослежено формирование угловой зависимости силы излучения (1) при изменении положения наблюдателя \mathbf{r}_{obs} относительно струи независимо для трех образующих ее поверхностей. Поверхность A соответствует плоскости $x = 0$, и сила излучения формируется на круге области начала струи. Поверхность B соответствует боковой поверхности струи, сила излучения формируется на параболоиде вращения. Поверхность C соответствует плоскости $x = L$ (L — длина струи), и сила излучения формируется на круге конечного сечения струи. Дистанция до объекта (1 км) много больше размера струи, обход осуществляется по круговым траекториям и на всех графиках по оси абсцисс отложено угловое положение наблюдателя. Излучающими компонентами газовой фазы являются вода и углекислый газ. Коэффициенты поглощения получены из базы данных HITRAN [14], и их значения при различных температурах табулированы. От спектральных величин осуществлен переход к интегральным согласно групповой модели [13] в малом спектральном диапазоне. Средний по расчетному объему коэффициент поглощения газовой фазы составляет 0.057 м^{-1} . Выбраны четыре сечения рассеяния частиц $(0.1, 10, 40.5, 80) \times 10^{-11} \text{ м}^2$, которые соответствуют среднеобъемным значениям альbedo $\varpi = (0.021, 0.177, 0.465, 0.632)$. На рис. 2 показаны угловые зависимости силы излучения нерассеянной компоненты при различных значениях альbedo.

Наличие криволинейного паттерна в силе излучения с поверхности B связано с количеством ячеек, на которые разбивается расчетная область. При использовании более мелкой сетки по оси Ox данный паттерн сглаживается, что требует,

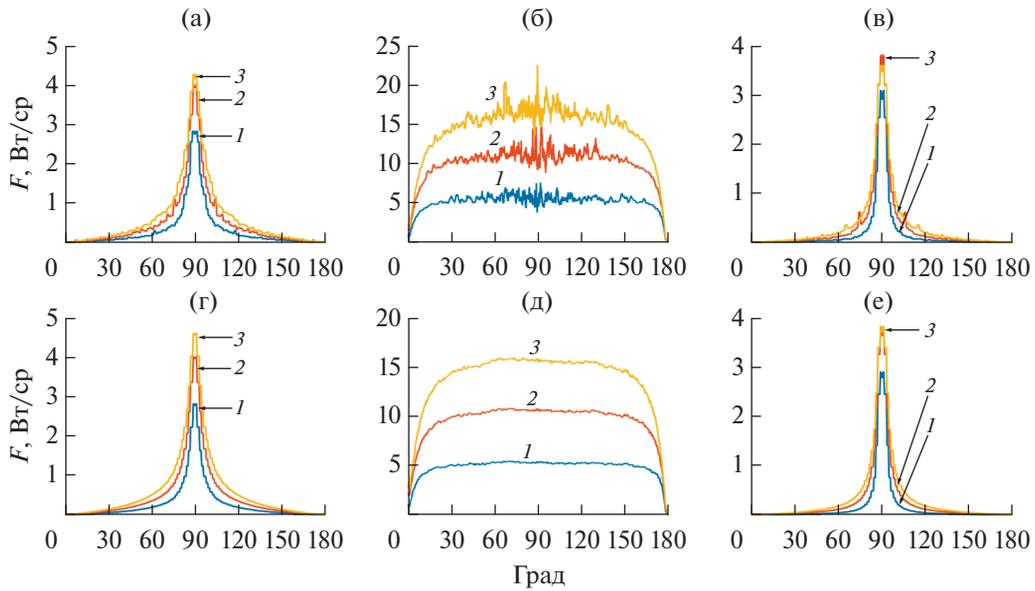


Рис. 3. Угловые зависимости силы излучения рассеянной компоненты по алгоритмам решения прямого (а)–(в) и сопряженного (г)–(е) уравнений с изотропной индикатрисой рассеяния для поверхностей *A* (а), (г), *B* (б), (д), *C* (в), (е): 1 – $\omega = 0.021$, 2 – 0.465, 3 – 0.632.

однако, большего времени расчета. Для получения общего решения в случае неаналоговых методов нерассеянная компонента складывается с рассеянным излучением. На рис. 3 приведено сравнение угловых зависимостей силы излучения рассеянных компонент, полученных с использованием локальных оценок в решении прямого и сопряженного уравнений при изотропной индикатрисе рассеяния

$P(\omega' \rightarrow \omega) = 1/4\pi$. Значение N_{\min} , используемое в прямом методе, составляет 50.

Полученные по двум различным методам значения силы излучения количественно соответствуют друг другу. Из графиков можно наблюдать увеличение силы излучения рассеянной компоненты при увеличении альbedo. Результаты расчета угловой зависимости силы полного (рассе-

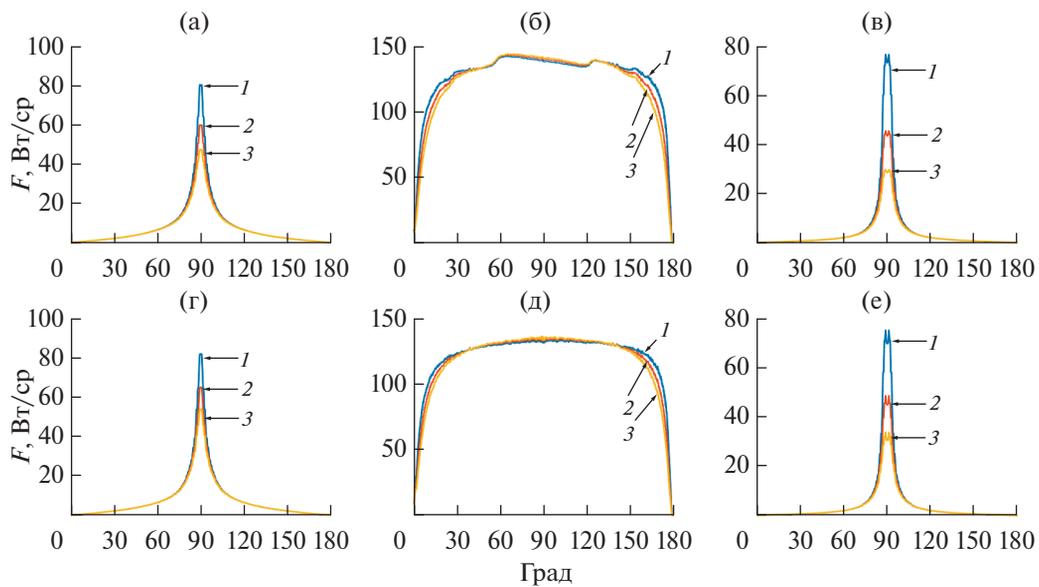


Рис. 4. Угловые зависимости силы излучения по решению сопряженного уравнения (а)–(в) и прямому методу расчета (г)–(е) с изотропной индикатрисой рассеяния для: 1 – $\omega = 0.021$, 2 – 0.465, 3 – 0.632.

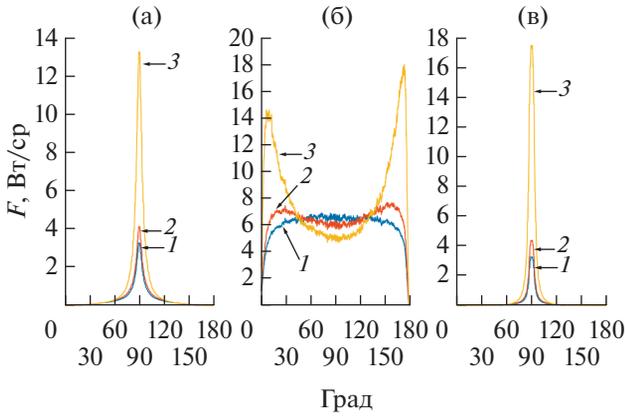


Рис. 5. Угловые зависимости рассеянной компоненты силы излучения по решению сопряженного уравнения и $\varpi = 0.021$ и различных параметрах асимметрии g : 1 – изотропное рассеяние ($g = 0$), 2 – $g = 0.5$, 3 – 0.9; для поверхностей *A* (а), *B* (б), *C* (в).

янного и нерассеянного) излучения по решению сопряженного уравнения в сопоставлении с результатами по прямому методу расчета представлены на рис. 4.

Значение N_{\min} , используемое в методе прямого расчета, составляет 2000. При изотропной индикатрисе рассеяния данный метод демонстрирует несколько большие (примерно на 5%) значения силы излучения с поверхности, но в целом результаты хорошо согласуются друг с другом. Рассмотрим теперь угловые зависимости при использовании не-

изотропной индикатрисы Хенни–Гринштейна, которая часто используется для описания индикатрис

$$P_{\text{HG}}(\theta) = \frac{(1-g^2)(1+g^2-2g\cos(\theta))^{-3/2}}{4\pi},$$

где g – параметр, определяющий вытянутость индикатрисы (фактор асимметрии). При увеличении рассеяния вперед профиль угловой зависимости силы излучения (рассеянной компоненты) претерпевает существенные изменения. На рис. 5 продемонстрировано изменение профиля силы излучения рассеянной компоненты при расчете по сопряженному уравнению.

Сравнение различных способов расчета рассеянного излучения при неанисотропной индикатрисе показывает плохую адаптируемость метода прямого расчета, занижающего значения по сравнению с методами локальных оценок в 2.5–3 раза при $g = 0.9$, что продемонстрировано на рис. 6.

Рассеянная компонента в методе прямого расчета представлена здесь как разность полного излучения и нерассеянного. На графиках отсутствует зависимость рассеянного излучения с боковой поверхности *B* по данному методу ввиду наличия криволинейного паттерна в расчете нерассеянного излучения (обусловленного степенью детализации расчетной сетки). Методы, основанные на локальных оценках, по-прежнему хорошо согласуются друг с другом качественно, однако стоит отметить возрастающую дисперсию результата для решения прямого уравнения при увеличении неанисотропности индикатрисы. Сравнение времен расчета представлено в таблице.

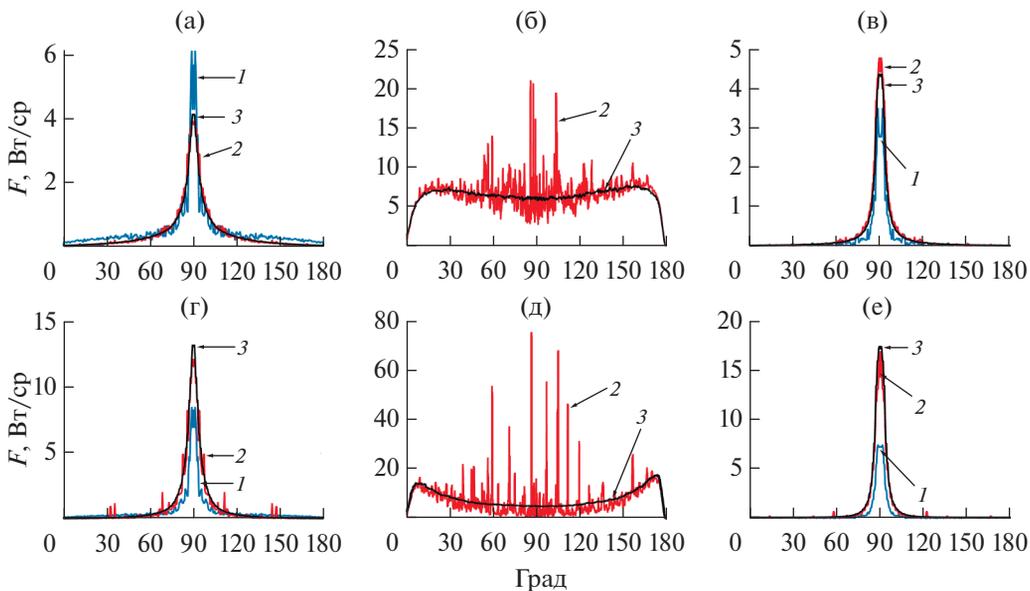


Рис. 6. Сравнение угловых зависимостей силы рассеянной компоненты излучения для трех расчетных методов с индикатрисой Хенни–Гринштейна при $\varpi = 0.021$ и $g = 0.5$ (а)–(в) и 0.9 (г)–(е) для поверхностей *A* (а), (г), *B* (б), (д), *C* (в), (е): 1 – метод прямого расчета; 2 – локальная оценка, прямое уравнение; 3 – сопряженное уравнение.

Сравнение времен расчета (в с) при использовании индикатрисы Хенби–Гринштейна с параметром $g = 0.5$

ϖ	Метод прямого расчета, $N_{\min} = 2000$	Локальная оценка (прямое уравнение), $N_{\min} = 50$	Локальная оценка (сопряженное уравнение)
0.021	126.8	125636	2560.6
0.465	126.8	144719	3186.7
0.465	126.9	158114	3720.5

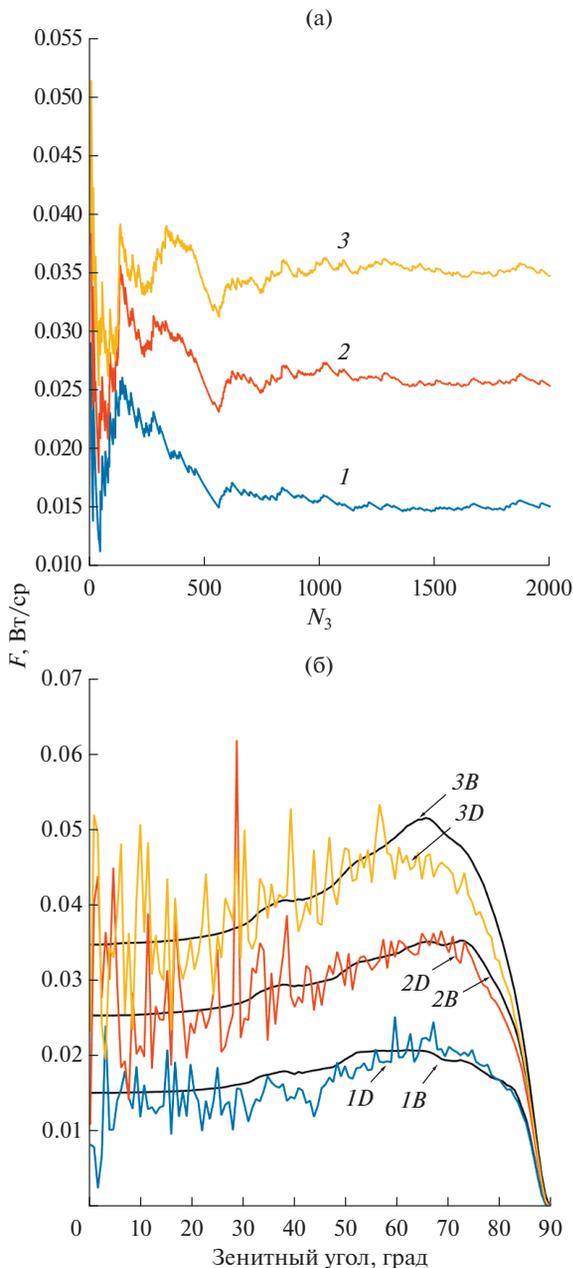


Рис. 7. Сходимость метода локальных оценок сопряженного уравнения при зенитном угле 0.375° , азимутальном — 0.75° (а); (б) сравнение зависимостей по зенитному углу методов локальных оценок прямого уравнения (D , $N_{\min} = 10000$) и сопряженного уравнения (B , $N_3 = 2000$): 1 — $\varpi = 0.021$, 2 — 0.465 , 3 — 0.632 .

Вычислительно более “дорогим” для данной задачи является метод локальных оценок при решении прямого уравнения. Следует обратить внимание на вопрос сходимости при вычислении математического ожидания в (9) и в (15). Выбрана площадка в середине поверхности B , и проанализирована сходимость значений рассеянного излучения при изменении управляющих параметров (N_{\min} для локальных оценок прямого уравнения и N_3 для локальных оценок сопряженного уравнения). При этом на сетке регистрируемых направлений зенитный угол отсчитывается от нормали к поверхности, таким образом, угол в 0° соответствует направлению внутрь расчетного объема по нормали, а угол в 90° — направлению по касательной с быстрым выходом из объема.

Несмотря на то, что в обоих методах используются одни и те же функции расчета длины свободного пробега и оптической толщины, сходимость метода локальных оценок сопряженного уравнения не зависит от направления регистрации (одинаково низкая дисперсия на графиках $1B-3B$, рис. 7), в то время как при решении прямого уравнения сходимость зависит от направления (возрастающая дисперсия на графиках $1D-3D$ при стремлении зенитного угла к 0°). Плохой сходимостью решения прямого уравнения объясняются пики на представленных ранее зависимостях рассеянного излучения при обходе поверхности. Такое поведение сходимости может обуславливаться и недостаточным качеством примененных алгоритмов трассировки луча.

Тем не менее, исходя из общего согласования графиков зависимостей рассеянного излучения, можно заключить, что приведенное описание применения методов расчета рассеянного излучения на основе решения прямого и сопряженного уравнений методами локальных оценок в среде с объемными источниками излучения является корректным и приводит (при выполнении условий сходимости) к схожим значениям рассеянного излучения. На основании анализа временных затрат и особенностей сходимости данных методов можно сделать вывод о предпочтительности применения того или иного подхода к решению конкретной задачи.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, можно выполнить качественное сравнение рассмотренных методов расчета силы излучения с осесимметричного объема при наличии рассеяния. Методу решения прямого уравнения с использованием локальной оценки и методу прямого расчета сопутствует общее ограничение: выражение (10) для мощности, испускаемой элементарным объемом среды, соответствует предположению объемного высвечивания, т.е. малой оптической толщины такого объема, что может налагать довольно жесткие условия на дискретизацию расчетной области. Метод прямого расчета не подходит при работе с неизотропными индикатрисами, по крайней мере для сеток детектируемых направлений высокой дискретизации. Метод локальных оценок прямого уравнения способен учитывать неизотропность индикатрис рассеяния в среде, однако для малой дисперсии результата может потребоваться достаточно большое число N_{\min} . Общим свойством методов локальных оценок является принципиальная независимость от наличия симметрии в среде. Наиболее универсальным оказался метод решения сопряженного уравнения переноса с использованием локальной оценки. Во-первых, энергия, излучаемая объемом среды в данном методе, рассчитывается напрямую, без деления на отдельные элементарные излучающие объемы. Во-вторых, явный вид оценки (14) в данном методе интуитивно понятным образом обеспечивает вклад от всех источников излучения. С ее использованием наиболее просто учитывать вклад внешних источников излучения, видимых из текущей точки под определенным телесным углом.

Продемонстрировано значительное влияние величины альbedo однократного рассеяния на характеристики рассеянного излучения: при увеличении значения альbedo в 30 раз сила излучения от рассеянной компоненты в случае использования однородной индикатрисы возрастает в ~ 3 раза с поверхности B и в ~ 1.5 раза с поверхностями A и C . С увеличением доли рассеянного вперед излучения профиль силы излучения от поверхности B деформируется, что является важным фактором при оценке максимальной силы излучения рассеивающих струй, так как, несмотря на максимальную площадь проекции струи при положении наблюдателя в 90° , максимум силы излучения достигается при смещенном угле наблюдения ($\sim 15^\circ$ и $\sim 160^\circ$). Однако при расчете реальных струй двигателей данные угловые зависимости дополнительно деформируются излучением металлических

стенок сопла – расчет подобной задачи также полностью описывается представленными уравнениями.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Марчук Г.И., Михайлов Г.А., Назарлиев М.А. и др. Метод Монте-Карло в атмосферной оптике. Новосибирск: Наука, 1976.
2. Yetzer K., Varnai T., Huang S. Intercomparison of 3D Radiation Codes, 2015. <http://i3rc.gsfc.nasa.gov/>
3. Михайлов Г.А., Лотова Г.З. Численно-статистическая оценка потока частиц с конечной дисперсией // Докл. АН. 2012. Т. 447. № 1. С. 18.
4. Каблукова Е.Г., Каргин Б.А. Эффективные дискретно-стохастические модификации локальных оценок метода Монте-Карло для задач лазерного зондирования рассеивающих сред // Вычислительные технологии. 2012. Т. 17. № 3. С. 70.
5. Ухинов С.А. Методы Монте-Карло для решения задач теории переноса поляризованного излучения. Дис. ... докт. физ.-мат. наук. Новосибирск: Институт вычислительной математики и математической геофизики Сиб. отд. РАН, 2010.
6. Wang Z., Cui S., Zhang Z. et al. Theoretical Extension of Universal Forward and Backward Monte Carlo Radiative Transfer Modeling for Passive and Active Polarization Observation Simulations // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 2019. V. 235. P. 81.
7. Wang Z., Cui S., Yang J. et al. A Novel Hybrid Scattering Order-dependent Variance Reduction Method for Monte Carlo Simulations of Radiative Transfer in Cloudy Atmosphere // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 2017. V. 189. P. 283.
8. Deutschmann T., Beirle S., Frieß U. et al. The Monte Carlo Atmospheric Radiative Transfer Model McArtim: Introduction and Validation of Jacobians and 3D Features // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 2011. V. 112. № 6. P. 1119.
9. Modest M.F. Backward Monte Carlo Simulations in Radiative Heat Transfer // J. Heat Transfer. 2003. V. 125. № 1. P. 57.
10. Котов Д.В., Суржиков С.Т. Локальная оценка направленной излучательной способности светорассеивающих объемов методом Монте-Карло // ТВТ. 2007. Т. 45. № 6. С. 885.
11. Григорьев И.С. Моделирование влияния процессов рассеяния на силу излучения высокотемпературной струи по методу Монте-Карло // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2020. Т. 5. № 92. С. 28.
12. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973. 311 с.
13. Суржиков С.Т. Тепловое излучение газов и плазмы. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2004. 544 с.
14. Kochanov R.V., Gordon I.E., Rothman L.S. et al. HITRAN Application Programming Interface (HAPI): A Comprehensive Approach to Working with Spectroscopic Data // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 2016. V. 177. P. 15.

УДК 544.452.42

РАСЧЕТНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГОРЕНИЯ ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ В МОДЕЛЬНОМ КАНАЛЕ ПРИ УДАРНО-ВОЛНОВОЙ СТРУКТУРЕ ТЕЧЕНИЯ

© 2022 г. Н. В. Кукшинов^{1, 2}, Д. Л. Мамышев^{1, 2}, *¹ФАУ “Центральный институт авиационного моторостроения им. П.И. Баранова”, Москва, Россия²НИУ “Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана”, Москва, Россия

*E-mail: dlmamyshev@ciam.ru

Поступила в редакцию 07.07.2021 г.

После доработки 10.12.2021 г.

Принята к публикации 15.02.2022 г.

В работе представлены результаты численного моделирования горения водородно-воздушной смеси в сверхзвуковом потоке в модельном канале конфигурации, исследованной в проекте “HyShot”. Решается осредненная по Фавру система уравнений Навье–Стокса, дополненная различными моделями турбулентности, моделями взаимодействия турбулентности с горением, а также описанием химико-кинетических механизмов. Выполнено сравнение результатов расчетов с применением различных моделей с экспериментальными данными, определены отклонения расчетных и экспериментальных значений статического давления по длине модели. Проведено исследование влияния угла подачи топлива на характеристики потока, определены границы теплового запираания в зависимости от этого фактора. Исследовано влияние начального уровня турбулентности потока на структуру течения.

DOI: 10.31857/S0040364422040068

ВВЕДЕНИЕ

Исследование горения топливно-воздушных смесей в высокоскоростном потоке с ударно-волновой структурой направлено на решение задачи создания комбинированных силовых установок, разрабатываемых для многоцелевых авиационно-космических систем [1–3]. Ввиду больших скоростей потока в камере сгорания возникает необходимость интенсификации смешения и горения топливных компонентов [4–6]. В качестве топлива может рассматриваться как водород, обеспечивающий высокий удельный импульс, высокие экологические характеристики и имеющий большой потенциал применения в энергетических установках [7], так и углеводородные топлива, например этилен [8, 9].

Обеспечение эффективного процесса горения топлива, в частности, связано со способом подачи горючего в набегающий поток. Горючее может подаваться как со стенки, так и с использованием пилонов топливоподачи. Первый вариант рассмотрен, например, в работе [10], где проведено экспериментальное и численное исследование горения водородно-воздушной смеси в камере сгорания проекта LARCAT II со сверхзвуковым режимом течения. Для камеры сгорания, которая имеет четыре секции, проводятся эксперименты со следующими параметрами: полное давление $p_0 = 0.40$ МПа, полная температура $1414 < T_0 < 1707$ К, ко-

эффициент избытка горючего – 0.15. Использование второго варианта рассмотрено в [11], где проводится исследование при числе Маха $M = 2.5$, $p_0 = 0.6$ МПа, $T_0 = 1620$ К и коэффициенте избытка горючего 0.45. Для данного эксперимента рассматриваются различные типы пилонов и проводится их сравнение по эффективности обеспечиваемого смешения.

Одним из экономически выгодных методов, позволяющих исследовать процессы смешения и горения горючего и окислителя в сверхзвуковом потоке и выявить эффективные способы их интенсификации, является численное моделирование. Среди ряда примеров можно рассмотреть работу [12], основанную на данных из [13], где исследуется модернизированный пилон для создания дополнительных вихрей в продольном направлении в сверхзвуковом потоке, которые в свою очередь интенсифицируют смешение водорода с воздухом. В [14] рассматривается влияние коэффициента избытка топлива на горение в сверхзвуковом потоке с помощью LES- и PaSR-моделирования. Выявлено, в частности, что с увеличением коэффициента избытка топлива среднее число Маха в камере сгорания и сопле уменьшается. В [15] проводится RANS-моделирование с поправкой в модели турбулентности для учета влияния шероховатости стенки на развитие горения в сверхзвуковом потоке. Показано,

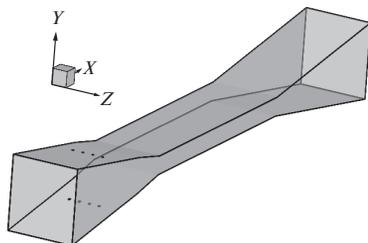


Рис. 1. Трехмерная конфигурация модели.

что шероховатость существенно влияет на результат, а ее учет в моделировании позволяет обеспечить лучшее совпадение с экспериментальными данными. Ряд летных и наземных экспериментов, а также численных исследований выполнен в проекте “HyShot”. Так, в [16] с помощью численного моделирования исследовалась модельная камера с разными высотами горла для оценки влияния этого геометрического фактора на характеристики горения при ударно-волновой структуре течения. Результаты моделирования сравнивались с экспериментальными данными из [17]. Выявлена сильная зависимость от выбора модели турбулентности и модели взаимодействия горения и турбулентности (ВТГ).

При численном моделировании горения в сверхзвуковом потоке необходимо правильно использовать расчетные модели, которые описывают процессы воспламенения и горения, турбулентное перемешивание и их взаимодействие друг с другом. Применение той или иной модели может качественно влиять на получаемый результат. Так, выбор модели химической кинетики горения водорода может по-разному воспроизводить задержку воспламенения [18, 19] и приводить к различным значениям ламинарной скорости пламени [19].

Основная задача данной работы заключается в валидации численных методов расчета горения водородно-воздушной смеси по экспериментальным данным, полученным при исследовании модельной камеры сгорания конфигурации проекта “HyShot” [17], а также в определении степени влияния различных условий на результаты расчета. При трехмерном численном моделировании решались осредненные по Фавру уравнения Навье–Стокса, дополненные моделями турбулентности и механизмами химической кинетики. При этом варьировались модели турбулентности ($k-\omega$ SST Менера [20], γ -Re Θ [21] и ее развитие γ , $k-\epsilon$ -модель [22]) и модели ВТГ (laminar finite-rate – LFR и eddy-dissipation-concept – EDC [23]). Валидация результатов расчетного исследования проводилась путем сравнения расчетных и экспериментальных распределений давления на стенках модели. Дополнительно исследовалось влияние разных условий однозначности на полу-



Рис. 2. Схематическое изображение модели: размеры – в мм.

чаемые значения характеристик эффективности сгорания топлива.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Конфигурация модели. Численное моделирование проводится для конфигурации экспериментальной модели проекта “HyShot” [17]. Трехмерная конфигурация модели, а также ее схематическое изображение представлены на рис. 1 и 2 соответственно.

Модель симметрична относительно плоскостей XY и XZ и состоит из входного устройства, камеры сгорания, а также сопла. Длина модели – 625 мм, ширина – 75 мм. В исследовании рассматривается вариант с высотой горла 20 мм и высотой входного устройства 82 мм. Общая длина камеры сгорания составляет 250 мм. Модель имеет два клина сжатия, первый из которых расположен под углом 9° , а второй – под углом 12° по отношению к плоскости XZ . Первый клин сжатия удален от начальной точки входного устройства на 135 мм. В качестве горючего используется водород, который подается в спутный поток с двух клиньев сжатия (верхний и нижний); оба имеют по четыре форсунки диаметром 2 мм. Форсунки расположены под углом 45° по отношению к плоскости клина сжатия или под углом $\alpha = 54^\circ$ по отношению к плоскости XZ .

Расчетная область. В данном численном моделировании первоначально рассматривалась двумерная блочно-структурированная расчетная сетка. Использование такой сетки позволило оценить необходимое количество ячеек в продольном и поперечном сечениях на основе сходимости сетки и значения параметра Y^+ . Дальнейшее исследование проводится уже с использованием трехмерной блочно-структурированной расчетной сетки. Ввиду того что модель симметрична относительно центральных плоскостей, сеточная область строится только для $1/4$ модели, что позволяет ускорить процесс счета. Общий вид расчетной сетки представлен на рис. 3а. На рис. 3б показано распределение ячеек в области форсунок на поверхности клина сжатия.

Для детального описания структуры пограничного слоя и его взаимодействия с ударными

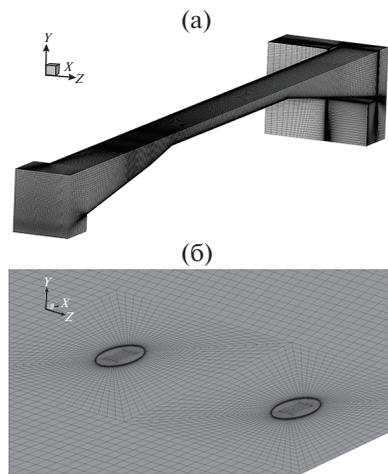


Рис. 3. Трехмерная расчетная сетка: (а) — общий вид расчетной сетки, (б) — распределение ячеек в области форсунок.

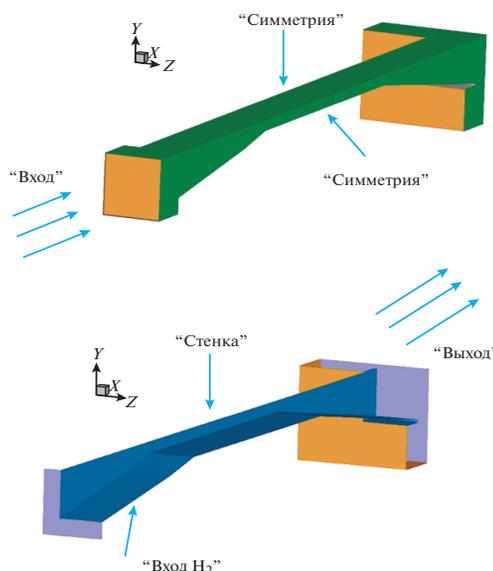


Рис. 4. Типы граничных условий.

волнами проводится сгущение сетки ко всем стенкам модели, а также вблизи форсунок. Расчетная сетка содержит $\sim 4 \times 10^6$ ячеек (4213920). Минимальный размер ячеек равен 5×10^{-3} мм. В областях входа и выхода расчетная сеточная область расширяется за счет дополнительных ячеек, которые учитывают развитость потока, а также обеспечивают независимость получаемого решения от граничных условий. Значение параметра Y^+ для режима без подачи топлива, как и с подачей топлива, < 5 .

Граничные условия и замыкающие модели. Физические параметры набегающего потока и впрыска топлива, которые используются при численном моделировании, соответствуют экспериментальным и представлены в табл. 1. Здесь T — статическая температура, ρ — плотность, u — скорость, Y_{O_2} , Y_{N_2} , Y_{H_2} — массовые доли кислорода, азота, водорода, p — статическое давление, ϕ — эквивалентное отношение топлива.

Численное моделирование проводится для двух режимов. Первый, когда форсунки закрыты, т.е. без подачи топлива, — “холодный” запуск. Вторым, когда форсунки открыты, т.е. с подачей топлива, — “горячий” запуск.

На рис. 4 представлены типы граничных условий, используемых при численном моделировании.

На входе в расчетную область (“вход” на рис. 4) задается число Маха, статическое давление и статическая температура в соответствии с табл. 1. Также в одном из расчетов для выявления независимости получаемого решения от граничного условия на входе окислителя задаются удельный расход, статическое давление и полная температура, на выходе из расчетной области (“выход”) — условие экстраполяции. На граничном условии “вход H_2 ” задаются число Маха, статическое давление и статическая температура, на границах “симметрия” (зеленый цвет) — условие симметричности, на стенках модели “стенка” (синий цвет) — условие адиабатической стенки и условие “прилипания”.

Для описания процессов протекания химических реакций при взаимодействии горючего и окислителя используются химико-кинетический механизм, разработанный в [24] (Dimitrov), а также механизм из [25] (Hong). Механизм Dimitrov содержит девять компонент (O , O_2 , H , H_2 , H_2O , H_2O_2 , N_2 , включая радикалы OH , HO_2) и 30 общих реакций; механизм Hong — 10 компонент (O , O_2 , H , H_2 , H_2O , H_2O_2 , N_2 , AR , включая радикалы OH , HO_2) и 20 общих реакций с учетом диапазоновых ограничителей.

Таблица 1. Параметры для численного моделирования

	Запуск	T , К	ρ , кг/м ³	u , м/с	Y_{O_2}	Y_{N_2}	Y_{H_2}	M	p , Па	ϕ
Воздух	“Холодный”	280	0.0902	2275	0.23	0.77	0	6.78	7253	—
	“Горячий”	422	0.0755	2634	0.23	0.77	0	6.4	9131	0.46
Топливо	—	250	0.543	1206	0	0	1	—	—	—

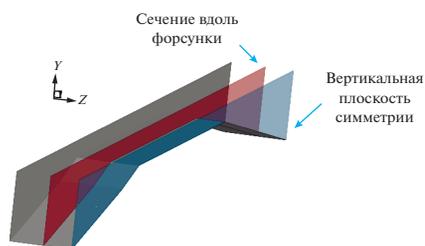


Рис. 5. Изображение сечений вдоль модели.

Для описания процессов взаимодействия химических реакций и турбулентности используются модели LFR и EDC.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

“Холодный” запуск. Результаты численного моделирования сравниваются с результатами эксперимента, в котором проводились замеры статического давления на стенке вдоль вертикальной плоскости симметрии проточного тракта (рис. 5).

Для режима “холодного” запуска распределения давления при использовании разных замыкающих моделей представлены на рис. 6. Вертикальные серые линии соответствуют координатам мест подачи топлива, начала второго клина сжатия, начала и конца камеры сгорания.

Показано, что в целом все варианты расчетов качественно схожи между собой. Удастся выявить несколько пиков: первый образуется при прохождении потока через ударную волну от второго клина сжатия; второй, третий, четвертый приходятся на область камеры сгорания; пятый – в области сопла. Максимальные значения давлений второго и четвертого пика не достигают уровня значений в эксперименте, а величины третьего пика, наоборот, завышены. Пространственное расположение первых четырех пиков совпадает с экспериментом. Основное отличие приходится на пятый пик, который в расчетах оказывается раньше, чем в эксперименте. Видно, что в этой области расчет с моделью химико-кинетического механизма Dimitrov и моделью турбулентности $k-\epsilon$ дает завышенные значения по сравнению с другими моделями турбулентности. Давления же при использовании модели $\gamma\text{-Re}\Theta$ (Dimitrov, $\gamma\text{-Re}\Theta$) незначительно меньше, чем при использовании модели $k-\omega$ SST (Dimitrov, SST).

При сравнении моделей химико-кинетического механизма с одной моделью турбулентности $k-\omega$ SST (Dimitrov, SST и Hong, SST) результаты качественно схожи между собой. Распределение давления с другим типом граничного условия (Dimitrov, SST), т.е. с заданием на входе в расчетную область удельного расхода, статического давления и полной температуры, не приводит к отличию от результата при задании на входе числа

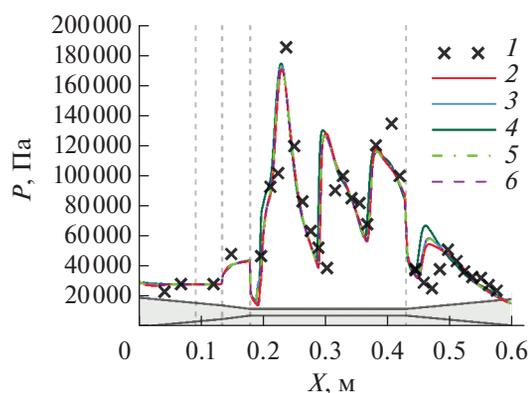


Рис. 6. Распределения давления на стенке вдоль вертикальной плоскости симметрии для “холодного” запуска с разными замыкающими моделями: 1 – эксперимент [17]; расчет: 2 – Dimitrov, $\gamma\text{-Re}\Theta$; 3 – Dimitrov, SST; 4 – Dimitrov, $k-\epsilon$; 5 – Dimitrov, SST, второе граничное условие; 6 – Hong, SST.

Маха, статического давления и статической температуры.

В целом, несмотря на сложный процесс взаимодействия ударных волн с пограничным слоем, использование численного моделирования позволяет достаточно точно воспроизвести распределение давления на стенках камеры сгорания.

Для варианта расчета с химико-кинетическим механизмом Dimitrov при использовании модели турбулентности $\gamma\text{-Re}\Theta$ поля числа Маха, давления и температуры в плоскости симметрии представлены на рис. 7.

Показано, что внутри камеры сгорания при прохождении потока воздуха через ударные волны, образующиеся от первого и второго клиньев сжатия, наблюдается четыре крупных области сжатия и разрежения (рис. 7б). Видно, что при взаимодействии падающей, отраженной ударных волн и волны разрежения от поверхности стенки в области стенок образуются зоны с повышенными давлением и температурой (рис. 7в). Данные зоны благоприятны для образования в них радикалов OH и обеспечивают самовоспламенение даже с невысоким значением степени сжатия потока в воздухозаборнике. Схожий результат получен в работе [16]. Зоны повышенных давлений и температур соответствуют меньшим числам Маха (рис. 7а).

Одним из факторов, влияющих на получаемое численное решение, является степень турбулентности потока на входе в расчетную область [26], определяемая параметром интенсивности I и отношением турбулентной вязкости к молекулярной μ_t/μ_l . В представленных выше расчетах интенсивность $I = 5\%$, а отношение вязкостей $\mu_t/\mu_l = 10$. Для определения степени влияния турбулентности потока на численное решение про-

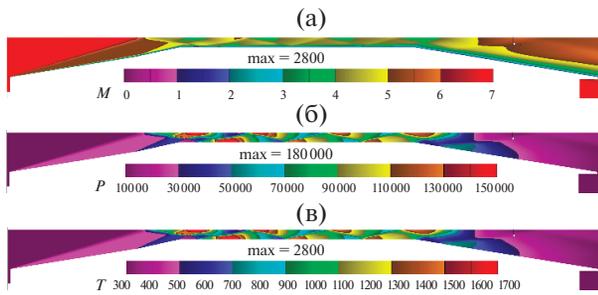


Рис. 7. Поля параметров для расчета Dimitrov, γ -Re Θ вдоль вертикальной плоскости симметрии: (а) – поле числа Маха, (б) – поле статического давления, (в) – поле статической температуры.

водится варьирование параметров I и μ_t/μ_l (табл. 2).

Определение величины μ_t/μ_l основывается на заданных I и характерном размере рассматриваемой задачи $L_{хар}$ с использованием следующих зависимостей:

$$k = \frac{3}{2}(Iu_{ave})^2, \quad l = \frac{0.07L_{хар}}{C_\mu^{\frac{3}{4}}},$$

$$\varepsilon = \frac{k^{\frac{3}{2}}}{l}, \quad \varepsilon = \rho \frac{C_\mu k^2}{\mu_l} \left(\frac{\mu_t}{\mu_l}\right)^{-1},$$

где l – турбулентный масштаб длины (размер наибольшего турбулентного вихря), C_μ – эмпирическая константа модели турбулентности, k – турбулентная кинетическая энергия, ε – турбулентная скорость диссипации.

В качестве основных величин характерного размера используются значения высоты горла 20 мм, гидравлического диаметра на основе высоты горла $4S/A = 31.579$ мм, а также длина проточного тракта 625 мм (табл. 2).

Для “холодного” запуска рассматривались только несколько расчетов с разными значениями степени турбулентности потока на входе в расчетную область (табл. 2) с химико-кинетическим механизмом Dimitrov и моделью турбулентности γ -Re Θ . Результаты данных расчетов представлены на рис. 8.

По данным результатам можно видеть, что распределение давления вдоль стенки при разных степенях входной турбулентности качественно схожи между собой. Можно сделать вывод, что в

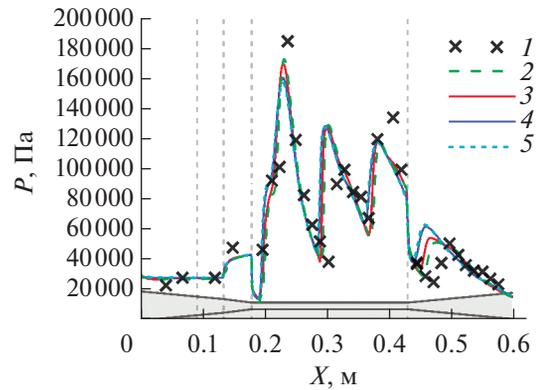


Рис. 8. Распределения давления на стенке вдоль вертикальной плоскости симметрии для “холодного” запуска с разными значениями степени турбулентности на входе в расчетную область: 1 – эксперимент [17]; расчет: 2 – Dimitrov, γ -Re Θ , 0.1-1; 3 – 5-10; 4 – 5-540; 5 – 10-540.

эксперименте обеспечивались низкие уровни турбулентности на входе в рабочую часть установки. При этом изменение интенсивности турбулентности на входе с сохранением отношения турбулентной вязкости к молекулярной не приводит к изменению результата.

В табл. 2 также представлены значения средней арифметической относительной погрешности ($\delta_{ср_хол}$) для расчетов с “холодным” запуском при разной входной степени турбулентности. Вычисление погрешностей давления выполнялось по следующим формулам:

$$\delta(i) = \frac{P_{расч}(i) - P_{эксп}(i)}{P_{эксп}(i)}, \quad \delta_{ср} = \frac{\sum_{i=1}^N \delta(i)}{\sum_{i=1}^N i},$$

где i – проба эксперимента, N – количество проб из эксперимента.

Стоит отметить, что данная методика приводит к завышенным значениям отклонений давления в местах пространственного смещения пика давления.

Для расчетов с разной степенью турбулентности также представлен коэффициент восстановления полного давления (рис. 9), который вычисляется по формуле

Таблица 2. Параметры степени турбулентности потока на входе в расчетную область

$I, \%$	0.1	5	5	5	5	10	10	10	10
μ_t/μ_l	1	10	540	850	16847	540	1078	1702	33694
$L_{хар}, мм$	1.88	0.37	20	31.579	625	10.01	20	31.579	625
$\delta_{ср_хол}, \%$	23.6	24.9	29.4	–	–	31.6	–	–	–

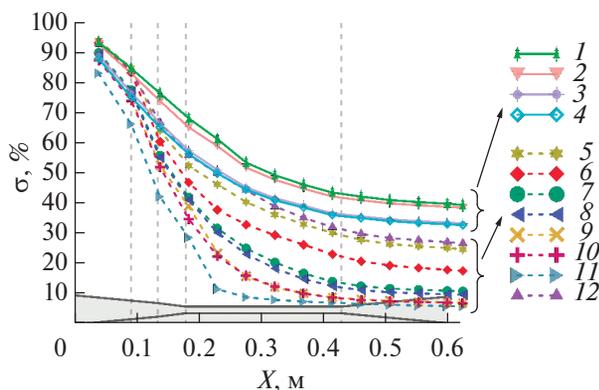


Рис. 9. Распределения коэффициента восстановления полного давления для ряда поперечных сечений вдоль модели для “холодного” запуска: 1 – Dimitrov, γ -Re Θ , 0.1-1; 2 – 5-10; 3 – 5-540; 4 – 10-540; “горячего” запуска с разными замыкающими моделями: 5 – расчет № 1, 6 – 2, 7 – 10, 8 – 11, 9 – 12, 10 – 14, 11 – 16, 12 – 17.

$$\sigma = \frac{\sum_{i=1}^n P_{0i}(x) \rho_i(x) \mathbf{V}_i(x) \mathbf{S}_i(x)}{\sum_{i=1}^n (P_{0i} \rho_i \mathbf{V}_i \mathbf{S}_i)_{\text{inlet}}}$$

Здесь $P_{0i}(x)$ – полное давление в i -й ячейке, $\rho_i(x)$ – плотность смеси в i -й ячейке, $\mathbf{V}_i(x)$ – вектор скорости i -й ячейке, $\mathbf{S}_i(x)$ – площадь i -й ячейки в рассматриваемом сечении; индекс inlet обозначает параметры на входе в воздухозаборник.

С ростом значений I и μ_r/μ_l (Dimitrov, γ -Re Θ , 5-540 и Dimitrov, γ -Re Θ , 10-540) коэффициент восстановления полного давления практически на одну и ту же величину меньше вдоль всей модели, чем при расчете Dimitrov, γ -Re Θ , 0.1-1 и Dimitrov, γ -Re Θ , 5-10.

“Горячий” запуск. Для “горячего” запуска выполнены расчеты с учетом подачи топлива в проточный тракт модели. Особенности основных численных расчетов при “горячем” пуске представлены в табл. 3, где $I-\mu_r/\mu_l$ – параметры степени турбулентности потока на входе в расчетную область.

На рис. 10 представлены распределения давления при разных химико-кинетических механизмах, моделях турбулентности, а также разных моделях ВТГ.

По распределению контрольного параметра, представленному на рис. 10, видно, что вне зависимости от модели турбулентности и химико-кинетического механизма результаты с применением модели ВТГ EDC не совпадают с экспериментальными значениями давления на стенках (расчеты №№ 5–7). Использование модели EDC оправдано при исследовании процесса горения в дозвуковом потоке, где характерное время химических

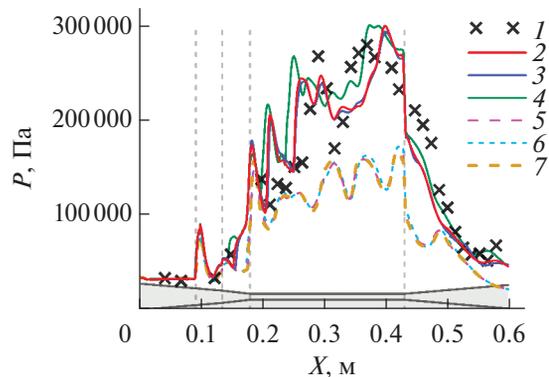


Рис. 10. Распределения давления на стенке вдоль вертикальной плоскости симметрии для “горячего” запуска с разными замыкающими моделями: 1 – эксперимент [17]; расчет: 2 – № 2, 3 – 3, 4 – 4, 5 – 5, 6 – 6, 7 – 7.

реакций значительно меньше, чем характерное гидродинамическое время [27]. В сверхзвуковом потоке данные характерные величины могут быть одного порядка. В то же время на рис. 10 показано, что результаты с химико-кинетическим механизмами Dimitrov, Hong при использовании модели турбулентности γ -Re Θ и γ , а также модели LFR относительно близки к экспериментальным (расчеты №№ 2–4). Выявлено, что химико-кинетический механизм (расчеты №№ 2, 3) не является критическим фактором исходя из оценки контрольного параметра давления [18]). На основе средней арифметической относительной погрешности выбраны расчетные модели для дальнейшего исследования (расчет № 2).

Результаты с моделями турбулентности $k-\omega$ SST и $k-\epsilon$ при использовании ВТГ LFR (расчеты №№ 8, 9) не приведены, так как при численном моделировании возникает эффект теплового запыления (табл. 4).

С помощью численного моделирования удается выявить небольшой рост давления до 10^5 Па, приходящийся на область впрыска водорода ($x = 0.0925$ м), который отсутствует при “холодном” расчете (рис. 10). Данный пик является результатом образования ударной волны вследствие подачи топлива, который не отображается в экспериментальных данных из-за отсутствия датчика вблизи входного отверстия горячего [28]. Вдобавок результаты моделирования показывают возвращение уровня давления к первоначальному значению на небольшом промежутке модели вниз по потоку после подачи топлива.

Для варианта расчета с химико-кинетическим механизмом Dimitrov при использовании модели турбулентности γ -Re Θ и модели ВТГ LFR представлены поля числа Маха, давления, массовой

Таблица 3. Обозначения расчетов и их характеристики

Расчет №	Параметры расчета						$\eta_1, \%$	$\eta_2, \%$
	химико-кинетический механизм	модель турбулентности	модель ВТГ	$I-\mu_f/\mu_f$	угол подачи топлива α	$\delta_{ср_гор}, \%$		
1	Dimitrov	γ -Re Θ	LFR	0.1-1	54°	18.8	60.6	55.5
2	Dimitrov	γ -Re Θ	LFR	5-10	54°	17.88	76.0	70.3
3	Hong	γ -Re Θ	LFR	5-10	54°	17.89	76.3	73.0
4	Dimitrov	γ	LFR	5-10	54°	18.5	82.8	77.4
5	Dimitrov	γ -Re Θ	EDC	5-10	54°	33.1	36.4	27.7
6	Dimitrov	$k-\omega$ SST	EDC	5-10	54°	32.3	39.7	30.0
7	Hong	γ -Re Θ	EDC	5-10	54°	33.6	33.9	25.7
8	Dimitrov	$k-\omega$ SST	LFR	5-10	54°	—	—	—
9	Dimitrov	$k-\epsilon$	LFR	5-10	54°	—	—	—
10	Dimitrov	γ -Re Θ	LFR	5-540	54°	17.8	87.1	81.5
11	Dimitrov	γ -Re Θ	LFR	5-850	54°	17.6	89.9	84.5
12	Dimitrov	γ -Re Θ	LFR	5-16847	54°	20	96.7	92.1
13	Dimitrov	γ -Re Θ	LFR	10-540	54°	21.2	90.9	85.5
14	Dimitrov	γ -Re Θ	LFR	10-1078	54°	27.5	95.8	90.8
15	Dimitrov	γ -Re Θ	LFR	10-1702	54°	29.7	97.0	92.2
16	Dimitrov	γ -Re Θ	LFR	10-33694	54°	32	97.6	93.0
17	Dimitrov	γ -Re Θ	LFR	5-10	39°	—	71.3	65.7

Примечание. η_1, η_2 – коэффициенты сгорания топлива, рассчитанные по разным формулам.

доли H_2 и изоповерхности массовой доли H_2O (рис. 11, 12).

Поле числа Маха показывает, что в тракте преобладает сверхзвуковое течение топливно-воздушной смеси вдоль всей модели. Поле массовой доли водорода позволяет оценить процесс смешения водорода с окислителем, активная часть которого заканчивается до достижения второго клина, и то, насколько эффективно этот процесс происходит. Также можно отметить, что повышение температуры вследствие тепловыделения смещает вверх по потоку ударно-волновую структуру, частичное сохранение которой можно наблюдать по полю давления. Рис. 12 позволяет сделать вывод, что топливо проникает практически во всю область рабочего участка как по ширине, так и по высоте. Если при прочих равных условиях высоту горла сделать меньше, то, как предполагается, удалось бы задействовать весь объем камеры сгорания.

При моделировании процессов с подачей топлива также менялась степень турбулентности потока на входе в расчетную область (табл. 3). На рис. 13 показано распределение давления на стенке вдоль вертикальной плоскости симметрии для “горячего” запуска с разными значениями параметров турбулентности. Видно, что при $I = 5\%$ и увеличении μ_f/μ_f до 540, 850 и 16847 происходит повышение давления на стенках камеры сгорания (расчеты №№ 10–12). Результаты для $I = 10\%$

и $\mu_f/\mu_f = 540, 1078$ и 1702 показывают качественно схожую зависимость, но с некоторым приростом давления в той же области проточного тракта (расчеты №№ 13–15). Показано, что пик, наблюдающийся в области конечного участка камеры сгорания, с увеличением интенсивности турбулентности изменяется со значения $p \approx 3 \times 10^5$ до 3.59×10^5 Па. При параметрах $I = 10\%$ и $\mu_f/\mu_f = 33694$ расчетное давление выше экспериментального (расчет № 16). Увеличение давления на поверхности камеры сгорания с возрастанием параметров турбулентности возникает благодаря интенсификации турбулентного массообмена. Так, если уменьшить значения I и μ_f/μ_f до 0.1% и 1 (расчет № 1), то давление окажется значительно меньше, чем в эксперименте.

Для “горячего” запуска проводилась также оценка влияния степени турбулентности потока на входе горючего (табл. 5). Для всех расчетов в данной работе степень турбулентности на входе горючего имеет значение $I_f = 1\%$ и $\mu_{f,f}/\mu_{f,f} = 2$.

Таблица 4. Модели турбулентности и эффект теплового запираания

ВТГ	LFR			
	γ -Re Θ	γ	$k-\omega$ SST	$k-\epsilon$
Модель турбулентности	γ -Re Θ	γ	$k-\omega$ SST	$k-\epsilon$
Запираание	—	—	+	+

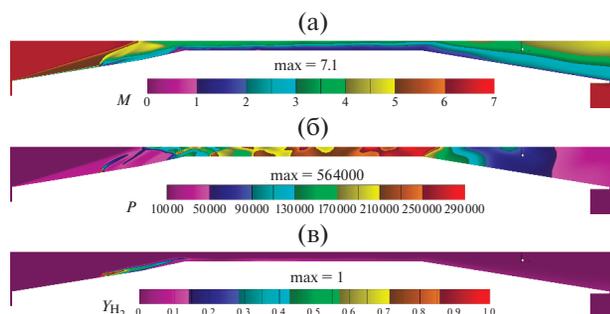


Рис. 11. Поля параметров для расчета № 2 по сечению вдоль форсунки: (а) – поле числа Маха, (б) – поле статического давления, (в) – поле массовой доли H_2 .

Чтобы исследовать влияние этого фактора, производится сравнение результатов расчета № 2 с $I_f = 1\%$, $\mu_{t,f}/\mu_{l,f} = 2$ на входе горючего и аналогичного расчета, но уже со значениями $I_f = 10\%$ и $\mu_{t,f}/\mu_{l,f} = 401$ (расчет jet 10-401), соответствующими характерному значению диаметра форсунки.

Сравнение расчетных и экспериментальных распределений давления при расчетах с разной степенью турбулентности на форсунках представлено на рис. 14. Видно, что распределения давления схожи.

С помощью численного моделирования также проводилось исследование влияния угла впрыска топлива на характеристики потока. Некоторые модели турбулентности при численном моделировании показали тепловое закливание потока, поэтому было решено исследовать и влияние других факторов. В расчете № 2 угол впрыска топлива составляет 54° относительно плоскости XZ ($\alpha = 54^\circ$), что соответствует экспериментальной подаче. Другие значения углов α относительно клина сжатия представлены в табл. 6.

Распределение давления на стенке вдоль вертикальной плоскости симметрии с разными углами впрыска водорода $\alpha = 54^\circ$ и 39° представлено на рис. 14 (расчеты №№ 2, 17). Видно, что при $\alpha = 39^\circ$ значение давления по всей модели становится меньше по сравнению с $\alpha = 54^\circ$. Распределение давления для углов $\alpha = 69^\circ$ и 90° не представлены, так как с такой подачей топлива возникает эффект теплового закливания (табл. 6). По результатам численного моделирования отмечено, что с углом впрыска $\alpha = 39^\circ$ скорость потока локально становится выше, чем при угле 54° , при

Таблица 5. Показатели степени турбулентности на входе горючего

$I_f, \%$	1	10
$\mu_{t,f}/\mu_{l,f}$	2	401
$L_{хар}, мм$	0.1	2

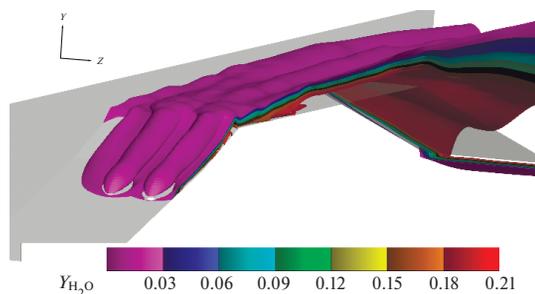


Рис. 12. Изоповерхности массовой доли паров H_2O .

этом уменьшается глубина проникновения горючего в основной поток.

На рис. 15 показано распределение осредненных значений числа Маха в рассматриваемых поперечных сечениях вдоль модели для разных вариантов расчетов. Осредненное число Маха определялось по следующей формуле:

$$M_{оср}(x) = \frac{\sum_{i=1}^n M_i(x) S_i(x)}{\sum_{i=1}^n S_i(x)},$$

где $M_i(x)$ – число Маха i -й ячейки в рассматриваемом сечении.

Осредненные значения числа Маха вдоль модели для расчета с углом впрыска водорода $\alpha = 39^\circ$ (расчет № 17) по всей длине тракта превышают значения для угла $\alpha = 54^\circ$ (№ 2). При сравнении осредненных чисел Маха при разных уровнях турбулентности видно, что с ростом параметра турбулентности на входе в расчетную область числа Маха понижаются. Особенно изменения заметны при переходе со значения $I = 0.1\%$ и $\mu_t/\mu_l = 1$ (расчет № 1) к $I = 5\%$ и $\mu_t/\mu_l = 10$ (№ 2). Также рис. 15 в целом указывает на то, что во всем проточном тракте наблюдается сверхзвуковое течение среды.

Для оценки качества сгорания водорода в полученных расчетах рассматривается коэффициент полноты сгорания топлива, который вычисляется по следующей формуле (по расходу):

$$\eta_l = 1 - \frac{\dot{m}_{H_2}(x)}{\dot{m}_{H_2inj}} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n Y_{H_2i}(x) \rho_i(x) V_i(x) S_i(x)}{\left(\sum_{i=1}^n Y_{H_2i} \rho_i V_i S_i \right)_{inj}},$$

где $Y_{H_2i}(x)$ – массовая доля водорода i -й ячейки в рассматриваемом сечении, индекс inj обозначает параметры на выходе из форсунки.

Распределение коэффициента полноты сгорания топлива при разных режимах представлено

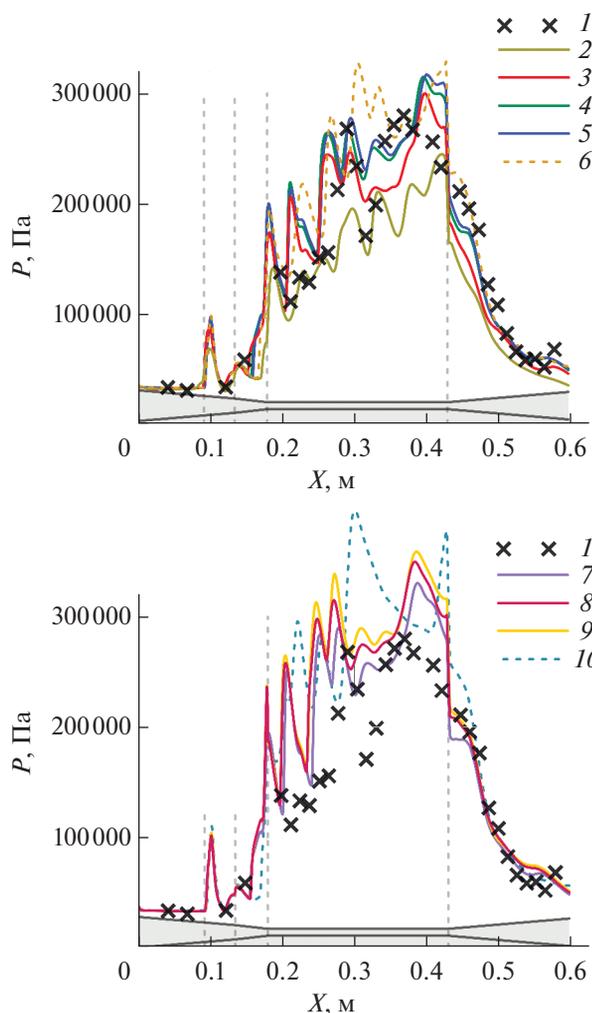


Рис. 13. Распределения давления на стенке вдоль вертикальной плоскости симметрии для “горячего” запуска с разными значениями параметра турбулентности: 1 – эксперимент [17]; расчет: 2 – № 1, 3 – 2, 4 – 10, 5 – 11, 6 – 12, 7 – 13, 8 – 14, 9 – 15, 10 – 16.

на рис. 16 вместе с распределением расхода воды. С повышением уровня турбулентности на входе полнота сгорания топлива повышается практически вдоль всего тракта. Причем больший объем химических реакций во всех режимах протекает примерно до середины камеры сгорания, что отображается по активному образованию водяного пара в этой области.

Распределения коэффициента полноты сгорания вдоль модели для большинства полученных расчетов соответствуют кривой выгорания [29].

Значение коэффициента полноты сгорания топлива в выходном сечении сопла (по расходу) приведено в табл. 3, где также представлены значения коэффициента полноты сгорания топлива в выходном сечении, полученные по следующей зависимости (по энергии):

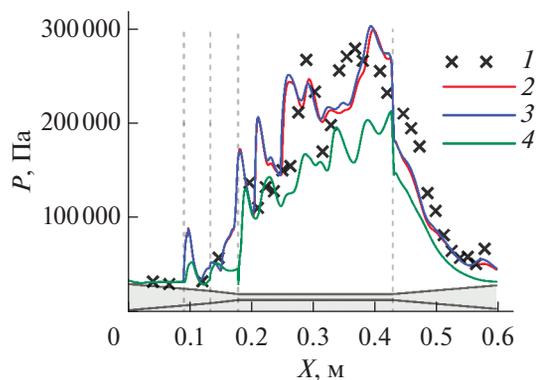


Рис. 14. Распределения давления на стенке вдоль вертикальной плоскости симметрии для “горячего” запуска с разными значениями степени турбулентности на входе горючего и разными углами впрыска горючего: 1 – эксперимент [17]; расчет: 2 – № 2, 3 – jet 10-401, 4 – 17.

$$\eta_2 = \left(\frac{\sum_{k=1}^n \dot{m}_k(x) h_k^0}{G_{H_2O} h_{H_2O}^0} \right),$$

где $\dot{m}_k(x)$ – массовый расход k -й компоненты в рассматриваемом сечении, h_k^0 – стандартная энтальпия образования k -й компоненты, G_{H_2O} – расход воды при коэффициенте полноты сгорания 1.

По представленным значениям (табл. 3) уменьшение угла впрыска топлива по сравнению с экспериментальной подачей снижает коэффициент ввиду большей скорости потока на протяжении всего проточного тракта. Полнота сгорания с ростом значений параметров турбулентности на входе в расчетную область возрастает, что связано с интенсификацией турбулентного перемешивания.

Для “горячего” запуска также определяется коэффициент восстановления полного давления. Данный коэффициент представлен на рис. 9 в рассматриваемых поперечных сечениях вдоль модели для разных вариантов расчетов. Коэффициент восстановления полного давления связан с вычислением тяги двигателя [30]. По рис. 9 видно, что с увеличением степени турбулентности на входе в расчетную область наблюдается понижение коэффициента восстановления полного давления. Усиление турбулентности на входе, с одной стороны, повышает полноту сгорания, но, с другой,

Таблица 6. Угол подачи топлива и запираение

Угол подачи топлива, град	54	39	69	90
Запираение	–	–	+	+

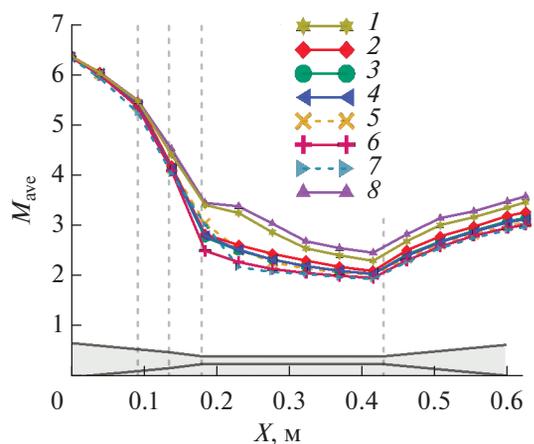


Рис. 15. Распределения осредненного числа Маха для ряда поперечных сечений вдоль модели в разных режимах: 1 – расчет № 1, 2 – 2, 3 – 10, 4 – 11, 5 – 12, 6 – 14, 7 – 16, 8 – 17.

уменьшает коэффициент восстановления полного давления вдоль проточного тракта.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено численное моделирование горения водородно-воздушной смеси в сверхзвуковом потоке модельной камеры сгорания экспериментальной конфигурации проекта “HyShot”. Выполнена валидация вычислительного алгоритма с разными замыкающими моделями турбулентности, моделями взаимодействия турбулентности с горением, а также химико-кинетическими механизмами. Анализ полученных данных при сравнении распределения давления вдоль стенки показал следующее:

- модель турбулентности γ -Re Θ , модель взаимодействия турбулентности с горением LFR и химико-кинетический механизм Dimitrov обеспечивают наилучшее совпадение с экспериментом среди выбранных моделей;

- использование модели ВТГ EDC для сверхзвукового потока занижает значения давления в проточном тракте;

- в зависимости от выбранной модели турбулентности может возникать тепловое запирание потока; так, данный эффект наблюдается для моделей k - ω SST и k - ϵ ;

- разные механизмы химической кинетики обеспечивают схожее распределение давления, но, по данным [19], необходимо проводить валидацию и по другим критериям, так как структура пламени может быть различна, даже если механизмы одинаково описывают задержку воспламенения и ламинарную скорость пламени.

Выполнены расчеты с варьированием параметров турбулентности на входе в расчетную об-

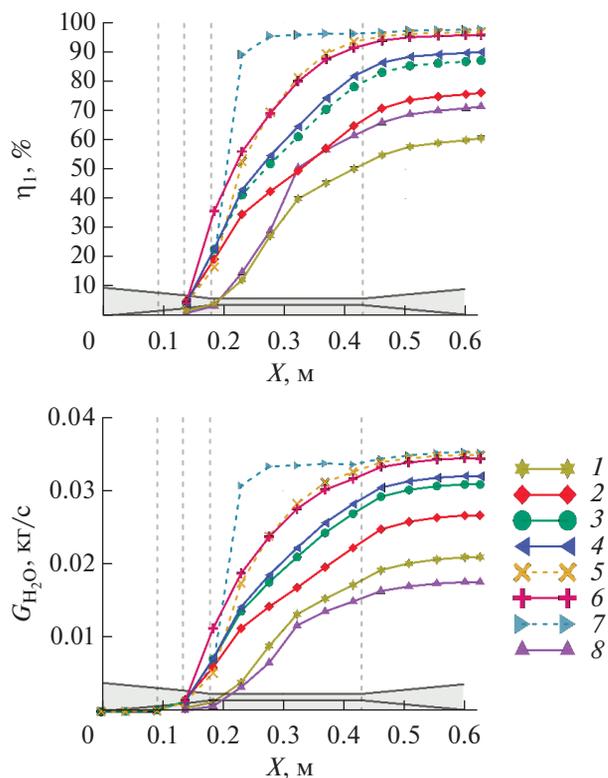


Рис. 16. Распределения коэффициента полноты сгорания топлива и расхода воды для ряда поперечных сечений вдоль модели при разных режимах: 1 – расчет № 1, 2 – 2, 3 – 10, 4 – 11, 5 – 12, 6 – 14, 7 – 16, 8 – 17.

ласть. Показано, что с увеличением этих параметров возникает повышение турбулентного перемешивания, что приводит к увеличению давления на стенках камеры сгорания, увеличению коэффициента полноты сгорания топлива и одновременно уменьшению коэффициента восстановления полного давления. Коэффициент полноты сгорания может изменяться от 60.6 до 97.6% для низкого и высокого уровня турбулентности соответственно. Таким образом, уровень турбулентности на входе является важным фактором, который необходимо определять в экспериментах.

Проведено моделирование с варьированием угла впрыска водорода в набегающий поток. Выявлено, что при меньшем угле подачи топлива наблюдается ускорение потока по сравнению с экспериментальной подачей, что в результате обеспечивает меньшее давление на поверхностях камеры сгорания, меньшее значение коэффициента полноты сгорания топлива и большее значение коэффициента восстановления полного давления. При увеличении угла впрыска водорода наблюдается эффект теплового запирания.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zhang H., Guo J., Xu Y., Du B., Wang Y., She W. Research on TSTO Reusable Launch Vehicle Powered by Turbo-aided RBCC Engine // AIAA Paper 2017-2372. 2017.
2. Mehta U., Aftosmis M., Bowles J., Pandya S. Skylon Airframe Aerodynamics and SABRE Plumes // AIAA Paper 2015-3605. 2015.
3. Arefyev K. Yu., Kukshinov N.V., Prokhorov A.N. Analysis of Development Trends of Power-units for High-speed Flying Vehicles // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 1147. № 012055. P. 1.
4. Seleznev R.K., Surzikov S.T., Shang J.S. A Review of the Scramjet Experimental Data Base // Prog. Aeronaut. Sci. 2019. V. 106. P. 43.
5. Choubey G.D.Y., Huang W., Yan L., Babazadeh H., Pandey K.M. Hydrogen Fuel in Scramjet Engines – A Brief Review // Int. J. Hydrogen Energy. 2020. V. 45. P. 16799.
6. Liu Q., Vaccarella D., Lee T. Review of Combustion Stabilization for Hypersonic Airbreathing Propulsion // Prog. Aeronaut. Sci. 2020. V. 119. P. 100636.
7. Счастливец А.И., Дуников Д.О., Борзенко В.И., Шматов Д.П. Водородно-кислородные установки для энергетики // ТВТ. 2020. Т. 58. № 5. С. 809.
8. Kim K., Park G., Jin S. Flameholding Characteristics of Ethylene-fueled Model Scramjet in Shock Tunnel // Acta Astronautica. 2019. V. 161. P. 446.
9. Кукушинов Н.В., Мамышев Д.Л. Оценка применимости различных уравнений состояния реального газа для этилена // Изв. вузов. Машиностроение. 2018. № 5. С. 60.
10. Vincent-Randonnier A., Sabelnikov V., Ristori A., Zettervall N., Fureby C. An Experimental and Computational Study of Hydrogen–Air Combustion in the LAPCAT II Supersonic Combustor // Proc. Combust. Inst. 2016. V. 37. P. 3703.
11. Sunami T., Magre P., Bresson A., Grisch F., Orain M., Koderer M. Experimental Study of Strut Injectors in a Supersonic Combustor Using OH-PLIF // AIAA Paper 2005-3304. 2005. P. 18.
12. Aravind S., Kumar R. Supersonic Combustion of Hydrogen Using an Improved Strut Injection Scheme // Int. J. Hydrogen Energy. 2019. V. 44. № 12. P. 6257.
13. Waidmann W., Alff F., Brummund U., Clauss W., Oswald M., Sender J. Experimental Investigation of the Combustion Process in a Supersonic Combustion Ramjet (SCRAMJET) Combustion Chamber // Dtsch. Luft- Raumfahrt, Mitt. 1994. S. 629.
14. Liu B., Xu J.-C., Qin F., He G.-Q., Zhang D., Shi L. Influence of Hydrogen Equivalence Ratios on Supersonic Combustion Based on Large Eddy Simulations // Int. J. Hydrogen Energy. 2020. V. 45. P. 11341.
15. Pelletier G., Ferrier M., Vincent-Randonnier A., Sabelnikov V., Mura A. Wall Roughness Effects on Combustion Development in Confined Supersonic Flow // J. Propul. Power. 2021. V. 37. P. 151.
16. Xing F., Cai J., Huang Y., Yao Y. Numerical Analysis of HyShot Scramjet Model with Different Throat Height // AIAA Paper 2017–2121. 2017. P. 12.
17. Odam J. Scramjet Experiments Using Radical Farming. Ph.D. Dissertation. Australia. Brisbane: Univ. Queensland. Mech. Eng. Dept, 2004.
18. Kukshinov N.V., Batura S.N. Numerical Simulation of Hydrogen Combustion in Oxidizer Supersonic Flow in Flowpaths of Various Configurations // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 1359. 012064.
19. Liu B., He G.-Q., Qin F., An J., Wang S., Shi L. Investigation of Influence of Detailed Chemical Kinetics Mechanisms for Hydrogen on Supersonic Combustion Using Large Eddy Simulation // Int. J. Hydrogen Energy. 2019. P. 5007.
20. Menter F.R. Zonal Two Equation $k-\omega$ Turbulence Models for Aerodynamic Flows // AIAA Paper 93-2906. 1993. P. 21.
21. Langtry R.B., Menter F.R. Correlation-based Transition Modeling for Unstructured Parallelized Computational Fluid Dynamics Codes // AIAA J. 2009. V. 47. № 12. P. 2894.
22. Launder B.E., Spalding D.B. Lectures in Mathematical Models of Turbulence. England. London: Acad. Press, 1972.
23. Magnussen B.F. On the Structure of Turbulence and a Generalized Eddy Dissipation Concept for Chemical Reaction in Turbulent Flow // AIAA Paper 81-0042. 1981.
24. Dimitrow V.I. The Maximum Kinetic Mechanism and Rate Constants in the H_2-O_2 System // React. Kinetic Catal. Lett. 1977. V. 7. № 1. P. 81.
25. Hong Z., Davidson D.F., Hanson R.K. An Improved H_2/O_2 Mechanism Based on Recent Shock Tube/Laser Absorption Measurements // Combust. Flame. 2011. V. 158. P. 633.
26. Зангиев А.Э., Иванов В.С., Медведев С.Н., Фролов С.М., Фролов Ф.С., Семенов И.В., Власенко В.В. Влияние турбулентности на развитие течения в высокоскоростной камере сгорания // Горение и взрыв. 2016. Т. 9. № 3. С. 66.
27. Ivankin M., Nikolaev A., Sabelnikov V., Shiryayeva A., Talyzin V., Vlasenko V. Complex Numerical-experimental Investigations of Combustion in Model High-speed Combustor Ducts // Acta Astronautica. 2019. V. 158. P. 425.
28. Xing F., Zhang S., Yao Y. Numerical Simulation of Shock-induced-combustion in Three-dimensional HyShot Scramjet Model // AIAA Paper 2012–0945. 2012.
29. Аннушкин Ю.М. Основные закономерности выгорания турбулентных струй водорода в воздушных каналах // ФГВ. 1973. Т. 9. № 4. С. 473.
30. Gerlinger P., Stoll P., Kindler M., Schneider F., Aigner M. Numerical Investigation of Mixing and Combustion Enhancement in Supersonic Combustors by Strut Induced Streamwise Vorticity // Aerospace Sci. Technol. 2008. № 12. P. 159.

УДК 536.46

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ САЖЕОБРАЗОВАНИЯ ПРИ ГОРЕНИИ ПЕРЕОБОГАЩЕННОЙ КИСЛОРОД-МЕТАНОВОЙ СМЕСИ

© 2022 г. Д. А. Ягодников*, О. А. Ворожеева**, А. О. Новиков

ФГБОУ ВО «Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана
(национальный исследовательский университет)», Москва, Россия*E-mail: daj@bmstu.ru**E-mail: oa-vorozheeva@bmstu.ru

Поступила в редакцию 19.04.2021 г.

После доработки 26.07.2021 г.

Принята к публикации 28.09.2021 г.

Представлены описания экспериментального оборудования, систем измерения и регистрации, методики проведения экспериментальных исследований особенностей сажеобразования при горении переобогащенной кислород-метановой смеси в двухзонном модельном газогенераторе при соотношении долей компонентов в диапазоне 0.4–1.0. С использованием визуализации внутрикамерного процесса во второй зоне газогенератора с помощью цветной цифровой видеосъемки и регистрации интенсивности излучения продуктов сгорания посредством фотосопротивления определены условия, при которых реализуется сажеобразование.

DOI: 10.31857/S0040364422050167

ВВЕДЕНИЕ

Расширение сферы использования космического пространства (навигация, связь, изучение ресурсов Земли, промышленность, разведка, телевидение, астрономия, метеорология, фармацевтика, медицина) предполагает применение ракет-носителей разных классов, не наносящих ущерба экологии околоземного пространства, а также пригодных к многоразовому использованию. При этом ключевым звеном является разработка жидкостных ракетных двигателей (ЖРД), в частности кислородно-метанового ЖРД. Метан обладает в рассматриваемом аспекте рядом важных преимуществ перед традиционным керосином, в частности:

- возможностью создания замкнутой схемы ЖРД с восстановительным газогенератором;
- более высокими энергетическими характеристиками ракет (на 20–30% большая масса полезного груза при одинаковой массе ракеты);
- лучшими охлаждающими свойствами;
- более низкой стоимостью (втрое меньше, чем у керосина).

Вопросами разработки ЖРД на сжиженном природном газе занимаются конструкторские бюро: АО «КБхиммаш им. А.М. Исаева» [1], АО «Конструкторское Бюро Химавтоматики» [2], НПО «Энергомаш» им. акад. В.П. Глушко [3], НИИМашиностроения (Россия), корпорации США, Кореи, Японии [4]. Экспериментально-

теоретическими исследованиями, выполненными на перечисленных предприятиях, продемонстрирована принципиальная возможность организации устойчивого рабочего процесса и достижения высоких значений действительного (полученного в процессе огневых стендовых испытаний) удельного импульса. Тем не менее один из принципиальных вопросов, связанный с образованием сажи в условиях, соответствующих параметрам рабочего процесса в газогенераторе с избытком горючего, до настоящего времени детально не изучен. Актуальность проблемы образования сажи обусловлена обоснованием реализуемости разработки метанового ЖРД с дожиганием восстановительного генераторного газа, который при прочих равных условиях является более безопасным, чем ЖРД с дожиганием окислительного генераторного газа.

Вопросам образования сажи и нанодисперсных частиц углерода посвящены исследования переобогащенных углеводородных пламен, выполненные на лабораторных установках [5–10]. Теоретические исследования связаны с проведением термодинамических расчетов равновесного состава продуктов сгорания метана в кислороде применительно к условиям, характерным для камеры сгорания ЖРД. Так, в работе [5] с использованием программного комплекса TEPRA [11] проведены расчетные исследования по определению концентрационных пределов появления конден-

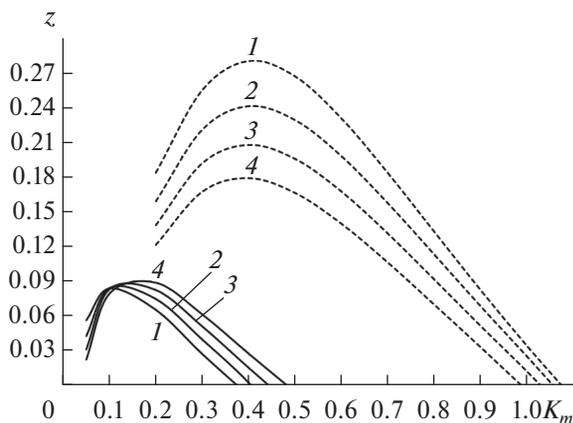


Рис. 1. Зависимости относительной массовой концентрации сажи в продуктах сгорания от массового соотношения компонентов при давлении: 1 – 0.10 МПа, 2 – 0.35, 3 – 1.00, 4 – 2.5; штриховые линии – однозонная равновесная модель, сплошные – двухзонная неравновесная модель.

сированной фазы в виде сажи в продуктах сгорания переобогащенной кислород-метановой смеси. Как следует из рис. 1 (штриховые линии), сажа в продуктах сгорания в предположении термодинамического равновесия (однозонная модель) образуется при значениях массового соотношения компонентов $K_m < 1.1$. Максимум концентрации наблюдается в области $K_m \approx 0.4$. Причем с ростом давления сужаются концентрационные пределы образования сажи, а также ее относительная массовая концентрация z .

При использовании двухзонной модели термодинамический расчет в первой зоне ($K_m = 2$) проводился при условии равновесного протекания химических реакций. Расчетное значение температуры при этом составило 2615–2730 К при наличии в продуктах сгорания только газообразных компонентов.

Во второй зоне моделировалась химическая неравновесность по отношению к метану с использованием предположения, что подаваемый во вторую зону метан как избыточный компонент не проявляет химической активности и его массовое содержание фиксировано (“заморожено”). При этом химическое взаимодействие других компонентов продуктов сгорания, поступающих из первой зоны, моделировалось равновесной моделью. Сажа в продуктах сгорания для двухзонной модели образуется при меньших значениях K_m (< 0.5), и относительная массовая концентрация сажи уменьшается по сравнению с однозонной равновесной моделью в 2–3 раза (рис. 1). Максимум концентрации наблюдается при $K_m \approx 0.1–0.18$ и сдвигается в сторону стехиометрии с ростом давления. Кроме того, рост давления приводит в большему выходу конденсированной фазы в виде

сажи, что согласуется с опубликованными в работах [12, 13] результатами.

Таким образом, термодинамические расчеты с использованием двухзонной модели, результаты которых приведены на рис. 1, подтверждают экспериментальные данные [12, 13] по неоднозначному влиянию давления на выход сажи, в общем случае зависящий от условий протекания процесса (окисление или пиролиз), состава углеводородного горючего, температуры, концентрации атомов углерода в исходной смеси. Выход сажи может увеличиваться, уменьшаться или оставаться практически постоянным.

Важно заметить, что данный диапазон значений K_m предпочтителен для схем ЖРД с дожиганием восстановительного (работающего с избытком горючего) генераторного газа, однако наличие к-фазы (сажи) может привести к снижению эффективности и надежности ЖРД вследствие возникновения двухфазных потерь и эрозионно-го разрушения элементов конструкции.

Целью настоящей работы является экспериментальное исследование особенностей рабочего процесса в модельном газогенераторе на кислороде и метане для определения концентрационных условий образования в продуктах сгорания сажи.

ОПИСАНИЕ СТЕНДОВОЙ УСТАНОВКИ

Для достижения поставленной цели разработаны модельный газогенератор на кислороде и метане, методика проведения огневых испытаний, а также следующие системы, обеспечивающие функционирование модельной установки:

- 1) подачи окислителя и горючего;
- 2) управления газогенератором и установкой с устройством запуска, останова и оперативного управления;
- 3) визуального контроля и видеорегистрации;
- 4) измерений с применением первичных преобразователей, линий связи и регистрирующей аппаратуры.

Состав и размещение первичных измерительных преобразователей на магистралях пневмогидравлической системы представлены на рис. 2.

Система подачи окислителя в камеру газогенератора. В качестве окислителя газогенератора используется газообразный кислород, который поступает в камеру газогенератора из баллонов высокого давления. Функционально система подачи состоит из магистрали подачи окислителя с установленной на ней арматурой. Кислород из баллона через вентиль ВН5 поступает в магистраль окислителя стенда и через редуктор РД3, вентиль ВН6, обратный клапан КО2 и дроссельную шайбу ШЗ подается в газогенератор. Настройка стендовой магистрали на заданный массовый расход окислителя осуществляется редуктором РД3, дроссельной

шайбой Ш3 и контролируется с помощью манометров МН4 и МН5. Значение давления, необходимое для определения массового секундного расхода окислителя, фиксируется с помощью датчика давления ДД3.

Система подачи горючего в камеру газогенератора. В качестве горючего в газогенераторе используется газообразный метан, который поступает в камеру газогенератора из баллона высокого давления. Система подачи горючего состоит из магистралей подачи горючего в первую и во вторую зоны с установленной на них арматурой.

Первый контур используется для запуска газогенератора. Метан из баллона через вентиль ВН1 поступает в магистраль горючего, через вентиль ВН3 – в первый контур магистрали и через редуктор РД2, вентиль ВН4 и дроссельную шайбу Ш2 подается в первую зону камеры газогенератора. Настройка первого контура на заданный расход горючего осуществляется редуктором РД2 и контролируется манометрами МН1 и МН3. Давление в первом контуре, значение которого необходимо для определения массового секундного расхода горючего в первую зону газогенератора, регистрируется с помощью датчика давления ДД2.

Для независимого регулирования соотношения долей компонентов топлива в системе подачи горючего предусмотрен второй контур, обеспечивающий независимую подачу компонента во вторую зону газогенератора. Через вентиль ВН2, редуктор РД1, электропневмоклапан ЭПК, обратный клапан КО1 метан подается во вторую зону камеры газогенератора. Настройка второго контура на заданный массовый расход горючего осуществляется заданием давления редуктором РД1, дроссельной шайбой Ш1, контролируется манометрами МН1 и МН2 и регистрируется с помощью датчика давления ДД1.

Система управления стендом состоит из пульта управления, кабельных линий связи стендовых агрегатов и обеспечивает дистанционный запуск газогенератора, управление его работой во время испытаний и останов при подаче электрического сигнала с пульта управления на электропневмоклапан ЭПК, который прекращает подачу метана в газогенератор.

Конструкция модельного газогенератора. Экспериментальные исследования рабочего процесса выполнялись на модельном газогенераторе двухзонной схемы смесеобразования. Общий вид конструкции газогенератора представлен на рис. 2. Камера газогенератора выполнена разъемной и состоит из форкамеры (первая зона), узла тепло-массообмена, сопла и смесительной головки. Смесительная головка состоит из корпуса, в который устанавливаются свеча зажигания и три штуцера, через один из них осуществляется измерение давления, два других необходимы для подвода горючего и

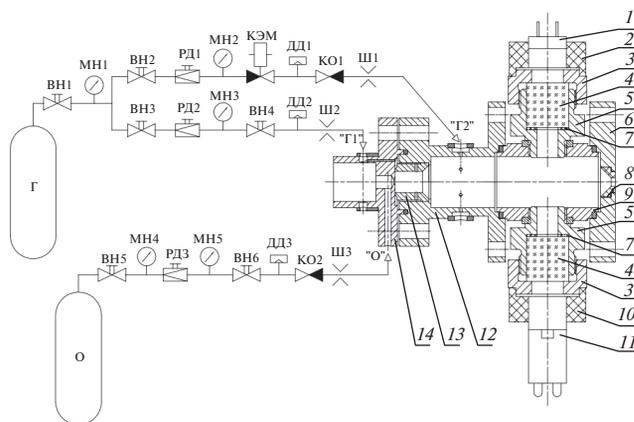


Рис. 2. Пневмогидравлическая схема установки и конструкция модельного газогенератора.

окислителя к первой зоне газогенератора. Обдув свечи электроискровой системы воспламенения осуществляется окислителем, который поступает в газогенератор через центральное осевое отверстие.

Газообразный метан подается в первую зону газогенератора через четыре отверстия диаметром 1.5 мм, выполненных в корпусе форкамеры 13 перпендикулярно ее оси. На внешней боковой цилиндрической поверхности смесительной головки 14 (свеча не показана) предусмотрены четыре паза, продольная ось которых перпендикулярна оси отверстий. Система каналов и отверстий образует коллектор подвода горючего в первую зону (цилиндрическая полость в корпусе форкамеры, в которой образуется смесь, воспламеняющая компоненты в газогенераторе).

Во вторую зону газогенератора метан подается из коллектора через шесть радиальных отверстий диаметром 1.5 мм, расположенных в корпусе 12. Все детали смесительной головки и второй зоны выполнены из нержавеющей стали 12Х18Н10Т.

Модельный газогенератор предусматривает визуализацию внутрикамерных процессов при огневых испытаниях. Конструктивно узел визуализации включает в себя следующие детали (рис. 2): корпус 9; уплотнительные кольца; штуцеры 5; уплотнения из терморасширенного графита 7; смотровые окна 4, выполненные из полиметилметакрилата; накидные гайки 3. Оба штуцера 5 расположены в узле соосно и перпендикулярно основной оси газогенератора для обеспечения возможности организации сквозного (на просвет) наблюдения за рабочим процессом. К накидной гайке 3, наворачиваемой на штуцер 5 и фиксирующей смотровое окно 4, крепится держатель 2 фотоспротивления типа ФСД1 1. На такую же накидную гайку с помощью держателя 10 устанавливается светодиодная лампа NLL-G9-2.5-230-3К 11, радиационная температура излучения которой составляет 3000 К. При

Предельная погрешность регистрации определяющих и определяемых параметров

Параметр	Погрешность, %
Давление в камере (измерение манометрическим способом)	±0.51
Давление (измерение потенциометрическим датчиком)	±1.50
Массовое соотношение окислителя и горючего	±2.12
Интервалы времени	±0.24

этом выбор лампы осуществлялся исходя из необходимости гарантированного превышения ее радиационной температуры относительно яркостной температуры пламени.

Справа к узлу визуализации стыкуется фланец 6 с установленным в нем сменным графитовым вкладышем критического сечения сопла 8 диаметром 3 мм.

Системы измерения и регистрации. Система измерения включает в себя первичный измерительный преобразователь (датчик) давления в камере сгорания, датчики давления на магистралях окислителя ДДЗ, горючего первой ДД2 и второй ДД1 зон, а также фотосопротивление ФСД1 1 (рис. 2). Измерительная система станда базируется на цифровом регистратор-анализаторе динамических процессов МІС 300М.

Разработанные методики определения параметров рабочего процесса в модельном газогенераторе характеризуются тем, что преобладающей является систематическая погрешность. Результаты расчета предельных погрешностей основных параметров представлены в таблице, которые подтверждают удовлетворительную для теплофизического эксперимента точность.

АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ИССЛЕДОВАНИЙ РАБОЧЕГО ПРОЦЕССА И САЖЕОБРАЗОВАНИЯ

На рис. 3 представлена осциллограмма испытания № 22_10_01. Данная осциллограмма характерна для всех проведенных огневых испытаний.

Особенностью циклограммы работы является двухступенчатый выход на расчетный режим работы газогенератора: первоначально метан подается только в первую зону. Это обеспечивает, во-первых, устойчивое воспламенение кислород-метановой смеси и, во-вторых, позволяет сравнить интенсивность излучения продуктов сгорания внутри газогенератора при подаче метана во вторую зону, когда топливная смесь значительно переобогащается горючим и соотношение содержаний компонентов топлива уменьшается до значений $K_m = 0.4-0.6$. Первоначально избыточное давление в газогенераторе составляет ~2.2 ати и в первой зоне и газогенераторе в целом $K_m = K_{m1} = 2.03$. После открытия электропневмоклапана подачи дополнительного расхода метана во вторую зону давление в газогенераторе возрастает до ~2.7 ати, а соотношение содержаний компонентов в газогенераторе уменьшается до $K_m = 0.61$. После регистрации показаний фотосопротивлений при работе в режиме в течение ~3-4 с происходит останов газогенератора.

Результаты записи напряжений, регистрируемых с помощью фотосопротивления, представлены на рис. 3 в виде относительного изменения сигнала U/U_0 . При горении топлива в газогенераторе на фотосопротивление попадают световые потоки от лампы подсветки и продуктов сгорания. Видно, что запуск газогенератора сопровождается локальным ростом величины U/U_0 , обусловленным излучением продуктов сгорания при температурах, превышающих радиационную температуру лампы подсветки. Это подтверждается видеосъемкой аналогичного испытания, отдельные видеок cadры которого приведены на рис. 4. После выхода на промежуточный режим работы уровень сигнала ($U/U_0 = 0.71$, 132-я с отсчета) практически соответствует начальному ($U/U_0 = 0.7$), регистрируемому фотосопротивлением только от светодиодной лампы.

Во втором (основном) режиме работы одновременно с открытием электропневмоклапана и

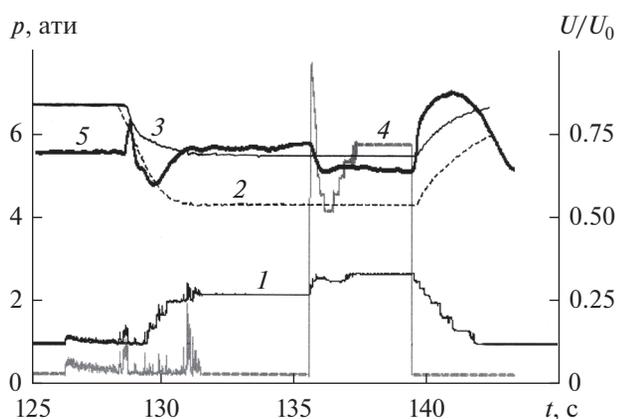


Рис. 3. Осциллограмма испытания № 22_10_01: 1 – давление в камере сгорания p_k , 2 – изменение давления подачи кислорода p_{O_2} , 3 – изменение давления подачи метана в первую $p_{CH_4}^1$ зону, 4 – вторую $p_{CH_4}^2$ зону, 5 – относительное изменение сигнала U/U_0 .

подачей метана во вторую зону газогенератора изменяется газодинамика горения рабочего процесса в камере газогенератора, что обусловлено, с одной стороны, повышением давления, а с другой – уменьшением K_m до 0.61. Последнее приводит к снижению равновесной температуры горения переобогащенной смеси с $T_1^* = 2656$ до $T_1^* = 982$ К и, соответственно, к уменьшению интенсивности излучения продуктов сгорания. Видеограмма работы в промежуточном режиме (рис. 4) свидетельствует, что до подачи метана во вторую зону при $K_m = 2.03$ визуально наблюдается факел продуктов сгорания на срезе сопла и интенсивное излучение продуктов сгорания внутри газогенератора, регистрируемое через окно из полиметилметакрилата. После подачи во вторую зону газогенератора дополнительного расхода метана вследствие снижения температуры реагирующей смеси при $K_m = 0.61$ интенсивность излучения продуктов сгорания за срезом сопла и внутри газогенератора уменьшается, и видеокамера регистрирует изображение на пороге чувствительности ПЗС-матрицы, а также догорание за срезом сопла газогенератора топливной смеси в окружающем воздухе.

Тем не менее, анализируя уменьшение относительного сигнала фотосопротивления ($U/U_0 = 0.64$) при подаче метана во вторую зону газогенератора ($K_m = 0.61$) и увеличение значений U/U_0 до первоначального уровня и более (рис. 4, промежуточный режим) при закрытии электропневмоклапана и прекращении подачи дополнительного расхода метана, представляется возможным заключить следующее. В промежуточном режиме ($K_m = K_{m1} = 2.03$) излучение от лампы не редуцируется холодными пристеночными слоями (которые имели бы место в случае неравномерного смешения горючего и окислителя) и не усиливается высокотемпературными продуктами сгорания (яркостная температура лампы превышает расчетную температуру горения). Однако при подаче дополнительного расхода метана и соответствующем переобогащении смеси ($K_m = 0.61$) первоначальной яркости не наблюдается, и это дает возможность заключить, что на пути излучения светодиодной лампы появляется среда – частицы сажи, рассеивающие или редуцирующие ее излучение. Появление других материальных объектов, например капель воды, не представляется возможным. Кроме того, результаты осмотра поверхности окна, выполненного из полиметилметакрилата, свидетельствуют о сохранении прозрачных свойств последнего и исключают возможность влияния окна на уменьшение значений U/U_0 . Поэтому данный результат может быть обусловлен появлением во второй зоне именно частиц сажи, например вследствие пиролиза находящегося в избытке метана [12–14]. Такая возможность определяется результатами термодинамического расчета.

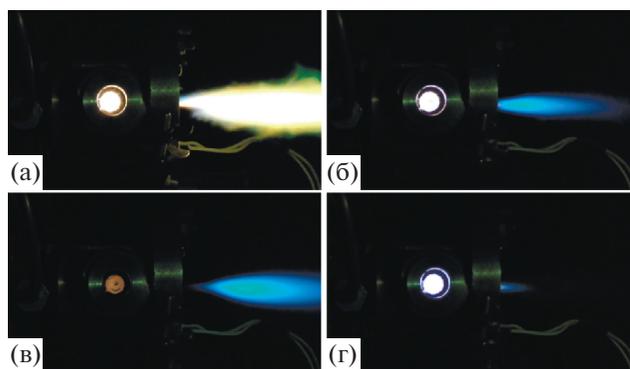


Рис. 4. Видеограмма испытания: (а) – выход на режим, (б) – работа в промежуточном режиме, (в) – работа в основном режиме, (г) – останов.

Превышение при останове газогенератора величин U/U_0 над значениями, зарегистрированными только от светового потока лампы, связано с тем, что при прекращении подачи метана во вторую зону газогенератора и сохранении неизменным значения K_{m1} температура продуктов сгорания увеличивается (причем возможно, чтобы K_m было больше 2.0) и, следовательно, излучение факела, видимое как за срезом сопла, так и внутри газогенератора, усиливает регистрируемый сигнал.

Следует отметить, что сажа может являться источником излучения при горении углеводородного топлива в различных энергосиловых установках, например при испытаниях и старте ракетносителей с жидкостными ракетными двигателями на углеводородном горючем. Однако в условиях проведения эксперимента уровень температур был недостаточным для того, чтобы частицы сажи излучали в видимой области спектра.

Также вблизи зоны подачи компонентов топлива возможен неравномерный профиль соотношения компонентов. При этом следует учитывать тот факт, что используются газообразные компоненты топлива, которые подаются как в первую, так и во вторую зоны газогенератора через равномерно по окружности расположенные отверстия в специальных коллекторах, что в совокупности обеспечивает быстрое и равномерное смешение окислителя и горючего. Это подтверждают данные визуализации внутрикамерных процессов, представленные в виде однородных изображений отдельных видеокладов на рис. 4.

Анализ изменения давлений подачи кислорода, метана в первую и вторую зоны и давления в камере сгорания в испытании № 22_10_04, приведенных на осциллограмме, позволяет сделать вывод о реализации устойчивого рабочего процесса в двухзонном газогенераторе при уменьшении суммарного соотношения содержаний компонентов от $K_m = 2.0$ до 0.4.

На рис. 5 приведены результаты огневых испытаний, проведенных для исследования влияния массового соотношения компонентов на нижний концентрационный предел образования сажи. При обеднении топливной смеси фотоспротивление регистрирует повышенный уровень излучения только в моменты запуска и останова газогенератора, когда возможно мгновенное образование близкого к стехиометрическому состава топливной смеси, обуславливающего высокие уровни температур и излучения пламени. Тем не менее подача метана во вторую зону на 173-й с испытания № 10_11_03, вызвавшая уменьшение значения K_m с $K_{m1} = 1.93$ до $K_m = 0.81$, практически не приводит к изменению регистрируемых фотоспротивлениями значений U/U_0 (рис. 5а).

При дальнейшем уменьшении концентрации метана в первой зоне до $K_{m1} = 1.17$ и, соответственно, увеличении значений массового соотношения компонентов подача метана во вторую зо-

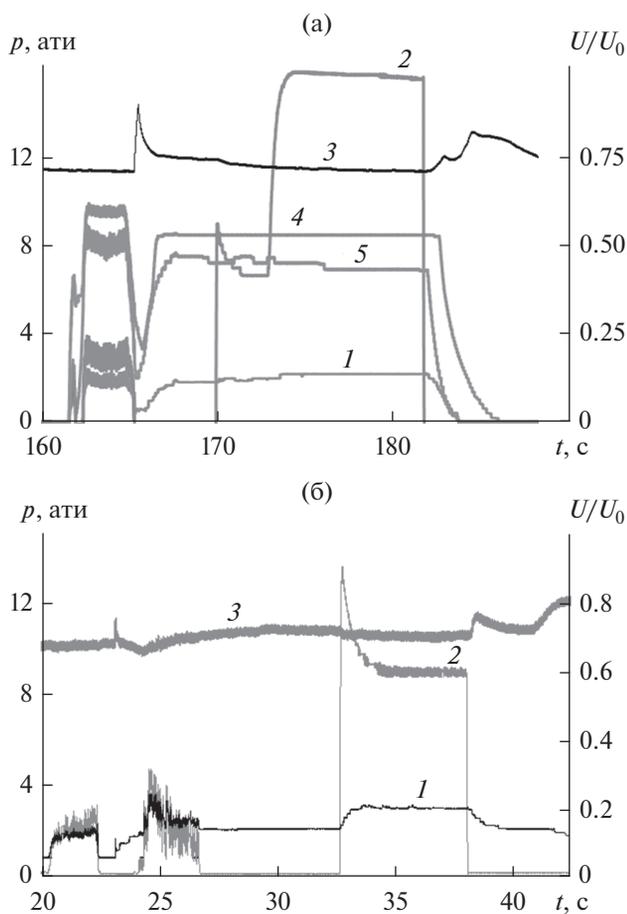


Рис. 5. Осциллограммы изменения режимных параметров испытаний № 10_11_03 (а) и № 10_11_04 (б): 1 – p_K , 2 – $p_{CH_4}^2$, 3 – U/U_0 , 4 – p_{O_2} , 5 – $p_{CH_4}^1$.

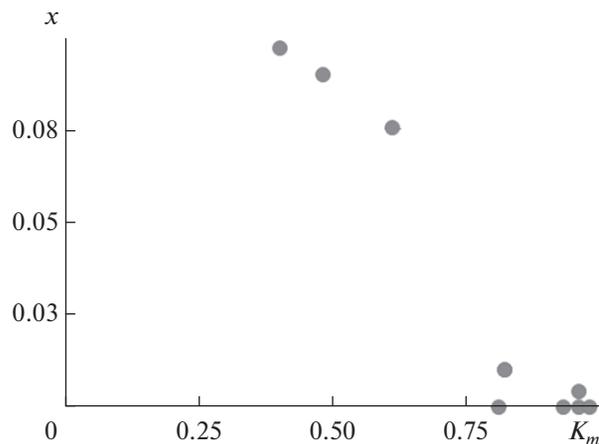


Рис. 6. Зависимость интенсивности ослабления x регистрируемого фотоспротивлением сигнала от массового соотношения компонентов K_m .

ну, в которой значение K_m становится равным 0.96, также не приводит к изменению U/U_0 (рис. 5б).

В заключение рассмотрим влияние массового соотношения компонентов на относительное ослабление сигнала x , регистрируемого фотоспротивлением до и после подачи метана во вторую зону газогенератора:

$$x = \frac{\left(\frac{U}{U_0}\right)}{\left(\frac{U}{U_0}\right)_0}$$

Как следует из приведенных на рис. 6 данных, переобогащение топлива при $K_m < 0.85$ приводит к увеличению ослабления регистрируемого фотоспротивлением сигнала от излучения светодиодной лампы вследствие процесса сажеобразования. Полученные экспериментальные данные согласуются с результатами термодинамического расчета (рис. 1), согласно которым при давлении 0.1–0.5 МПа отличная от нуля массовая концентрация сажи в продуктах сгорания возможна, если $K_m < 1.0$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Резюмируя приведенные в данной работе результаты, можно заключить следующее.

1. Разработанные экспериментальная установка и модельный газогенератор на газообразных кислороде и метане, а также не требующая специального измерительного оборудования и условий проведения экспериментов методика экспериментальных исследований позволяют проводить огневые испытания с визуализацией внутрикамерных процессов в модельном газогенераторе в диапазоне

изменения массового соотношения компонентов топлива $K_m \approx 1.0$ при давлении 0.3–0.4 МПа.

2. Экспериментально определен верхний концентрационный предел возможного сажеобразования в продуктах сгорания кислород-метанового топлива при $K_m \approx 1.0$ и менее.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Leontyev N.I., Kolkin Ye.N., Zavyalov V.S.* KB Khim-mash Lox/LNG Development Status // Mater. 48th Int. Astronautical Congress. Berlin, 2000. P. 23.
2. *Gorokhov V.D., Rachuk V.S., Grigorenko I.N.* Development of Liquid Propulsion Engines, Working on Liquefied Natural Gas and Liquid Oxygen // Mater. 1st Int. Conf. on Green Propellants for Space Propulsion. Noordwijk, Netherlands, 2001. P. 235.
3. *Katargin B.I., Klepikov I.A., Chvanov V.K.* The New Generation of Rocket Engines, Operating by Ecologically Safe Propellant “Liquid Oxygen and Liquefied Natural Gas (Methane)” // Acta Astronautica. 1997. V. 41. № 4. P. 209.
4. *Tamura H., Ono E., Kuma Kawa A.* LOX/Methane Staged Combustion Rocket Combustor Investigation // AIAA 87-1856.
5. *Дорофеев А.А., Ягодников Д.А.* Термодинамическое моделирование состава и характеристик продуктов сгорания переобогащенных жидких ракетных топлив в режиме закалки // ТВТ. 2018. Т. 56. № 2. С. 270.
6. *Heubner A.W.* High Pressure Lox/Hydrocarbon Pre-burner Injector Investigation // AIAA 82-1152.
7. *Елецкий А.В., Зицерман В.Ю., Кобзев Г.А.* Наноуглеродные материалы. Физико-химические и эксплуатационные свойства, методы синтеза, энергетические применения // ТВТ. 2015. Т. 53. № 1. С. 117.
8. *Мансуров З.А.* Образование сажи полициклических ароматических углеводородов, фуллеренов и углеродных нанотрубок при горении углеводорода // ИФЖ. 2011. Т. 84. № 1. С. 116.
9. *Krestinin A.V.* Detailed Modeling of Soot Formation in Hydrocarbon Pyrolysis // Combust. Flame. 2000. V. 121. № 3. P. 513.
10. *Leung K.M., Lindstedt R.P., Jones W.P.* A Simplified Reaction Mechanism of Soot Formation in Non-premixed Flames // Combust. Flame. 1991. V. 87. № 3–4. P. 289.
11. *Трусов Б.Г.* Программная система моделирования фазовых и химических равновесий при высоких температурах // Инженерный журнал: наука и инновации. 2012. № 1. С. 21.
12. *Warnatz J., Maas U., Dibble R.W.* Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation. Berlin–N.Y.: Springer, 2006. 390 p.
13. *Власов П.А., Смирнов В.Н., Тереза А.М. и др.* Влияние давления на процесс сажеобразования при пиролизе н-гексана и окислении богатых смесей н-гептана в отраженных ударных волнах // Хим. физика. 2016. Т. 35. № 12. С. 35.
14. *Tesner P.A., Shurupov S.V.* Soot Formation During Pyrolysis of Methane and Rich Methane-oxygen Mixtures // CST. 1995. V. 109. P. 399.

УДК 661.961+661.968

ГИДРОТЕРМАЛЬНОЕ ОКИСЛЕНИЕ АЛЮМИНИЯ И МЕТАЛЛОГИДРИДНОЕ КОМПРИМИРОВАНИЕ ВОДОРОДА

© 2022 г. А. З. Жук, **В. И. Борзенко**, П. П. Иванов*

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*E-mail: peter-p-ivanov@yandex.ru

Поступила в редакцию 29.11.2021 г.

После доработки 11.03.2022 г.

Принята к публикации 07.06.2022 г.

Предложена схема производства водорода методом гидротермального окисления алюминия в сочетании с технологией утилизации тепла реакции окисления алюминия в металлгидридных циклах. Металлогидридные циклы используются для сжатия водорода до давления 90 МПа и производства электроэнергии. Методом термодинамического моделирования рассчитаны энергетические и материальные балансы процессов. Расчеты показали, что использование метода гидротермального окисления алюминия в сочетании с металлгидридными утилизационными циклами позволяет увеличить эффективность использования энергоносителя на 14%.

DOI: 10.31857/S0040364422050180

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время в большинстве экономически развитых стран активно реализуются программы широкого внедрения водородных энергетических технологий. При этом одной из наиболее актуальных задач является организация экономически эффективного массового производства высококачественного, химически чистого водорода, не сопровождающегося массивным выбросом в атмосферу парниковых газов. С этой точки зрения весьма перспективной оказывается технология гидротермального окисления алюминия (ГТОА).

В работе [1] показано, что стоимости водорода, полученного электролизом воды, и водорода, полученного методом гидротермального окисления алюминия, оказываются сопоставимыми, если цена электроэнергии в регионах производства энергоносителей находится на уровне 1–3 цента за кВт ч. При цене электроэнергии ниже двух центов за кВт ч водород, полученный методом гидротермального окисления алюминия, оказывается дешевле, чем водород, полученный методом электролиза воды. Такое соотношение затрат на производство водорода обусловлено тем, что суммарный расход электроэнергии при производстве водорода методом ГТОА (около 130 кВт ч/кг H_2) выше, чем для электролиза воды (около 66 кВт ч/кг H_2), а приведенные капитальные затраты для технологии ГТОА в три раза ниже. Соответственно, производство водорода по технологии ГТОА целесообразно в регионах, где имеется или может быть создано производство алюминия, использующее дешевую электроэнергию, получаемую, напри-

мер, на крупных ГЭС или АЭС. При этом непосредственно на месте производства водорода наличия развитой энергетической инфраструктуры не требуется. К месту производства водорода алюминий может доставляться любым видом наземного или водного транспорта. Авторы [1] предложили использовать тепло, выделяющееся в реакции гидротермального окисления алюминия, для компримирования водорода, что повышает энергоэффективность процесса.

Низкая стоимость реактора ГТОА, его энерго-независимость, а также возможность получения сжатого водорода в едином технологическом цикле делает технологию гидротермального окисления алюминия привлекательной при создании локальных источников водорода в районах со слаборазвитой энергетической инфраструктурой. Например, для создания сети станций для заправки водородного транспорта, а также на объектах инфраструктуры, где необходимо экологически чистое совместное производство тепловой и электрической энергии.

В настоящей работе методами термодинамического моделирования исследуются следующие физико-химические процессы:

– реакция гидротермального окисления алюминия, дающая на выходе паро-водородную газовую смесь и конденсированную смесь воды и бемита;

– получение окиси алюминия Al_2O_3 из бемита для последующего восстановления алюминия в процессе Холла–Эру;

– получение водорода из паро-водородной смеси, состоящей из химически чистого водорода

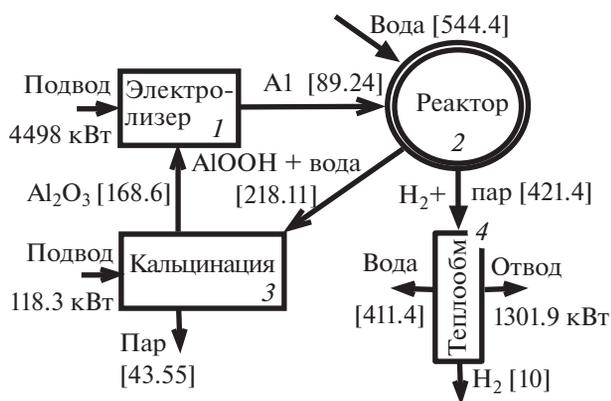


Рис. 1. Расходные и энергетические характеристики комплекса для производства водорода 36 кг/ч: 1 – электролизер для производства алюминия, 2 – реактор ГТОА, 3 – печь для кальцинации бемита, 4 – теплообменник/конденсатор; в квадратных скобках даны значения расходов.

и пара; сконденсированная вода возвращается в цикл ГТОА;

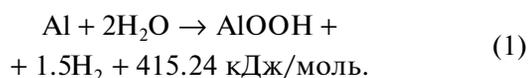
- компримирование водорода до уровня 90 МПа за счет теплового эффекта реакции гидротермального окисления алюминия с помощью металлогидридного термосорбционного компрессора;

- преобразование излишков низкотемпературного тепла в электроэнергию с помощью металлогидридного утилизационного цикла.

Моделирование производилось с помощью программы расчета термодинамического равновесия в многокомпонентной гетерогенной системе с использованием свойств индивидуальных веществ из базы данных ИВТАНТЕРМО [2]. Тексты программ на языке Delphi7SE выложены в Mendeley Data [3].

РЕАКЦИЯ ГИДРОТЕРМАЛЬНОГО ОКИСЛЕНИЯ АЛЮМИНИЯ

В представленных ниже расчетах материальных и энергетических балансов используются экспериментальные данные, полученные в работах [1, 4, 5]. При температуре реагентов 300 К и давлении в реакторе 15 МПа реакция гидротермального окисления алюминия происходит с образованием бемита:



Температура в реакторе и, соответственно, фазовый состав продуктов реакции зависят от соотношения расходов воды и алюминия m_w . Опыт эксплуатации установок ГТОА [4, 5] показывает, что при $m_w = 6.1$ окисление алюминия идет по реакции (1) [6, 7].

Из реактора выводится смесь бемита с водой (конденсированная фаза) и смесь водорода с водяным паром – газовая фаза.

Для конкретизации масштаба технологических циклов выбрана производительность по водороду 0.01 кг/с (36 кг/ч), что приблизительно соответствует параметрам перспективных модулей электролизных установок [8–10]). Расходы реагентов в г/с, требуемые для этой производительности, показаны на схеме рис. 1. Расход алюминия составляет 320 кг/ч, и при среднем удельном расходе энергии на получение алюминия из глинозема с помощью электролиза (процесс Холла–Эру) 14 кВт·ч/кг Al требуемая мощность электролизера составляет 4498 кВт.

Для расхода алюминия 89.2 г/с стехиометрический расход воды по реакции (1) составляет 119 г/с. Избыток воды позволяет контролировать температуру и давление в реакторе в диапазоне 573–623 К и 12–16 МПа [4, 5]. При расходе воды 544.4 г/с температура реакции равна 598.4 К. Состав продуктов реакции в весовых долях: пар – 0.65, вода – 0.022, бемит – 0.31, H₂ – 0.016.

На выходе образуются два продукта: газообразный, состоящий из водорода и водяного пара, доля которого в общем расходе составляет 0.666, и конденсированный, состоящий из бемита и воды, доля которого в общем расходе составляет 0.334. В газообразном продукте весовая доля водяного пара составляет 0.98, а в конденсированном весовая доля бемита составляет 0.94.

Следует отметить, что установка ГТОА расходует некоторое количество электроэнергии на собственные нужды. Перед началом работы реактор ГТОА прогревается до 300°C с помощью электронагревателя. После первого впрыска нагрев отключается, и температура поддерживается за счет теплового эффекта реакции окисления. После выхода на режим электроэнергия продолжает расходоваться на привод насоса высокого давления, электромагнитных клапанов и работу контрольно-измерительной аппаратуры. Для выработки электроэнергии, расходуемой на собственные нужды, авторы [4, 5] использовали воздушно-водородные топливные элементы. Эксперименты показали, что расход электроэнергии на собственные нужды составляет не более 2% от установленной мощности установок ГТОА.

ВОССТАНОВЛЕНИЕ ОКИСИ АЛЮМИНИЯ Al₂O₃ ИЗ КОНДЕНСИРОВАННОГО ПРОДУКТА

В рассматриваемом случае из реактора выходит 212.2 г/с конденсированной смеси, состоящей из бемита и воды, при температуре 598.4 К и под давлением 15 МПа. Процесс получения $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ из

этой смеси состоит из нескольких простых термодинамических процессов.

1) Приведение давления к 1 атм. Температура снижается до 507.1 К. Состав (в весовых долях) следующий: пар – 0.06, бемит – 0.94.

2) Сепарация пара (выход пара – 13.75 г/с). Остается один бемит с расходом 198.4 г/с при температуре 507.1 К.

3) Изотермический подвод тепла – 118.3 кВт. Бемит разлагается на окись алюминия $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ (0.85) и водяной пар (0.15).

4) Сепарация пара (выход пара – 29.8 г/с). Остается 168.6 г/с $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ при температуре 507.1 К. Таким образом, для утилизации также доступно тепло, содержащееся в 43.55 г/с пара с температурой 507.1 К и давлением 1 атм. В турбине с конденсатором при выходном давлении 0.1 атм можно получить дополнительную мощность 15.36 кВт.

ОБРАБОТКА ПАРОВО-ВОДОРОДНОЙ СМЕСИ

Схема обработки паро-водородной смеси представлена на рис. 2. Она включает в себя вымораживание водяного пара с помощью охлаждения смеси до 290 К, возврат в цикл конденсата с расходом 411.4 г/с, сжатие чистого водорода при расходе 10 г/с до 90 МПа с помощью термосорбционного компрессора водорода (ТСКВ). Преобразование 1120.7 кВт тепла от охлаждения паро-водородной смеси в электроэнергию осуществляется в металлгидридном утилизационном блоке (МГУБ). МГУБ представляет собой металлгидридный компрессор, сопряженный с машиной расширения водорода.

Состав паро-водородной смеси при 290 К и 15 МПа: пар – 2.8×10^{-5} , вода – 0.976, H_2 – 0.024. После вывода конденсата состав чистого водорода такой: пар – 0.0012, H_2 – 0.9988 (объемное содержание водорода – 0.9999).

При охлаждении паро-водородной смеси выделяется 1301.9 кВт тепла. Из этого количества 181.2 кВт используется для компримирования водорода до 90 МПа с помощью ТСКВ, остальные 1120.7 кВт преобразуются в электричество в другом ТСКВ, работающем в режиме металлгидридного утилизационного блока.

Компримирование водорода до давления 90 МПа. Товарный водород, например для применения на водородных заправочных станциях, должен иметь давление до 90 МПа. При использовании механических компрессоров затраты электроэнергии на сжатие до этого уровня давления оказываются не менее 4.0 кВт ч/кг H_2 [11, 12]. Для компримирования водорода, полученного в процессе ГТОА, целесообразно использовать металлгидридный ТСКВ [13, 14], который позволяет осуществить прямое преобразование низкопотенциального тепла ре-

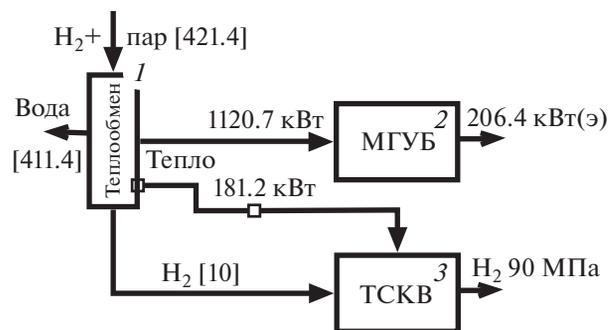


Рис. 2. Схема получения сжатого водорода и электроэнергии из паро-водородной смеси с помощью металлгидридной технологии: 1 – теплообменник, 2 – металлгидридный утилизационный блок, 3 – термосорбционный компрессор водорода; в квадратных скобках даны значения расходов.

акции окисления в механическую энергию сжатого водорода.

Четырехтактный металлгидридный термосорбционный цикл для повышения давления водорода с 15 до 90 МПа рассчитан по модели, подробно описанной в Приложении. Для одноступенчатого металлгидридного компрессора выбран сплав $\text{TiCr}_{1.5}\text{Mn}_{0.25}\text{Fe}_{0.25}$ [14].

Предельные значения насыщенности X_1 и X_2 в модели выбраны как границы линейного участка изобар $T = f(X)$ (см. уравнение (4) Приложения). На рис. 3 представлены такие изобары для двух сплавов: $\text{TiCr}_{1.5}\text{Mn}_{0.25}\text{Fe}_{0.25}$ [14] и $\text{LaFe}_{0.5}\text{Mn}_{0.3}\text{Ni}_{4.8}$ [15]. Для каждого сплава выбраны характерные значения давления в цикле их использования – 15, 90 МПа и 15, 0.1 МПа. Выбор 0.15 и 0.75 в качестве предельных значений насыщенности представляется приемлемым для всех четырех вариантов. Температура холодильника (охлаждающей воды) принята равной 283 К. Температурный напор при охлаждении принят равным 5 К, при нагреве – 35 К. Температура нагревателя равна 506 К. Это результат последующей подгонки равновесного давления в конце третьего такта (табл. 1) – оно должно быть на 10% больше номинального давления 90 МПа.

Данные о четырех тактах работы одноступенчатого металлгидридного компрессора сведены в табл. 1 в виде итогов в конце такта (подробнее см. Приложение). Это значит, что начальное состояние перед первым тактом по насыщенности, температуре и давлению можно видеть в строке для четвертого такта. Во время такта № 1 происходит сорбция водорода при охлаждении металлгидрида при постоянной температуре 288.1 К, насыщенность растет от 0.15 до 0.75, равновесное давление – от 4.34 до 8.35 МПа. Во время такта № 2 происходит нагрев системы до 471.3 К с повышением равновесного давления до 191.7 МПа при

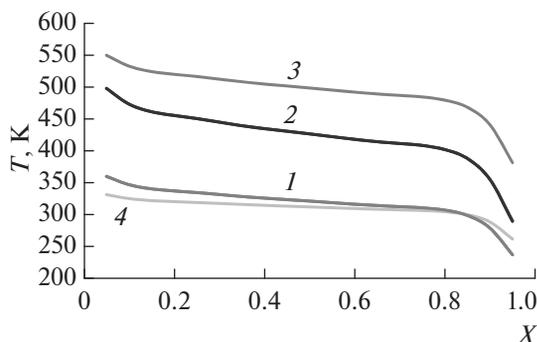


Рис. 3. Изобары $T = f(X)$: 1, 2 – $\text{TiCr}_{1.5}\text{Mn}_{0.25}\text{Fe}_{0.25}$ [14], при 15 и 90 МПа; 3, 4 – $\text{LaFe}_{0.5}\text{Mn}_{0.3}\text{Ni}_{4.8}$ [15], 15 и 0.1 МПа.

постоянной насыщенности. Изотермическая десорбция водорода происходит в такте № 3 при температуре 471.3 К. Такт № 4 – возвращение системы к температуре 288.1 К при минимальной насыщенности водородом.

Длительность цикла составляет 1711 с. За один цикл подводится 816.3 кДж тепла и сжимается 45.05 г водорода. Интерес представляют цифры для стационарного режима, которые получаются в результате осреднения за цикл тепловой мощности и расхода водорода, т.е. в результате деления количеств тепла и водорода на длительность цикла – 0.477 кВт и 0.02633 г/с. Пренебрегая нелинейностью зависимости характеристик от единичной мощности, находим, что для сжатия водорода расходом 10 г/с (рис. 2) нужна установка в $10/0.02633 = 379.8$ раз большей производительности, чем рассмотренная, которая будет потреблять $0.477 \times 379.8 = 181.2$ кВт тепла.

Утилизация тепла паро-водородной смеси в электроэнергию. На рис. 2 показано, что 1120.7 кВт потока тепла, выносимого из реактора с паро-водородной смесью, преобразуются в электричество в МГУБ. В данном блоке водород сжимается в термосорбционном компрессоре за счет тепла реакции окисления и далее производит работу в процессе возвращения параметров водорода к ис-

ходному состоянию. В проведенных расчетах не рассматривается конкретный тип механизма расширения, однако предполагается, что его КПД составляет 85%. Это типичный уровень внутреннего КПД паровых и газовых турбин.

В утилизационном блоке не требуются высокие давления, поэтому для термосорбционного цикла в данном случае выбран хорошо изученный гидридообразующий материал – $\text{LaFe}_{0.5}\text{Mn}_{0.3}\text{Ni}_{4.8}$ [15]. Для предельных значений насыщенности X_1 и X_2 , температуры холодильника и температурных напоров в расчетах использованы те же исходные данные, что и в предыдущем разделе для цикла компримирования. Температура нагревателя 550 К подобрана для получения максимума генерируемой электрической мощности. Для цикла компримирования температура нагревателя подбиралась по величине давления в конце третьей фазы и оказалась равной 506 К. Дополнительной иллюстрацией этой разницы температур служит рис. 3, где изобара 15 МПа для сплава $\text{LaFe}_{0.5}\text{Mn}_{0.3}\text{Ni}_{4.8}$ выше по температуре, чем для сплава $\text{TiCr}_{1.5}\text{Mn}_{0.25}\text{Fe}_{0.25}$.

Аналогично предыдущему циклу результаты для четырех тактов данного сведены в табл. 2 в виде итогов в конце такта. В такте № 3 выход водорода равен $\rho_{\text{H}_2} V_{\text{max}} (X_2 - X_1) = 0.04$ кг при изменении давления от 25 до 13 МПа. При расширении водорода в турбине с внутренним КПД 85% до максимального давления первой фазы цикла 0.042 МПа (в расчетах принят запас давления в 10%, что дает 0.05 МПа) может быть получена полезная мощность 208.1 кДж. Суммарный подвод тепла во втором и третьем тактах составляет 1176.3 кДж. Четырехтактный термосорбционный цикл длится 1607 с.

Если перейти к условным характеристикам стационарного режима, которые получаются в результате осреднения электрической и тепловой мощности за один цикл, т.е. в результате деления значений энергии на длительность цикла, то получаем следующие данные: $208.1/1607 = 0.1295$ кВт электрических и $1176.3/1607 = 0.732$ кВт тепловых.

Таблица 1. Параметры ТСКВ на концах тактов цикла

№ такта	Длительность, с	Насыщенность водородом	Температура, К	Давление, МПа	Тепло, кДж
1	674.0	0.75	288.1	8.35	-434.8
2	97.0	0.75	471.3	191.7	381.1
3	748.0	0.15	471.3	99.7	435.2
4	192.0	0.15	288.1	4.34	-381.2

Таблица 2. Параметры металлгидридного термосорбционного цикла в конце каждого такта

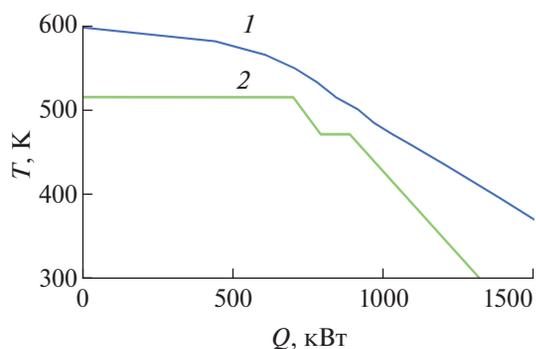
№ такта	Длительность, с	Насыщенность водородом	Температура, К	Давление, МПа	Тепло, кДж
1	624	0.75	288.1	0.042	-702.9
2	107	0.75	515.5	25.06	473.0
3	673	0.15	515.5	13.04	703.3
4	203	0.15	288.1	0.022	-473.1

Таблица 3. Расходные и энергетические характеристики комплекса для производства водорода 36 кг/ч

Расход алюминия, г/с	89.24
Расход воды в реактор, г/с	544.4
Выход водорода, г/с	10
Возврат воды, г/с	454.9
Возврат окиси алюминия, г/с	168.6
Мощность электролизера, кВт (14 кВт ч/кг Al)	4498
Расход энергии на кальцинацию, кВт	118.3
Утилизация пара при кальцинации, кВт	15.36
Утилизация тепла паро-водородной смеси, кВт	206.4

Схему рис. 2 можно рассматривать как схему гибридной энергетической установки для преобразования тепловой энергии в электрическую с одновременным использованием части тепла для компримирования водорода. Основным источником тепла является паро-водородная смесь. Каждая из двух металлгидридных установок представляет собой источник и сток тепла с $T-Q$ -диаграммами (Q – объемный расход водорода, м³/с), которые легко рассчитать с помощью табл. 1, 2. Мощность утилизационного блока в гибридной энергетической установке определяется из усло-

вия, чтобы минимальный температурный напор между суммарными $T-Q$ -диаграммами для источников и стоков тепла (рис. 4) равнялся заданному минимуму (здесь 35 К – часто используемое в литературе значение для сравнения циклов газотурбинных установок). В данном случае это условие достигается увеличением тепловой мощности утилизационного блока в 1594 раза. При этом генерируемая электрическая мощность становится равной $1594 \times 0.1295 = 206.4$ кВт. Соответственно КПД утилизационного блока по отношению к утилизируемой тепловой мощности 1120.7 равен 18.4%.

**Рис. 4.** $T-Q$ -диаграммы для источников (1) и стоков (2) тепла при утилизации тепла от охлаждения паро-водородной смеси в ТСКВ и в металлгидридном утилизационном цикле.

РАСХОДНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ УСТАНОВКИ ПОЛУЧЕНИЯ ВОДОРОДА ПО ТЕХНОЛОГИИ ГТОА + ТСКВ + МГУБ

Расходы реагентов и продуктов реакции комплекса ГТОА + ТСКВ производительностью водорода 36 кг/ч приведены в табл. 3. Электрическая мощность потребляется только электролизером. Сжатие водорода в ТСКВ производится за счет тепла паро-водородной смеси из реактора ГТОА. Утилизация избытка тепла ГТОА производится с помощью МГУБ. Учтена также возможность утилизации пара от кальцинации.

Табл. 4 иллюстрирует ступени преобразования теплотворной способности алюминия в теплотворную способность водорода. В колонке “Фор-

Таблица 4. Эффективность преобразования теплотворной способности алюминия в теплотворную способность водорода

Идентификаторы	Описание	Формулы	Значения
<i>A</i>	Мощность в реакции окисления алюминия в кислороде, кВт		2769.3
<i>B</i>	Мощность сгорания водорода (высшая), кВт		1428.8
<i>C</i>	Мощность реакции окисления алюминия в воде, кВт	$C = D + E$	1385.9
<i>D</i>	Выход тепла с паро-водородной смесью, кВт		1301.9
<i>E</i>	Выход тепла со смесью бемита с водой, кВт		84
<i>F</i>	Тепло, использованное в металлгидридном компрессоре, кВт		181.2
<i>G</i>	Утилизация остатка тепла паро-водородной смеси ($D - F$) с КПД 18.4%, кВт	$G = 0.184(D - F)$	206.4
<i>H</i>	Утилизация пара при кальцинации, кВт		15.36
<i>I</i>	Коэффициент преобразования в теплоту сгорания водорода (без утилизации тепла)	$I = B/A$	0.516
<i>J</i>	Коэффициент преобразования в теплоту сгорания водорода (с утилизацией тепла)	$J = (B + F + G + H)/A$	0.661

мулы” приведены функциональные соотношения между процессами из колонки “Идентификаторы” (там, где это возможно без увеличения числа строк в таблице).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена схема производства водорода методом гидротермального окисления алюминия в сочетании с технологией утилизации тепла реакции окисления алюминия в металлгидридных циклах. Металлогидридные циклы используются для сжатия водорода до давления 90 МПа и производства электроэнергии. Методом термодинамического моделирования рассчитаны энергетические и материальные балансы процессов.

Термодинамическое моделирование технологических процессов выполнено для производительности водорода 36 кг/ч. Преобразование теплотворной способности алюминия в теплотворную способность водорода происходит с КПД 51.6%.

Паро-водородная смесь выносит из реактора 1301.9 кВт тепла. Часть низкопотенциального тепла мощностью 181.2 кВт используется для компримирования водорода до давления 90 МПа с помощью металлгидридного термосорбционного компрессора. Остаток тепла, полученного от паро-водородной смеси, с помощью металлгидридного утилизационного цикла преобразуется в электрическую мощность 206.4 кВт. Использование металлгидридных компрессоров для утилизации тепла реакции ГТОА позволяет увеличить эффективность технологического процесса получения сжатого водорода на 14%.

ПРИЛОЖЕНИЕ

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТАЛЛОГИДРИДНОГО ЦИКЛА УТИЛИЗАЦИИ НИЗКОПОТЕНЦИАЛЬНОГО ТЕПЛА

Простейшая система нульмерных нестационарных дифференциальных уравнений для описания процессов сорбции/десорбции водорода металлической фазой представлена в [15]:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{Q}{V_{\max}}, \quad (2)$$

$$\frac{dT}{dt} = \left(\frac{\rho_{\text{H}_2}}{M_{\text{H}_2}} Q \Delta H + q_a \right) / (C_{p, \text{MH}} m_{\text{MH}}), \quad (3)$$

где X – относительная насыщенность металлгидрида водородом; T – температура металлгидрида, К; Q – объемный расход водорода, м³/с; m_{MH} – масса металла, кг; $C_{p, \text{MH}}$ – теплоемкость металла, Дж кг⁻¹ К⁻¹; V_{\max} – максимальная водородоемкость данной массы металла, м³; ρ_{H_2} , M_{H_2} – плотность (в кг/м³) и молекулярный вес (в кг/моль) водорода; ΔH – тепловой эффект реакции сорбции/десорбции, Дж/моль H₂; q_a – отведенное/подведенное тепло, Вт.

Максимальная водородоемкость V_{\max} и объемный расход водорода Q определяются по формулам

$$V_{\max} = 0.01 C_{\max} m_{\text{MH}} / \rho_{\text{H}_2},$$

$$Q = C_a \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \ln\left(\frac{P_d}{P_s}\right) V_{\max} (1 - X),$$

Таблица 5. Экспериментальная изотерма $\varphi(X)$ для сплава $\text{LaFe}_{0.5}\text{Mn}_{0.3}\text{Ni}_{4.8}$

$X - 0.5$	φ	$X - 0.5$	φ
-0.501680672	-1.143312102	0.306722689	0.366242038
-0.441176471	-0.713375796	0.365546218	0.671974522
-0.365546218	-0.426751592	0.405882353	1.22611465
-0.271428571	-0.302547771	0.431092437	1.894904459
-0.145378151	-0.140127389	0.442857143	2.296178344
-0.027731092	-0.015923567	0.459663866	3.012738854
0.185714286	0.203821656		

Таблица 6. Параметры модели [15]

Параметр	Значение
Поверхность теплообмена A_{HEX} , м ²	0.337
Кинетические константы $C_d = C_a$, 1/с	59.187
Максимальное содержание H_2 C_{max} , мас. %	1.35
Теплоемкость воды $C_{p,HEX}$, Дж/кг/К	4200
Теплоемкость металла $C_{p,MH}$, Дж/кг/К	420
Энергии активации $E_d = E_a$, Дж/моль H_2	21 180
Масса металла m_{MH} , кг	5
Расход охлаждающей воды m_{HEX} , кг/с	0.3
Молекулярный вес водорода M_{H_2} , кг/моль	0.002
Коэффициент теплоотдачи α , Вт/м ² К	120
Тепловой эффект реакции сорбции/десорбции ΔH , Дж/моль H_2	34/700
Энтропийный эффект реакции ΔS , Дж/К/моль H_2	111
Плотность водорода ρ_{H_2} , кг/м ³	0.0899
Гистерезис φ_h	0.125

где P_d – давление десорбции ($P_d < P_s$).

Равновесное давление P_s в процессе десорбции в зависимости от температуры и насыщенности определяется по уравнению Вант Гоффа

$$\frac{P_s}{P_0} = \exp\left(\frac{\Delta S}{R} - \frac{\Delta H}{RT} + \varphi(X)\right), \quad (4)$$

где P_0 – атмосферное давление; $\varphi(X)$ – функция влияния относительной насыщенности металлгидрида водородом. Для расчетов здесь использовалась аппроксимация кубическими сплайнами данных табл. 5, которая соответствует экспериментальной изотерме, приведенной в [15] для сплава $\text{LaFe}_{0.5}\text{Mn}_{0.3}\text{Ni}_{4.8}$ (насыщенность X определена на отрезке от 0 до 1, но для аппроксимации удобнее пользоваться сдвинутым на 0.5 аргументом). Также в [15] приведена величина гистерезиса – превышение давления абсорбции над давлением десорбции:

$$\ln \frac{P_{s,a}}{P_{s,d}} = \varphi_h.$$

Подвод тепла q_a определяется по формулам

$$q_a = \alpha A_{HEX} (T_{hot} - T),$$

$$T_{hot} = \frac{T_1 + a\alpha A_{HEX} T}{1 + a\alpha A_{HEX}},$$

$$a = \frac{0.5}{C_{p,HEX} m_{HEX}}.$$

В работе [16] описан четырехтактный процесс работы металлгидридного термосорбционного компрессора, который в терминах системы уравнений (2), (3) можно идеализировать следующими этапами:

– изотермическая сорбция водорода металлической фазой при низкой температуре T_1 , при этом от-

носительная насыщенность металлогибрида в соответствии с уравнением (2) растет от X_1 до X_2 ;

– нагрев металлогибрида при $X = X_2$ от низкой температуры T_1 до высокой температуры T_2 , сопровождаемый компримированием водорода;

– десорбция водорода из металлогибрида при высокой температуре T_2 с отбором водорода высокого давления, при этом относительная насыщенность металлогибрида падает от X_2 до X_1 в соответствии с уравнением (2);

– охлаждение металлической фазы при $X = X_1$ до первоначально низкой температуры T_1 .

Особенность описанного цикла в том, что все такты описываются только одним уравнением. Для тактов №№ 1, 3 – это уравнение (2), а для тактов №№ 2, 4 – уравнение (3), а его упрощенная версия, потому что в этих тактах расход водорода равен нулю ($Q = 0$) выглядит так:

$$\frac{dT}{dt} = q_a / (C_{p,МН} m_{МН}). \quad (5)$$

Характеристики четырех тактов работы двух рассмотренных циклов получаются интегрированием уравнений (2) и (5) с использованием параметров из табл. 6. Полученные результаты приведены в табл. 1, 2.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Жук А.З., Борзенко В.И., Бузоверов Е.А., Иванов П.П. Оценка конкурентоспособности технологий получения “зеленого” водорода: “безуглеродный” алюминий и электролиз воды // Вестник ОИВТ РАН. 2021. Т. 6. С. 21.
2. Белов Г.В., Иорш В.С., Юнгман В.С. Моделирование равновесных состояний термодинамических систем с использованием ИВТАНТЕРМО для Windows // ТВТ. 2000. Т. 38. № 2. С. 209.
3. Ivanov P. AL_H2_Soft // Mendeley Data. 2021. V. VI. <https://data.mendeley.com/datasets/g6pp9cpcf9/1>
4. Grigorenko A.V., Shkolnikov E.I., Zhuk A.Z., Vlaskin M.S. Experience in Creation and Exploitation of Energetic and Energy-technological Plants Based on Hydrothermal Oxidation of Aluminum // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 2018. V. 381. 012049.
5. Vlaskin M.S., Shkolnikov E.I., Bersh A.V. et al. An Experimental Aluminum-fueled Power Plant // J. Power Sources. 2011. V. 196. P. 8828.
6. Laubengayer A.W., Weisz R.S. A Hydrothermal Study of Equilibria in the System Alumina–Water // J. Amer. Chem. Soc. 1943. V. 65. № 2. P. 247.
7. Kennedy G.C. Phase Relations in the System of Al_2O_3 – H_2O at High Temperatures and Pressures // Amer. J. Sci. 1959. V. 257. № 8. P. 563.
8. Green Hydrogen Cost Reduction: Scaling up Electrolysers to Meet the 1.5°C Climate Goal. Abu Dhabi: International Renewable Energy Agency, 2020. <https://clck.ru/334UfY>
9. Christensen A. Assessment of Hydrogen Production Costs from Electrolysis: United States and Europe. Final Release. June 18, 2020. https://theicct.org/sites/default/files/icct2020_assessment_of_hydrogen_production_costs_v1.pdf
10. Air Liquide Inaugurates 20MW PEM Electrolyser in Québec, Canada // NS Energy. 2021. <https://www.nsenenergybusiness.com/news/air-liquide-quebec-pem-electrolyser/#>
11. Parks G., Boyd R., Cornish J., Remick R. Hydrogen Station Compression, Storage, and Dispensing. Technical Status and Costs. Tech. Rep. NREL/BK-6A10-58564. May 2014.
12. Penev M., Zuboy J., Hunter Ch. Economic Analysis of a High-pressure Urban Pipeline Concept (HyLine) for Delivering Hydrogen to Retail Fueling Stations // Transportation Research. Part D: Transport and Environment. 2019. V. 77. P. 92. <https://doi.org/10.1016/j.trd.2019.10.005>
13. Glagoleva-Khayrullina A., Blinov D., Borzenko V. Novel kW Scale Hydrogen Energy Storage System Utilizing Fuel Cell Exhaust Air for Hydrogen Desorption Process from Metal Hydride Reactor // Energy. 2019. V. 183. P. 1244.
14. Lototsky M.V., Yartys V.A., Pollet B.G., Bowman R.C. Jr. Metal Hydride Hydrogen Compressors: A Review // Int. J. Hydrogen Energy. 2014. V. 39. P. 5818.
15. Blinov D.V., Borzenko V.I., Dunikov D.O., Romanov I.A. Experimental Investigations and a Simple Balance Model of a Metal Hydride Reactor // Int. J. Hydrogen Energy. 2014. V. 39. P. 19361.
16. Бочарников М.С. Разработка и исследование металлогидридных компрессоров водорода высокого давления для систем аккумулирования энергии. Дис. ... канд. техн. наук. Черноголовка: Ин-т проблем хим. физики РАН, 2019.

УДК 537.311.4

КОНТАКТНОЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ СОПРОТИВЛЕНИЕ ГРАФИТА МАРКИ МПГ-7 ПРИ ПОСТОЯННОМ И ПЕРЕМЕННОМ ТОКЕ

© 2022 г. М. Г. Зеодинов*, А. В. Костановский**, М. Е. Костановская, А. А. Пронкин***

*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия***E-mail: mz.64@mail.ru****E-mail: Kostanovskiy@gmail.com*****E-mail: Pronkin.A.A@gmail.com*

Поступило в редакцию 21.07.2021 г.

После доработки 08.09.2022 г.

Принято к публикации 14.09.2022 г.

В работе сравниваются величины контактного сопротивления, которое возникает при прохождении через одну неподвижную контактную поверхность переменного или постоянного электрического тока. Сравнение проводится на графите марки МПГ-7 в идентичных экспериментальных условиях. Диапазон изменения температуры составлял 350–750 К. Падение напряжения измерялось несколькими точечными поверхностными зондами, что позволяло одновременно определять контактное сопротивление на разных расстояниях от контактной поверхности. Показано, что удельное контактное электрическое сопротивление и контактное сопротивление оказываются выше при пропуске постоянного тока, чем при использовании переменного тока.

DOI: 10.31857/S0040364422050179

ВВЕДЕНИЕ

В электроэнергетике часто применяются контактирующие сочетания различных материалов достаточно протяженных размеров. Электрическое контактное сопротивление (КС) представляет собой сопротивление, которое возникает в результате соединения двух образцов одного или разных материалов. Повышенный интерес к исследованию КС вызван, в частности, изучением процесса сварки, поэтому основные измерения были выполнены при пропуске постоянного тока по образцу, составленному из одного и того же материала [1]. Экспериментально было показано, что величина КС прямо пропорционально связана с удельным электрическим сопротивлением (УЭС) монолитного материала. Наиболее высокие значения КС зафиксированы у углеграфитовых материалов. В России КС экспериментально определено, по видимому, только для одной марки графита (ГМЗ), причем использовался переменный электрический ток [2]. Цель данной работы заключается в изучении влияния вида источника питания (постоянный или переменный ток) на величину КС, измеренного в идентичных экспериментальных условиях и на одной марке графита.

ЭКСПЕРИМЕНТ

Исследования проводились на сплошном цилиндре радиусом $r = 3.905$ мм и длиной 124 мм, изготовленном из графита марки МПГ-7. Обра-

зец устанавливался в вертикальном положении, после чего по нему пропускался переменный или постоянный электрический ток (рис. 1). Сила тока I , проходящего по образцу, измерялась с помощью 100 А шунта и вольтметра марки GDM-8246. Несколько точечных поверхностных зондов устанавливались попарно на одинаковом расстоянии от контактной поверхности $l_{\text{проб}}(i)$, что позволяло одновременно определять падение напряжения на участках разной длины $U(i)$. Падение напряжения между каждой парой зондов, равноудаленных от контактной поверхности, измерялось вольтметрами GDM-8135. Предварительные эксперименты показали, что расстояние, на котором выполняется изотермическое приближение, находится в центральной части образца и составляет не менее 50 мм. В основном эксперименте температура измерялась в двух сечениях на расстоянии ~40 мм друг от друга хромель-копелевыми термопарами с диаметром королька 0.5 мм, размещенными внутри образца. Зонды устанавливались между термопарами. Термопары намеренно выводились из области проведения электрических измерений, так как отверстия, просверленные для установки термопар, могли вносить дополнительную погрешность в определяемые величины УЭС и КС. Диапазон исследуемых температур составлял 350–750 К, переход между режимами измерения выполнялся последовательным повышением или понижением температуры с шагом 50–100 К. Эксперименты реализованы в стационарном тепловом режи-

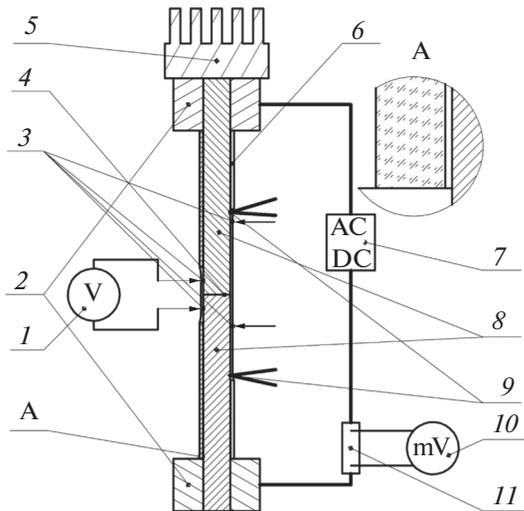


Рис. 1. Принципиальная схема экспериментального образца: 1 – вольтметр для измерения падения напряжения между зондами, 2 – токоподводы, 3 – поверхностные зонды, 4 – контактная поверхность, 5 – гиря, 6 – кварцевая трубка, 7 – источники питания постоянного и переменного тока, 8 – два элемента экспериментального образца, 9 – термопары, 10 – вольтметр, 11 – эталонное сопротивление.

ме, время предварительной выдержки составляло не менее 10 мин. Первые эксперименты проводились на сплошном цилиндре с целью определения УЭС монолитного образца. При наличии контактной поверхности центральная часть образца помещалась в кварцевую тонкостенную трубку, что позволяло сохранить соосность двух элементов образца. Специальные эксперименты показали, что кварцевый цилиндр не оказывает влияния на результаты определения КС. Исследования реализованы на воздухе. Для изучения влияния силы давления на величину КС на верхний торец образца помещали гири известной массы.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Изучение КС удобно проводить в сравнении с величиной УЭС монолитного образца, которая рассчитывается по известной формуле

$$\rho = \frac{U\pi r^2}{I_{\text{проб}}}$$

Ранее экспериментально было установлено [3], что для графита марки МПГ-7 величины УЭС, измеренные на образцах, которые были вырезаны параллельно направлению приложения давления при прессовании ρ^{\parallel} , имели большой разброс, тогда как величины УЭС, измеренные в направлении, перпендикулярном направлению прессования ρ^{\perp} , характеризовались хорошей воспроизводимостью. В данной работе КС и УЭС монолитного материала определялись на образцах,

вырезанных перпендикулярно направлению приложения давления в процессе прессования.

Следует отметить, что для расчета контактного электрического сопротивления в цепи переменного тока необходимо оперировать понятиями активного и реактивного сопротивлений (импеданса). Однако в данном случае при реализации эксперимента на рабочем участке, выполненном как образец (активная нагрузка) – токоподвод – источник питания, электрическую цепь можно рассматривать в приближении одного витка. Оценки показывают [4], что различие между полным и активным электрическими сопротивлениями составляет 0.3%. Это свидетельствует о том, что в частном случае можно выводить расчетные соотношения, используя классический закон Ома для постоянного тока.

При определении удельного электрического КС для одной контактной поверхности $\rho_{\text{ксл}}$ (Ом м), образованной при соединении двух участков образца графита, используется формула [2]

$$\rho_{\text{ксл}}(T) = U\pi r^2 / (I_{\text{проб}}) - \rho^{\perp}(T). \quad (1)$$

В формуле (1) предполагается, что величина $l_{\text{проб}}$ равна длине двух участков, состоящих из монолитного материала, при этом протяженность контактной поверхности является бесконечно малой величиной. Первоначально полагается, что КС проявляется только в плоскости контакта и измеряемые значения $\rho_{\text{ксл}}$ не должны зависеть от расстояния до контактной поверхности [1]. По-видимому, по этой причине авторы [2] провели измерения $\rho_{\text{ксл}}$ графита марки ГМЗ на одном расстоянии от контактной поверхности при $l_{\text{проб}}/r \approx 7.4$ и получили, что по сравнению с УЭС монолитного материала $\rho_{\text{ксл}}$ выше на ~10%. Данные результаты позволили сделать ошибочный вывод, что влияние КС не является значительным. В результате измерений величины падения напряжения между зондами, размещенными на различном расстоянии от контактной поверхности, в данной работе обнаружено, что имеет место влияние расстояния $l_{\text{проб}}(i)$ на величину $\rho_{\text{ксл}}(i)$. Во-первых, это означает, что контактные явления не ограничены только плоскостью, по которой соприкасаются элементы образца. Во-вторых, для оценки максимального значения удельного КС необходимо находить предел:

$$\left(\frac{\rho_{\text{ксл}}(l_{\text{проб}}(i)/r)}{\rho^{\perp}} \right)_{\text{max}} = \lim_{l_{\text{проб}}(i)/r \rightarrow 0} \frac{\rho_{\text{ксл}}(l_{\text{проб}}(i)/r)}{\rho^{\perp}}$$

Зависимость $\rho_{\text{ксл}}(i)/\rho^{\perp} \sim f(l_{\text{проб}}(i)/r)$ задана экспоненциальной функцией и определено (достоверность аппроксимации $R^2 \geq 0.986$), что при постоянном токе, давлении $P = 32$ кПа (масса гири – 160 г) и $T = 400$ К $(\rho_{\text{ксл}}(i)/\rho^{\perp})_{\text{max}} \approx 26$. Вели-

чина отношения $(\rho_{ксл}(i)/\rho^\perp)_{\max}$ более чем на два порядка превышает значения, приведенные в [2]. На рис. 2 представлены результаты сравнения относительных значений удельного электрического КС $\rho_{ксл}(i)/\rho^\perp$ в зависимости от относительного расстояния между зондами $l_{проб}/r$, которые были измерены при пропускании постоянного и переменного тока при $P = 32$ кПа и $T = 400$ и 700 К. Аппроксимирующие кривые построены по уравнениям:

$$\frac{\rho_{ксл}}{\rho^\perp} = 25.96299e^{-0.28374 \frac{l_{проб}}{r}}, \quad (2)$$

$$\frac{\rho_{ксл}}{\rho^\perp} = 14.08986e^{-0.22955 \frac{l_{проб}}{r}}, \quad (3)$$

для постоянного и переменного тока соответственно.

При использовании постоянного тока величина $\rho_{ксл}(i)/\rho^\perp$ оказывается выше на ~35%, чем при пропускании по образцу переменного тока ($l_{проб}/r \approx 1.5$ и $T = 400$ К). При приближении к контактной поверхности данное различие будет возрастать.

Экспериментальные зависимости $\rho_{ксл}(i) \sim f(l_{проб}(i))$ могут быть использованы для численного моделирования с целью оценить дополнительное повышение температуры в области, прилегающей к контактной поверхности.

С увеличением температуры при прочих равных условиях отношение $\rho_{ксл}(i)/\rho^\perp$ уменьшается. Этот вывод качественно совпадает с результатами литературных источников [2, 5, 6].

Влияние силы давления на величину КС можно представить в форме, которая используется в работе [1]. Величина КС для одной контактной поверхности $R_{ксл}$ (Ом) определяется следующим образом [1]:

$$R_{ксл}(T) = U_{проб}/I - \rho^\perp(T)l_{проб}/(\pi r^2).$$

В данной формуле так же, как и в (1), используется гипотеза, что протяженность контактной поверхности много меньше длины $l_{проб}$.

Дополнительно предполагается, что реальная площадь контакта может быть много меньше площади, по которой соприкасаются элементы экспериментального образца, поэтому в [1] переход к $\rho_{ксл}$ не используется. На рис. 3 в форме, которая используется в [1], приведены результаты определения КС графита МПГ-7 $R_{ксл}$, измеренные при $T = 400$ К и на минимальном расстоянии $l_{проб} = 5.89$ мм между зондами в зависимости от силы веса $G = 160, 380$ и 520 г, приложенного к верхнему торцу образца. Выбранная для рис. 3 форма представления экс-

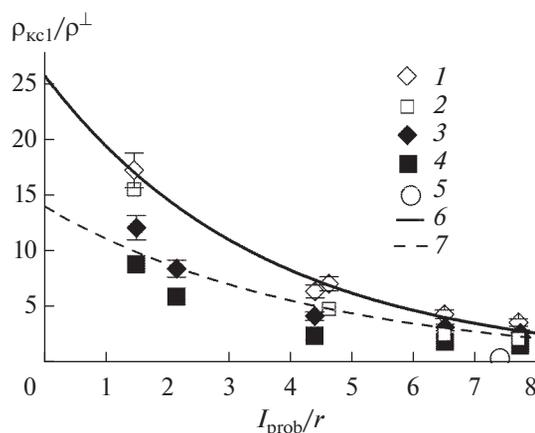


Рис. 2. Относительное удельное КС $\rho_{ксл}/\rho^\perp$ в зависимости от относительного расстояния между зондами $l_{проб}/r$ при $P = 32$ кПа: 1 – постоянный ток, $T = 400$ К; 2 – 700; 3 – переменный ток, $T = 400$ К; 4 – 700; 5 – графит марки ГМЗ, [2]; 6 – аппроксимирующая зависимость (2) для постоянного тока; 7 – (3) для переменного тока.

периментальных результатов позволяет сравнить их с данными для углеграфитовых материалов иностранного производства и использовать теоретические зависимости для $R_{ксл} = f(G)$ [1]. Зависимость $R_{ксл} = f(G)$ является убывающей при увеличении приложенной внешней нагрузки для графитов иностранного производства и для графита МПГ-7. Как в случае удельного КС $\rho_{ксл}$, величины $R_{ксл}$ оказываются несколько выше при использовании постоянного тока по сравнению с результатами, измеренными при переменном токе. Привлечение теоретической методики позволило показать, что $R_{ксл}$ подчиняется обратной степенной

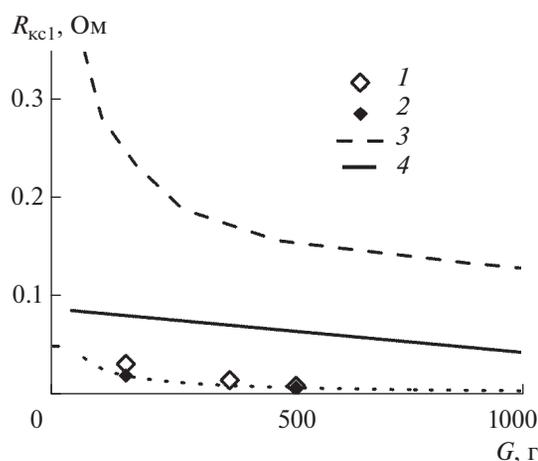


Рис. 3. Зависимости КС $R_{ксл}$ от приложенной силы веса G для графита: 1 – МПГ-7, постоянный ток; 2 – МПГ-7, переменный ток; 3 – стержень из электрографита; 4 – угольная щетка/угольное кольцо [1].

зависимости $R_{ксл} \sim G^{-1/k}$ от приложенного внешнего усилия [1]. Для графита марки МПГ-7 при пропускании переменного тока имеет место зависимость $R_{ксл} \sim G^{-1/1.3}$, при использовании постоянного тока $R_{ксл} \sim G^{-1/1.035}$. Следовательно, при пропускании постоянного тока зависимость КС от внешней нагрузки проявляется сильнее по сравнению со случаем использования переменного тока.

Относительные суммарные расширенные неопределенности величин $U(\rho_{ксл})$ и $U(R_{ксл})$ оцениваются в ~7 и ~6% при $T = 700$ К соответственно. Данные величины $U(\rho_{ксл})$ и $U(R_{ксл})$ возрастают при понижении температуры и превышают неопределенность значений $U(\rho)$ для УЭС, которые были определены для графитов других марок [7].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные впервые экспериментальные результаты определения КС графита марки МПГ-7 позволяют сделать вывод, что величины $\rho_{ксл}$ и $R_{ксл}$, измеренные при пропускании постоянного тока, оказываются выше по сравнению со случаем использования переменного тока. Следовательно, при наличии контактных поверхностей графита электрические потери в электрических

цепях постоянного тока будут выше по сравнению с электрическими потерями при использовании переменного тока.

Работа проводится по программе Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хольм Р. Электрические контакты. М.: Изд-во иностр. лит., 1961. 464 с.
2. Лутков А.И. Тепловые и электрические свойства углеродных материалов. М.: Metallurgy, 1990. 176 с.
3. Зеодинов М.Г., Костановский А.В., Костановская М.Е., Пронкин А.А. Контактное электрическое сопротивление графита // ТВТ. 2022. Т. 60. № 4. С.
4. Калашников С.Г. Электричество. 6-е изд., стереотип. М.: Физматлит, 2003.
5. Berger H.H. Contact Resistance and Contact Resistivity // J. Electrochem. Soc. 1972. V. 119. № 4. P. 514.
6. Liyadi M., Pardo F., Bardou N., Pelouard J.-L. An Improved Method of Ohmic Contact Resistance Measurement // Solid-State Electronics. 2005. V. 49. P. 1655.
7. Костановский А.В., Костановская М.Е., Зеодинов М.Г., Пронкин А.А. Влияние температуры на электрическое сопротивление пиролитического графита // ТВТ. 2020. Т. 58. № 4. С. 732.

УДК 536.2.023;532.591

ПОВЕДЕНИЕ МАГНИЕВОГО СПЛАВА ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ДЕФОРМАЦИИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ УДАРНО-ВОЛНОВОЙ НАГРУЗКИ

© 2022 г. Е. В. Струлева¹, *, П. С. Комаров¹, С. А. Евлашин², С. И. Ашитков¹¹ФГБУН Объединенный институт высоких температур РАН (ОИВТ РАН), Москва, Россия²Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия

*E-mail: struleva.evgenia@yandex.ru

Поступило в редакцию 21.07.2022 г.

После доработки 09.09.2022 г.

Принято к публикации 13.10.2022 г.

Проведено исследование движения тыльной свободной поверхности пленочного образца магниевого сплава субмикронной толщины при воздействии лазерными импульсами субпикосекундной длительности. Непрерывная диагностика смещения свободной задней поверхности образца осуществлена в пикосекундном диапазоне в одноимпульсном режиме с использованием спектральной интерферометрии. Получено значение откольной прочности при скорости деформирования $\sim 10^9$ с⁻¹, величина которой составляет около 53% от предельно возможной прочности для магниевого сплава.

DOI: 10.31857/S004036442205012X

ВВЕДЕНИЕ

Исследование прочностных свойств материалов при воздействии ультракороткими нагрузками пикосекундного диапазона в настоящее время вызывает значительный интерес [1–9]. Данные исследования перспективны с точки зрения разработки широкодиапазонных уравнений состояния вещества, развития теории фазовых переходов, прочности и пластичности, расчетного прогнозирования интенсивных импульсных воздействий на материалы в широком диапазоне параметров нагрузки, верификации гидродинамических расчетов и результатов атомистического моделирования, а также постановки новых задач.

Предел текучести твердых тел возрастает с увеличением скорости нагружения. Для многих кристаллических тел эта зависимость резко усиливается с превышением скорости деформирования 10^3 – 10^4 с⁻¹, что интерпретируется как следствие изменения механизма движения дислокаций от термофлуктуационного к надбарьерному, контролируемому фононным трением [10]. Разрушение конденсированного вещества при высокоскоростном растяжении происходит путем зарождения, роста и слияния многочисленных несплошностей, однако скорость этих процессов ограничена. При малой длительности и высокой амплитуде ударной нагрузки сопротивление разрушению твердых тел становится сравнимо с предельной теоретической прочностью, которая определяется непосредственно потенциалом межатомных взаимодействий [11]. В работах [1–9] на металлических пленочных образцах в пикосекундном диапазоне удалось приблизиться к иде-

альным значениям объемной и сдвиговой прочности. Накопление таких экспериментальных данных требуется для выявления общих закономерностей скоростных зависимостей сопротивления разрушению в широком диапазоне параметров для различных материалов.

В данной работе с помощью интерферометрической методики непрерывной регистрации движения поверхности с использованием частотно-модулированного (чирпированного) диагностического импульса измерена откольная прочность магниевого сплава (Mg–4Al–2Zn) в твердой фазе вблизи предела теоретической прочности. Исследование поведения магниевых сплавов как легких и высокопрочных материалов оказывается актуальным в связи с широкой областью практического применения в промышленности [12–15].

ЭКСПЕРИМЕНТ

Для исследования динамической прочности материалов на разрыв в диапазоне длительностей нагрузки $\leq 10^{-6}$ с регистрируются откольные явления при отражении импульса ударно-волнового сжатия от свободной поверхности тела. Для этого определяется профиль скорости свободной поверхности как функции времени $u_{fs}(t)$.

Источником лазерных импульсов являлась титан-сапфировая лазерная система, генерирующая импульсы с энергией до 2 мДж на длине волны 800 нм. Лазерная система собрана по принципу усиления чирпированных импульсов.

Экспериментальный образец представлял собой поликристаллическую пленку из магниевого

сплава (Mg–4Al–2Zn) толщиной 660 нм, нанесенную методом магнетронного напыления на стеклянную подложку толщиной 120 мкм. Сплав состоял из 94% Mg, 4% Al и 2% Zn. Толщина пленочных образцов измерялась электронным микроскопом непосредственно в области проведения экспериментов. В экспериментальной схеме лазерное воздействие на образец осуществлялось со стороны стеклянной подложки. Диагностика изменений проводилась на тыльной (свободной) поверхности. Нагревающий импульс фокусировался линзой с фокусным расстоянием 20 см через подложку на поверхность металлической пленки с радиусом пучка 30 мкм по уровню e^{-1} с гауссовым распределением интенсивности. Существовало ограничение на энергию нагревающего лазерного излучения в связи с возможным возникновением оптического пробоя в стеклянной подложке при интенсивности $\sim 10^{13}$ Вт/см². Поэтому для уменьшения пиковой интенсивности (при неизменном значении энергии) длительность нагревающего импульса была увеличена с 40 фс до 0.8 пс с помощью соответствующей настройки оптического компрессора лазерной системы.

Энергия в каждом импульсе плавно варьировалась с помощью поляризационного ослабителя и измерялась калиброванным фотодиодом. После каждого воздействия мишень перемещалась на новое место на расстояние около 300 мкм с помощью микроманипулятора.

Для диагностики смещения свободной поверхности мишени часть chirпированного импульса длительностью 300 пс с шириной спектра 40 нм и центральной длиной волны $\lambda_0 = 800$ нм отводилась из лазерного тракта перед компрессором. В экспериментальной схеме применялся интерферометр Майкельсона, собранный по схеме переноса изображения, и дифракционный спектрометр Acton-2300i (схема Черни–Тернера) с решеткой 600 штрих/мм. Перенос изображения осуществлялся с помощью микрообъектива Olympus с числовой апертурой $NA = 0.3$. Регистрация оптических сигналов на выходе спектрометра производилась с помощью ПЗС-камеры SensiCam QE с матрицей размером 1420×1080 пкс и разрядностью 12 бит. В каждом эксперименте записывались три типа интерферограмм: поверхности образца до воздействия (начальная), в момент воздействия выхода ударной волны (временная) и после окончания процесса — спустя несколько секунд после воздействия (финальная). Сопоставление начальной и временной интерферограмм дает информацию о динамике ударно-волнового процесса.

Применяемая методика измерений обеспечивала непрерывную регистрацию динамики процесса в интервале $\Delta t = 0–200$ пс с временным разрешением $\delta t \approx 2$ пс. Более подробно оптическая схема и методика измерений описана в [16, 17].

Дальнейшая обработка интерферограмм проводилась с помощью двумерного фурье-анализа, подробно описанного в работах [17–19]. Результатом анализа являлись пространственно-временные распределения изменения фазы $\Delta\varphi(x, t)$ отраженной от мишени диагностической волны.

Величина смещения границы поверхности $z(t)$ связана с изменением фазы $\Delta\varphi(t)$ соотношением

$$z(t) = \frac{\Delta\varphi(t)\lambda}{4\pi}.$$

При этом точность измерения фазы составляла $\delta\varphi \approx 0.02$ рад, что соответствует погрешности определения смещения поверхности на уровне $\delta z \approx (1–2)$ нм.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 приведено пространственно-временное распределение $\Delta\varphi(x, t)$, описывающее динамику пространственно-неоднородного движения тыльной свободной поверхности пленочного образца магниевого сплава толщиной $h = 660$ нм в момент выхода ударной волны, генерируемой лазерным импульсом с энергией $E = 50$ мкДж.

Измеренный профиль смещения $z(t)$ тыльной свободной поверхности магниевого образца и профиль скорости $u_{fs}(t)$, полученный путем дифференцирования зависимости $z(t)$, показаны на рис. 2. Профили построены для центральной части области взаимодействия при $E = 50$ мкДж.

Интерференция падающей и отраженной волн внутри образца приводит к возникновению в нем растягивающих напряжений. Откольное разрушение или откол с образованием откольной пластины наблюдаются, если величина растягивающих напряжений превосходит некоторое критическое значение для данного материала. По мере развития разрушения растягивающие напряжения релаксируют к нулю. Формируются волны сжатия в обе стороны от поверхности откола. Выход волны сжатия на свободную поверхность от-

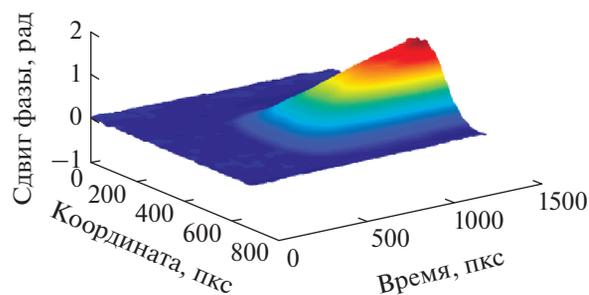


Рис. 1. Пространственно-временное распределение фазы диагностического импульса при выходе ударной волны на свободную тыльную поверхность образца; масштаб по оси времени — 0.164 пс/пкс, пространственный масштаб по вертикальной оси — 0.3 мкм/пкс.

кольной пластины приводит к повторному возрастанию ее скорости (откольный импульс) [11]. Величина растягивающего напряжения непосредственно перед разрушением определяется методом характеристик по декременту скорости свободной поверхности Δu_{fs} между ее максимальным значением и значением перед откольным импульсом [11].

На рис. 2 на профиле $u_{fs}(t)$ на фронте волны вблизи максимального значения скорости свободной поверхности регистрируется уменьшение градиента скорости. Аналогичная особенность наблюдалась на других профилях в данной серии экспериментов. Такое поведение может быть связано с наличием упругого предвестника в упругопластической волне сжатия, амплитуда которого на субмикронной длине распространения в металлах может составлять от единиц до десятков гигапаскалей [1–8].

Откольная прочность в упругопластическом теле для импульсов нагрузки треугольной формы определяется выражением [20]

$$\sigma_{spall} = \rho c_l \Delta u_{fs} \frac{1}{1 + c_l/c_b}.$$

Здесь $\rho = 1.79$ – начальная плотность, г/см³; $c_l = 5.78$ – продольная скорость звука в магниевом сплаве [13] км/с; $c_b = 4.5$ – объемная скорость звука в магнии [21], км/с; $\Delta u_{fs} = 0.7$ км/с – разность между максимальным и минимальным значениями скорости свободной поверхности из рис. 2. Соответствующее значение откольной прочности при этом равно $\sigma_{spall} = 3.2$ ГПа.

Под скоростью деформирования $\dot{\epsilon}$ в ударно-волновых экспериментах понимается скорость расширения вещества в волне разряжения. Скорость деформирования определяется по соотношению

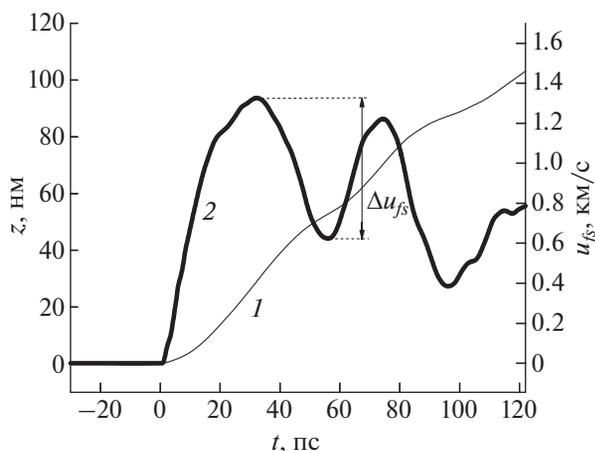


Рис. 2. Временные профили смещения (1) и скорости (2) движения свободной поверхности магниевого образца при $E = 50$ мкДж.

$$\dot{\epsilon} = \dot{V}/V_0 = -\dot{u}_{fs}/2c_b,$$

где \dot{u}_{fs} – измеренная скорость спада скорости свободной поверхности в разгрузочной части импульса ударного сжатия [11], и составляет $\dot{\epsilon} \approx 3.2 \times 10^9$ с⁻¹. Толщину откола можно оценить по формуле $L_{spall} \approx c_b \Delta t/2 \approx 54$ нм, где $\Delta t = t_{min} - t_{max} \approx 24$ пс (рис. 2). Таким образом, получается, что откольное разрушение в образце магниевого сплава происходит в твердом состоянии. После откола на профиле $u_{fs}(t)$ наблюдаются осцилляции, связанные с акустическими колебаниями откольного слоя.

На рис. 3 полученное в настоящей работе значение динамической откольной прочности магниевого сплава сопоставляется с данными экспериментов по соударению пластин в микросекундном диапазоне длительности ударного нагружения.

С увеличением скорости растяжения имеет место существенное увеличение динамической прочности магния и сплавов на разрыв. В настоящей работе удалось достичь значения σ_{spall} , которое составляет около 53% от значения “идеальной” откольной прочности для магниевого сплава. Расчетное предельное значение прочности на растяжение данного сплава по результатам [23] равно $\sigma_{lim} = 6.01$ ГПа. Так как данные, полученные в результате экспериментов с лазерными ударными волнами с образцами субмикронной толщины, могут быть согласованы со сведениями, полученными на образцах миллиметровой толщины в экспериментах по удару пластин, это позволяет спрогнозировать поведение магния и сплавов в широком диапазоне скоростей деформации от 10^5 до 10^9 с⁻¹.

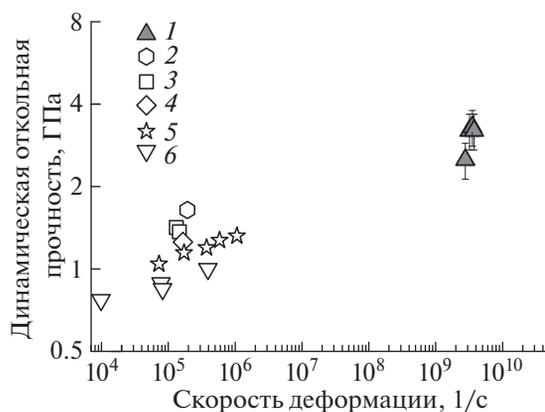


Рис. 3. Результат измерения динамической откольной прочности сплава Mg–4Al–2Zn в зависимости от скорости деформирования по данным настоящей работы (1) в сравнении с данными экспериментов по соударению пластин: 2–4 – для монокристаллов ориентации (1010), (0001) и 45° [22]; 5 – сплава Mg2-1 [13]; 6 – крупнозернистого первичного магния Mg95 [15].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Интерферометрическим методом с пикосекундным разрешением исследована динамика движения свободной поверхности магниевых сплавов Mg–4Al–2Zn при выходе ударной волны, генерируемой лазерными импульсами субпикосекундной длительности. Измерена откольная прочность магниевых сплавов, равная 3.2 ГПа, при скорости деформирования $3.2 \times 10^9 \text{ с}^{-1}$. Полученные в настоящей работе данные позволяют характеризовать тенденцию роста динамической прочности магния и его сплавов в широком диапазоне скоростей деформирования. Представленные экспериментальные данные дополняют литературные данные о сопротивлении разрушению магния и его сплавов в микросекундном диапазоне, полученные в экспериментах по соударению пластин [13–15, 22, 24, 25]. Эти исследования представляют интерес для молекулярно-динамического моделирования разрушения сплава магния в пикосекундном диапазоне нагрузки.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.). Эксперименты проведены на оборудовании ЦКП “Лазерный фемтосекундный комплекс” ОИВТ РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ашитков С.И., Агранат М.Б., Канель Г.И. и др.* Поведение алюминия вблизи предельной теоретической прочности в экспериментах с фемтосекундным лазерным воздействием // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т. 92. С. 568.
2. *Whitley V.H., McGrane S.D., Eakins D.E. et al.* The Elastic-Plastic Response of Aluminum Films to Ultrafast Laser-generated Shocks // Appl. Phys. 2011. V. 109. P. 013505.
3. *Crowhurst J.C., Armstrong M.R., Knight K.B. et al.* Invariance of the Dissipative Action at Ultrahigh Strain Rates above the Strong Shock Threshold // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 107. P. 144302.
4. *Demaske B.J., Zhakhovsky V.V., Inogamov N.A., Oleynik I.I.* Ultrashort Shock Waves in Nickel Induced by Femtosecond Laser Pulses // Phys. Rev. B. 2013. V. 87. P. 054109.
5. *Ashitkov S.I., Agranat M.B., Kanel G.I., Fortov V.E.* Approaching the Ultimate Shear and Tensile Strength of Aluminum in Experiments with Femtosecond Pulse Laser // AIP Conf. Proc. 2012. V. 1426. P. 1081.
6. *Ашитков С.И., Комаров П.С., Агранат М.Б. и др.* Реализация предельных значений объемной и сдвиговой прочности железа при воздействии фемтосекундными лазерными импульсами // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 98. С. 439.
7. *Crowhurst J.C., Reed B.W., Armstrong M.R. et al.* The $\alpha \rightarrow \epsilon$ Phase Transition in Iron at Strain Rates up to $\sim 10^9 \text{ s}^{-1}$ // J. Appl. Phys. 2014. V. 115. P. 113506.
8. *Ашитков С.И., Комаров П.С., Струлева Е.В., Агранат М.Б., Канель Г.И.* Механические и оптические свойства ванадия под действием ударных нагрузок пикосекундного диапазона // Письма в ЖЭТФ. 2015. Т. 101. С. 294.
9. *Струлева Е.В., Комаров П.С., Ашитков С.И.* Откольная прочность титана при высокоскоростном растяжении // ТВТ. 2020. Т. 58. № 5. С. 823.
10. *Альшиц В.И., Инденбом В.Л.* Динамическое торможение дислокаций // УФН. 1975. Т. 115. № 1. С. 3.
11. *Канель Г.И., Фортвов В.Е., Разоренов С.В.* Ударные волны в физике конденсированного состояния // УФН. 2007. Т. 177. № 8. С. 809.
12. *Mordike B., Ebert T.* Magnesium: Properties – Applications – Potential // Mater. Sci. Eng. A. 2001. V. 302. P. 37.
13. *Garkushin G.V., Kanel' G.I., Razorenov S.V.* High Strain Rate Deformation and Fracture of the Magnesium Alloy Mg-2-1 under Shock Wave Loading // Phys. Solid State. 2012. V. 54. P. 1079.
14. *Garkushin G.V., Kanel G.I., Razorenov S.V.* The Resistance to Deformation and Fracture of Magnesium Mg-2-1 under Shock-Wave Loading at 293 K and 823 K of the Temperature // AIP Conf. Proc. 2012. V. 1426. P. 935.
15. *Kanel G.I., Razorenov S.V., Bogatch A.A., Utkin A.V., Fortov V.E., Grady D.E.* Spall Fracture Properties of Aluminum and Magnesium at High Temperatures // J. Appl. Phys. 1996. V. 79. P. 8310.
16. *Ашитков С.И., Комаров П.С., Овчинников А.В., Струлева Е.В., Агранат М.Б.* Динамика деформации и откольная прочность алюминия при однократном воздействии фемтосекундного лазерного импульса // Квант. электроника. 2013. Т. 43. № 3. С. 242.
17. *Струлева Е.В., Комаров П.С., Ашитков С.И.* Интерферометрическая диагностика нанодеформаций поверхности мишени в пикосекундном диапазоне при импульсном лазерном воздействии // Вестн. ОИВТ РАН. 2018. Т. 1. № 1. С. 130.
18. *Geindre J.P., Audebert P., Rebibo S., Gauthier J.C.* Single-Shot Spectral Interferometry with Chirped Pulses // Opt. Lett. 2001. V. 26. P. 1612.
19. *Temnov V.V., Sokolovski-Tinten K., Zhou P., von der Linde D.* Ultrafast Imaging Interferometry at Femtosecond Laser-Excited Surfaces // J. Opt. Soc. Am. B. 2006. V. 23. P. 1954.
20. *Канель Г.И.* Искажение волновых профилей при отколе в упругопластическом теле // ПМТФ. 2001. Т. 42. № 2. С. 194.
21. *Antoun T., Seaman L., Curran D.R., Kanel G.I., Razorenov S.V., Utkin A.V.* Spall Fracture. N.Y.: Springer, 2003. P. 317.
22. *Kanel G.I., Garkushin G.V., Savinykh A.S., Razorenov S.V., de Resseguier T., Proud W.G., Tyutin M.R.* Shock Response of Magnesium Single Crystals at Normal and Elevated Temperatures // J. Appl. Phys. 2014. V. 116. P. 143504.
23. *Kanel' G.I.* Distortion of the Wave Profiles in an Elastoplastic Body upon Spalling // J. Appl. Mech. Tech. Phys. 2001. V. 42. № 2. P. 358.
24. *Renganathan P., Gupta Y.M.* Shock Compression/Release of Magnesium Single Crystals Along a Low-Symmetry Orientation: Role of Basal Slip // J. Appl. Phys. 2019. V. 126. P. 115902.
25. *Winey J.M., Renganathan P., Gupta Y.M.* Shock Wave Compression and Release of Hexagonal-close-packed Metal Single Crystals: Inelastic Deformation of C-Axis Magnesium // J. Appl. Phys. 2015. V. 117. № 10. P. 105903.

УДК 536.21

ВОЛНОВОЙ ТЕПЛОПЕРЕНОС В ТЕПЛОЗАЩИТНЫХ МАТЕРИАЛАХ С НЕЛИНЕЙНОЙ ЗАВИСИМОСТЬЮ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОГО ТИПА

© 2022 г. В. Ф. Формалев*, С. А. Колесник**

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

*E-mail: formalev38@yandex.ru

**E-mail: sergey@oviont.com

Поступило в редакцию 31.05.2022 г.

После доработки 16.06.2022 г.

Принято к публикации 13.10.2022 г.

Исследуется теплоперенос в полубесконечной прямой, теплопроводность которой экспоненциально зависит от температуры. Введение автомодельной подстановки сводит задачу теплопроводности к задаче нелинейного обыкновенного дифференциального уравнения. Ее решение показало волновой характер распространения теплоты в виде бегущих тепловых волн. Решение дает предельное время, при превышении которого тепловой поток “запирается” на определенном расстоянии от границы тела, несмотря на то что температура или тепловой поток на границе могут возрастать до бесконечности. Получена предельная глубина прогрева, при превышении которой расчетная область остается холодной (с начальной температурой).

DOI: 10.31857/S0040364422050039

ВВЕДЕНИЕ

Волновые явления теплопроводности характеризуют конечную скорость распространения теплоты вследствие следующих факторов: термодинамической неравновесности из-за отставания тепловых потоков от градиентов температуры на время релаксации [1–6], периодического нагрева изолированными тепловыми импульсами (тепловыми солитонами) [7, 8], зависимостью от температуры теплофизических характеристик (ТФХ) материалов расчетной области [9–12].

На фронтах тепловых волн наблюдаются разрывы температур, или тепловых потоков, или производных температурного распределения по пространственным переменным первого и выше первого порядков.

Так, при волновом теплопереносе за счет нелинейности ТФХ на фронтах тепловых волн наблюдается непрерывность температур и тепловых потоков, но градиенты температур и более старшие производные температур по пространственным переменным претерпевают разрывы первого рода [10].

В случае наличия релаксационных явлений температурные профили и тепловые потоки претерпевают разрывы первого рода на подвижных фронтах, причем амплитуды разрывов при продвижении в глубь расчетной области уменьшаются за счет диссипации тепловой энергии [5, 6].

В данной работе поставлена и аналитически решена задача о нагреве полубесконечной прямой, материал которой имеет нелинейную теплопроводность в виде экспоненциальной зависимости от температуры. Следствием такой зависимости теплопроводности от температуры является предельная глубина прогрева за ограниченное время, несмотря на неограниченный рост температуры или теплового потока на границе тела [9], что можно использовать для блокировки тепловых потоков в тепловой защите высокоскоростных летательных аппаратов.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И МЕТОД РЕШЕНИЯ

Рассматривается следующая задача теплопереноса в полубесконечной прямой:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[(\lambda_0 T(x, t) \exp(-kT(x, t))) \frac{\partial T}{\partial x} \right], \quad (1)$$

$$0 < x < \infty, \quad t > 0;$$

$$T(x, 0) = 0, \quad 0 \leq x < \infty, \quad t = 0; \quad (2)$$

$$T(0, t) = \varphi(t), \quad x = 0, \quad t > 0; \quad (3)$$

$$T(\infty, t) = 0, \quad \partial T(\infty, t) / \partial x = 0, \quad (4)$$

где λ_0 — теплопроводность при некоторой фиксированной температуре с размерностью в Вт/(м К²), c — теплоемкость, ρ — плотность, t — время, T — температура, k — коэффициент в 1/К.

Из выражения (1) ясно, что теплопроводность является существенно нелинейной функцией температуры

$$\lambda(T) = \lambda_0 T(x, t) \exp(-kT(x, t)),$$

значительно зависящей от коэффициента k .

Такая зависимость теплопроводности от температуры обнаружена в оксиде кобальта [13] и стехиометрической смеси германия и кремния $\text{Si}_c\text{Ge}_{1-c}$ с объемной долей кремния, равной c [14].

Для решения задачи (1)–(4) строим частное автомодельное решение, введя пространственно-временную переменную типа бегущей волны:

$$T(x, t) = f(\xi), \quad \xi = x - \alpha t, \quad (5)$$

где α – скорость возмущений в бегущей волне.

Подставляя (5) в (1)–(4) и учитывая равенства

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \xi}(-\alpha); \quad \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \xi},$$

получаем

$$-\alpha \frac{df}{d\xi} = \frac{d}{d\xi} \left(a_0 f(\xi) e^{-kf(\xi)} \frac{df}{d\xi} \right), \quad (6)$$

где $a_0 = \lambda_0 / (c\rho)$ – температуропроводность при некоторой постоянной температуре в $\text{м}^2 / (\text{с К})$; объемная теплоемкость $c\rho$ принимается постоянной.

Вычислив неопределенные интегралы от левой и правой частей равенства (6), приходим к равенству

$$-f(\xi)\alpha = a_0 f(\xi) e^{-kf(\xi)} \frac{df}{d\xi} + C_1. \quad (7)$$

Из начального условия (2) следует, что при $t = 0$ и $0 \leq x < \infty$ $\xi|_{t=0, x=0} = x - \alpha t = 0$, $f(0) \equiv 0$ и $df(0)/d\xi = 0$, т.е. $C_1 = 0$. Тогда из (7) следует равенство

$$e^{-kf(\xi)} \frac{df}{d\xi} = -\frac{\alpha}{a_0}. \quad (8)$$

Интегрируя (8) по ξ от $\xi = 0$ до ξ и учитывая, что

$$\int_0^\xi e^{-kf(\xi)} \frac{df}{d\xi} d\xi = \int_0^{f(\xi)} e^{-kf(\xi)} df(\xi) = -\frac{1}{k} [e^{-kf(\xi)} - 1],$$

получаем

$$-\frac{1}{k} (e^{-kf(\xi)} - 1) = -\frac{\alpha}{a_0} \xi,$$

или, используя подстановку (5), выражение

$$-kf(\xi) = \ln \left[1 + \frac{k\alpha}{a_0} (x - \alpha t) \right], \quad (9)$$

из которого в соответствии с (5) находим

$$T(x, t) = -\frac{1}{k} \ln \left[1 - \frac{k\alpha}{a_0} (\alpha t - x) \right]. \quad (10)$$

Из равенства (10) следует, что подлогарифмическое выражение внутри квадратных скобок должно быть больше нуля и меньше единицы, т.е. значение логарифма должно быть отрицательным. Отсюда же следует, что при $\alpha t - x < 0$ значения $T(x, t)$ отрицательны, что неприемлемо. Поэтому $\alpha t - x \geq 0$, т.е. $\xi = x - \alpha t \leq 0$.

Решению (10) должна удовлетворять следующая функция $\varphi(t)$ в граничном условии (3) при $x = 0$:

$$\varphi(t) = -\frac{1}{k} \ln \left(1 - \frac{k\alpha^2}{a_0} t \right),$$

т.е.

$$T(0, t) = -\frac{1}{k} \ln \left(1 - \frac{k\alpha^2}{a_0} t \right). \quad (11)$$

Из выражения (11) следует, что при максимальном значении времени, равном

$$t_{\max} = \frac{a_0}{k\alpha^2}, \quad (12)$$

граничное значение температуры $T(0, t)$ должно стремиться к бесконечности.

С другой стороны, при $\alpha t - x = 0$ из (9) следует равенство

$$T(x, t) = 0.$$

Поэтому при $\alpha t_{\max} - x_{\max} = 0$, используя равенство (12), получаем

$$x_{\max} = \alpha \frac{a_0}{k\alpha^2} = \frac{a_0}{k\alpha}.$$

Вводя обозначение $x_{\max} = l$, находим максимальную глубину прогрева l , когда $t \rightarrow t_{\max} = \frac{a_0}{k\alpha^2}$, а граничное значение температуры $T(0, t)$ при этом стремится к бесконечности

$$x_{\max} = l = \frac{a_0}{k\alpha}$$

и

$$T(0, t)|_{t \rightarrow t_{\max}} \rightarrow \frac{1}{k} \ln \left(1 - \frac{k\alpha^2}{a_0} t_{\max} \right).$$

Итак, получено следующее решение задачи (1)–(4):

$$T(x, t) = \begin{cases} -\frac{1}{k} \ln \left[1 - \frac{k\alpha}{a_0} (\alpha t - x) \right], & 0 \leq x \leq \alpha t \leq \alpha t_{\max} = \frac{a_0}{k\alpha} = l; \\ 0, & x > a_0/k\alpha. \end{cases} \quad (13)$$

Из (13) следует, что, несмотря на то что на границе $x = 0$ значение $T(0, t)$ возрастает неограниченно при $t \rightarrow t_{\max} - \varepsilon$, где ε – бесконечно малое время, температурные возмущения проникают лишь на ограниченную глубину $l = \alpha t_{\max} = \alpha \frac{a_0}{k\alpha^2} = \frac{a_0}{k\alpha}$.

Таким образом, из выражения (13) следует волновой характер распределения температур в средах с нелинейной зависимостью ТФХ от температуры с фронтами $x_{\phi} = \alpha t$.

Из выражения (13) следует также, что при $T(x, t) = 0$ имеет место непрерывность температур $T(x - \varepsilon, t) = T(x + \varepsilon, t)$ при $\varepsilon \rightarrow 0$ и разрыв производной $\frac{\partial T(x - \varepsilon, t)}{\partial x} < 0, \frac{\partial T(x + \varepsilon, t)}{\partial x} = 0$, так как $T(x, t) \equiv 0$ при $x > \alpha t$. Тепловой же поток $\lambda_0 T(x, t) e^{-kT(x, t)} \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=\alpha t} = 0$ и, следовательно, непрерывен в точках фронта $x_{\phi} = \alpha t$.

На рис. 1 и 2 приведены результаты расчетов температурных полей в полубесконечной прямой при следующих входных данных: $k = 10^{-3}$ 1/К (рис. 1) и $k = 2 \times 10^{-3}$ (рис. 2), $\alpha = 10^{-3} \frac{м}{с}$, $a_0 = 10^{-6} \frac{м^2}{с \cdot К}$.

Видны предельные зависимости температур от пространственной переменной x (жирные кривые), ограничивающие прогрев по пространственной переменной в момент времени $t = t_{\max}$, хотя граничное значение температуры беспредельно возрастает, т.е. имеет место “запирание” тепловых потоков и температурных полей. При этом максимальное значение пространственной переменной, после которого температура становится равной начальной температуре, равно значению $x_{\max} = l = a_0/(k\alpha)$.

Рисунки показывают существенную зависимость температурного поля от коэффициента k . Так, при $k = 10^{-3}$ 1/К максимальное значение температуры в точке $x = 0.1$ м составляет $T_{\max} = 2300$ К, а при $k = 2 \times 10^{-3}$ $T_{\max} = 800$, т.е. с ростом k температура падает.

Таким образом, материалы с теплопроводностью в форме (5) можно использовать в качестве тепловой защиты перспективных гиперзвуковых летательных аппаратов планирующего типа, функционирующих длительное время в плотных слоях атмосферы. Подобные подходы можно также использовать при исследовании термостойкости композиционных материалов на основе керамики [15–20].

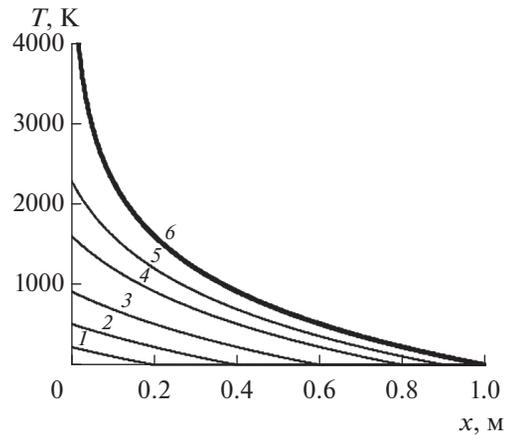


Рис. 1. Распределения температур по пространственной переменной для $k = 10^{-3}$ 1/К: 1 – $t = 200$ с, 2 – 400, 3 – 600, 4 – 800, 5 – 900, 6 – 1000.

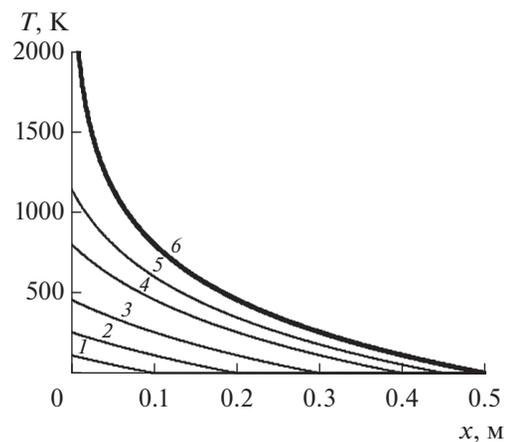


Рис. 2. Распределения температур по пространственной переменной при $k = 2 \times 10^{-3}$ 1/К: 1 – $t = 100$ с, 2 – 200, 3 – 300, 4 – 400, 5 – 450, 6 – 500.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Поставлена и аналитически решена задача о теплопереносе в нелинейной полубесконечной прямой с нелинейной зависимостью теплопроводности от температуры экспоненциального вида. Полученное решение типа бегущей волны характеризует волновой теплоперенос, возникающий вследствие специального вида зависимости теплопроводности от температуры.

Несмотря на то, что граничное значение температуры стремится к бесконечности при некотором ограниченном значении времени, температурные возмущения проникают на ограниченную глубину с предельным температурным профилем по пространству. Возникает процесс “запирания” тепловых потоков предельной зависимостью температуры от пространственной переменной при

предельном времени прогрева. После предельного профиля температуры с ярко выраженным фронтом тепловой волны, на котором непрерывны температуры и тепловые потоки, устанавливается начальное значение температуры.

Материалы с экспоненциальной зависимостью теплопроводности от температуры можно рекомендовать для тепловой защиты перспективных гиперзвуковых летательных аппаратов с длительным временем полета в плотных слоях атмосферы.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Соболев С.Л.* Процессы переноса и бегущие волны в локально-неравновесных системах // УФН. 1991. Т. 161. № 3. С. 5.
2. *Карташов Э.М.* Аналитические решения гиперболических моделей переноса // ИФЖ. 2014. Т. 87. № 5. С. 1072.
3. *Карташов Э.М.* Математические модели теплопроводности с двухфазным запаздыванием // ИФЖ. 2016. Т. 89. № 2. С. 338.
4. *Шашков А.Г., Бубнов А.В., Яновский С.Ю.* Волновые явления теплопроводности. М.: URSS, 2004. 216 с.
5. *Формалев В.Ф.* О тепловых ударных волнах в нелинейных средах // ТВТ. 2012. Т. 50. № 6. С. 799.
6. *Формалев В.Ф., Карташов Э.М., Колесник С.А.* Волновой теплоперенос в анизотропном полупространстве под действием точечного источника теплоты экспоненциального характера на основе волнового уравнения параболического типа // ИФЖ. 2022. Т. 95. № 2. С. 373.
7. *Формалев В.Ф., Колесник С.А.* О тепловых солитонах при волновом теплопереносе в ограниченных областях // ТВТ. 2019. Т. 57. № 4. С. 543.
8. *Формалев В.Ф., Карташов Э.М., Колесник С.А.* О динамике движения и отражения температурных солитонов при волновом теплопереносе // ИФЖ. 2020. Т. 93. № 1. С. 11.
9. *Самарский А.А., Галактионов В.А., Курдюмов В.А., Михайлов А.П.* Режимы с обострением в задачах для квазилинейных параболических уравнений. М.: Наука, 1987. 480 с.
10. *Формалев В.Ф., Рабинский Л.Н.* Волновой теплоперенос в анизотропном пространстве с нелинейными характеристиками // ТВТ. 2014. Т. 52. № 5. С. 704.
11. *Кузенов В.В., Рыжков С.В.* Численное моделирование взаимодействия мишени магнитно-инерциального термоядерного синтеза с плазменным и лазерным драйверами // ТВТ. 2021. Т. 59. № 4. С. 492.
12. *Ryzhkov S.V., Kuzenov V.V.* Analysis of the Ideal Gas Flow Over Body of Basic Geometrical Shape // Int. J. Heat Mass Transfer. 2019. V. 132. P. 587.
13. *Kobayashi W., Teraoka Y., Terasaki I.* An Oxide Thermal Rectifier // Appl. Phys. Lett. 2009. V. 95. № 17. 171905.
14. *Rogolino P., Cimmeli V.A.* Fitting Thermal Conductivity and Optimizing Thermoelectric Efficiency in $\text{Si}_c\text{Ge}_{1-c}$ Nanowires // Mathematics and Computers in Simulation. 2020. V. 176. P. 279.
15. *Булычев Н.А.* Получение наноразмерных материалов в плазменных разрядах и ультразвуковой кавитации // ТВТ. 2021. Т. 59. № 4. С. 600.
16. *Булычев Н.А., Иони Ю.В., Димитриева С.Е., Чеботарев С.Н., Рабинский Л.Н.* Плазмохимический синтез наноразмерных бактерицидных частиц под действием ультразвуковой кавитации // ТВТ. 2021. Т. 59. № 5. С. 770.
17. *Butusova O.A.* Surface Modification of Titanium Dioxide Microparticles under Ultrasonic Treatment // Int. J. Pharmaceutical Res. 2020. V. 12. № 4. P. 2292.
18. *Butusova O.A.* Adsorption Behaviour of Ethylhydroxyethyl Cellulose on the Surface of Microparticles of Titanium and Ferrous Oxides // Int. J. Pharmaceutical Res. 2020. V. 12. Suppl. № 2. P. 1156.
19. *Bulychev N.A.* Preparation of Stable Suspensions of ZnO Nanoparticles with Ultrasonically Assisted Low-Temperature Plasma // Nanosci. Technol.: Int. J. 2021. V. 12. № 3. P. 91.
20. *Bulychev N.A.* Study of Interaction of Surface-active Polymers with ZnO Nanoparticles Synthesized in Ultrasonically Assisted Plasma Discharge // Nanosci. Technol.: Int. J. 2022. V. 13. № 1. P. 55.