

УДК 629.735.45

А.И. ДОЛМАТОВ¹, Д.А. ДОЛМАТОВ¹, В.А. БОГУСЛАЕВ²¹Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Украина²ОАО «Мотор Сич»**ГРАНИЦЫ ПРИМЕНЕНИЯ ТЕОРИИ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ В ГАЗОДИНАМИКЕ**

Авторами исследованы недостатки использования принципа сплошной среды при решении разнообразных задач газовой динамики и термодинамики и указаны типы задач, для которых предпочтительнее использовать решения, основанные на моделях дискретного вещества. Рассмотрены основные закономерности, используемые при математическом моделировании задач дискретной среды. Предложены основные способы решения типичных задач газовой динамики дискретного вещества.

дискретная среда, гетерогенное взаимодействие, тонкая пленка

Расчетные схемы газовой динамики в последнее время имеют тенденцию к усложнению и детализации описания картины течения. Широкое применение средств электронно-вычислительной техники позволяет с большей или меньшей точностью решать основные уравнения течения газа или жидкости – в частности, уравнение Навье–Стокса с дополнительными упрощениями, уравнения ламинарного и турбулентного пограничного слоя в криволинейной системе координат и др. Практическое применение существующих расчетных схем дает хорошую сходимость с экспериментальными данными, что вполне естественно, учитывая ту существенную часть поправочных коэффициентов и переменных, которая находится эмпирическим путем.

Вместе с тем нельзя не отметить, что у классических математических моделей существуют ограничения на применение, связанные с самим принципом моделирования. В частности, существенной проблемой является теоретическое моделирование тех видов течения, которое не может быть смоделировано в лабораторных условиях или не может быть подвергнуто измерениям. В подобных случаях используется принцип аналогий, с большей или меньшей достоверностью позволяющий моделировать искомое течение. Еще более сложной задачей является разработка концепций взаимодействия жидкой

или газообразной среды с твердой поверхностью неопределенной формы и детерминирование оптимальной формы этой поверхности. Вообще, гетерогенное взаимодействие, т.е. физические и химические процессы на границе раздела сред и в некоторой окрестности этой границы, существенно зависит от микроизменений пограничных условий – от формы поверхности контакта до химического состава реагирующих веществ. Можно выделить два основных недостатка применения гипотезы сплошной среды при решении задач, связанных с гетерогенным взаимодействием:

1) дискретный (молекулярный) характер процессов химического взаимодействия и физико-химических эффектов (к примеру, диффузии молекул газа в металлическую поверхность);

2) большой размер ячеек конечно-элементной сетки, используемой в газодинамических расчетах, не позволяющий с достаточной точностью описать процессы гетерогенного взаимодействия.

Очевидно, последний недостаток теоретически может быть исправлен с появлением достаточно мощных ЭВМ, позволяющих рассчитывать сетку, линейные размеры ячейки которой сопоставимы с размерами зоны элементарной реакции ($\approx 10d_A$, где d_A – эффективный диаметр наибольшей молекулы или атома, присутствующей в зоне реакции). Прак-

тически же, не говоря о невероятном измельчении сетки при подобных условиях, само применение метода конечных элементов с подобным шагом решетки подразумевает отход от теории сплошной среды и учет межмолекулярного взаимодействия. Упомянутые в пункте 1) эффекты, связанные с дискретностью реальной среды, невозможно описать, исходя из неразрывности рабочего тела.

Для эффективного описания процессов, имеющих место быть в зоне гетерогенного взаимодействия, необходимо выработать новую систему, позволяющую моделировать дискретную физическую среду и совместимую с классическими газодинамическими и термомеханическими расчетными методами.

Одним из простейших примеров успешного совмещения двух взглядов на газовую среду могут быть различные уравнения состояния реальных газов [1] – уравнения, имеющие в основе способа определения поправочных коэффициентов, членов полиному и т.п. параметров методике расчета межмолекулярного взаимодействия – т.е., расчета эффектов дискретной среды. Вместе с тем уравнения реальных газов успешно применяются в механике сплошной среды для расчета течения газа. Таким образом, при разработке расчетных схем для реальных веществ главным условием должна быть возможность использовать конечные результаты расчетов в методиках, предназначенных для моделирования сплошной среды.

Условно можно выделить несколько типов газодинамических задач, требующих использования комбинированных методов расчета:

- 1) реакции гетерогенного горения и окисления;
- 2) определение параметров газового потока в непосредственной окрестности твердой поверхности и описание взаимодействия поверхности с потоком (коэффициент трения, химические реакции на поверхности, разрыхление и др.);
- 3) газовая динамика сильно разреженных газов.

Разумеется, вышеприведенный перечень является далеко не исчерпывающим и просто позволяет наметить основные пути развития газодинамики дискретной среды. Очевидно, в основе расчета любой задачи для дискретной среды следует заменить обыкновенные параметры газа или жидкости, применяемых в классической газовой динамике, на физические значения соответствующих им характеристик реальных объектов.

Основной физической характеристикой любого газа при учете его молекулярной или атомарной структуры является его концентрация, определяющая во многом все остальные газодинамические параметры:

$$C_{\Gamma} = \frac{v_{\Gamma}}{V_{\Gamma}} = \frac{\rho_{\Gamma}}{M_{\Gamma}}, \quad (1)$$

где v_{Γ} – количество вещества газа в объеме V_{Γ} ; ρ_{Γ} – плотность газа; M_{Γ} – молярная масса газа. Следующим важным параметром дискретной среды является кинетическая энергия хаотического движения молекул, определяемая по основному уравнению молекулярно-кинетической теории газов:

$$p = \frac{2}{3} n_V \bar{E}_k, \quad (2)$$

где n_V – молекулярная концентрация газа:

$$n_V = C_{\Gamma} N_A, \quad (3)$$

N_A – число Авогадро; \bar{E}_k – средняя кинетическая энергия молекулы газа. Как известно [2],

$$\bar{E}_k = \frac{3}{2} k T_{\Gamma}, \quad (4)$$

где T_{Γ} – средняя температура газа. В случае твердого тела вместо \bar{E}_k используется величина энергии колебания атома или молекулы в кристаллической решетке или аморфной структуре \bar{E}_o .

Для гетерогенного взаимодействия, в отличие от гомогенных газодинамических процессов, существенную роль играют микропроцессы – взаимодействие частиц веществ газа и жидкости или газа и твердой поверхности в непосредственной близости к

границе раздела сред. Очевидно, для решения задач дискретной физики газа необходимо определить размеры области, определяющей общую картину течения и физическую модель вообще. Именно при определении этой области и проявляются преимущества дискретной точки зрения на строение материи.

Граница раздела сред может быть либо геометрически стационарной (твердая поверхность – газ/жидкость; статистическое исследование горения жидкой струи топлива возле края форсунки), либо нестационарной (горение капель и микро-капель топлива; взаимодействие газовой струи с сильно разреженной средой и др.). Рассмотрим наиболее простой пример задачи дискретной газодинамики – взаимодействие пограничного слоя и твердой стенки в непосредственной окрестности раздела сред.

Классическая газодинамика не имеет механизмов для описания взаимодействия газа и поверхности и использует вместо физической модели обобщенный коэффициент трения, зависимость которого от шероховатости, формы поверхности, типа вещества, составляющего твердую поверхность и параметров газа определяется эмпирическим путем. Кроме того, за счет использования теории сплошной среды невозможно четко описать тот слой газа, скорость которого относительно поверхности равна нулю, но толщина, разумеется, отлична от нуля. Для построения модели молекулярного гетерогенного взаимодействия необходимо ввести понятие тонкой пленки.

Тонкой пленкой в дальнейшем будем называть местный слой дискретного вещества, частицы которого обладают одинаковыми физическими характеристиками и показатели которого, будучи преобразованы и осреднены к типичным газодинамическим функциям, неизменны как для всей тонкой пленки, так и для любого ее участка:

$$\bar{F}_g = \int_{V_{m.n.}} \Theta \left(\sum_{i=1}^n \bar{E}_{k_i} / n \right) dV = \quad (5)$$

$$= \int_{\tau} \Theta \left(\sum_{i=1}^n \bar{E}_{k_i} / n \right) dV = const,$$

где

$$\bar{F}_g = \{T, p, \vec{C}, a, \dots\}, \quad (6)$$

т.е. газодинамическая функция, n – число элементарных частиц газа или жидкости в рассматриваемом объеме; $V_{m.n.}$ – объем тонкой пленки; τ – произвольный объем, отвечающий условию $\tau \in V_{m.n.}$; $\Theta(\bar{x})$ – удельная объемная функция преобразования осредненных параметров дискретной среды к газодинамическим величинам, описывающим сплошную среду.

Учитывая, что размеры тонкой пленки в некоторых случаях могут быть сопоставимы с диаметром частиц газообразного или жидкого вещества, большое значение при расчетах дискретной среды имеет структура обтекаемой твердой поверхности. Наиболее простым случаем структуры является поверхность грани идеального кристалла, форму которой можно описать элементарными математическими функциями.

В большинстве случаев поверхность твердого тела имеет более сложную форму. Общепринятой обобщенной качественной характеристикой поверхности является шероховатость, легко преобразуемая к максимальному отклонению от заданного размера и к среднему значению точной координаты поверхности. Для расчета тонкой пленки в некоторой области необходимо знать математическое ожидание нормальной координаты границы раздела сред относительно теоретически заданной координаты поверхности. Также следует учесть вероятностное распределение координаты поверхности относительно кривой $\xi_n = M[\xi_n]$.

Очевидно, для простейших случаев типа стационарного пограничного слоя условия, позволяющие определить границы тонкой пленки, заключаются в механическом равновесии тонкой пленки:

$$\sum F(m_{m.n.}) = 0, \quad (7)$$

где $F(m_{m.n.})$ – силы межмолекулярного взаимодействия, приложенные к частицам, составляющим тонкую пленку, и диффузном равновесии:

$$\bar{E}_{квн} \frac{\partial n_{вн}}{\partial t} + \bar{E}_{кввнут} \frac{\partial n_{внутр}}{\partial t} = 0, \quad (8)$$

$\bar{E}_{квн}$, $\bar{E}_{кввнут}$ – средняя энергия частиц тонкой пленки и внешней среды соответственно, диффундирующих сквозь границу пленки; $\frac{\partial n_{вн}}{\partial t}$, $\frac{\partial n_{внутр}}{\partial t}$ – скорость диффузии в и из тонкой пленки соответственно.

Скорость диффузии здесь приведена в традиционной химической форме [3].

В более сложных случаях гетерогенного взаимодействия приходится оперировать категориями образования, роста и разрушения тонкой пленки. В частности, при моделировании реакции горения капли топлива (и, вообще, при расчете взаимодействий на границе жидкость – газ) следует учитывать силу поверхностного натяжения жидкости, зная которую, можно определить геометрическую форму поверхности капли как функцию времени и газодинамических параметров окружающей среды.

Также при моделировании всевозможных химических реакций следует вместо термодинамического подхода к оценке процесса использовать законы неравновесной химической кинетики, позволяющие описать структуру пламени (и вообще состав) в интересующей исследователей окрестности границы раздела фаз.

Описание взаимодействие дискретных сред в области раздела фаз предполагает широкое использование законов молекулярной теории, подробного рассмотрения электромагнитного взаимодействия

веществ, имеющих дипольный момент или ионизированных частиц газа.

Конечный результат расчета, к примеру, тонкой пленки в основании пограничного слоя на твердой поверхности позволит, помимо точного построения профилей скорости во всем пограничном слое, определить коэффициент трения покоя для текущих условий без проведения экспериментальных исследований и изучить процессы разрыхления поверхности газом.

Разработка газовой динамики дискретной среды позволит в дальнейшем теоретически моделировать любое течение газа или жидкости, усовершенствовать конструкцию и технологию производства деталей газотурбинных двигателей, уточнить некоторые законы газодинамики сплошной среды и т.д. Авторами предполагается создание типичных расчетных схем для всех упоминаемых в статье типов задач газодинамики дискретной среды и схем обработки результатов расчета для использования в механике сплошной среды.

Литература

1. Райс Ф.О. Молекулярно-кинетическая теория газов. – М.: Наука, 1968. – 484 с.
2. Медведев С.П., Николаенко А.А. Физические основы газовой динамики. – М.: Наука, 1979. – 320с.
3. Moelwyn-Hughes E.A. Physical Chemistry. – Pergamon Press, London-New York-Paris, 1961. – в 2-х т., т. 2. – 1150 с.

Поступила в редакцию 30.04.2005

Рецензент: д-р техн. наук, проф. В.П. Герасименко, Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Харьков.