

3-Молекулярная физика, физика жидкостей и газов

Андбаева Валентина Николаевна, магистрант 1 года
Уральский Государственный Университет, Институт теплофизики УрО РАН, физический
Измерение капиллярной постоянной и поверхностного натяжения жидких криогенных растворов
Научный руководитель: Каверин Алексей Михайлович, к.ф.-м.н.
E-mail: andbaeva@itp.uran.ru стр. 144

Береснева Екатерина Николаевна, м.н.с.
Пермский Государственный Университет, физический
Волновые режимы конвекции в наклонном слое магнитной жидкости
Научный руководитель: Путин Геннадий Федорович, д.ф.-м.н.
E-mail: beresneva_katy@mail.ru стр. 145

Ванцов Андрей Викторович, аспирант 1 года
Рязанская Государственная Сельскохозяйственная Академия, инженерный
Определение цетанового числа дизельного топлива
Научный руководитель: Пашенко Василий Михайлович, д.б.н.
E-mail: phisik@mail.ryazan.ru стр. 147

Власов Александр Сергеевич, аспирант
Уральский Государственный Университет, физический
Экспериментальное исследование энергообмена ионизированного газа с поверхностью
Научный руководитель: Борисов Сергей Федорович, д.ф.-м.н.
E-mail: vlasov-a@yandex.ru стр. 148

Галиева Ляйсан Наиловна, магистрант 1 года
Башкирский Государственный Университет, физический
Изучение особенностей нагрева термовязких углеводородных жидкостей
Научный руководитель: Ковалева Лиана Ароновна, д.т.н.
E-mail: Lyaيسانochka@rambler.ru стр. 149

Галимзянов Марат Назиповчи, н.с.
Институт Механики УрО РАН,
Распространение волн давления в пузырьковой жидкости
Научный руководитель: Шагапов Владик Шайхулагамович, д.ф.-м.н.
E-mail: monk@email.ru стр. 150

Давлетбаев Альфред Ядгарович, 5 курс
Башкирский Государственный Университет, физический
О некоторых численных реализациях уравнения теплопереноса
Научный руководитель: Ковалева Лиана Ароновна, д.т.н.
E-mail: codehope@yandex.ru стр. 151

Дашкевич Сергей Александрович, 6 курс
Уральский Государственный Технический Университет (УПИ), физико-технический
Распределение газодинамических параметров в прямоугольном канале конечных размеров (метод потоков)
Научный руководитель: Породнов Борис Трифонович, д.ф.-м.н.
E-mail: xtremal@mail.ru стр. 152

Ершов Иван Николаевич, аспирант
Новосибирский Государственный Университет, физический
Экспериментальное исследование межфазного массообмена при всплытии одиночного снаряда в прямоугольных каналах малого сечения
Научный руководитель: Кузнецов Владимир Васильевич, д.ф.-м.н.
E-mail: drugy@ngs.ru стр. 153

Желонкин Дмитрий Александрович, 6 курс
Уральский Государственный Технический Университет (УПИ), физико-технический
Динамика разреженного газа
Научный руководитель: Породнов Борис Трифонович, д.ф.-м.н.
E-mail: zhelonkin@bk.ru стр. 153

Заварыкина Мария Михайловна, инженер
Пермский Государственный Университет, физический
Экспериментальное исследование движения шаров во вращающейся жидкости
Научный руководитель: Макарихин Игорь Юрьевич, к.ф.-м.н.
E-mail: zavar@psu.ru стр. 154

Ильин Владимир Алексеевич, аспирант 3 года
Пермский Государственный Университет, физический
Электроконвекция слабопроводящей жидкости в модулированном электрическом поле при наличии инжекции заряда
Научный руководитель: Смородин Борис Леонидович, д.ф.-м.н.
E-mail: ilin1@psu.ru стр. 156

Кирюшин Иван Александрович, 5 курс
Уральский Государственный Технический Университет (УПИ), физико-технический
Распределение параметров газового потока при внутреннем и внешнем течении (SPH-метод)
Научный руководитель: Породнов Борис Трифионович, д.ф.-м.н.
E-mail: kia@sky.ru стр. 156

Козлов Александр Алексеевич, аспирант
Пермский Государственный Университет, физический
Режимы конвекции в трехосном эллипсоиде
Научный руководитель: Путин Геннадий Федорович, д.ф.-м.н.
E-mail: a_kozlov@freemail.ru стр. 158

Куркин Степан Георгиевич, 5 курс
Новосибирский Государственный Технический Университет, Радиотехники, электроники и физики
Перенос заряда в кремниевых туннельных структурах с участием электронных состояний, локализованных на границе раздела
Научный руководитель: Камаев Геннадий Николаевич, к.ф.-м.н.
E-mail: zubzub@ngs.ru стр. 159

Лаврищева Евгения Игоревна, аспирант
Казахский Национальный Университет, физический
Численное исследование влияния избытка воздуха в камере сгорания на процесс горения высокозольного пылеугольного топлива
Научный руководитель: Аскарлова Адия Сандыбаевна, д.ф.-м.н.
E-mail: ljanr@kazsu.kz стр. 160

Ломов Иван Викторович, аспирант
Томский Политехнический Университет, физико-технический
Селективное возбуждение вращательно - поступательного движения сольватированных аквакомплексов асимметричным полем высокой частоты
Научный руководитель: Шаманин Игорь Владимирович, д.ф.-м.н.
E-mail: lomov@phtd.tpu.ru стр. 161

Лукашов Сергей Сергеевич, аспирант 1 года
Санкт-Петербургский Государственный Университет, физический
Исследование фрагментации 3,4-диметоксипропиофенона
Научный руководитель: Акопян Михаил Евгеньевич, д.ф.-м.н.
E-mail: luks@photonics.phys.spbu.ru стр. 162

Мальханова Ольга Геннадьевна, аспирант
Институт Металлургии УрО РАН, лаборатория математического моделирования
Расчет структурных факторов жидких металлов в рамках модели прямоугольной ямы
E-mail: m_o_l_a@mail.ru стр. 164

Менделев Валентин Сергеевич, 5 курс
Уральский Государственный Университет, математико-механический
Цепочечные агрегаты в магнитных жидкостях, помещенных во внешнее однородное магнитное поле произвольной напряженности
Научный руководитель: Иванов Алексей Олегович, д.ф.-м.н.
E-mail: vm@apiural.ru стр. 164

Назарова Анастасия Сергеевна, аспирант
Уральский Государственный Технический Университет (УПИ), физико-технический
Поведение производства энтропии вблизи стационарного состояния. Задача теплопереноса в стержне
Научный руководитель: Мартюшев Леонид Михайлович, к.ф.-м.н.
E-mail: nasarovaas@ekat.ru стр. 165

Обанин Виктор Вячеславович, 4 курс
Новосибирский Государственный Университет, физический
Экспериментальные исследования течений нанодисперсных порошков
Научный руководитель: Бардаханов С.П., д.ф.-м.н.
E-mail: bard@itam.nsc.ru стр. 167

Романчук Алексей Петрович, аспирант
Уральский Государственный Университет, математико-механический
Фазовые переходы в магнито-реологических суспензиях
Научный руководитель: Зубарев Андрей Юрьевич, д.ф.-м.н.
E-mail: alexr@kazna.ru стр. 168

Сачков Виктор Иванович, с.н.с.
Сибирский Физико-Технический Институт, отдел электроники
Термодинамика молекулярно-кинетических процессов в системе селективно возбужденных молекул
Научный руководитель: Сачков В.И., к.х.н.
E-mail: vicsachkov@mail2000.ru стр. 169

Семёнов Андрей Борисович, аспирант
Институт Теоретической и Прикладной Механики СО РАН, лаборатория аэрофизических исследований
Особенности возникновения резонансных явлений при различной форме плохобтекаемых тел
Научный руководитель: Бардаханов Сергей Прокопьевич, д.ф.-м.н.
E-mail: semenov@itam.nsc.ru стр. 171

Стерхова Ирина Валентиновна, 5 курс
Удмуртский Государственный Университет, физический
Исследование процессов кристаллизации объемно - аморфизуемого сплава Fe₅₀Mo₁₄Cr₁₅C₁₅B₆.
Научный руководитель: Ладьянов В. И., д.ф.-м.н.
E-mail: las@pti.udm.ru стр. 171

Судаков Иван Алексеевич, 3 курс
Уральский Государственный Университет, физический
Каталитические реакции атмосферных газов на теплозащитных поверхностях в условиях слабой ионизации
Научный руководитель: Борисов Сергей Федорович, д.ф.-м.н.
E-mail: physicsivan@mail.ru стр. 172

Табачков Олег Васильевич, аспирант 2 года
Рязанская Государственная Сельскохозяйственная Академия, инженерный
Определение октанового числа автомобильных бензинов УЗ - методом.
Научный руководитель: Пашенко Василий Михайлович, д.б.н.
E-mail: phisik@mail.ryazan.ru стр. 173

Хуснутдинов Рамиль Миннегазович, аспирант 1 года
Эффекты статистической памяти в жидкостях и в стеклах.
E-mail: khrm@mail.ru стр. 174

Хуснутдинов Рамиль Миннегазович, аспирант 1 года
Казанский Государственный Педагогический Университет, физический
Численное моделирование переохлажденных леннард-джонсовских жидкостей методом молекулярной динамики.
Научный руководитель: Юльметьев Ренат Музипович, д.ф.-м.н.
E-mail: khrm@mail.ru стр. 175

Шестаков Максим Владимирович, 6 курс
Новосибирский Государственный Университет, физический
Гидродинамические характеристики турбулентной струи в узком зазоре
Научный руководитель: Маркович Дмитрий Маркович, д.ф.-м.н.
E-mail: maximuss@gorodok.net стр. 177

Измерение капиллярной постоянной и поверхностного натяжения жидких криогенных растворов

Андрева Валентина Николаевна

Институт теплофизики УрО РАН, Уральский Государственный Университет

Каверин Алексей Михайлович, к.ф.-м.н.

andbaeva@itp.uran.ru

Несмотря на активное использование криогенных растворов в различных областях науки и техники, многие свойства таких растворов всё ещё остаются неисследованными. К числу таких свойств можно отнести поверхностное натяжение, знание которого необходимо для разработки криогенной аппаратуры, при анализе процессов испарения и конденсации, плавления и кристаллизации, оно также составляет неотъемлемую часть многих природных и технологических процессов.

Представленная работа выполнена в Институте теплофизики Уральского отделения РАН в лаборатории энергетики и криогеники и посвящена измерению капиллярной постоянной и определению поверхностного натяжения жидких криогенных растворов: азот – кислород, относящийся к растворам с полной взаимной растворимостью компонентов, неон – аргон и гелий – аргон, относящихся к газонасыщенным растворам. В литературе данные о поверхностном натяжении указанных растворов относятся к области низких температур [1]. В нашей работе исследуемый температурный интервал расширяется в область более высоких температур (до 140 К).

Измерения капиллярной постоянной проведены дифференциальным вариантом метода капиллярного поднятия [2]. В опытах использовалась сборка из трёх капилляров с внутренними радиусами $r_1=0,6393$ мм, $r_2=0,2297$ мм, $r_3=0,0967$ мм. Для проведения опытов использовались газы высокой чистоты. Паспортная чистота кислорода составляла 99,999%, азота - 99,999%, гелия - 99,99%, неона - 99,89%, аргона - 99,998%.

По экспериментальным данным капиллярной постоянной рассчитывалось поверхностное натяжение [2]

$$\sigma = \frac{1}{2} g a^2 (\rho_l - \rho_g) , \quad (1)$$

где $g=9,8162$ м/с² – ускорение свободного падения в месте проведения эксперимента, a^2 – капиллярная постоянная, ρ_l и ρ_g – ортобарические плотности жидкой и газовой фаз, соответственно. Как видно из формулы (1), для определения поверхностного натяжения необходимо знать разность плотностей между жидкой и газовой фазами. Для раствора азот – кислород эта разность находилась по уравнению состояния Леммона и др. [3]. Для растворов неон – аргон и гелий – аргон плотности жидкой и газовой фаз находились следующим образом [1]. Молярный объём жидкой фазы предполагался равным его значению для чистого растворителя при данном давлении и по молекулярному весу раствора $\mu_l = \mu_1 x_1 + \mu_2 x_2$ вычислялась плотность жидкости. Здесь μ_1 и μ_2 – молекулярный вес аргона и неона (гелия), x_1 и x_2 – концентрация аргона и неона (гелия), соответственно. Плотность газовой фазы вычислялась по уравнению состояния $p = (\rho_g / \mu_g) RT (1 + B^* \rho_g)$ с использованием вторых вириальных коэффициентов B . В данном уравнении B^* связан со вторым вириальным коэффициентом B соотношением $B^* = B / \mu_g$, где $\mu_g = \mu_1 x_1 + \mu_2 x_2$. Здесь x_1 и x_2 – концентрация аргона и неона (гелия) в газовой фазе, соответственно. Вторые вириальные коэффициенты рассчитывались по следующей формуле [4]

$$B = \frac{RT_c}{p_c} (B_0 + \omega B_1) , \quad (2)$$

где R – универсальная газовая постоянная, T_c – критическая температура раствора, p_c – критическое давление раствора, ω – ацентрический коэффициент. Коэффициенты B_0 и B_1 получены эмпирически Питцером в следующем виде [4]

$$B_0 = 0.1445 - \frac{0.33}{T_r} - \frac{0.1385}{T_r^2} - \frac{0.0121}{T_r^3} , \quad (3)$$

$$B_1 = 0.073 + \frac{0.46}{T_r} - \frac{0.5}{T_r^2} - \frac{0.097}{T_r^3} - \frac{0.0073}{T_r^8} , \quad (4)$$

где $T_r = T / T_c$ – приведённая температура.

Опыты с раствором азот – кислород проведены в интервале температур 100-132 К, с раствором неон – аргон - 110,78-140 К, с раствором гелий – аргон - 108-140 К. Давление в опытах не превышало 4 МПа. В результате опытов с раствором азот – кислород показано, что зависимость поверхностного натяжения от концентрации раствора в интервале температур 120-132 К в пределах погрешности эксперимента может быть аппроксимирована линейной функцией. При более низких температурах наблюдается слабое отклонение от линейности. В опытах с газонасыщенными растворами концентрация гелия не превышала 1,5%, неона – 4,1%. Добавление неона или гелия в раствор всегда приводит к понижению капиллярной постоянной и уменьшению поверхностного натяжения. Барические зависимости капиллярной постоянной газонасыщенных

растворов и зависимости поверхностного натяжения от концентрации растворов хорошо аппроксимируются линейными функциями. Результаты опытов с раствором неон – аргон представлены на рис.1(а) в виде зависимости поверхностного натяжения от концентрации неона, с раствором гелий аргон – на рис.1(б) в барической зависимости капиллярной постоянной.

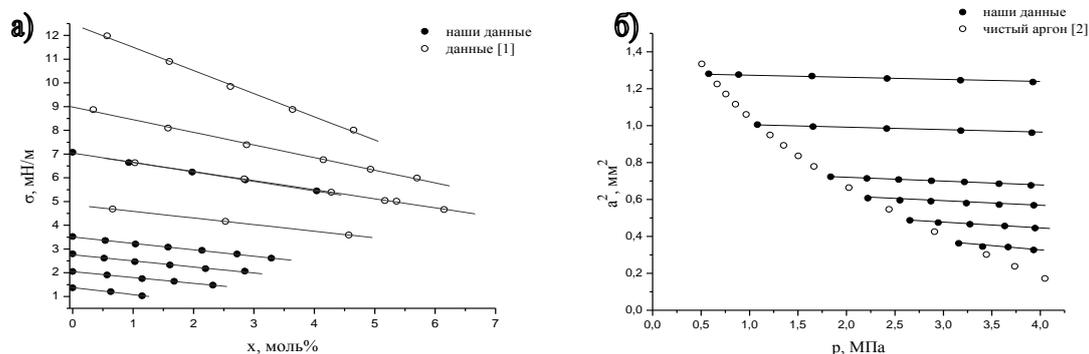


Рис.1. а) Поверхностное натяжение раствора неон – аргон при различных температурах (линии сверху вниз): $T=87,42; 101,92; 110,78; 121,36; 128; 132; 136; 140$ К. б) Барическая зависимость капиллярной постоянной раствора гелий – аргон при различных температурах (линии сверху вниз): $T=108; 118; 128; 132; 136; 140$ К. Светлые кружки показана капиллярная постоянная чистого аргона на линии насыщения.

Ввиду малой растворимости гелия и неона в криогенных жидкостях вблизи линии фазового равновесия растворителя можно записать следующую зависимость поверхностного натяжения от температуры и концентрации неона (гелия) в аргоне

$$\sigma = \sigma_0 + (b_0 + b_1\tau + b_2\tau^2)x, \quad (5)$$

где σ_0 – поверхностное натяжение чистого аргона на линии насыщения, мН/м, x – концентрация неона (гелия), моль%, b_0, b_1, b_2 – эмпирические коэффициенты, полученные методом наименьших квадратов, $\tau = T/T_{cAr}$ – приведённая температура, $T_{cAr} = 150,687$ К – критическая температура аргона, К. Для раствора неон – аргон $b_0 = -7,206792$ мН/(м·моль%), $b_1 = 16,18407$ мН/(м·моль%), $b_2 = -9,423722$ мН/(м·моль%). Для раствора гелий – аргон $b_0 = -14,68541$ мН/(м·моль%), $b_1 = 33,40048$ мН/(м·моль%), $b_2 = -19,32739$ мН/(м·моль%).

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ № НШ – 905.2003.2 и интеграционного проекта УрО – ДВО РАН “Акустическая кавитация в метастабильных жидкостях”.

Список публикаций:

- [1] Благой Ю.П. Исследование термодинамических свойств ожиженных газов и их растворов. Дисс. ...докт. физ. – мат. наук. Харьков (1970).
- [2] Байдаков В.Г. Межфазная граница простых классических и квантовых жидкостей. Екатеринбург, УИФ “Наука” (1994).
- [3] Lemton E.W., Jacobsen R.T., Renoncello S.G., Friend D.G. // J. Phys. Chem. Ref. Data. 29, №3, 331-362 (2000).
- [4] Уэйлес С. Фазовые равновесия в химической технологии: В 2-х частях. М.: Мир (1989).

Волновые режимы конвекции в наклонном слое магнитной жидкости

Береснева Екатерина Николаевна

Божко Александра Александровна

Пермский Государственный Университет

Путин Геннадий Фёдорович, д.ф.-м.н.

beresneva_katy@mail.ru

При изучении тепловой конвекции в ряде жидкостных и газовых систем в непосредственной близости от порога неустойчивости механического равновесия зафиксировано нерегулярное поведение надкритических конвективных движений, получившее название пространственно-временного хаоса вблизи порога конвекции [1-4].

В данной работе проводилось экспериментальное исследование конвективной неустойчивости и теплопереноса, а также пространственно-временных структур в наклонном слое магнитной жидкости вблизи порога неустойчивости, проведение подробного систематического анализа в широком диапазоне управляющего параметра, такого как угол наклона слоя по отношению к горизонту. При этом разность температур, необходимая для возбуждения течения в опытах с постепенным увеличением ΔT , меняется в широких пределах в зависимости от предыстории эксперимента. Опыты проводились с коллоидным раствором магнетита в керосине, стабилизированный олеиновой кислотой, имевший концентрацию твердой фазы 10 %, плотность $\rho = 1.25 \cdot 10^3$ кг/м³, вязкость $\eta = 0,006$ кг/м·с, намагниченность насыщения $M_S = 55$ кА/м, средний

размер частиц 10 мкм. В экспериментах использовалась измерительная ячейка высотой $h = 3,50 \pm 0,03$ мм и диаметром 75 мм, ограниченная с одной из широких сторон медным теплообменником, а с другой – плексигласовым. К прозрачному теплообменнику со стороны, обращенной к исследуемой жидкости, приклеивалась термочувствительная жидкокристаллическая пленка, меняющая окраску в диапазоне $24^\circ - 27^\circ \text{C}$. Структура течения снималась на цифровую видеокамеру.

Было показано, что при отклонении слоя от горизонтального положения, механическое равновесие в неизотермической жидкости делается невозможным, и возникает течение, при котором жидкость всплывает вдоль нагретой и опускается вдоль охлажденной стенок. При значениях критерия Прандтля $Pr > 0,24$, что подробно описано в работах [5]. В таких условиях подогрева по мере превышения определенной разности температур, зависящей от угла наклона, на фоне основного подъемно-опускного течения развивается движение рэлеевской природы. Рэлеевская составляющая имеет вид одноэтажной системы конвективных валов, оси которых вытянуты в направлении первичного потока. В поведении этих вытянутых по потоку роллов могут быть выделены три основных типа структур: зигзаговые и прямые валы с дислокациями, а также “ограниченные” (confined) и “мерцающие” (blinking) состояния.

Режим “zipper state” [3], получен при $\alpha = 5^\circ$, в котором конвективные валы становятся неустойчивыми вследствие поперечно-валиковой неустойчивости и распадаются на отдельные конвективные ячейки. Поперечная – валиковая неустойчивость при $\alpha = 10^\circ$ носила локальный характер: разрушение валов происходило лишь в отдельных частях кюветы, а не по всему полю. Так продольные валы сначала модулируются по фазе, а затем в некоторых местах появлялись поперечные перемычки. Модулированные валы характерны для режима при $\alpha = 15^\circ$ (обсуждаемый режим принципиально отличается от “мерцающего” состояния). Здесь общее число валов также осциллирует со временем; валы не участвующие в перестройках, образуют модулированную бегущую волну. Так называемые “ограниченные” состояния – конвективные режимы, в которых модуляция валов оказывается настолько глубокой, что в некоторой части поля кюветы рэлеевская конвекция на какое-то время почти полностью, угасает, наиболее отчетливо проявляются при значениях параметров $\alpha = 10^\circ$, $\alpha = 15^\circ$, $\alpha = 45^\circ$. Ранее подобное квазипериодическое движение фронта рэлеевской конвекции от одного края кюветы к другому и обратно было зафиксировано в экспериментах [6] с горизонтальным слоем магнитной жидкости, помещенным в продольное магнитное поле; однако для возбуждения таких волн приходилось вносить в эту систему возмущения конечной амплитуды, и после 2–3 повторений крупномасштабные перемещения фронта конвекции затухали. В наклонном слое магнитной жидкости такие режимы возникают самопроизвольно, не угасают на протяжении всего опыта и сопровождаются несколькими десятками циклов затухания и появления валиковой конвекции. По мере увеличения наклона полости $\alpha = 45^\circ$, $\alpha = 55^\circ$ – протяженность краевых возмущенных по температуре зон значительно возрастает; в вертикально ориентированной полости ($\alpha = 90^\circ$) их высота достигает половины радиуса кюветы. Рассмотрены режимы при $\alpha = 55^\circ$ модулированных бегущих волн, которые могут быть классифицированы как “мерцающие состояния” [3]. Отличительной чертой таких режимов является нерегулярное изменение не только амплитуды, но и пространственного периода рэлеевских конвективных валов. При больших перепадах температуры ΔT охват значительных участков поля кюветы “ограниченными” состояниями прекращаются, и определяющим механизмом нестационарного поведения рэлеевской составляющей становится движение конвективных валов и дефектов.

Неоднородность намагниченности может быть обусловлена двумя факторами – неизотермичностью жидкости и неравномерным распределением частиц магнитной фазы по объему. В большинстве публикаций, как теоретических, так и экспериментальных, касающихся конвекции в ферроколлоидах, концентрация магнитных частиц считается однородной, и принимаются во внимание только термогравитационный и термомагнитный механизмы возбуждения течений. Вместе с тем, относительно малые градиенты концентрации магнитных частиц, образующиеся в первоначально однородном ферроколлоиде вследствие гравитационной седиментации, оказывают существенное влияние на конвекцию в таких средах. Это влияние проявляется, в основном, через концентрационно-гравитационный и концентрационно-магнитный механизмы, а конвективные течения носят колебательный и волновой характер.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований № 04 01 00586

Список публикаций:

- [1]..Ahlers G., Canell D.S. et al. *The spatio-temporal structure of spiral-defect chaos*// *Physica D*. 1996. V. 97. P. 164 - 179.
- [2].Bestehorn M., Friedrich R., Haken H. *Pattern formation in convective instabilities*// *Int. J. Modern Phys. B*. 1990. V. 4. N 3. P. 365 - 400.
- [3].Гетлинг А.В. *Формирование пространственных структур конвекции Рэлея-Бенара*//*УФН*. 1991.Т.161, N 9. С. 1-79.
- [4].Steinberg V., Kuznetsov E. et al. *Burst and collapse in travelling-wave convection of a binary fluid*// *Phys. Rev. E*. 1994. V. 50. N 5. P. 712 - 722.
- [5].Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М., Непомнящий А.А. *Устойчивость конвективных течений*. М.: Наука, 1989. 320 с.
- [6].Божко А.А., Пилюгина Т.В., Путин Г.Ф., Шупеник Д.В. *Нерегулярные режимы конвекции в ферроколлоиде. Сб. “Устойчивость течений гомогенных и гетерогенных жидкостей”, вып. 2. Новосибирский архитектурно-строительный университет. Новосибирск, 1998, с. 133 – 138.*

Определение цетанового числа дизельного топлива

Ванцов Андрей Викторович

Баландин Василий Николаевич.

Рязанская Государственная Сельскохозяйственная Академия

Пащенко Василий Михайлович, д.б.н.; Ванцов В.И., к.т.н.

phisik@mail.ryazan.ru

В двигателе с воспламенением от сжатия топливо самовоспламеняется в воздухе, сильно нагретом за счет сжатия, а смесеобразование осуществляется непосредственно в камере сгорания и к началу воспламенения не заканчивается, а развивается одновременно с горением.

Физико-химические преобразования рабочей смеси в дизеле представляют собой единый непрерывный процесс, в котором условно выделяют четыре основных фазы. Первая начинается с впрыском топлива и заканчивается началом самовоспламенения – период задержки самовоспламенения, в течение которого протекают предпламенные процессы. Вторая включает время интенсивного турбулентного горения топливовоздушной смеси с резким увеличением давления. Третья фаза включает время замедленного или регулируемого горения за верхней мертвой точкой при снижении давления и завершается к концу впрыска топлива. Последняя фаза включает время догорания топлива.

Характеристикой эффективности сгорания топлива в двигателе с воспламенением от сжатия является **цетановое число** – процентное, по объему, содержание цетана ($C_{16}H_{34}$) в смеси с альфаметилнафталином, которая по характеру самовоспламенения эквивалентна топливу, испытываемому в стандартных условиях.

При повышении цетанового числа топлив скорость нарастания давления снижается и уменьшается жесткость работы двигателя, расход топлива и дымность отработавших газов. С повышением цетанового числа сверх оптимального ухудшается экономичность двигателя в среднем на 0,2-0,3% на единицу цетанового числа и повышается дымность отработавших газов.

Цетановое число топлива связано с показателями испаряемости и химического состава. Топливо утяжеленного фракционного состава с улучшенной воспламеняемостью может привести к увеличению дымности отработавших газов. Топливо расширенного состава может привести к ухудшению воспламеняемости и прокачиваемости за счет образования паровых пробок в системе питания дизеля.

Цетановое число взаимосвязано также с низкотемпературными свойствами – чем выше цетановое число, тем хуже низкотемпературные свойства.

Определение цетанового числа производится на установках ИТ9-3, ИТ9-3М, ИТД-69. Основным агрегатом этих установок является одноцилиндровый предкамерный дизельный двигатель с рабочим объемом 652 см^3 и переменной степенью сжатия.

В качестве эталонных топлив используют два индивидуальных углеводорода – цетан (нормальный гексадекан $C_{16}H_{34}$) и альфаметилнафталин (ароматический углеводород $C_{11}H_{10}$). Цетан обладает высокой склонностью к самовоспламенению и его воспламеняемость условно принята за 100 ед. Альфаметилнафталин имеет, наоборот, большую задержку самовоспламенения, условно принята за 0.

Составляя смеси цетана и альфаметилнафталина в объемных процентах, можно получить топливо с цетановым числом от 0 до 100. цетановое число определяется методом совпадения вспышек.

Сущность метода. К маховику двигателя установки крепят специальный обод, на котором монтируют две неоновые лампы, расположенные на ободе маховика таким образом, что центральный угол между ними составляет 13° . В ободе маховика напротив ламп выполнены прорезы, которые можно наблюдать через специальную визирную трубку. Первая лампа вспыхивает в момент начала подачи топлива: контактное устройство, включающее ее, смонтировано на форсунке. Вторая лампа вспыхивает в момент начала воспламенения, управляющий ею, замыкает цепь при резком изменении давления в цилиндре.

Во время работы двигателя обе лампы периодически вспыхивают, и наблюдатель видит две светящиеся полосы. Полоска от неоновой лампы, фиксирующая момент впрыскивания, независимо от режима работы вспыхивает под визирной нитью смотровой трубки, так как угол опережения впрыска по условию постоянен и равен 13° до ВМТ, а полоска от лампы, фиксирующей момент воспламенения топлива, оказывается под визирной нитью только в том случае, если задержка воспламенения соответствует углу опережения впрыска, т.е. 13° . Если задержка воспламенения больше 13° , то вторая полоска видна за визирной нитью по направлению вращения вала двигателя, а если меньше – до визирной нити.

В процессе испытания добиваются, чтобы задержка воспламенения при работе на испытуемом и эталонном топливах была одинаковой, т.е. равной 13° . Тогда острые концы световых полосок совпадают и оказываются под визирной нитью смотровой трубки – происходит «совпадение вспышек». Недостатком данного метода является его трудоемкость и длительное время проведения эксперимента. На основании литературных источников известна эмпирическая зависимость цетанового числа от его октанового числа:

где ЦЧ – цетановое число; ОЧ – октановое число.

Существует много методов определения октанового числа. Наиболее точным и эффективным является экспресс-метод определения октанового числа с помощью ультразвука. На установке определяется октановое число дизельного топлива, затем по эмпирической зависимости (1) определяется его цетановое число. Чем выше октановое число, тем ниже его цетановое число и наоборот. Поэтому введение в дизельное топливо бензиновых фракций ведет к снижению его цетанового числа.

Экспериментальное исследование энергообмена ионизированного газа с поверхностью

Власов Александр Сергеевич

Уральский Государственный Университет

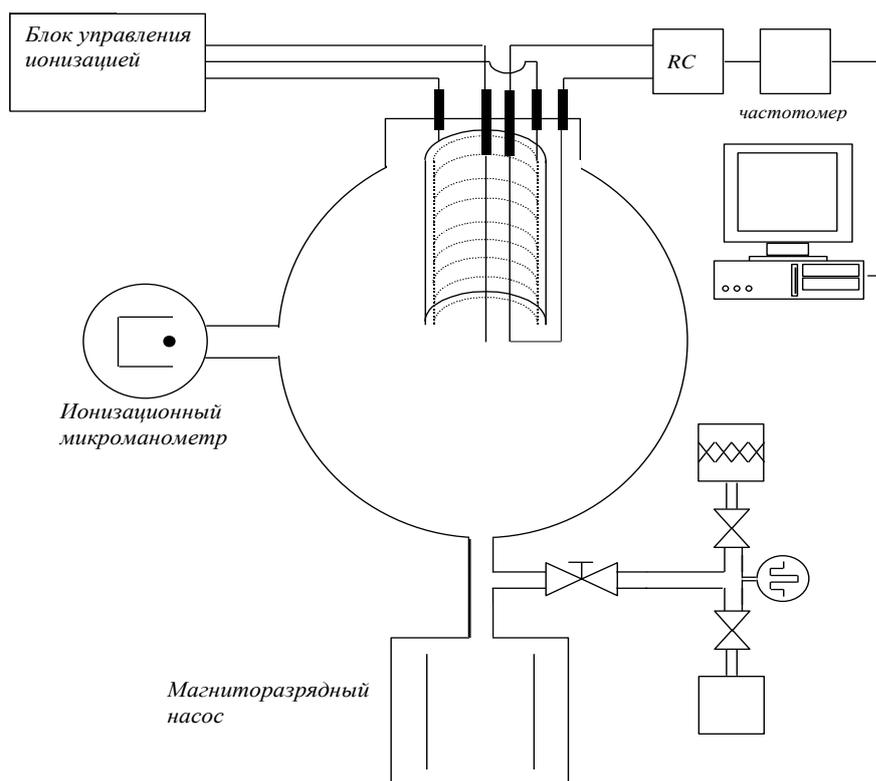
Борисов Сергей Федорович д.ф.м.н.

Vlasov-a@yandex.ru

Методика экспериментального исследования энергообмена газа с поверхностью основана на измерении темпов охлаждения датчика в исследуемом газе.

Датчик представляет из себя тонкую металлическую нить включенную в качестве сопротивления в частотозадающую цепь RC-генератора. С изменением температуры, меняется сопротивление датчика и соответственно частота RC-генератора. Частота измеряется с помощью электронного частотомера, показания которого считываются на ЭВМ.

Ионизация газов производится путем бомбардировки молекул газа термоэлектронами, а ее контроль осуществляется по методу Франка - Герца, с помощью измерения потенциала ионизации.



В результате работы:

1. Создана экспериментальная установка.
2. Проведен ряд экспериментов по измерению параметров энергообмена не ионизированных газов с поверхностями различных металлов (Ta, Au, Pt).
3. Отработана методика ионизации газов.
4. Проведен ряд экспериментов по измерению параметров энергообмена ионизированных газов с поверхностью Ta.

Изучение особенностей нагрева термовязких углеводородных жидкостей

Галиева Ляйсан Наилевна

Башкирский Государственный Университет

Ковалева Л. А.

Lvaisanochka@rambler.ru

Разработана математическая модель и проведены численные исследования нагрева высоковязких углеводородных систем, теплопроводность которых существенно и неоднозначно зависит от температуры. Проведен сопоставительный анализ численных расчетов и результатов экспериментальных исследований.

В лабораторных условиях моделировался резервуар, заполненный природной углеводородной жидкостью (так называемый «нефтешлам»), разогрев которого осуществлялся с помощью специально разработанного индукционного нагревателя.

Моделирование нагрева углеводородной жидкости проводилось с использованием параметров экспериментальной установки. Для этого использовалась цилиндрическая система координат r, φ, z с осью z , направленной вверх вдоль оси емкости, в аксиально-симметричной геометрии. С точки зрения математического моделирования физическая модель представляет собой многослойную среду.

Индуктор устроен так, что энергия вихревых токов, создаваемых катушкой индуктивности, выделяется в виде тепла в стенке трубы индуктора. Это происходит в тонком скин-слое трубы, но из-за малой толщины стенки трубы и большой теплопроводности металла, тепло, создаваемое индуктором, мгновенно распространяется, и может рассматриваться как «внутренние распределенные источники тепла» в стенке трубы индуктора. Уравнение теплопроводности в стенке трубы индуктора имеет вид:

$$c_m \rho_m \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda_m}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \lambda_m \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + q; \quad q = \frac{N_0}{\pi (R_3^2 - R_2^2) l}, \quad (1)$$

где c_m, ρ_m, λ_m – удельная теплоемкость, плотность и теплопроводность металла; q – плотность распределенных источников тепла; N_0 – мощность индуктора.

На других рассматриваемых участках (воздух между индуктором и трубой индуктора, углеводородная жидкость) теплопроводность среды – переменная величина. В первом случае это обусловлено возможной конвекцией воздуха, во втором, кроме того, зависимостью коэффициента молекулярной теплопроводности от температуры. Здесь уравнения теплопроводности имеют соответственно вид:

$$c_a \rho_a \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\varepsilon_a \lambda_a r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_a \lambda_a \frac{\partial T}{\partial z} \right); \quad (2)$$

$$c_f \rho_f \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\varepsilon_f \lambda_f(T) r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_f \lambda_f(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right), \quad (3)$$

где c_a, ρ_a, λ_a – удельная теплоемкость, плотность и теплопроводность воздуха; c_f, ρ_f, λ_f – удельная теплоемкость, плотность и теплопроводность углеводородной жидкости; $\varepsilon_a, \varepsilon_f$ – коэффициенты конвекции воздуха и углеводородной жидкости.

При проведении расчетов принята линейная зависимость коэффициента теплопроводности жидкости от температуры:

$$\lambda_f(T) = \lambda_{f0} [1 + b(T - T_0)],$$

где λ_{f0} – коэффициент теплопроводности при температуре $T=T_0$; b – температурный коэффициент теплопроводности.

В слое бетона уравнение теплопроводности имеет вид:

$$c_b \rho_b \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda_b}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \lambda_b \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}. \quad (4)$$

Здесь c_b, ρ_b, λ_b – удельная теплоемкость, плотность и теплопроводность бетона.

Краевые условия. Принято, что на внешней боковой и верхней поверхностях трубы индуктора, выступающей из углеводородной жидкости, теплообмен с окружающей средой происходит по закону свободной конвекции воздуха в неограниченном пространстве. Соответственно граничные условия имеют вид:

$$\alpha_v(T(R_3, z, t) - T_0) = -\lambda_m \frac{\partial T(R_3, z, t)}{\partial r}; \quad (5)$$

$$\alpha_h(T(r, Z_3 + Z_1 + Z_4, t) - T_0) = -\lambda_m \frac{\partial T(r, Z_3 + Z_1 + Z_4, t)}{\partial z}. \quad (6)$$

Здесь α_v – коэффициент теплоотдачи вдоль вертикальной стенки; α_h – коэффициент теплоотдачи вдоль горизонтальной стенки; T_0 – первоначальная температура среды и температура воздуха, окружающего экспериментальную установку.

Принято, что в основании и в боковой части лабораторной модели тепловой поток равен нулю:

$$T(r, z, 0) = T_0; \quad (7)$$

$$\frac{\partial T(0, z, t)}{\partial r} = 0; \quad \frac{\partial T(R_4, z, t)}{\partial r} = 0; \quad (8)$$

$$\frac{\partial T(r, 0, t)}{\partial z} = 0. \quad (9)$$

На поверхности нефтешлама теплообмен с окружающим воздухом также происходит по закону свободной конвекции:

$$\alpha_h(T(r, Z_3 + Z_1, t) - T_0) = -\lambda_f \frac{\partial T(r, Z_3 + Z_1, t)}{\partial z}. \quad (10)$$

На остальных границах слоев принимается равенство температур и тепловых потоков – граничное условие четвертого рода.

Расчетные исследования показали сильную зависимость эффективной теплопроводности жидкости от температуры, о сложном теплообмене, а также о том, что, начиная с некоторой температуры (в эксперименте это 93 °С), эффективная теплопроводность дополнительно резко увеличивается: при температуре около 100 °С эффективный коэффициент теплопроводности углеводородной жидкости возрастает на 2-3 порядка.

Распространение волн давления в пузырьковой жидкости

Галимзянов Марат Назипович

Институт механики Уфимского Научного Центра РАН

Шагапов Владик Шайхулаязамович, д.ф.-м.н.

Monk@email.ru

Данная работа посвящена исследованию динамики двумерных волн в пузырьковой жидкости, а также в жидкости при наличии в ней пузырьковой области конечных размеров. Проанализирована зависимость динамики волн от амплитуды и протяженности первоначального сигнала, характеристик завесы (форма и геометрические размеры завесы) и смеси (начальное объемное содержание пузырьков, начальный радиус пузырька).

На основе проведенных численных расчетов получены следующие результаты:

1. Установлено, что при распространении импульсных сигналов в жидкости, содержащей пузырьковую завесу конечных размеров, когда временная протяженность импульса достаточно большая ($t_* > l_y / C$, l_y – длина завесы в поперечном направлении, C – равновесная скорость звука в пузырьковой жидкости), внутри завесы может происходить нарастание амплитуды давления выше, чем амплитуда исходного сигнала

2. Для достаточно коротких импульсов ($t_* \leq l_y / C$) частицы двухфазной системы, находящиеся внутри завесы, практически не чувствуют прохождения волнового импульса (они как бы полностью защищены от ее воздействия).

3. При падении волнового импульса на твердую стенку, покрытую пристенной пузырьковой завесой конечных размеров, в зависимости от параметров завесы (размеров пузырьковой зоны, объемного содержания газа в завесе, радиуса пузырьков), завеса может существенно уменьшить или увеличить воздействие импульсного сигнала на стенку.

4. Показано, что при эволюции в однородной пузырьковой смеси колоколообразного по поперечной координате импульсного сигнала, когда его временная протяженность превышает период собственных колебаний пузырьков, в пузырьковой смеси формируется лидирующая волна, в случае соизмеримости этих характерных времен образуется расходящийся пакет волн.

5. Установлено, что распространение импульсного сигнала в кусочно–неоднородной по объемному содержанию пузырьков области сопровождается образованием в поперечном направлении профилей давления с пиками вблизи границ между слоями. Этот эффект обусловлен различием скорости волны в слоях с отличающимися объемными содержаниями газа.

6. При распространении волны давления вдоль плоской стенки, покрытой неоднородным пузырьковым слоем с уменьшающимся объемным содержанием газовой фазы, происходит фокусировка импульсного сигнала к поверхности стенки. Максимальная амплитуда сигнала, воздействующего на стенку, может превысить амплитуду исходного сигнала в два раза.

Основные результаты исследований опубликованы в [1], [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 04-01-97513-р_офи и № 04-01-08050-офи_а).

Список публикаций

[1] Нигматулин Р.И., Шагапов В.Ш., Гималтдинов И.К., Галимзянов М.Н. Двумерные волны давления в жидкости, содержащей пузырьковые зоны. // Доклады РАН. 2001. Т. 378. № 6. С. 763-767.

[2] Галимзянов М.Н., Гималтдинов И.К., Шагапов В.Ш. Двумерные волны давления в жидкости, содержащей пузырьки. // Механика жидкости и газа. 2002. № 2. С. 139-147.

О некоторых численных реализациях уравнения теплопереноса

Давлетбаев Альфред Ядгарович

Башкирский Государственный Университет

Ковалева Л. А.

DavletbaevAY@rambler.ru

При моделировании различных физических процессов часто сталкиваются с задачами в которых на ряду с другими присутствуют конвективные слагаемые. При их разностной аппроксимации сталкиваются с серьезными проблемами. Многие численные схемы имеют большую погрешность аппроксимации. В связи с этим представляет интерес сравнение решений, полученных с помощью различных численных аппроксимаций с аналитическим решением простейшей модельной задачи конвективного переноса:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

где a – известная скорость ($a = const > 0$). $u = u(x, t)$ – некоторая скалярная функция (плотность, температура).

Целью данной работы являлся выбор оптимального конечно-разностного метода решения уравнения вида (1). Рассматривались следующие конечно-разностные схемы: 1–схема с разностью вперед по времени и центральной по пространству; 2–схема с разностью вперед и назад по пространству, или, явный левый угол; 3–схема Лакса–Вендроффа; 4– численная схема TVD (Total Variation Diminishing – Уменьшение полной вариации); 5–схема ENO (Essentially Non-Oscillatory – Существенное не осциллирующее).

Проведенные исследования показали, что первая схема имеет наименьший порядок точности. Из численного решения задачи о движении разрыва с постоянной скоростью с помощью второй схемы видно, что особенностью данной схемы является размазывание фронта ступеньки. Чем меньше число Куранта, тем заметнее эта особенность. Численное решение с помощью третьей схемы в случае со ступенькой дает ложные осцилляции, но фронт ступеньки размазывается меньше, чем для схемы явный левый угол. В численном решении с помощью схемы TVD нет осцилляций и фронт ступеньки почти не размазывается, а в решении с помощью схемы ENO полностью отсутствует дисперсия и фронт ступеньки размазывается еще меньше.

Распределение газодинамических параметров в прямоугольном канале конечных размеров (метод потоков)

Дашкевич Сергей Александрович

Уральский Государственный Технический Университет (УПИ)

Породнов Борис Трифонович, д.ф.-м.н.

xtremal@mail.ru

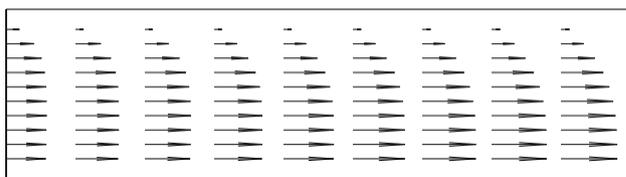
Задача о течении газа в плоской щели является одной из классических задач газодинамики. В зависимости от геометрии и перепада параметров возможны различные режимы течения газа, знание конкретных значений и характеристик которых необходимо в инженерно-конструкторской деятельности.

Численное моделирование течений вязкого газа при различных параметрах оказывается весьма важным, так как экспериментальные исследования в этой области являются весьма дорогостоящими и позволяют получить лишь ограниченную информацию. Аналитические подходы часто связаны со многими упрощающими предположениями, что значительно сужает область их применения.

В данной работе приведена попытка определить расходные характеристики и распределение газодинамических параметров при течении вязкого сжимаемого газа через плоскую щель конечных размеров нестационарным методом потоков [1, 2]. Отличительная черта метода состоит в аппроксимации нестационарных уравнений, отражающих законы сохранения каждой аддитивной характеристики среды, которые выписаны в интегральной форме для всех элементарных объемов-ячеек, возникающих при дискретизации области интегрирования.

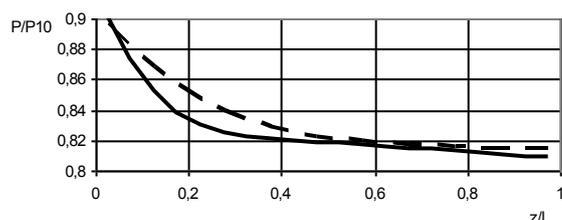
Численные решения были получены в предположении о наличии симметрии потока относительно двух перпендикулярных плоскостей, проходящих через центр канала и делящих его на четыре части в продольном направлении. Система координат введена таким образом, что ось z совпадает с пересечением плоскостей симметрии задачи и направлена вдоль канала, а оси x и y перпендикулярны ей и сонаправлены с границами канала. В качестве расчетной была выбрана щель с высотой, равной ширине $h = b = 1$ мм и отношением длины к высоте $L/h = 1$ и 2. Исследования проводились для воздуха в предположении степенной зависимости вязкости от температуры в диапазонах чисел Кнудсена Kn от 10^{-1} до 10^{-6} и перепадах давления между резервуарами P_2/P_1 от 0,4 до 0,8.

Некоторые результаты данных расчетов приведены ниже. Выбранные длины каналов являются достаточно короткими и профиль скорости Пуазейля в канале не успевает сформироваться (рис. 1). Установлено, что в вязком режиме ($Kn \leq 10^{-3}$) давление в канале спадает по экспоненте (рис.2), а для переходных режимов ($10^{-2} \leq Kn \leq 10$) – линейно. Расходные характеристики резко зависят от длины канала. Так, величина эйлеровского предела относительного числового расхода при звуковом режиме истечения при уменьшении числа Кнудсена для более длинного канала существенно выше, чем в более коротком, что подтверждается серией имеющихся экспериментальных данных.



V_z

рис. 1



— $P_2/P_1=0.8, L/h=2$ - - $P_2/P_1=0.8, L/h=1$

рис. 2

Список публикаций:

[1] Белоцерковский О.М., Северинов Л.И. Консервативный метод потоков и расчет обтекания тела конечных размеров вязким теплопроводным газом // ЖВМ и МФ, 1973. Т.13. №2. с. 385-397.

[2] Бабаков А.В., Северинов Л.И. Стационарный вариант метода потоков для решения задач механики сплошной среды // ЖВМ и МФ, 1976. Т.16. №1. с.140-151.

Экспериментальное исследование межфазного массообмена при всплытии одиночного снаряда в прямоугольных каналах малого сечения.

Ершов Иван Николаевич

Новосибирский Государственный Университет

Кузнецов Владимир Васильевич, д.ф-м.н.

drugy@ngs.ru

Снарядный режим течения двухфазных смесей встречается в большом числе технологических и промышленных устройств, использующих двухфазные потоки. Снарядный режим, как объект исследования отличается большой сложностью, особенно в каналах некругового сечения с острыми углами. Ячеистая структура потока, нестационарность процесса формирования картины течения в жидких перемычках, наличие пузырьков газа в жидкости - всё это значительно усложняет как экспериментальное, так и теоретическое исследование снарядного режима. Вместе с тем, все модели двухфазного снарядного режима течения основаны на особенностях движения одиночного снаряда в канале.

Процессы межфазного массообмена широко используются в различных аппаратах химической и биотехнологии. Перспективным методом интенсификации тепло и массообмена в аппаратах энергетики, криогенной техники и химической технологии является использование компактных теплообменников-реакторов. Они основаны на использовании каналов малого и сверхмалого размера, что развивает поверхность контакта фаз при испарении, конденсации, проведении газожидкостных реакций и снижает внешнее диффузионное сопротивление. В связи этим, в последнее время возник большой интерес к изучению режимов течения и структурам потоков в маленьких каналах некруглой формы. Многофазные компактные теплообменники нашли применение в микроэлектронике, атомной энергетике, авиации, криогенике и во множестве других областей, при этом в качестве теплоносителя используются различные жидкости от сжиженных газов до расплавленных металлов. Течение многофазных потоков в капиллярах также широко используется в химических реакторах.

При этом, несмотря на большое число работ, описывающих режимы двухфазного течения и межфазный массообмен в трубах большого диаметра, их результаты не могут быть прямо использованы при анализе тепло и массообмена в каналах с малым проходным сечением в связи с важностью влияния капиллярных сил.

Большое отличие прямоугольных каналов от круглых трубок и капилляров заключается в том, что по углам канала образуются мениски, по которым стекает жидкость, таким образом, снаряд всплывает при гораздо меньших числах Этвеша Eo , чем в круглых каналах, как показано в нескольких работах.

Настоящая работа посвящена экспериментальному исследованию межфазного массообмена (в системе углекислый газ - вода) и измерению коэффициентов массообмена при всплытии снаряда в прямоугольных каналах с одним из размеров порядка капиллярной постоянной. Цель работы: выявление влияния угла наклона, размеров канала на прохождение межфазного массообмена в таких каналах.

Установка представляла собой канал, склеенный из стеклянных пластин, со входом и выходом для воды и впрыском для газа. В воду добавлялся КОН до определенной концентрации (0,33г/л) для улучшения смачивания, влияние химической реакции CO_2 и щелочи на изменение объема снаряда позднее учитывалось. Вода стекала из верхнего бака в нижний, некоторый объем газа впрыскивался и формировал снаряд, этот снаряд завешивался перед камерой регулированием расхода жидкости и снималось уменьшение его во времени. Из полученных данных об уменьшении объема снаряда были получены коэффициенты массообмена, в разных каналах, сечением 4x4мм, 4x7,5мм, 3x5мм.

Таким образом, впервые было проведено экспериментальное исследование массообмена в прямоугольных каналах в снарядном режиме течения, получены коэффициенты массообмена при разных длинах снарядов.

Распределение газодинамических параметров в сложных вакуумных системах в свободномолекулярном и промежуточных режимах

Желонкин Дмитрий Александрович

Завада Андрей Александрович

Уральский Государственный Технический Университет (УПИ)

Породнов Борис Трифонович д.ф-м.н.

zhelonkin@bk.ru

В данной работе была смоделирована и исследована физическая модель, представляющая собой сложную вакуумную систему, состоящую из канала прямоугольного сечения, конфузора (диффузора), а также коллиматора, двух зон влияния и области ионизации (рис 1). Расчётная программа основана на решении задачи формирования молекулярного пучка в свободномолекулярном и промежуточном режимах с целью дальнейшей

его ионизации и использования его для, например, анализа распределения частиц по массам в соответствующих устройствах.

Суть метода, основанного на прямом статистическом моделировании (метод Монте-Карло) заключается в следующем. Предполагается, что в зоне влияния 1 находится газ с равновесным значением макропараметров и заданным числом модельных частиц в каждой ячейке этой зоны, а в остальной части системы вакуум. В начальный момент времени открывается заслонка, разделяющая первую зону (зону влияния) и канал, в который начинают проникать частицы. Постепенно происходит заполнение всей системы частицами до тех пор, пока не установится стационарный режим течения. После этого программой вычисляются необходимые макрохарактеристики в каждой ячейке и происходит их запись в файл. Отражение частиц от стенок происходит по диффузному закону, но возможно задание вероятности зеркального отражения частиц. В качестве экспериментального газа был использован азот, но программа предусматривает проведение эксперимента с другими веществами. После определения граничных и начальных условий необходимо построить модель исследуемой системы. Вся область «покрывается» трехмерной сеткой, то есть, доступное для модельных частиц пространство представляет собой набор ячеек заданного размера. Сетка является стационарной, а модельные частицы при движении перемещаются из одной ячейки в другую. Такая сетка является неотъемлемой частью метода прямого статистического моделирования и необходима для моделирования межмолекулярных столкновений частиц в каждой ячейке. Размер элементарной ячейки не произволен, а выбирается, исходя из начальных условий поставленной задачи, и не может, как правило, превышать среднюю длину свободного пробега молекул. В качестве модели межмолекулярных столкновений была использована модель молекул в виде упругих сфер. Для реализации этой модели был применён метод мажорантной частоты. При этом основным отличием модельной системы от реальной, помимо естественно меньшего количества модельных частиц, является разделение на временном шаге свободномолекулярного перемещения молекул и их столкновения

В процессе работы программы вычисляются следующие характеристики: макроскорость, плотность, температура, давление в каждой ячейке системы, профиль скорости и плотность потока в различных сечениях канала, а также распределение по углу вылета и временная зависимость вероятности прохождения канала и всей системы. Численные эксперименты были проведены для нескольких различных геометрических параметров системы различных режимов течения от свободномолекулярного ($Kn > 100$) до промежуточного ($Kn \sim 1$).

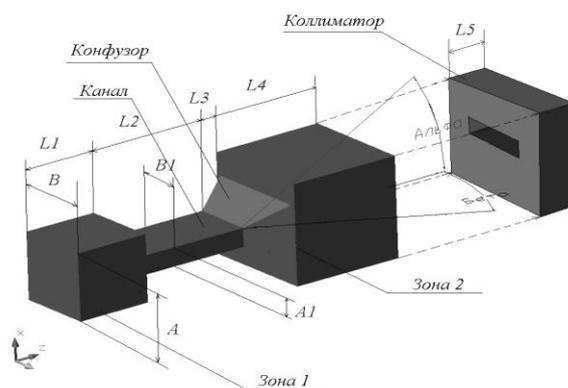


рис 1.

Экспериментальное исследование движения шаров во вращающейся жидкости.

Заварыкина Мария Михайловна

Пермский Государственный Университет

Макарихин Игорь Юрьевич, к.ф.-м.н.

zavar@psu.ru

В настоящей работе экспериментально решается задача о дрейфе шаровых тел во вращающихся с постоянной угловой скоростью Ω жидкостях. Стационарное движение быстро вращающейся жидкости относительно вращающейся с той же скоростью системы отсчёта представляет собой наложение двух независимых движений: осевого движения и плоского течения в поперечной плоскости (Праудмен, 1916) [1]. На практике при увеличении Ω скорость дрейфа уменьшается и при $\Omega \rightarrow \infty$ шар должен практически остановиться. Физической причиной подавления дрейфа, как нам кажется, является формирование силой Кориолиса “застойных” зон в приполярных областях движущегося шара. Если время, в течение которого струйка тока обтекает шарик много больше времени, необходимого кориолисовой силе для разворота струйки,

то сила Кориолиса успевает создать встречное движение по отношению к основному, ламинарному потоку вблизи обоих полюсов шарового тела. При обратном неравенстве времен шар будет продолжать поступательное движение под действием внешней силы. Появляется конкурентная борьба между двумя факторами, определяющими скорость дрейфа: внешней силой действующей на шар и силой Кориолиса. Подобная ситуация возникает во многих задачах и трактуется как потеря устойчивости основного состояния.

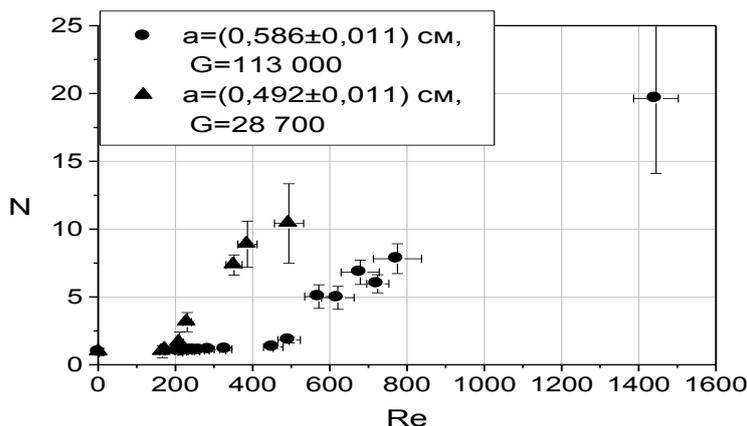
Для экспериментального решения задачи был сконструирован лабораторный комплекс. Установка состояла из оптически прозрачной цилиндрической кюветы высотой 14 см и диаметром 10 см, диска, приводимого во вращение электродвигателем, и системы наблюдения, основным элементом которой являлась цифровая видеокамера. Двигатель постоянного тока позволял получать несколько значений угловых скоростей вращения сосуда с жидкостью в пределах от 30 до 200 об/мин. Серии экспериментов проводились с дистиллированной водой и силиконовым маслом. Исследовался дрейф вдоль оси вращения цилиндра шарообразных тел с двумя значениями радиусов (a). Плотности шаров ρ_0 превосходили плотности жидкостей ρ на 5%. Определялась скорость падения шара под действием силы тяжести в покоящейся жидкости (u_0), и средняя скорость дрейфа шара при определенной скорости вращения жидкости (u). О влиянии сил Кориолиса

можно судить по отношению $N = \frac{u_0}{u}$, которое является функцией двух безразмерных параметров, полученных при обезразмеривании уравнений движения и непрерывности. Это число Рейнольдса

$Re = \frac{2\Omega a^2}{\nu}$, определенное через угловую скорость вращения жидкости, радиус шара и кинематическую

вязкость жидкости; и модифицированное число Галилея $G = \frac{a^3 g}{\nu^2} \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right)$. Результаты измерений

представлены в виде зависимости $N(Re)$ при фиксированных значениях чисел Галилея $G=28\ 600$ (\blacktriangle) и $113\ 000$ (\bullet) (для двух серий экспериментов с шарами различных радиусов, жидкость - дистиллированная вода).



Характерные изломы на графике могут свидетельствовать о смене режимов обтекания шара. Ламинарное течение по Стоксу сменяется течением Праундмена. Можно сказать, что сценарий смены режимов напоминает классическую задачу по определению кризиса теплопотока через слой, подогреваемый снизу и слегка наклоненный к горизонту [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке Американского Фонда Гражданских Исследований и Развития (грант PE-009-0).

Список публикаций:

- [1] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. VI. Гидродинамика. Изд 3-е, перер. М.: Наука, 1986. 736 с.
 [2] Чернатыйский В.И., Шлиомис М.И. Конвекция вблизи критических чисел Рэлея при почти вертикальном градиенте температуры // Изв АН СССР. МЖГ. 1973. №1. С. 64-70

Электроконвекция слабопроводящей жидкости в модулированном электрическом поле при наличии инъекции заряда

Ильин Владимир Алексеевич

Пермский Государственный Университет

Сморodin Борис Леонидович, д.ф.-м.н.

ilin1@psu.ru

Исследована электроконвекция слабопроводящей жидкости в модулированном электрическом поле горизонтального конденсатора при униполярной инъекции заряда. Инъекция заряда оказывает существенное влияние на динамику жидкости при превышении напряженности электрического поля на электродах некоторого порогового значения. Заряд, возникающий в жидкости, взаимодействует с внешним электрическим полем, в результате чего жидкость может придать движение даже в невесомости. Инжектируемые с поверхности электрода заряды движутся через слой диэлектрика, изменяя в нём распределение электрического поля.

Основная цель работы – исследовать устойчивость жидкости и надкритические режимы электроконвекции. В данной задаче инъекционный механизм неустойчивости является основным. Считается, что заряд, инжектируемый в жидкость, прямо пропорционален напряжённости электрического поля в конденсаторе. Используется электрогидродинамическое (ЭГД) приближение. Диффузию заряда не учитываем, считаем, что время диффузии заряда пренебрежимо мало по сравнению с характерным гидродинамическим временем и временем релаксации заряда.

Получены пространственно-временные распределения плотности заряда, тока, потенциала, напряжённости электрического поля в конденсаторе в неподвижной жидкости. В одномерном случае жидкость исследована на устойчивость. В двухмерном случае задача решалась методом конечных разностей. Исследовано влияние амплитуды и частоты модуляции поля на динамику надкритических режимов движения жидкости. Исследованы процессы переноса зарядов через объём диэлектрической жидкости. Вычислены пространственно-временные распределения плотности заряда, тока, потенциала, напряжённости электрического поля; зависимость плотности тока в конденсаторе от степени надкритичности для различных амплитуд и частот модуляции поля. Построены карты устойчивости. С помощью Фурье анализа исследованы закономерности временной эволюции различных режимов.

Исследования, результаты которых представлены в данной работе, выполнялись при частичной финансовой поддержке гранта PE-009-0 Американского фонда гражданских исследований и развития (АФГИР) и Программы подготовки ведущих научных школ НШ – 1981.2003.1.

Распределение параметров газового потока при внутреннем и внешнем течении (SPH-метод)

Кирюшин Иван Александрович

Уральский Государственный Технический Университет (УПИ)

Породнов Борис Трифонович, д.ф.-м.н.

kia@sky.ru

Одними из актуальных проблем газовой динамики являются задачи внутреннего и внешнего течения газов вблизи тел сложной геометрии, как, например, обтекание газом различных погружных датчиков, течения по каналам сложной формы и другие. К решению данных задач можно подойти различными способами. Первыми являются способы аналитического решения системы гидродинамических уравнений, состоящей из трёх уравнений сохранения (массы, импульса и энергии) и уравнения состояния вещества, но зачастую подобное решение не представляется возможным. Поэтому прибегают к численному решению задач. В последние годы стал популярен метод гладких частиц SPH (Smooth Particle Hydrodynamics). Изначально данный метод был разработан Luci [1], Gingold и Monaghan [2] для задач астрофизики, однако сейчас спектр его применения весьма расширился. Основным положением этого метода является то, что физические параметры f аппроксимируют их сглаженными представителями $\langle f \rangle$, которые, по сути, являются обобщенными функциями, определяемыми как:

$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle = \int_{(V)} f(\mathbf{r}') \cdot W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}', \quad (1)$$

где $f(\mathbf{r}')$ - произвольный физический параметр в точке с радиус-вектором \mathbf{r}' , определённый в области задачи V ; $W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h)$ - *интерполяционное ядро*, а h – *носитель интерполяционного ядра*, который иногда, исходя из его физического смысла, называют *длиной сглаживания*.

Основными для SPH-метода являются следующие два соотношения:

$$\frac{d\langle f(\mathbf{r}) \rangle}{dt} = \left\langle \frac{df(\mathbf{r})}{dt} \right\rangle, \quad \nabla \langle f(\mathbf{r}) \rangle = \langle \nabla f(\mathbf{r}) \rangle + O(h^2). \quad (2)$$

Используя интегрирование по частям и формулу Гаусса-Остроградского, второе соотношение в (2) может быть приведено к виду, где оператор ∇ действует только на ядро:

$$\langle \nabla_r f(\mathbf{r}) \rangle = - \int_{(V)} f(\mathbf{r}') \nabla_r W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}'. \quad (3)$$

Таким образом, с помощью определения обобщенной функции (1) и основных соотношений (2) в системе уравнений эволюции сплошной среды был осуществлен переход от дифференцирования по времени и по пространству к интегрированию, которое является гораздо более удобным в плане математического моделирования. Интегрирование же в свою очередь аппроксимируется разбиением всей области задачи V на N частиц и сопоставлением каждой i -ой частице объёма $d\mathbf{r}_i$. Причем, сопоставив частице помимо объёма массу m_i и плотность ρ , можно получить следующее выражение для нахождения сглаженных представителей:

$$\langle f(\mathbf{r}_j) \rangle = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{\rho(\mathbf{r}_i)} f(\mathbf{r}_i) \cdot W(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i, h). \quad (4)$$

Подобная запись существенно упрощает нахождение обобщенной функции, так как массы частиц задаются на начальном этапе и не изменяются в течение всего расчета, а плотность находится подстановкой в (4) вместо параметра f плотности ρ . Аналогичным образом аппроксимируют интеграл в (3).

Следует отметить, что, определяя сглаженные представители в виде (4), удобно в качестве интерполяционного ядра W использовать функцию с компактной поддержкой, которая является ненулевой в некотором объёме вокруг частицы (этот объем, как правило, ограничивают сферой радиусом $2h$) и равной нулю вне него. Преимущество такого ядра заключается в ограничении числа межчастичных взаимодействий, т. е. суммирование в (4) ведётся не по всему объёму, а по частицам, попавшим в ограниченную сферу с центром в \mathbf{r} .

Применяя полученные выражения к системе уравнений сохранения сплошной сжимаемой среды в приближении Эйлера с учетом вспомогательных слагаемых, учитывающих вязкие силы, получим следующие SPH-аппроксимации:

$$\begin{cases} \frac{d\rho_j}{dt} = \rho_j \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{\rho(\mathbf{r}_i)} (\mathbf{v}(\mathbf{r}_j) - \mathbf{v}(\mathbf{r}_i)) \cdot \nabla W(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i, h) \\ \frac{d\mathbf{v}_j}{dt} = - \sum_{i=1}^N m_i \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) \nabla W(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i, h) \\ \frac{de_j}{dt} = - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \nabla W(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i, h) + T_{dj} \end{cases} \quad (5)$$

В приведенной выше системе уравнений P – давление, \mathbf{v} – вектор скорости, e – удельная внутренняя энергия, Π_{ij} – искусственная вязкость [3], которая введена для учета вязких сил и сглаживания разрывов при описании ударных волн, а T_{dj} – искусственная теплопроводность [3], которая введена для устранения теплового эффекта, возникающего на границах сред с различными состояниями. Остается только дополнить систему (5) уравнением состояния, которое и будет отличать одно вещество от другого. В рассмотренных ниже задачах использовалось уравнение состояния идеального газа: $P = (\gamma - 1)\rho \cdot e$, где γ есть показатель адиабаты.

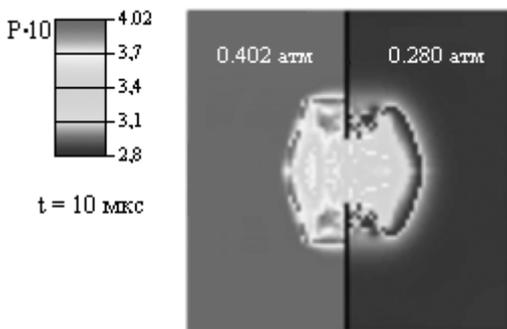


рис. 1

Теперь, найдя SPH-аппроксимацию уравнений сохранения, можно опробовать эффективность данного метода при решении ряда тестовых задач. Была рассмотрена задача столкновения потоков [4], задача Римана [5] и другие. Во всех численных экспериментах метод показал достаточно высокую точность, что, в силу широкого спектра задач, свидетельствует о его универсальности.

В качестве примера применения метода к описанию внутреннего течения рассмотрим двухмерную задачу о движении сплошной среды через канал нулевой длины. Суть задачи в следующем. Два неограниченных объема, разделенных

перегородкой, в которой имеется отверстие высотой 29.8 мм, наполнены двуокисью углерода при температуре 300 К и давлении 0,280 атм и 0,402 атм в правом и левом (рис. 1), соответственно. В начальный момент времени канал открывается и рассчитывается эволюция системы во времени, пока не установится стационарный профиль газодинамических параметров течения. Представлен профиль давления (рис. 1) неустановившегося, в силу его большей наглядности, течения в момент времени 10 мкс. Как видно, при открытии канала вблизи его начинает устанавливаться стационарный профиль, а по объемам – распространяться волны разрежения и сжатия.

Полученные результаты численного моделирования задач внутреннего и внешнего течения и сравнение их с имеющимися экспериментальными данными, а также с численными решениями при помощи других методов, в том числе, и аналитических, свидетельствуют о перспективных возможностях использования метода SPH для подобного класса задач газовой динамики.

Список публикаций:

- [1] Lucy L.B. *A numerical approach to the testing of the fission hypothesis* // *Astron. J.* 1977. V. 82. № 12. P. 1013-1024.
 [2] Gingold R.A., Monaghan J.J. *Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to nonspherical stars.* // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 181, 1977. P. 375-389.
 [3] Noh W.F. *Artificial Viscosity (Q) and Artificial Heat Flux (H) Errors for Spherically Divergent Shocks.* Lawrence Livermore National Laboratory technical report UCRL-89623. 1983.
 [4] Кирюшин И.А., Породнов Б.Т. *Применение SPH-методики для моделирования гидродинамических систем. Студент и научно-технический прогресс: Сборник тезисов докладов студенческой научной конференции. Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, 2004. 318с.*
 [5] Паршиков А.Н. *Применение решения задачи Римана в методе частиц.* // *Журнал вычислительной математики и математической физики*, 1999, том 39, № 7, с.1216 – 1225.

Конвективные автоколебания в трехосном эллипсоиде

Козлов Александр Алексеевич

Путин Геннадий Федорович

Пермский Государственный Университет

Путин Геннадий Федорович, д.ф.-м.н.

a.kozlov@freemail.ru

В работах [1 - 3] были обнаружены автоколебательные режимы в маломодовых гидродинамических системах, что делает особенно интересной экспериментальную реализацию их в течениях, возможно, более простой структуры. Например, простейшую систему - трехмодовую модель Лоренца [2], предсказывающую стохастический режим для одномерной циркуляции в конвективной петле и для плоского вала в горизонтальном слое, в опытах воспроизвести не удастся из-за возбуждения гармоник других масштабов. Среди наблюдавшихся двумерных нерегулярных течений наиболее простым является, по-видимому, конвективное движение в вертикальной ячейке Хеле-Шоу, заключающееся в попарном перезамыкании четырех вихрей [4, 5].

В настоящей работе изучались колебательные режимы конвекции воздушной смеси, которая заполняла полость (рис. 1) в форме трехосного эллипсоида с осями 6.0*4.8*3.0 см (большая ось вертикальна). Общий вид экспериментальной установки иллюстрирует рис. 1.

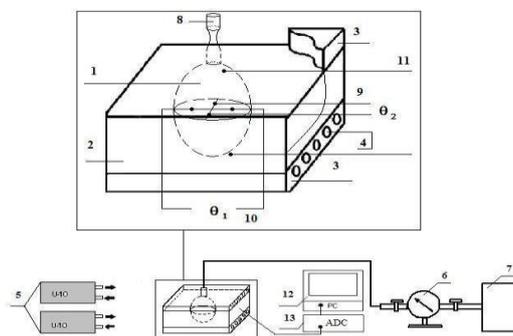


рис. 1.

Массивный блок из органического стекла 2 ограничивается плоскими изотермическими теплообменниками 3, которые поддерживают заданные температуры границ слоя. По каналам 4 теплообменников прокачивается термостатирующая жидкость от струйных ультратермостатов 5, которые могут поддерживать температуру с точностью до 0.1 К. При помощи теплообменников, в блоке создается градиент температуры, направленный вниз. Для изменения давления в конвективной ячейке используется насос 7, внутреннее давление измеряется с помощью манометра 6, который присоединен к патрубку 8. Перепад температур между теплообменниками, а также интенсивность конвективного движения в полости

регистровались с помощью дифференциальных термодар 9, 10 и 11. Сигналы с датчиков поступали на персональный компьютер 12 через аналого-цифровую многоканальную термодарную плату 13.

Исследованы границы устойчивости механического квазиравновесия и области управляющих параметров, в которых существуют различные колебательные режимы конвекции. Экспериментально осуществлены автоколебания в полости данной конфигурации. Построены спектры Фурье и фазовые портреты нестационарных режимов конвекции.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Администрации Пермской обл. (грант № 04-02-96038) и Американского Фонда Гражданских Исследований и Развития (грант PE-009-0).

Список публикаций:

- [1] Гледзер Е.Б., Должанский Ф.В., Обухов А.М. Системы гидродинамического типа и их применение. М.: Наука. 1981. 368 с.
- [2] Lorenz E.N. Deterministic non-periodic flow// J. Atmos.Sci. 20. 1963. P. 130 - 141.
- [3] Welande P. On the oscillatory instability of a differentially heated fluid loop// J. Fluid Mech. 1967. 29. № 1. P. 17 - 30.
- [4] Любимов Д.В., Путин Г.Ф., Чернатыйский В.И. О конвективных движениях в ячейке Хеле-Шоу // Доклады АН СССР. 1977. Т. 235. № 3. С. 554 - 557.
- [5] Любимов Д.В., Путин Г.Ф., Чернатыйский В.И. Конвекция в ячейке Хеле-Шоу при подогреве снизу. Сб. "Гидродинамика". Пермь, 1977. Вып. 10. С. 3 - 14.

Перенос заряда в кремниевых туннельных структурах с участием электронных состояний, локализованных на границе раздела.

Куркин Степан Георгиевич

Плотников Яков Викторович

Новосибирский Государственный Технический Университет

Камаев Геннадий Николаевич, к.ф.-м.н.

kamaev@isp.nsc.ru

Низкоразмерные системы, образующие систему квантовых ям, привлекают интерес у исследователей уже не только с точки зрения получения знаний в области фундаментальной физики твердого тела, но и возможности создания приборов. Это связано с перспективой построения на их основе твердотельных приборов, использующие квантовые эффекты, например, двухбарьерных туннельных диодных структур. Возможность контролируемого создания 0-мерных состояний в широкозонных материалах, представляет интерес и с точки зрения исследования эффектов памяти, процессов зарядки и разрядки данных центров в условиях подсветки.

В данной работе представлены результаты исследований электронного транспорта в кремниевых туннельных $n^{++}p^{++}$ -структурах, полученных методом прямого сращивания сильно легированных пластин кремния марки КЭМ-0.002 (n^{++}) и КДБ-0.001 (p^{++}). Особенность данных структур заключается в наличии на границе сращивания тонкого туннельно-прозрачного слоя диоксида кремния и локализованных электронных состояний на границах раздела (поверхностных состояний на границе сращивания), что приводит к появлению двухбарьерной туннельной диодной структуры. Измерения вольтамперных характеристик (ВАХ) после различных температур сращивания проводились при определенном способе подачи напряжения в диапазоне от -3 до +3 В при азотной и комнатной температурах.

На рисунке 1 представлены ВАХ образца после сращивания при 600 °С (направление развёртки напряжения указано в подписи к рисунку). При напряжениях около +1 и -1 В появляются осцилляции, связанные с перезарядкой состояний на границе раздела. Также можно заметить, что отсутствует асимметрия ВАХ, характерная для диодной структуры. Можно предположить, что при данной температуре сращивания в исследуемой структуре имеется высокая плотность состояний, которые определяют перенос заряда.

На рисунке 2 представлены ВАХ для диодной структуры после температурной обработки при 900 °С при разных последовательностях развёртки напряжений смещения (последовательность развёрток указана в подписи к рисунку). Анализируя ход представленных на рисунке кривых, можно заметить, что если развёртка осуществляется при положительном смещении на диоде в прямом и обратном направлении наблюдается только небольшой гистерезис. Осуществляя развёртку от +3 В в сторону убывания, при переходе от прямого к обратному смещению на диоде в области напряжений от -2 до -3 В наблюдаются осцилляции тока с периодом по напряжению ~0,35 В. Далее при осуществлении развёртки напряжения смещения от -3 до +3 В при напряжении около +2 В наблюдается участок с отрицательным дифференциальным сопротивлением. При дальнейшем увеличении напряжения при 2,8 В происходит ещё одно падение тока. Также на данном образце при измерениях ВАХ в разных направлениях развёртки напряжения наблюдается гистерезис.

Проведенные комплексные исследования свойств границы сращивания позволяют установить взаимосвязь между структурными параметрами и исследуемыми явлениями переноса носителей заряда через границу раздела в $n^{++}p^{++}$ -диодах с встроенными локализованными состояниями.

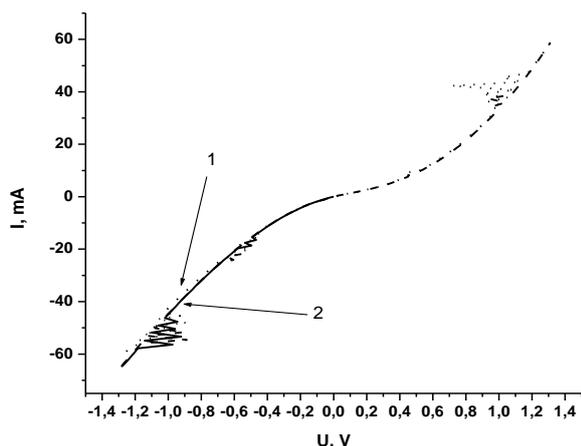


рис. 1 ВАХ диодной структуры
(после температурной обработки при 600 °С)
1 - при измерении от -1.5 до +1.5 В;
2 - при измерении от +1.5 до -1.5 В;

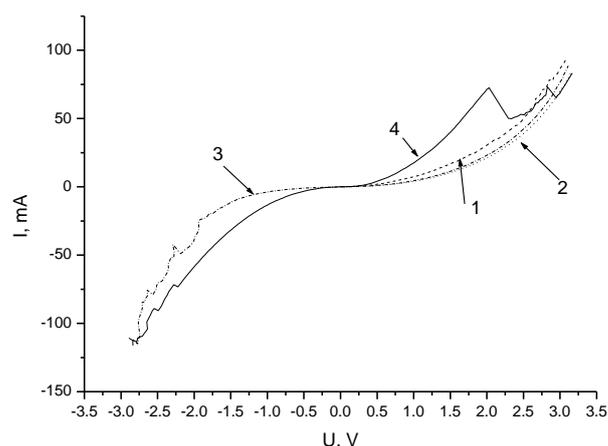


рис.2 ВАХ диодной структуры
(после температурной обработки при 900С)
1 - при измерении от 0 до +3 В;
2 - при измерении от +3 до 0 В;
3 - при измерении от 3 до -3 В;
4 - при измерении от -3 до 3 В.

Численное исследование влияния избытка воздуха в камере сгорания на процесс горения высокозольного пылеугольного топлива

Лаврицева Евгения Игоревна

Ахметова Дарига Амантаевна

Казахский Национальный Университет им. аль-Фараби

Аскарова Алия Сандыбаевна, д.ф.-м.н.

ljanr@kazsu.kz

Современные темпы развития топливно-энергетической отрасли требуют более глубокого анализа процессов, связанных с использованием энергетического сырья. Для Казахстана, обладающего богатыми месторождениями низкосортного угля, проблемы, связанные с рациональным использованием этого вида топлива выходят на первый план. Таким образом, исследования физических процессов, происходящих внутри топочного пространства камеры горения являются сегодня очень актуальными.

За последние годы в защите атмосферы от выбросов твердых частиц достигнуты значительные успехи. Намного сложнее обстоит дело с газовыми загрязнителями и особенно с оксидами азота (NO и NO₂), оксидами углерода (CO и CO₂). С помощью современных методов трехмерного моделирования в работе проведено исследование влияния коэффициента избытка воздуха на концентрацию окислов азота в топочной камере реального энергетического объекта.

Численный эксперимент проводится в несколько этапов: описание физической модели явления; формирование математической модели для описываемого процесса; разработка численного метода и составление алгоритма решения задачи; проведение отладки программы и тестирование; решение физической задачи, анализ и обработка результатов; сравнение полученных результатов с данными физического эксперимента, полученными непосредственно на ГРЭС.

Для расчета многофазного течения с химическими реакциями будем исходить из обобщенного транспортного уравнения переноса в виде [1,2]:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = -\frac{\partial(\rho u_j \phi)}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right] + S_\phi \quad (1)$$

Исходя из этого уравнения, получаем систему 3^x-мерных дифференциальных уравнений конвективного теплопереноса с учетом теплопередачи, теплового излучения, химических реакций и многофазности среды. В работе используется хорошо известная и наиболее часто используемая модель турбулентности, относящаяся к группе моделей с двумя уравнениями переноса турбулентных характеристик – k-ε модель турбулентности.

В работе проведено исследование процесса тепломассопереноса, происходящего при сжигании угольного топлива в топочных камерах действующих котлоагрегатов, с применением методов 3-D моделирования, применительно к проблемам, связанным с повышением эффективности работы ТЭЦ и уменьшением выбросов газовых загрязнителей в атмосферу. Проведено исследование влияния избытка воздуха в камере горения на процесс формирования вредных газовых выбросов при сжигании высокозольного пылеугольного топлива. Представлены результаты численного моделирования реакции горения для котла ПК-39 Аксуйской ГРЭС при различных коэффициентах избытка воздуха в топочной камере. Проведено сопоставление с экспериментальными данными [3]. Показано, что выбранная математическая модель позволяет удовлетворительно рассчитывать параметры процесса горения. Моделирование образования вредных веществ (NO_x) с помощью используемой в работе модели и пакета программ вполне возможно. Полученные результаты вычислительного эксперимента позволяют оптимизировать процесс сжигания высокозольного пылеугольного топлива и выбирать наиболее оптимальные значения коэффициента избытка воздуха в камере сгорания с целью уменьшения выбросов вредных веществ (NO_x) и улучшения процесса горения. Метод, предложенный в данной работе, может использоваться на любых теплоэлектростанциях Республики Казахстан, использующих в качестве основного топлива низкосортную угольную пыль, обладающую высокой зольностью и влажностью.

Список публикаций:

- [1]. Møller H. *Numerische Berechnung dreidimensionaler turbulenter Strömungen in Dampferzeugern mit Wärmevergang und chemischen Reaktionen am Beispiel des SNCR-Verfahrens und der Kohleverbrennung* // Fortschritt-Berichte VDI-Verlag. Reihe 6. Nr.268. 1992. 158 s.
- [2]. Vockrodt S. *3-Dimensionale Simulation der Kohleverbrennung in zirkulierenden atmosphärischen Wirbelschichtfeuerungen* // Fortschritt-Berichte VDI-Verlag. Reihe 6. Düsselndorf. 1995. 334s.
- [3]. Алиярлов Б.К. *Освоение сжигания экибастузского угля на тепловых электростанциях. Алматы: Гылым, 1996, 272с.*

Селективное возбуждение вращательно – поступательного движения сольватированных аквакомплексов асимметричным полем высокой частоты

Ломов Иван Викторович

Орлов Максим Сергеевич

Томский Политехнический Университет

Шаманин Игорь Владимирович, д.ф-м.н.

lomov@phtd.tpu.ru

В работе излагается физико–математическая модель и техническая реализация процесса дрейфа сольватированных ионов при наложении на водный раствор соли асимметричного электрического поля высокой частоты.

В основу модели положено предположение о возможности разделения вращательной и поступательной компонент движения поляризованного аквакомплекса.

Поляризация и, следовательно, деформация сольватной оболочки приводит к образованию системы, подобной системе двух связанных разноименно заряженных частиц различной массы. Поляризованный катионный аквакомплекс может образовать две системы, отличающиеся массами положительной части и, следовательно, точкой расположения центра инерции диполя. При действии на данные системы электрического поля возбуждаются колебательная и вращательная компоненты движения. В течение первого полупериода момент импульса возрастает, в течение второго – частично компенсируется. Нескомпенсированная часть момента трансформируется в поступательную компоненту движения центра инерции. Скорости поступательного движения (дрейфа) аквакомплексов, в силу различных инерционных свойств, также будут отличаться. Утверждение об аддитивности массы гласит, что связь между импульсом и скоростью системы как целого такая же, какая была бы между импульсом и скоростью одной материальной точки с массой, равной сумме масс всех частиц в системе [1]. Скорость системы как целого есть скорость перемещения центра инерции системы. При движении замкнутой системы сохраняется момент импульса системы. Он не зависит от наличия или отсутствия взаимодействия между частицами.

При математической формулировке модели процесса поляризованный катионный аквакомплекс “помещается” в плоскость XoY (см. рис.1). Вектора сил, действующих на положительную и отрицательную части диполя, таким образом, расположены в той же плоскости и имеют одну ненулевую компоненту.

Вектор напряженности электрического поля также расположен в плоскости XoY и имеет ненулевую компоненту E_x . В плоскости YoZ расположен первый (заземленный), а в плоскости $Y'o'Z'$ – второй (потенциальный) электрод. Компонента E_x – знакопеременная, являющаяся функцией времени:

$$E_x = E^+ \text{ при } 0 \leq t < T/2; \quad E_x = -E^- \text{ при } T/2 \leq t < T. \quad (1)$$

Основная идея численного описания процесса селективного дрейфа состоит в расщеплении по физическим процессам исходной нестационарной системы уравнений. Весь процесс вычислений состоит из многократного повторения шагов по времени. Расчет каждого временного шага $2\Delta t$ разбивается на три этапа.

На первом этапе (полушаг Δt) рассматривается приращение момента импульса за счет действия первого полупериода электрического поля: $\Delta \vec{M}_1$. Проекции импульсов положительной и отрицательной частей аквакомплекса на первом этапе определяются соотношениями:

$$p_+ = E^+ q_+ \Delta t; p_- = -E^+ q_- \Delta t. \quad (2)$$

На втором этапе (следующий полушаг Δt) рассматривается приращение момента импульса за счет действия второго полупериода электрического поля $\Delta \vec{M}_2$ в предположении, что диполь по отношению к вектору \vec{E} имеет ту же ориентацию и то же положение в плоскости XOY , что и на первом этапе. Проекции импульсов положительной и отрицательной частей аквакомплекса на втором этапе определяются соотношениями:

$$p_+ = -E^- q_+ \Delta t; p_- = -E^- (-q_-) \Delta t = E^- q_- \Delta t. \quad (3)$$

На третьем этапе определяется нескомпенсированная часть момента $\Delta \vec{M} = \Delta \vec{M}_1 + \Delta \vec{M}_2$, скорость поступательного движения \vec{V} и, следовательно, перемещение центра инерции.

Траектории инерционно-отличных катионных аквакомплексов (см. рис.2), находящихся в асимметричном электрическом поле различны. Катионный аквакомплекс 1 дрейфует в направлении OX быстрее и раньше достигает плоскости $Y'o'Z'$. Аквакомплекс 2 дрейфует медленнее. Кроме того, образующая его траектории существенно отклоняется от первой. За плоскостью $Y'o'Z'$ наблюдается обогащение аквакомплексами первого типа.

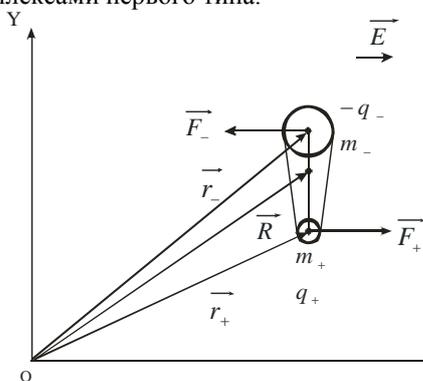


рис. 1. Поляризованный аквакомплекс в электрическом поле

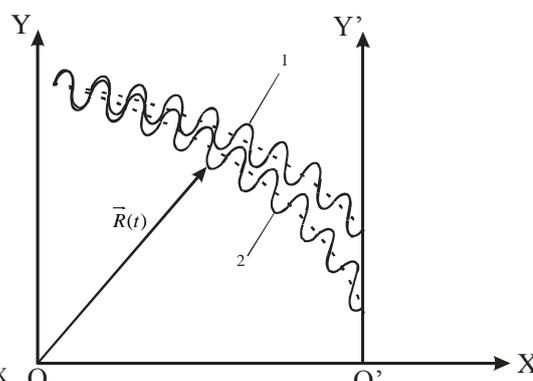


рис. 2. Вид траекторий $\vec{R}(t)$ инерционно-отличных аквакомплексов

С целью демонстрации использовалась смесь растворов солей $CaCl_2$ и $MgCl_2$. Катионы Ca^{2+} и Mg^{2+} имеют равные координационные числа – 4, но существенно отличаются массой (40 и 24 а.е.м., соответственно). При наложении на смесь растворов асимметричного электрического поля высокой частоты за изолированной потенциальной сеткой высокой прозрачности наблюдалось обогащение (обеднение) раствора гидратированным аквакомплексом ионов одного из металлов: $[Ca(OH_2)_4]^{2+}$ или $[Mg(OH_2)_4]^{2+}$. Эффект обнаружен при комплексонометрическом титровании.

Список публикаций:

[1]. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: Т.1. Механика. -М. : Наука. 1988. -216 с.

Исследование ступенчатой фотоионизации 3,4 – диметоксипропиофенона

Лукашов Сергей Сергеевич

Клеймёнов Виктор Иванович

Санкт-Петербургский Государственный Университет

Акопян Михаил Евгеньевич, д.ф-м.н.

luks@photonics.phys.spbu.ru

Масс-спектрометрия в сочетании с генерацией ионов резонансно-усиленной многофотонной ионизацией широко используется для спектроскопических исследований молекул и радикалов, изучения внутримолекулярного перераспределения энергии, фотодиссоциации молекул и ионов и других физико-химических процессов. Возможности метода, как при решении таких задач, так и при исследовании лазерной ионизации молекул существенно расширяются при использовании временного разрешения.

Нами реализована методика временного разрешения на лазерном фотоионизационном спектрометре, описанном в [1]. Она позволяет осуществлять двухцветную ступенчатую ионизацию паров двумя импульсами лазерного излучения с переменной задержкой между импульсами. Методика включает циклическую последовательную регистрацию трех времяпролетных масс-спектров: I_{nd} и I_d – спектров при ионизации лазерным излучением с энергией фотонов $h\nu_{nd}$ и $h\nu_d$, и I – спектра совместного действия двух импульсов при фиксированной задержке импульса $h\nu_d$ относительно $h\nu_{nd}$. Разностный спектр $\Delta I = I - (I_{nd} + I_d)$ формируется в результате воздействия излучения $h\nu_d$ на ионы и нейтралы, образующиеся под действием первого импульса: $M + h\nu_{nd} \rightarrow X_1^+ + (Y_1) + e$. Положительные значения ΔI соответствуют генерации новых заряженных фрагментов, а отрицательные ΔI диссоциации ионов. Более детально методика описана в [2].

Ступенчатая фотоионизация молекулы 3,4-диметоксипропиофенона (ДМП) осуществлялась следующими длинами волн: 266 (4.66 эВ, $S_0 \rightarrow S_3$ переход), 306 (4.05 эВ, $S_0 \rightarrow S_2$) и 532 нм (2.33 эВ). Излучение 532 нм не поглощается нейтральной молекулой в нашем диапазоне интенсивностей (Φ).

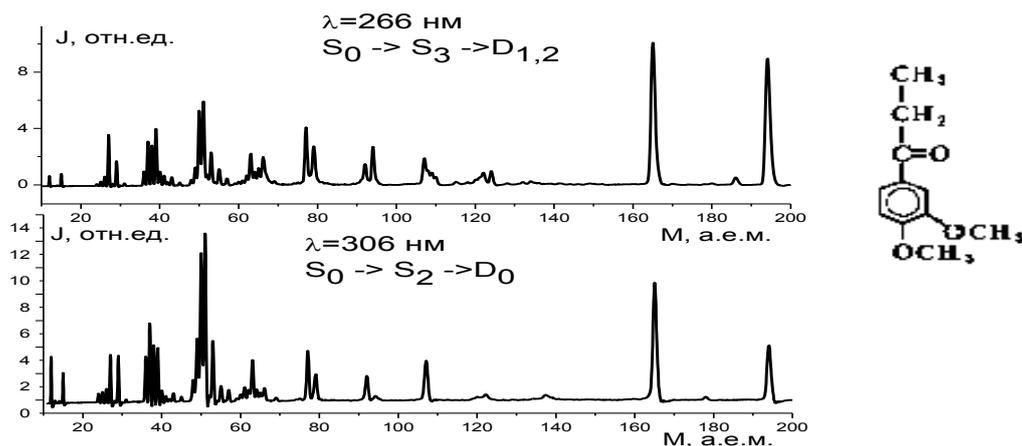
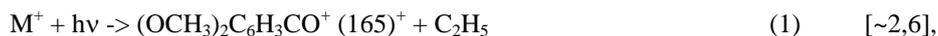


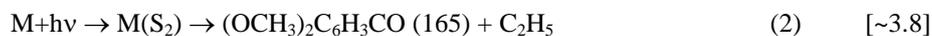
рис 1. Масс-спектры ступенчатой ионизации ДМП при ионизации через S_2 ($\lambda = 306$ нм) $\Phi = 2 \cdot 10^7$ Вт/см² и S_3 ($\lambda = 266$ нм) $\Phi = 9 \cdot 10^6$ Вт/см²;

справа структурная формула ДМП.

В спектрах, полученных в условиях генерации M^+ излучением 266 нм низкой интенсивности, когда фрагментация незначительна, однозначно можно выделить механизм ионизация-диссоциация. Интенсивность осколочного иона $(165)^+$ ~ в 5 раз меньше интенсивности M^+ . Сечения фотодиссоциации M^+ и $(165)^+$ близки, поэтому за образование фрагментных ионов в разностном спектре при включении задержанного излучения 532 нм (двухступенчатая схема фотоионизации 266 + 532 нм) отвечает диссоциация M^+ . Однозначно можно выделить следующий процесс фотодиссоциации:



где в квадратных скобках указана пороговая энергия образования фрагментов в эВ. Масс-спектры при фотоионизации через S_2 и S_3 состояния различаются (рис.1). Соотношение токов $(165)^+$ и молекулярных ионов в масс-спектре с $\lambda=306$ нм в 2-2.5 раза больше, чем в масс-спектре с $\lambda=266$ нм. При уменьшении светового потока с $\lambda=306$ нм отношение токов долго сохраняется в пользу $(165)^+$, что может быть объяснено наличием вклада диссоциации-ионизации:



Такой вывод можно подтвердить и из анализа разностных спектров (схемы 306 + 532 нм и 266 + 532 нм). Для всех спектров ΔI характерно, что сумма интенсивностей всех положительных пиков превышает сумму интенсивностей отрицательных, т.е. количество появившихся ионов превышает количество развалившихся. Это означает, что фрагменты, генерированные дополнительно излучением с $\lambda=532$ нм не есть результат только распада других заряженных частиц, и, следовательно, образуются, в том числе и из нейтральных частиц.

Таким образом, из анализа разностных спектров, как было показано на примере $(165)^+$, можно утверждать, что протекают как процессы образования, так и гибели фрагментов молекулы. В зависимости от концентрации исходно образованных фрагментных ионов доминирует либо процесс (1), либо процесс (3).

Список публикаций:

[1].Акопян М.Е.,КлейменовВ.И.,Клейменов М.В.,Феофилов А.Г.Ступенчатая фотоионизация паров 2,4-диоксибензальдегида и 3,4-диметокси-пропиофенона.Опт. и спектр.2002,Т.92.№1.С.42-50.

[2].Акопян М.Е., КлейменовВ.И., Лукашов С.С. Методика исследования фрагментации ионов. Материалы 2-ой Международной Сем.-школы «Масс-спектрометрия в хим. физике,биофизике и экологии». Москва,2004.С.178.

Расчет структурных факторов жидких металлов в рамках модели прямоугольной ямы

Мальханова Ольга Геннадьевна
Дубинин Николай Эдуардович
Филиппов Владимир Владимирович
Институт металлургии УрО РАН
Ватолин Николай Анатольевич, д.ф.-м.н.
tol@mail.ru

Важнейшее место в ряду исследований, посвященных жидким металлам, занимает изучение их структурных характеристик. Для описания структуры жидкости, которая, как известно, имеет ближний порядок, в прямом пространстве используют функцию радиального распределения атомов, а в обратном пространстве – структурный фактор.

Работа посвящена расчету структурных факторов жидких металлов в рамках модели прямоугольной ямы (square-well – SW) в сочетании со средне-сферическим приближением (mean-spherical approximation – MSA).

Парный потенциал прямоугольной ямы имеет следующий вид:

$$\varphi(r) = \begin{cases} \infty, & r < \sigma \\ -\varepsilon, & \sigma < r < \lambda\sigma \\ 0, & r > \lambda\sigma \end{cases} \quad (1)$$

где σ – диаметр твердой сферы; $(\lambda - 1)\sigma$ и ε – ширина и глубина потенциальной ямы, соответственно.

В средне-сферическом приближении для потенциала с жесткой сердцевиной на прямую корреляционную функцию $c(r)$ и функцию радиального распределения $g(r)$ накладываются следующие граничные условия:

$$\begin{cases} g(r) = 0, & r < \sigma \\ c(r) = -\beta\varphi(r), & r > \sigma \end{cases} \quad (2)$$

где $\beta = 1/kT$; k – константа Больцмана.

Используемый нами подход применения MSA к потенциалу прямоугольной ямы состоит в представлении $c(r)$ внутри твердосферного остова в виде полинома, коэффициенты которого определяются численно из условия равенства нулю в этой области функции $g(r)$.

Структурный фактор рассчитывается по известной формуле:

$$S(q) = \frac{1}{1 - \rho c(q)} \quad (3)$$

где ρ – плотность жидкости.

Для расчета структурного фактора чистого жидкого металла в рамках вышеописанного MSA-SW подхода необходимо задать значения параметров потенциала SW для исследуемого металла. Мы предлагаем их определять из характеристик эффективного парного потенциала, рассчитываемого в рамках теории локального модельного псевдопотенциала.

Таким образом, мы представляем новую процедуру расчета структурных факторов чистых простых жидких металлов в рамках модели прямоугольной ямы, используя теорию псевдопотенциала и полуаналитический подход для описания жидкости с потенциалом SW в рамках средне-сферического приближения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минпромнауки РФ (грант поддержки ведущих научных школ №2022.2003.03)

Цепочечные агрегаты в магнитных жидкостях, помещенных во внешнее однородное магнитное поле произвольной напряженности

Менделев Валентин Сергеевич
Уральский Государственный Университет
Иванов Алексей Олегович д.ф.-м.н.
vm@apiural.ru

Магнитные жидкости представляют собой коллоидные взвеси мельчайших частиц магнитных материалов (магнетит, кобальт и др.), в жидких носителях. Каждая частица обладает собственным магнитным моментом, зависящим от выбранного ферроматериала и объема магнитного ядра, в связи с чем внешнее

магнитное поле может оказывать существенное влияние на различные характеристики системы (например, вязкость), что часто находит применение в современных технологиях.

В различных работах по компьютерному моделированию было выявлено наличие в феррожидкостях цепочечных агрегатов. Именно их возникновением зачастую объясняют различные эффекты, проявляющиеся в магнитных жидкостях (особенно при наличии внешнего магнитного поля), которые не могут быть объяснены существующими на данный момент моделями, не учитывающими их формирование.

Вообще говоря, учет влияния цепочек на свойства жидкости приводит к необходимости проведения чрезвычайно трудоемких вычислений, поэтому ранее в большинстве аналитических работ, связанных с цепочками, рассматривались лишь предельные случаи бесконечной и нулевой напряженности внешнего магнитного поля. Цепочки образуются при условии сильного диполь-дипольного взаимодействия, так как для поддержания устойчивой связи необходимо, чтобы энергия связи значительно превышала тепловую энергию. Для реальных полидисперсных магнитных жидкостей это означает, что цепочки состоят исключительно из крупных частиц, доля которых обычно не превышает 2-3% от общего числа феррочастиц.

В данной работе рассматривается модель [1], позволяющая анализировать структуру и свойства магнитной жидкости во внешнем магнитном поле произвольной напряженности. Для ее построения использовался стандартный подход минимизации функционала свободной энергии. При использовании подобного подхода наиболее сложным моментом (для случая внешнего магнитного поля произвольной напряженности) является вычисление конфигурационного интеграла. Он представляет собой интеграл от плотности распределения Гиббса по всем ориентационным и трансляционным степеням свободы каждой частицы в цепочке. Для случая ненулевого однородного внешнего магнитного поля добавляется еще интегрирование по углу наклона первого элемента цепочки относительно вектора напряженности. Например: для димера ($n=2$) интеграл получается 6-кратным (если не производить никаких преобразований).

В работе принимаются следующие ограничения: жидкость предполагается монодисперсной; каждую цепочку рассматриваем как отдельный структурный элемент, обладающий собственными пространственными и ориентационными степенями свободы; учитывается взаимодействие только между ближайшими соседями в цепочке; взаимодействие между цепочками не учитывается. Такими свойствами обладают сильно разбавленные жидкости с крупными частицами.

Для вычисления конфигурационного интеграла была использована специальная техника матриц поворота. Была получена рекуррентная формула, позволяющая находить значения конфигурационного интеграла для произвольного n без существенных вычислительных затрат.

Вычисленные с использованием указанной формулы данные показали отличное совпадение с результатами численного счета тех же интегралов.

Кроме того, было произведено сравнение полученных при помощи этой модели значений для начальной восприимчивости и намагниченности (учитывая наличие в системе цепочек длиной до 20 частиц) с данными компьютерной симуляции методом молекулярной динамики, производимой в Институте Макса Планка (г. Майнц, Германия). Значения совпали практически точно.

Были получены количественное распределение цепочек по длинам, значения для намагниченности и начальной восприимчивости при различных концентрациях, напряженностях магнитного поля и силе диполь-дипольного взаимодействия между частицами.

Список публикаций:

[1]. V.S. Mendeleev and A.O. Ivanov, *Phys. Rev. E* 70, 051502 (2004).

Поведение производства энтропии вблизи стационарного состояния. Задача теплопереноса в стержне

Назарова Анастасия Сергеевна

Мартюшев Леонид Михайлович

Уральский Государственный Технический Университет (УПИ)

Мартюшев Леонид Михайлович, к.ф.-м.н.

nasarovaas@ekat.ru

Принцип минимума производства энтропии Пригожина заключается в том, что в стационарном режиме любой открытой неравновесной системы производство энтропии минимально по сравнению с режимами нестационарными, отвечающими тем же условиям на границе между системой и окружающей средой.

Принцип Пригожина очень быстро получил весьма широкую популярность и стал широко использоваться при решении различных задач в области физики, химии, биологии [1, 2, 3]. Этому способствовал высокий личный авторитет Пригожина. Существуют работы, в том числе и относительно свежие, в которых нелокальный принцип Пригожина пытаются либо обобщить [4, 5], либо опровергнуть [6].

Однако, при этом часто обнаруживается, что исследователи не до конца понимают область справедливости подхода Пригожина (кстати, изложенный у него не достаточно ясно, без точного указания области применимости, а порой даже противоречиво). Поэтому возникла необходимость подробного рассмотрения нелокального принципа Пригожина для выяснения действительной области его применимости.

Если предположить, что в рассматриваемой одномерной задаче теплопереноса в стержне температурные градиенты направлены вдоль оси \tilde{x} , то полное производство энтропии определяется выражением (λ - коэффициент теплопроводности)

$$\tilde{P} = \frac{d_i \tilde{S}}{d\tilde{t}} = \int_0^l \lambda \tilde{T}^2 \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \frac{1}{\tilde{T}(\tilde{x})} \right)^2 d\tilde{x} = \int_0^l \lambda \frac{1}{\tilde{T}(\tilde{x})^2} \left(\frac{\partial \tilde{T}(\tilde{x})}{\partial \tilde{x}} \right)^2 d\tilde{x} \quad (1)$$

У Пригожина рассматривается близкий к равновесию линейный режим [7]. Это значит, что кинетические коэффициенты должны рассматриваться как константы. Так как $\tilde{T}(\tilde{x})$ - функция координат, то такое предположение, строго говоря, неверно. Оно соблюдается только в приближении, когда температурные изменения от одного конца системы до другого малы по сравнению со средней температурой, т.е. если для всех x выполняется неравенство $|\tilde{T}(\tilde{x}) - \tilde{T}_{cp}| / \tilde{T}_{cp} \ll 1$, где \tilde{T}_{cp} - средняя температура стержня. Следовательно, можно аппроксимировать: $\tilde{T}^2 \approx \tilde{T}_{cp}^2$ и использовать $\lambda \tilde{T}_{cp}^2$ вместо $\lambda \tilde{T}^2$.

$$L_{qq} = \lambda \tilde{T}^2 \approx \lambda \tilde{T}_{cp}^2 - \text{феноменологический кинетический коэффициент} \quad (2)$$

Таким образом, полное производство энтропии в случае соблюдения условий теоремы Пригожина должно быть записано в форме

$$P_{np} = \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\lambda T_{cp}^2}{T_{cp}^4} \int_0^1 \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)^2 dx = \frac{\lambda}{T_{cp}^2} \int_0^1 \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)^2 dx \quad (3)$$

Мы рассматривали безразмерное нестационарное уравнение теплопроводности $\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ с граничными условиями $T|_{x=0} = 1$, $T|_{x=1} = \alpha$, где α имеет смысл разности температур на концах стержня, и начальным возмущением $Ae^{-\frac{n(\alpha^{n+1}-1)}{(n+1)}x} \sin(\pi nx)$. Производство энтропии для нестационарного случая P рассчитывали по формуле (1). В случае, если α и t достаточно велики, выражение для производства энтропии запишется в виде не берущегося аналитически интеграла. Производство энтропии для стационарного случая:

$$P_{cm} = \int_0^1 \frac{(\alpha-1)^2}{0((\alpha-1)x+1)^2} dx = \frac{(\alpha-1)^2}{\alpha} \quad (4)$$

Если рассматривать разность δP нестационарного P и стационарного P_{cm} производства энтропии, то, анализируя знак этой зависящей от времени разности, можно сделать вывод о виде полного производства энтропии (о его стремлении к минимуму или максимуму при приближении к стационару).

Расчет P_{cm} и δP был произведён в пакете Maple 8. Результаты приведены на рис. 1.

Зависимость производства энтропии вносимого возмущением от разницы температур на концах стержня при $A < 0$.

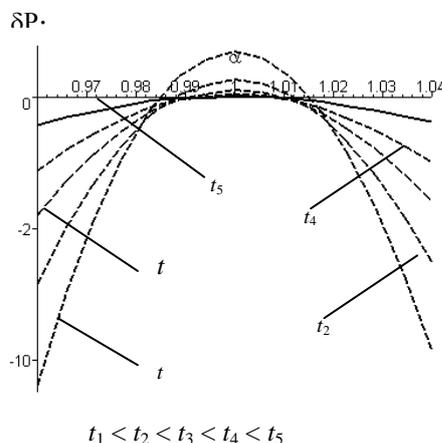


рис. 1

Результаты рис.1 показывают, что область применимости теоремы Пригожина достаточно узка и при приближении к стационарному режиму сужается.

Список публикаций:

- [1] Гроот С., Мазур П. *Неравновесная термодинамика*. М., 1964., 426с
- [2] Котоусов Л. С. *Принцип минимума производства энтропии и его применение в практических задачах // Проблемы современной физики*. Л., 1974.
- [3]. Стеблев Ю. И. *Условия минимальных потерь в теории поверхностного эффекта // Электричество*. 1983, №6. С. 62 – 65..
- [4]. Плешанов А. С. *Об экстремальных принципах в теплопроводности твёрдого тела // Теплофизика высоких температур*, 2002, Т. 40, №2, С. 323 – 327.
- [5]. Зотин А. И., Зотин А. А. *Направление, скорость и механизмы прогрессивной эволюции*. М.: Наука, 1999, 320 с.
- [6]. Петров Ю. П. *Информация и энтропия в кибернетике: Учебное пособие*. Л., 1989., 52с.
- [7]. Пригожин И. Р., Конденуди Д. *Современная термодинамика*. М: Мир. 2002., 402с.

Экспериментальные исследования течений нанодисперсных порошков

Обанин Виктор Вячеславович

Новосибирский Государственный Университет

А.Б.Семенов

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН

bard@itam.nsc.ru

В современной науке все большее развитие получают исследования объектов, размеры которых не превышают 100 нанометров. Соответствующая область знания собирательно называется “Нанотехнологии”. Одной из форм существования нано - объектов являются порошки, состоящие из первичных частиц с вышеуказанными размерами. Такие порошки можно рассматривать с различных точек зрения. Например, их можно “традиционно” относить к гранулированным средам. Для описания последних развивается несколько конкурирующих, и даже взаимоисключающих подходов. Провести их взаимное сравнение не представляется возможным, поскольку практически отсутствуют экспериментальные данные (и способы измерения) о “внутренних” динамических параметрах течения гранулированной среды при ее движении.

В настоящей работе предполагается, что нанодисперсные порошки есть новый тип сплошной среды [1]. Во-первых, в ней размеры частиц сравнимы с размерами молекул газа. Во-вторых, количество первичных частиц сравнимо с количеством молекул газа, как в покое, так и в движении, что может быть показано элементарными подсчетами. В-третьих, характер взаимодействия частиц имеет важнейшее значение и зависит от вещества частиц. В-четвертых, хотя плотность (“насыпная”) порошков велика по сравнению с плотностью газа, все же она на порядки меньше плотности вещества в компактном состоянии.

Такая среда неньютоновская, сжимаемая, частицы в ней образуют агломераты разного уровня прочности, и т.д. Однако эти трудности можно преодолеть, если, представляя ее сплошной средой типа “легкой жидкостью”, или “тяжелого газа”, найти способы сопоставления внутренней структуры течения с макропараметрами. Тогда поведение нанопорошков можно будет сравнивать с ситуациями, достаточно хорошо изученными в соответствующих разделах классической (и неклассической) механики.

Целью настоящей работы является получение данных о свойствах течений нанопорошков, опираясь на аналогии с механикой жидкости.

Использовались экспериментальные установки различного уровня сложности, моделирующие классические задачи механики жидкости: падение тяжелого шара под действием силы тяжести в покое; течение порошка через трубы различного диаметра под действием давления, силы тяжести, вентилятора; след за цилиндром в потоке порошка; затопленная пульсирующая струя в окружающем порошке; возбуждение звука и распространение волн в нанопорошках и другие. В качестве рабочих сред использовались различные типы промышленно выпускаемых и опытных нанодисперсных порошков оксида алюминия Al_2O_3 и диоксида кремния SiO_2 (аэросил) (и некоторых других веществ) с удельной поверхностью до $380 \text{ м}^2/\text{г}$, средним размером первичных частиц от 7 нанометров и насыпной плотностью от 40 граммов на литр. Основными средствами измерений служили видеосъемка и впервые примененный к исследованию таких сред термоанемометрический метод измерений, идея использования которого принадлежит автору.

Проведена оценка интегральных и флуктуационных параметров течений, обнаружены новые типы волн, показано существование пограничных слоев. Измерена скорость распространения “звука” в порошке. Полученные результаты могут быть полезны для построения основ теории движения сравнительно нового типа сплошной среды – нанодисперсных порошков. Данные о динамических свойствах движений нанопорошков, например, необходимы для развития нового раздела в “науке дисперсных состояний” - реология нанопорошков.

Для практики развитие соответствующих исследований будет полезно при решении проблем, возникающих при транспортировке нанодисперсных порошков, их хранении, компактировании и др.

Список публикаций:

[1]. S.P.Bardakhanov. *Flow of Media with High Nanoparticle's Concentration // International Symposium SEDIMENTATION AND SEDIMENT TRANSPORT. Monte Verita, Switzerland, 2-6 June 2002. Proceedings – Kluwer Academic Publishers, 2003, p. 137-142.*

Фазовые переходы в магнитореологических суспензиях

Романчук Алексей Петрович

Искакова Лариса Юрьевна, Зубарев Андрей Юрьевич
Уральский Государственный Университет

Зубарев Андрей Юрьевич, д.ф.-м.н.

alexr@kazna.ru

Магнитореологические суспензии (МРС) привлекают большой интерес исследователей и практиков из-за возможности управлять их реологическими и другими физическими свойствами при помощи умеренных и даже слабых магнитных полей. Типичные магнитореологические суспензии представляют собой взвеси парамагнитных или многодоменных ферромагнитных частиц в немагнитной жидкости – носителе. Приложенное магнитное поле индуцирует магнитные моменты частиц. В результате взаимодействия между поляризованными частицами в МРС возникают различные гетерогенные структуры. Образование таких структур обратимо и является причиной сильных (вплоть до нескольких порядков величины) изменений реологических и других характеристик суспензий в магнитном поле.

Цель работы – теоретическое изучение равновесных конденсационных фазовых переходов в ансамблях частиц МРС. Детально рассмотрены следующие задачи:

Магнитореологические суспензии в бесконечных объемах. Построены фазовые диаграммы равновесного расслоения МРС по типу «газ-жидкость» и «газ – твердое тело». Учитывалась не только объемная конденсация частиц, но и возможность их объединения в линейные цепочки. Продемонстрировано, что, в соответствии со всеми известными компьютерными и лабораторными экспериментами, возникновение цепочек предшествует разделению МРС на две фазы с различными концентрациями.

Расслоение МРС в тонких щелях, помещенных в нормальное к ним магнитное поле. В силу конечности размера щели, в финальном состоянии фазового перехода, в отличие от случая фазовых переходов в бесконечных объемах, плотная фаза представляет собой систему дискретных квазицилиндрических доменов вместо односвязных массивных плотных капель. Диаметр этого домена увеличивается с ростом магнитного поля и слабо (примерно как $L^{2/3}$) увеличивается с толщиной щели L , что находится в соответствии со всеми известными экспериментами.

Инверсные доменные структуры. При достаточно сильных полях в МРС, заполняющих тонкие щели, возможен переход от состояния «плотные квазицилиндрические домены в разбавленной среде» к состоянию «цилиндрические дырки плотности в плотной среде». Такие переходы неоднократно наблюдались в экспериментах. Оценены критерии наступления инверсии доменной структуры, размеры и плотность расположения «дырок» в зависимости от приложенного поля и толщины щели. Расчеты показывают, что инверсия доменной структуры возможна, если концентрация частиц превышает некоторую пороговую концентрацию, зависящую от приложенного магнитного поля.

Таким образом, основные результаты работы говорят о том, что, при увеличении поля фазовое поведение МРС включает следующие этапы. Во-первых, при относительно невысоких значениях магнитного поля в системе возникают линейные цепочки. На втором этапе, когда поле превышает некоторое критическое значение, происходит расслоение системы по принципу «газ цепочек– жидкость цепочек». При дальнейшем же увеличении магнитного поля фазовое расслоение близко к переходу типа «газ – твердое тело». В тонких щелях равновесному состоянию расслоившейся МРС соответствует система квазицилиндрических доменов, которая может испытывать инверсию в систему квазицилиндрических дырок плотности.

Работа выполнена при поддержке фонда CRDF, проект REC 005, грантов РФФИ 03-02-04001 и 04-02-16142, гранта Министерства Образования РФ А03-2.9-8.

Термодинамика молекулярно-кинетических процессов в системе селективно возбужденных молекул на границе раздела фаз

Сачков Виктор Иванович

Сибирский Физико-Технический Институт СО РАН

vicsachkov@mail2000.ru

Рассмотрим возможность процесса разделения молекул на границе раздела фаз в условиях селективного возбуждения. Такой процесс может быть осуществлен при селективном электромагнитном воздействии, например, на изотопную газовую смесь, находящуюся в сорбционном равновесии с поверхностью твердого тела.

Известно, что равновесные процессы весьма чувствительны к внешним воздействиям. Так, если в системе газ – твердое тело, газ имеет среднюю кинетическую энергию частиц, которая может быть вычислена согласно молекулярно-кинетической теории как:

$$E_T = \frac{3}{2} k T N_A, \text{ Дж/моль.}$$

В случае адсорбции молекул на поверхности твердого тела коэффициент прилипания, для газа, соударяющегося с поверхностью со скоростью теплового движения, может быть записан в виде:

$$k_A = 1 - \exp\left(-\frac{E_C}{E_T}\right),$$

где E_C - критическая энергия адсорбции.

Критическая энергия адсорбции в первом приближении может быть оценена в соответствии с уравнением Клаузиуса – Клапейрона, из которого следует, что энергия адсорбции может быть выражена как:

$$E_C = E_C^0 + \int_0^T \Delta C_p dT,$$

где E_C^0 - энергия адсорбции при абсолютном нуле температур, а ΔC_p - изменение удельной теплоемкости газа при его переходе в слой сорбента.

Поскольку, в отсутствии химического взаимодействия поверхности твердого тела с молекулами газа изменение удельной теплоемкости при нехимической адсорбции приближенно можно принять равным изменению удельной теплоемкости вещества при фазовом переходе, то примем $\Delta C_p = C_p' - C_p''$, где C_p' , C_p'' - удельные теплоемкости вещества в газообразном и конденсированном состоянии, соответственно.

Для молекул, находящихся в возбужденном состоянии, соответственно, можно записать:

$$k_A^* = 1 - \exp\left(-\frac{E_C}{E_T + E_V}\right),$$

где E_V - энергия возбуждения.

Рассматривая равновесное распределение возбужденных и невозбужденных частиц на границе раздела фаз газ – твердое тело, можно записать общую схему обмена частиц в данном процессе:



Коэффициент обогащения в данной системе будет равен:

$$\varepsilon = \frac{k_A - k_A^*}{k_A + k_A^*}.$$

Из классической термодинамики, для равновесных процессов известно, что

$$\varepsilon = \alpha - 1$$
$$\alpha = \sqrt[m]{K},$$

где α - коэффициент разделения;

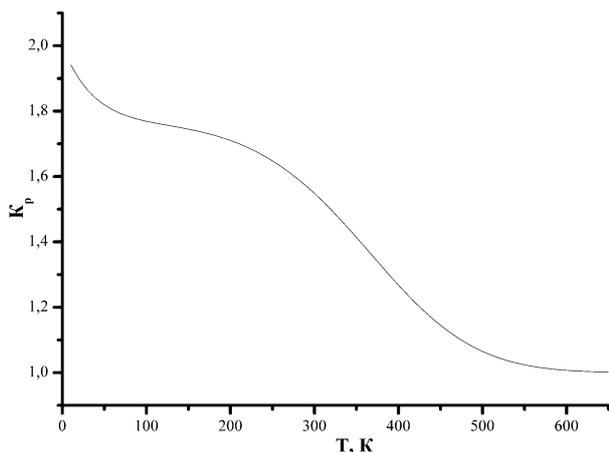


рис. 1 Температурная зависимость K_p

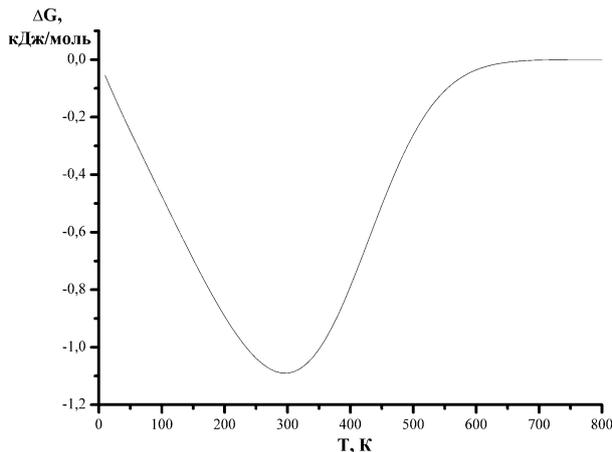


Рис. 2 Температурная зависимость энергии Гиббса

m, n - стехиометрические коэффициенты в схеме обмена.

Таким образом, с привлечением представленных формул возможно термодинамическое описание молекулярно-кинетических процессов на границе раздела фаз в системе селективно возбужденных молекул.

Рассчитаем по предлагаемой методике термодинамику равновесия, например, в системе селективно возбужденного углекислого газа.

Предположим, что селективное возбуждение газа осуществляется CO_2 - лазером ($\lambda = 947\text{ см}^{-1}$). Тогда 1 моль газа, находящегося в резонансно возбужденном состоянии, будет иметь 11,5 кДж избыточной энергии, введенной за счет излучения.

Известно, что удельная теплоемкость CO_2 в газообразном и конденсированном состояниях описывается, соответственно:

$$C_p' = 27,7 + 0,04T - 10^{-5} T^2$$

$$C_p'' = -8,7 + 0,79T - 0,003T^2$$

В этом случае: $\Delta C_p = 36,48 - 0,75T + 0,003T^2$.

Соответственно, температурная зависимость энергии адсорбции, в первом приближении, полагая, что вклад E_C^0 очень мал, может быть выражена как:

$$E_C = 36,48T - 0,75 \frac{T^2}{2} + 0,003 \frac{T^3}{3}$$

В соответствии с этим, можем записать конечное выражение, описывающее температурную зависимость константы равновесия в данной системе:

$$K_p = 1 + \frac{e^{-\frac{E_C(T)}{E_T(T)+E_v}} - e^{-\frac{E_C(T)}{E_T(T)}}}{2 - e^{-\frac{E_C(T)}{E_T(T)+E_v}} - e^{-\frac{E_C(T)}{E_T(T)}}}$$

Численный расчет по данной формуле дает следующий вид зависимости, представленной на рисунке 1. Расчет энергии Гиббса в данной системе позволяет оценить термодинамику молекулярно кинетических процессов в системе селективно возбужденных молекул на границе раздела фаз газ – твердое тело. Полученная зависимость представлена на рисунке 2.

Анализ полученных зависимостей показывает, что газовая фаза в данной системе будет обогащена возбужденными молекулами, а твердая фаза сорбента будет обогащаться невозбужденными молекулами. Причем, наибольший эффект следует ожидать в области от 250 до 350К.

Проведенные оценки свидетельствуют о возможности эффективного разделения селективно возбужденных молекул, что может быть использовано, например, для разработки нового способа разделения изотопических молекул и оптических изомеров, характеризующегося повышенной селективностью, по сравнению с известными способами разделения изотопов, в том числе хроматографическими. А также о возможности селективного управления термодинамикой молекулярно-кинетических процессов на границе раздела фаз.

Особенности возникновения резонансных явлений при различной форме плохообтекаемых тел

Семёнов Андрей Борисович

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН

Бардаханов Сергей Прокопьевич д.ф.-м.н.

asemenov@itam.nsc.ru

Повышенный интерес к аэроакустическому резонансу вызван задачами управления резонансными явлениями в разнообразных аэродинамических установках. Под аэроакустическим резонансом понимается звука в аэродинамическом канале при условии совпадения частоты когерентных структур в следе за плохообтекаемым телом с основной частотой резонансной области (которая в данном случае ограничена краями плохообтекаемого тела) [1,2]

Цель данной работы заключалась в изучении влияния формы плохообтекаемого тела на аэроакустический резонанс. В работе применялись плоские плохообтекаемые тела (пластины) с разной формой задней кромки (тупой и острой). Аэроакустический резонанс, возникающий при помещении в воздушный канал плоского плохообтекаемого тела с круглыми задними кромками был подробно освещён в [1,2].

Основной частью экспериментальных исследований явилось изучение зависимости основной частоты когерентных структур в следе за плохообтекаемым телом от скорости набегающего потока. При этом плохообтекаемыми телами были пластины с различной формой задней кромки. Измерения проводились термоанемометрическим методом на малотурбулентной аэродинамической трубе МТ-324 в институте теоретической и прикладной механики СО РАН. В ходе эксперимента измерялись основные характеристики аэроакустического резонанса (частота, диапазон скоростей, в пределах которых наблюдаются резонансные явления). В результате проведённых экспериментов было замечено, что ширина резонансной области при аэроакустическом резонансе на плохообтекаемом теле с тупой задней кромкой гораздо уже чем на теле с острой кромкой, а так же с круглой кромкой. Этот факт может быть использован для регулирования скорости потока, при которой имеют место резонансные явления.

Предположительной причиной изменения ширины резонансной области при изменении формы плохообтекаемого тела - генератора когерентных структур, может быть передвижение точки отрыва вверх по потоку при увеличении скорости потока, при этом основная частота в следе за плохообтекаемым телом совпадает с резонансной частотой данной резонансной области в большем диапазоне скоростей для пластины с острой задней кромкой, чем при аэроакустическом резонансе на плоском плохообтекаемом теле с тупой и круглой задней кромкой.

Список публикаций:

[1]. Бардаханов С. П., Лыгденов Е. В. (1990). Когерентные структуры в следе за плохообтекаемым телом и генерация звука в резонансных условиях. Изв. СО АН СССР. Сер. Тех. Наук, вып. 2, с. 36-40.

[2]. Бардаханов С. П., Порошин Е. В. (1994). Исследование свойств аэроакустического резонанса в течении с когерентными структурами. Теплофизика и аэромеханика, т. 1, №4, с. 313-321.

Исследование процессов кристаллизации объемно – аморфизируемого сплава

Fe₅₀Mo₁₄Cr₁₅C₁₅B₆

Стерхова Ирина Валентиновна

Удмуртский Государственный Университет

Ладьянов Владимир Иванович, д.ф.-м.н.

las@pti.udm.ru

В последние годы активно ведутся исследования новой группы объемных аморфных сплавов (ОАС) на основе железа [1-3]. Создание таких материалов весьма важно, учитывая их высокие магнитные и прочностные свойства, а также широкое применение сплавов на основе железа – чугунов и сталей. Эти сплавы имеют высокую стеклообразующую способность – максимальная толщина аморфного слоя достигает 1-6 мм [2]. Однако, существует возможность оптимизации получения аморфного состояния сплава путем варьирования его химического состава или изменение условий получения. Режимы закалки, используемые для повышения

стеклообразующей способности, должны обеспечивать способность расплава к переохлаждению, что является одним из условий стеклообразования. Для определения оптимальных условий закалки необходимо исследовать состояние расплава.

Поэтому в данной работе проводили исследование влияния степени перегрева расплава $Fe_{50}Mo_{14}Cr_{15}C_{15}B_6$ на величину его переохлаждения, а также процессов кристаллизации этого сплава. Исследование проводили методом дифференциального термического анализа (ДТА) и металлографии. Оценку фазового состава образцов проводили методом рентгеноструктурного анализа.

Исходные образцы в виде стержней были получены методом насасывания расплава в кварцевые трубки при температуре $1380^{\circ}C - 1390^{\circ}C$. Согласно данным рентгеноструктурного анализа они являются аморфно – кристаллическими. Металлографическое исследование стержней в исходном состоянии показало наличие аморфного слоя по периферии стержня и кристаллической сердцевины.

По данным ДТА плавление образца протекает в три стадии, температуры которых соответственно равны $1111^{\circ}C$, $1157^{\circ}C$, $1187^{\circ}C$. Исследование влияния степени перегрева расплава на величину его переохлаждения проводили в режиме термоциклирования образца в интервале температур от $1200^{\circ}C$ до $1560^{\circ}C$ с последовательным повышением температуры расплава в следующем цикле на $20^{\circ}C$. Время выдержки расплава при максимальной температуре цикла составляло 20 минут. Скорость изменения температуры расплава в процессе охлаждения составляла $100^{\circ}C/мин$. Полученные результаты показывают, что переохлаждение по ликвидусу увеличивается с увеличением температуры расплава. Однако, в интервале температур $1380-1420^{\circ}C$ наблюдается резкое изменение переохлаждения - скачок вниз (на 20%). Таким образом, температурная зависимость ΔT_L сплава $Fe_{50}Mo_{14}Cr_{15}C_{15}B_6$ в интервале температур $1200^{\circ}C$ до $1560^{\circ}C$ имеет две монотонно возрастающие части $1200 - 1400^{\circ}C$ и $1400 - 1560^{\circ}C$, что может быть следствием изменения структурного состояния расплава в области температур. Изменение величины переохлаждения сказывается на виде термограмм. На всех полученных кривых ДТА в режиме охлаждения наблюдаются два максимума тепловыделения, однако форма первого максимума и его величина существенно меняется при переходе максимальной температуры расплава $1400^{\circ}C$. Такое изменение термограмм отражается и на микроструктуре полученных в результате слитков. Для металлографических исследований были получены два образца охлажденные в тех же условиях от $1300^{\circ}C$ и $1500^{\circ}C$. Микроструктура образцов состоит из первичных кристаллов и нормальной ячеистой эвтектики. Увеличение температуры охлаждения приводит к увеличению объемной доли первичных кристаллов по сравнению с эвтектикой и к изменению их морфологии, что в свою очередь приводит к изменению структуры эвтектических колоний.

Таким образом, проведенные исследования показывают что в интервале температур $1380-1420^{\circ}C$ наблюдается резкое уменьшение величины переохлаждения сплава $Fe_{50}Mo_{14}Cr_{15}C_{15}B_6$ которое отражается на его микроструктуре. Для исследования обнаруженного эффекта на способность к аморфизации данного сплава необходимы дополнительные исследования.

Список публикаций:

- [1] Петржик М.И., Молоканов В.В. *Известия Академии Наук. Серия физическая*, 65, №10, 1384-1389 (2001).
- [2] Молоканов В.В., Шалыгин А.Н., Петржик М.И., и др. *Перспективные материалы*, №3, 10-17(2003).
- [3] Молоканов В.В., Петржик М.И., Михайлова Т.Н., и др. *Металлы*, №5, 112-115(2000).

Каталитические реакции атмосферных газов на теплозащитных поверхностях в условиях слабой ионизации

Судаков Иван Алексеевич

Уральский Государственный Университет

Борисов Сергей Фёдорович, д.ф-м.н.

physicsivan@mail.ru

При вхождении космических аппаратов в атмосферу Земли и планет возникает необходимость исследовать теплообмен с каталитическими поверхностями высокотемпературных покрытий, применяемых для теплозащиты летательных аппаратов.

В ходе работы были выполнены следующие шаги:

1. Выстроена методология применения основных закономерностей катализа к данной проблеме.
2. Рассмотрены различные методы моделирования гетерогенных каталитических реакций на теплозащитных поверхностях (механизмы на каталитической поверхности в диссоциированном, слабо ионизированном воздухе).
3. Проанализированы теплозащитные свойства материалов орбитального корабля «Буран» в условиях данных моделей гетерогенных каталитических реакций.

4. Изучена возможность описания каталитических свойств поверхности при входе в атмосферы других планет на основе «земных» моделей гетерогенных каталитических реакций.

По результатам работы можно сделать некоторые выводы:

1. При исследовании теплообмена с каталитической поверхностью была построена система гетерогенных каталитических реакций, являющаяся ключевой в данной модели:

$$\sum_{j=1}^{N_1} l_{rj} (A_j - S) + \sum_{j=1}^N \gamma'_{rj} A_j \stackrel{k_r}{=} \sum_{j=1}^{N_1} l''_{rj} (A_j - S) + \sum_{j=1}^N \gamma''_{rj} A_j, r = 1, \dots, N_r$$

2. Получены граничные условия на каталитической поверхности, обтекаемой диссоциированным и слабо ионизованным воздухом.

3. Выявлены ключевые проблемы каталитичности поверхности орбитального корабля «Буран».

4. Осуществлена постановка задачи исследования каталитичности поверхности космических аппаратов в условиях долгосрочных пилотируемых полетов на Марс с последующим возвращением в атмосферу Земли.

Влияние химических присадок на скорость ультразвука в автомобильных бензинах

Табаков Олег Васильевич

Рязанская Государственная Сельскохозяйственная Академия

Пащенко Василий Михайлович д.б.н., Ванцов Виктор Иванович к.т.н.

Phisik@mail.ryazan.ru

На кафедре физики РГСХА разработан способ и устройство для определения октанового числа автомобильных бензинов с помощью ультразвука.

Теоретические исследования заключались в обосновании исследуемых физических параметров с точки зрения их возможности коррелировать с октановым числом, разработке способов определения октанового числа и их анализа, а также обоснование конструктивно-технологических параметров устройства для определения октанового числа.

Экспериментальные исследования выполнялись на специально изготовленной оригинальной установке с использованием стандартных и частных методик.

Анализ экспериментальных исследований показывает, что скорость ультразвука зависит от особенностей структуры и химического строения вещества. На рисунках 1 и 2 представлены результаты по определению скорости распространения ультразвуковых волн в бензинах

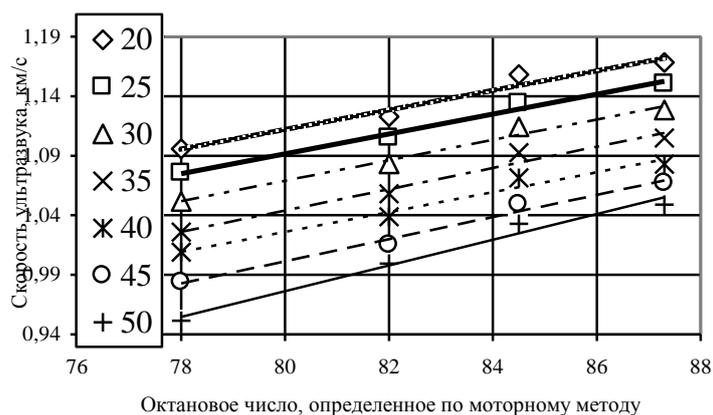


рис 1. График зависимости скорости ультразвука от октанового числа бензина при различных температурах

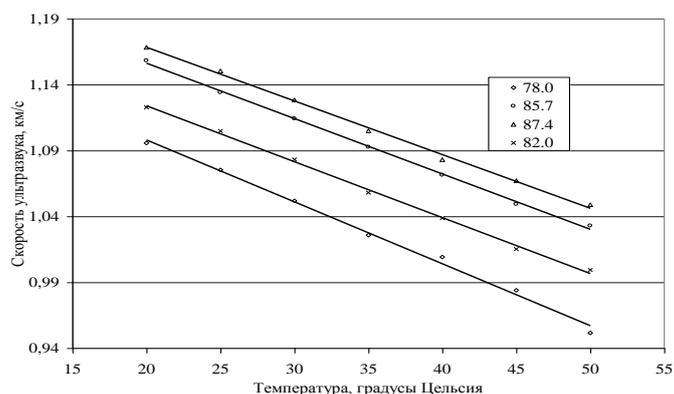


рис 2 . Графики зависимости скорости ультразвука от температуры в бензинах

Выявлена зависимость октанового числа бензина от скорости ультразвука. При изменении октанового числа от 78,0 до 87,4 по моторному методу скорость ультразвука возрастает на 73 м/с.

Скорость ультразвука зависит от температуры. При повышении температуры на 1⁰ С скорость уменьшается в среднем на 4,18 м/с.

В настоящее время ведутся эксперименты по изучению влияния химических присадок на скорость ультразвука в автомобильных бензинах.

Эффекты статистической памяти в жидкостях и в стёклах

Хуснутдинов Рамиль Миннегазович

Шурыгин Виктор Юрьевич

Казанский Государственный Педагогический Университет

Юльметьев Ренат Музипович, д.ф.-м.н.

khrm@mail.ru

В последнее время в физике конденсированного состояния большое внимание уделяется микродинамике стекольного перехода. Этот переход является переходом из эргодического состояния в неэргодическое, которое характеризуется рядом особенностей: очень медленной релаксацией, наличием двух релаксационных процессов, резким изменением таких параметров как объем, энтропия, энтальпия, вязкость и т.д.

В данной работе проведено исследование микродинамики жидкостей и стекол с помощью теории дискретных немарковских процессов [1]. Основу данной теории составляют временные корреляционные функции, вида

$$a(t) = \frac{\langle W_0(0)^* W_0(t) \rangle}{\langle |W_0(0)|^2 \rangle} \quad (1)$$

$$b(t) = \frac{\langle W_1(0)^* W_1(t) \rangle}{\langle |W_1(0)|^2 \rangle} \quad (2)$$

где $W_0(t)$ - исходная динамическая ортогональная переменная (в нашем случае флуктуация полной энергии системы, полученная с помощью компьютерного моделирования), $W_1(t) = f[W_0(t)]$ - новая динамическая ортогональная переменная. В качестве меры статистической памяти в этом подходе является параметр марковости-немарковости, впервые введенный в работе [2].

$$\varepsilon(\omega) = \sqrt{\frac{|FT[a(t)](\omega)|^2}{|FT[b(t)](\omega)|^2}} \quad (3)$$

Если значение $\varepsilon \rightarrow \infty$ говорят о марковских процессах, $\varepsilon \gg 1$ - квазимарковских и $\varepsilon \sim 1$ - немарковских.

Некоторые результаты наших исследований представлены на графиках.

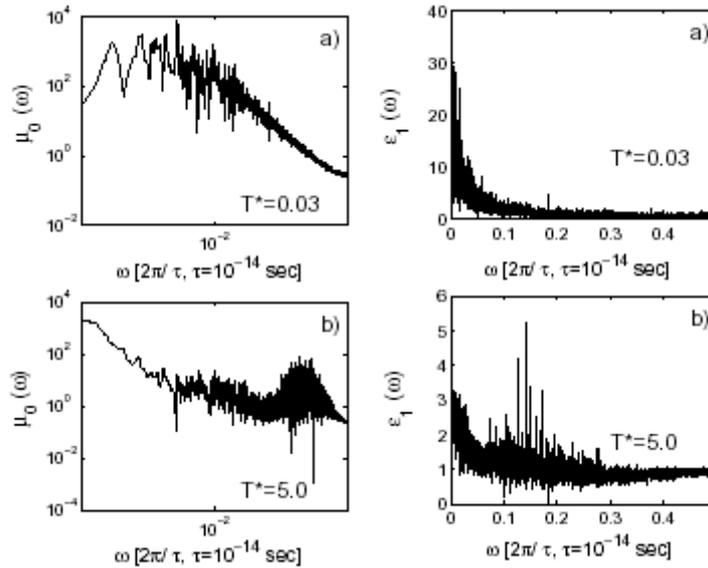


рис.1

рис.2

На рис. 1 представлены спектры мощности исходных временных корреляционных функции $\mu_0(\omega) = |FT[a(t)](\omega)|^2$ для двух температур: жидкое состояние ($T^* = 5.0$, где $T^* = \frac{Tk_B}{\varepsilon_{LG}}$ - приведенная температура, ε_{LG} - один из параметров потенциала межчастичного взаимодействия, размерностью энергии), стекловое состояние ($T^* = 0.03$). Из рисунка видно, что особо сильное различие проявляется на высоких частотах: в жидкостях наблюдается всплеск, в стеклах же наблюдается фрактальная зависимость.

На рис. 2 представлены частотные зависимости первой точки параметра марковости-немарковости для двух состояний вещества при тех же температурах. Наиболее информативным является значение параметра марковости-немарковости на нулевой частоте. Из рисунка видно, что это значение в жидкостях принимает величины порядка единицы, что соответствует немарковским процессам, т.е. динамика жидкостей сильно зависит от предыстории развития системы. В стеклах же величина параметра марковости-немарковости на нулевой частоте соответствует случаю квазимарковских процессов, т.е. наблюдается резкое ослабление эффектов памяти по сравнению с жидкостями.

Список публикаций:

- [1]. R.M. Yulmetyev, P. Hänggi, F. Gafarov, *Phys. Rev. E*, **62** (5) (2000).
 [2]. V. Yu. Shurygin, R.M. Yulmetyev, and V.V. Vorobjev, *Phys. Lett. A*, **148**, 199 (1990).

Численное моделирование переохлажденных жидкостей методом молекулярной динамики

Хуснутдинов Рамиль Миннегазович

Шурыгин Виктор Юрьевич

Казанский Государственный Педагогический Университет

Юльметьев Ренат Музипович, д.ф.-м.н.

khrm@mail.ru

В данной работе мы представляем результаты компьютерного моделирования молекулярной динамики. Система с периодическими граничными условиями состояла из 864 частиц. Взаимодействие частиц осуществлялось через потенциал Леннарда-Джонса с параметрами $\sigma = 3.405 \cdot 10^{-10}$ м и $\varepsilon_{LG}/k_B = 125.2^\circ K$. В качестве алгоритма интегрирования движения использован алгоритм Верлета в скоростной форме. При температуре $T^* = 5.0$ (жидкое состояние) и постоянной численной плотности $n^* = 1.0$ ($T^* = \frac{T \cdot k_B}{\varepsilon_{LG}}$, $n^* = n\sigma^3$ - соответственно приведенная температура и плотность) система быстрым

охлаждением (скорость охлаждения $\dot{T} = 10^{12} K/c$) проскочив температуру плавления была приведена в переохлажденное состояние (стекло) к температуре $T^* = 0.03$. Исследование системы проводилось при следующих температурах $T^* = \{5.0; 4.0; 3.0; 2.0; 1.0; 0.9; 0.8; 0.7; 0.6; 0.5; 0.4; 0.3; 0.2; 0.1; 0.07; 0.03\}$. По

полученным данным были вычислены радиальная функция распределения (РФР) $g(r)$, нормированная временная автокорреляционная функция скорости $Z(t)$, средний квадрат смещения $R^2(t)$, используя формулы представленные ниже.

$$\rho g(\vec{r}) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i \neq j}^N \delta(\vec{r} - (\vec{r}_i - \vec{r}_j)) \right\rangle \quad (1)$$

$$\Psi(t) = \frac{\langle V(t)V(0) \rangle}{\langle V(0)V(0) \rangle} \quad (2)$$

$$R^2(t) = \frac{\sum_{i=1}^N |\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(0)|^2}{N} \quad (3)$$

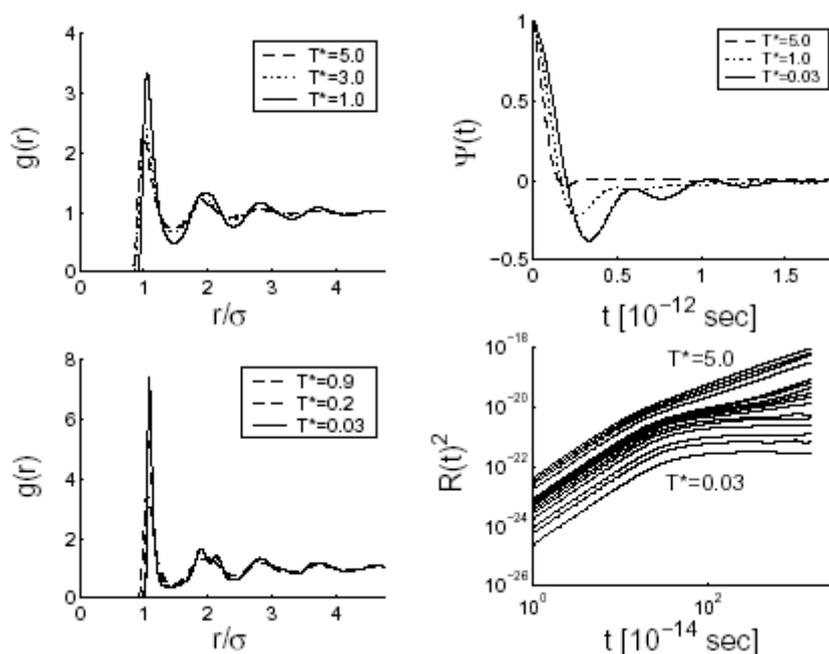


рис.1

рис.2

Результаты наших исследований представлены на графиках.

На рис. 1 представлены радиальные функции распределения для жидкого состояния (см. верхнюю панель) и переохлажденного состояния (см. нижнюю панель). Видно, что радиальные функции распределения для жидкости и стекла существенно различаются. Эти различия заключаются в следующем: в переохлажденном состоянии вещества первый пик более вытянут по сравнению с подобным пиком РФР в жидком состоянии; расщепление второго пика РФР в переохлажденном состоянии, в жидком же состоянии такая картина не наблюдается.

На рис. 2 представлены нормированные временные автокорреляционные функции скорости частиц (см. верхнюю панель) и средний квадрат смещения (см. нижнюю панель). График представлен в дважды логарифмической шкале. В автокорреляционной функции скорости частиц для стекла область отрицательных корреляций значительно глубже и протяженнее во времени, чем в жидкостях. Средний квадрат смещения в жидком состоянии более прямолинеен по сравнению с средним квадратом смещения в переохлажденном состоянии.

Гидродинамические характеристики турбулентной струи в узком зазоре

Шестаков Максим Владимирович

Новосибирский Государственный Университет

Маркович Дмитрий Маркович, д.ф.-м.н.

maximuss@gorodok.net

Течения жидкости или газа, в которых под влиянием тех или иных физических причин величина одной составляющей поля скорости существенно преобладает над другой, играют важную роль в природных и технических гидродинамических системах. К ним относятся, в частности, крупномасштабные движения океана и атмосфер вращающихся планет, течения с МГД - эффектами. К причинам, приводящим к подавлению одной из составляющих скорости и способствующим реализации квазидвумерных движений относятся: вращение системы в целом, наличие постоянного магнитного поля, пронизывающего электропроводящую жидкость, сильная стратификация по плотности (как, например, в океане), малая толщина жидкого слоя, в котором развивается движение, или совокупность указанных факторов.

В работе проведено экспериментальное исследование характеристик плоской затопленной струи в щелевом канале. Размеры канала: ширина 420 мм, высота 680 мм, глубина 2,4 мм, ширина сопла 24 мм. Измерения проводились при помощи метода PIV (Particle Image Velocimetry). Данный метод позволяет бесконтактно получать мгновенные поля скорости (рис.1). Применение методики PIV позволяет получать данные с высоким пространственным разрешением, и, соответственно, рассчитывать широкий набор одноточечных моментов, пространственных корреляций и спектров, а также дифференциальных характеристик, необходимых для оценки баланса турбулентной энергии. Измерения проводились в широком диапазоне чисел Рейнольдса (250 - 20000). Число Рейнольдса было рассчитано по двойной глубине канала. При помощи статистического анализа ансамбля мгновенных полей скорости получены распределения вектора скорости, рассчитаны значения статистических моментов пульсаций скорости различного порядка (в частности, коэффициенты асимметрии и эксцесса). По мгновенным полям скорости рассчитаны одномерные пространственные спектры пульсаций скорости.

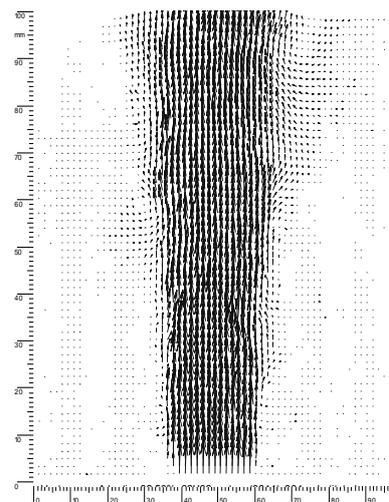


рис. 1.

В течении, реализующемся в изучаемой геометрии, начиная с определенных значений чисел Рейнольдса, образуются крупномасштабные вихревые структуры. Это происходит, когда инерционные эффекты начинают преобладать над вязкими, что приводит к развитию свободно-сдвиговой неустойчивости Кельвина-Гельмгольца. Анализ рассчитанных характеристик позволяет сделать вывод о том, что в исследованном диапазоне параметров струйное течение в щелевом зазоре имеет два основных режима: квазидвумерное турбулентное течение которое соответствует невысоким числам Re и течение, которое является полностью развитым трехмерным турбулентным. Особенностью представленного щелевого течения является подавление поперечной составляющей пульсаций, что приводит к анизотропии течения (отличию между пульсациями скорости вдоль и поперек струи в плоскости щели) вследствие чего закономерности развития когерентных (крупномасштабных) структур существенно отличаются от случая трехмерной свободной струи. Зафиксирован ряд характерных режимов течения в струе: ламинарный, переходной (квазидвумерный) и развитый турбулентный режимы. Ламинарный режим характеризуется низким уровнем пульсаций или их отсутствием, для переходного режима характерны максимальные значения коэффициентов асимметрии и эксцесса в слое смещения (больше, чем в основном потоке) из чего следует, что в этом режиме вихревые структуры слоя смещения являются сильно асимметричными, менее регулярными по сравнению с развитым турбулентным режимом. Эта нерегулярность обуславливает значительную перемежаемость в слое смещения. Полученные результаты количественно совпадают с результатами других авторов.