

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
РОССИЙСКИЙ ФОНД ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
НИИ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И МЕХАНИКИ ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
МЕХАНИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
СОВЕТ МОЛОДЫХ УЧЁНЫХ ТГУ



Актуальные проблемы современной механики сплошных сред и небесной механики

Международная молодежная научная конференция

17–19 ноября 2014 г., Томск



Издательство Томского университета
2015

5. Finney M.A. Modeling the spread and behaviour of prescribed natural fires // Proceedings of the 12th Conference on Fire and Forest Meteorology (Jekyll Island, Georgia). Society of American Foresters. 1993. P. 138–143.

6. Lymberopoulos N., Papadopoulos C., Stefanakis E. et al. A GIS-based forest fire management information system // EARSeL J. 1996. № 4(4). P. 68–75.

7. Фильков А.И. О создании системы торфяной пожарной опасности // Пожары и чрезвычайные ситуации: предотвращение, ликвидация. 2013. № 1. С. 18–24.

8. Фильков А.И., Гладкий Д.А. Математическое моделирование низкотемпературной сушки слоя торфа // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2012. № 3(19). С. 93–106.

9. Синюткина А.А. Классификация болотных геосистем Томской области // Вестник Томского государственного университета. 2012. № 357. С. 192–195.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БЕЗГАЗОВОГО ГОРЕНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОДЕЛИ СФЕРИЧЕСКИХ РЕАКЦИОННЫХ ЯЧЕЕК

Д.С. Шульц, А.Ю. Крайнов

Приводятся результаты численного моделирования нестационарного распространения волны СВС с использованием модели сферических реакционных ячеек и модели плоских реакционных ячеек.

NUMERICAL MODELING OF GASLESS COMBUSTION USING SPHERICAL REACTION CELLS MODEL

D.S. Shults, A.Yu. Krainov

Results of numerical modeling of unsteady wave propagation models using SHS reaction cells and spherical model of planar reaction cells.

При распространении пламени в безгазовых конденсированных системах важную роль играет гетерогенная структура реакционной смеси. В работах [1–4] для описания гетерогенной структуры СВС составов была предложена модель реакционной ячейки. Под реакционной ячейкой понимается усредненный элемент гетерогенной структуры смеси порошков, способных к самораспространяющемуся высокотемпературному синтезу (СВС).

В настоящей работе рассматривается распространение волны СВС по образцу, сформированному из смеси порошков двух веществ А и В, способных к реагированию друг с другом с образованием вещества АВ. Предполагается, что частицы вещества А более крупные и окружены мелкими частицами вещества В, занимающими все пространство между частицами вещества А (рис. 1).

В рамках подхода [2] выделим характерную реакционную ячейку в форме шарика, состоящего из вещества А, окруженного веществом В (рис. 2). Вещества находятся в стехиометрическом соотношении. На границе контакта веществ А и В будет образовываться продукт реакции АВ. При распространении реакционной волны по образцу заданной длины по мере прогрева реакционных ячеек в них активируется диффузия, происходит реакция и нарастание слоя продуктов реакции. Для моделирования распространения плоской реакционной волны СВС в однородной смеси порошков расположим реакционные ячейки непрерывным образом по длине образца. В силу малости реакционных ячеек пространственное распределение температуры в реакционной ячейке отсутствует [2, 6].

В данной работе приводятся результаты численного моделирования нестационарного распространения волны СВС по образцу и их сравнение с результатами [5], где представлены результаты моделирования в предположении, что реакционные ячейки имеют плоскопараллельную форму.

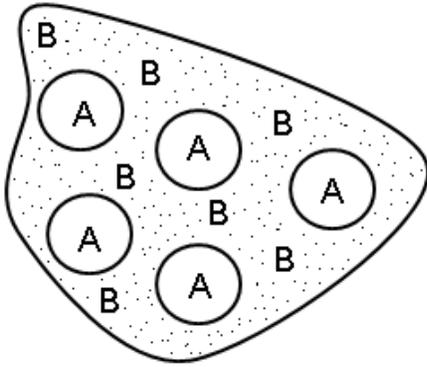


Рис. 1. Расположение ячеек в образце

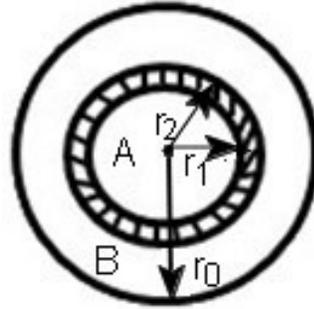


Рис. 2. Сферическая реакционная ячейка

Математическая модель представляет собой уравнение теплопроводности вдоль образца с источниками тепловыделения от химической реакции:

$$c_m \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + Q. \quad (1)$$

Начальные и граничные условия:

$$T(x, 0) = T_0, \quad T(0, t) = T_a, \quad \frac{\partial T(\infty, t)}{\partial x} = 0. \quad (2)$$

В уравнении (1) приняты следующие обозначения: t – время, x – координата, T – температура, c_m – удельная теплоёмкость смеси порошков, ρ – плотность, λ – коэффициент теплопроводности, Q – скорость тепловыделения.

Скорость тепловыделения Q определяется скоростью образования продукта АВ в реакции веществ А+В в единице объёма порошковой смеси. Скорость перемещения границ r_1 и r_2 шарового слоя, образующегося в реакции вещества АВ, умноженная на тепловой эффект q образования вещества АВ, и количество реакционных ячеек в единице объёма определяют скорость тепловыделения Q в виде

$$Q = n \cdot q \cdot \frac{dV}{dt}, \quad n = \frac{1}{V_0}, \quad V_0 = \frac{4}{3} \pi r_0^3, \quad V = \frac{4}{3} \pi (r_2^3 - r_1^3),$$

$$\frac{dV}{dt} = 4\pi \left(r_2^2 \frac{dr_2}{dt} - r_1^2 \frac{dr_1}{dt} \right), \quad (3)$$

где n – количество реакционных ячеек в единице объёма, V_0 – объём реакционных ячеек, r_1 и r_2 – внутренний и внешний радиусы продукта АВ, образующегося в реакционных ячейках в виде шарового слоя (см. рис. 2).

Скорости реакции определяются диффузионным переносом веществ А и В через слой продукта АВ. Через слой АВ происходит диффузия вещества А к границе r_2 и вещества В к границе r_1 соответственно. Достигнув границы, вещества вступают в реакцию, образуя продукт АВ, что приводит к нарастанию толщины слоя продукта АВ. Каждая реакционная ячейка имеет свою температуру, изменяющуюся во времени согласно уравнению (1). Поэтому при записи уравнения диффузии учтем зависимость коэффициента диффузии от температуры. При стехиометрическом соотношении количества веществ А (c_A) и В (c_B) будет выполнено: $c_B = (1 - c_A) = (1 - c)$. Обозначив $c_A = c$, запишем уравнение диффузии в сферической системе координат в виде

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_0 e^{-E_d/RT} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c}{\partial r} \right). \quad (4)$$

Начальные и граничные условия:

$$c(r_1(t), t) = c_1, \quad c(r_2(t), t) = c_2, \quad c(r, 0) = c_2, \quad r_1 \leq r \leq r_2, \quad (5)$$

где t – время, c – концентрация, r – координата по толщине слоя продукта АВ, D_0 – предэкспоненциальный множитель в зависимости коэффициента диффузии от температуры, E_d – энергия активации диффузии, R – универсальная газовая постоянная, $r_1(t)$, $r_2(t)$ – координаты границы, разделяющей вещество А и В от продукта АВ, c_1 и c_2 – концентрации вещества на границах $r_1(t)$ и $r_2(t)$.

Движение границ $r_1(t)$ и $r_2(t)$ во времени определяется притоком вещества А на границу r_2 и притоком вещества В на границу r_1 за счёт диффузии через слой АВ. Этот процесс описывается равенствами:

$$D_0 e^{-E_d/RT} \frac{\partial c}{\partial r} \Big|_{r_1(t)} = c_2 \frac{dr_1}{dt}, \quad -D_0 e^{-E_d/RT} \frac{\partial c}{\partial r} \Big|_{r_2(t)} = c_2 \frac{dr_2}{dt}. \quad (6)$$

Обозначим: $\frac{dr_1}{dt} = U_1$ и $\frac{dr_2}{dt} = U_2$, тогда выражение (3) примет вид

$$\frac{dV}{dt} = 4\pi (r_2^2 U_2 - r_1^2 U_1).$$

Систему уравнений (1)–(6) запишем в безразмерной форме. Выберем в качестве масштаба времени величину $t_* = c\rho RT_a^2 / (Q E_d D_0 e^{-E_d/RT_a})$, масштаб координаты на макроуровне: $x_* = \sqrt{t_* \lambda / c\rho}$, масштаб температуры: RT_a^2 / E , масштаб

координаты для реакционной ячейки: $r_* = r_0$. Введем безразмерные переменные:

$$\xi = x/x_*, \quad \tau = t/t_*, \quad \theta = \frac{E_d}{RT_a^2}(T - T_a), \quad \eta = r/r_*, \quad \bar{V} = V/V_0.$$

С учетом выбранных масштабов задача (1)–(6) в безразмерной форме принимает вид

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{\partial \bar{V}}{\partial \tau} \frac{1}{\gamma}, \quad (7)$$

$$\theta(\xi, 0) = -\frac{1}{\gamma}, \quad \theta(0, \tau) = 0, \quad \frac{\partial \theta(\infty, \tau)}{\partial \xi} = 0,$$

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = \gamma \cdot e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{1}{\eta^2} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta^2 \frac{\partial c}{\partial \eta} \right), \quad (8)$$

$$c(\eta_1(\tau), \tau) = c_1, \quad c(\eta_2(\tau), \tau) = c_2, \quad c(\eta, 0) = c_2, \quad \eta_1(0) \leq \eta \leq \eta_2(0).$$

В уравнении (7)

$$\frac{d\bar{V}}{d\tau} = \eta_2^2 \frac{d\eta}{d\tau} - \eta_1^2 \frac{d\eta}{d\tau} = \eta_2^2 |\bar{U}_2| + \eta_1^2 |\bar{U}_1|.$$

Значения \bar{U}_1 и \bar{U}_2 определяются из соотношений (6), записанных в безразмерной форме:

$$\gamma e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{\partial c}{\partial \eta} \Big|_{\eta_1(\tau)} = c_1 \bar{U}_1, \quad -\gamma e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{\partial c}{\partial \eta} \Big|_{\eta_2(\tau)} = c_1 \bar{U}_2. \quad (9)$$

В задаче (7)–(9) введены безразмерные параметры γ , β , определяемые следующим образом: $\gamma = \frac{c_m \rho}{Q} \frac{RT_a^2}{E_d}$, $\beta = \frac{RT_a}{E_d}$.

Система уравнений (7)–(9) решалась численно. Уравнения (8), записанные в каждой точке вдоль координаты ξ , решались методом прогонки по неявной разностной схеме. Уравнение (7) решалось по явной разностной схеме.

Расчеты проводились в следующем диапазоне изменения параметров задачи: $0,10 \leq \gamma \leq 0,20$, $0,505 \leq c_1 \leq 0,55$, $\beta = 0,05$. Результаты расчетов приведены на рис. 3–5.

Из рис. 3 видно, что скорости фронта горения U_f для реакционных ячеек в виде шариков и в виде плоского слоя отличаются почти в $\sim 1,7$ раза (скорость фронта

горения при использовании модели сферических ячеек больше). При разных значениях параметра c_1 такое отличие скоростей U_f сохраняется.

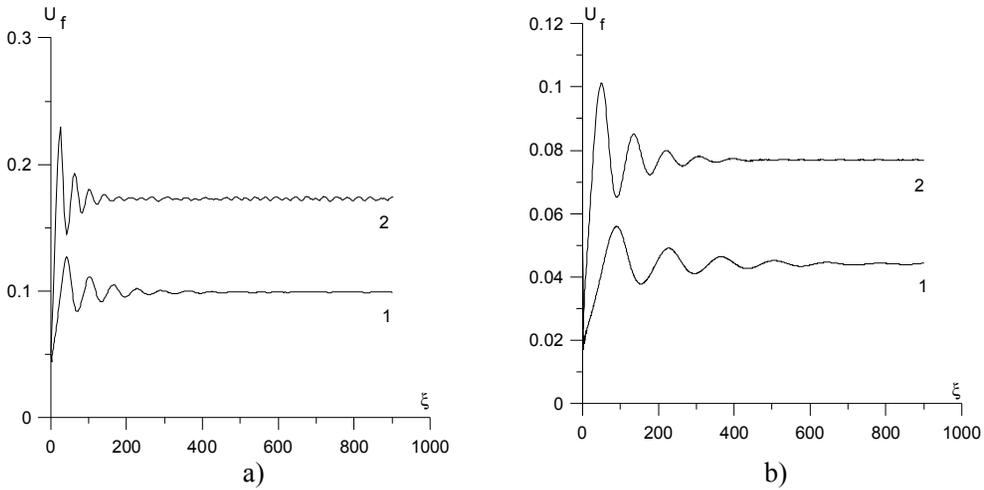


Рис. 3. Зависимости скорости горения U_f от координаты ξ при $\gamma = 0,125$: 1 – реакционные ячейки плоские; 2 – реакционные ячейки в форме шариков. $c_1 = 0,525$ (a); $c_1 = 0,505$ (b)

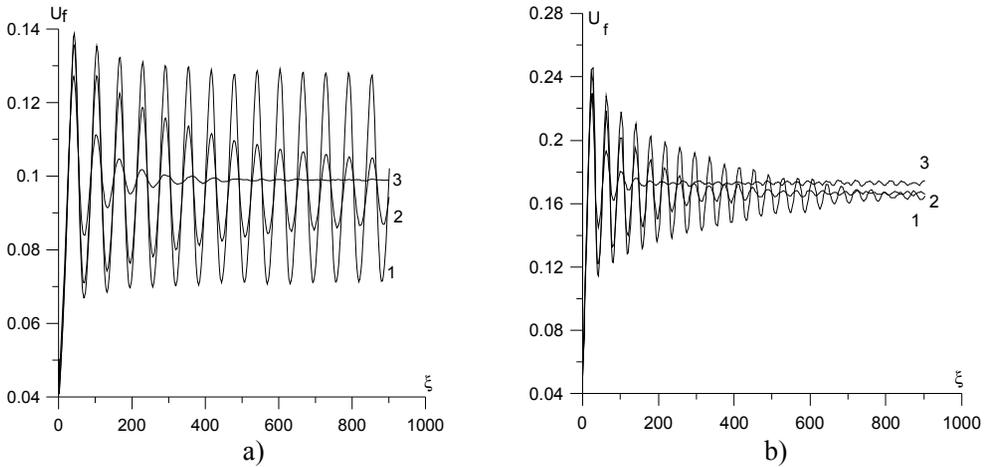


Рис. 4. Зависимости скорости горения U_f от координаты ξ при различных значениях γ : 1 – $\gamma = 0,12$; 2 – $\gamma = 0,121$; 3 – $\gamma = 0,125$; $c_1 = 0,525$. a – реакционные ячейки плоские, b – реакционные ячейки в форме шариков

Из рис. 4 можно определить критическое значение параметра γ_* , при котором происходит переход от стационарного к колебательному режиму распространения фронта горения. При $\gamma < \gamma_*$ наблюдается колебательный режим горения, а при $\gamma > \gamma_*$ – стационарный. Исследование зависимости скорости горения U_f от координаты ξ при других значениях параметра c_1 показало, что γ_* не зависит от зна-

чения c_1 . Полученное значение γ_* хорошо согласуется с аппроксимацией границы автоколебательного режима безгазового горения [7]: $9,1\gamma_* - 2,5\beta = 1$.

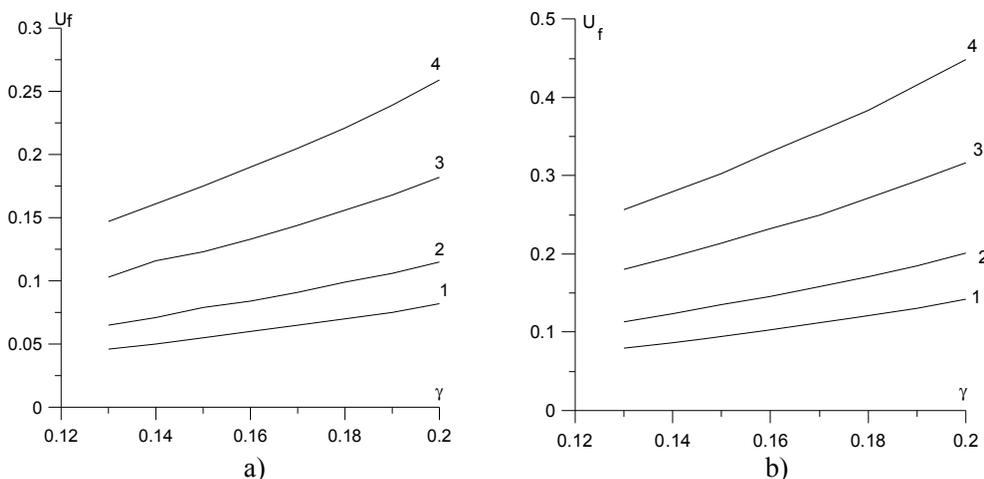


Рис. 5. Зависимости скорости горения U_f от γ при различных c_1 : 1 – 0,505; 2 – 0,51; 3 – 0,525; 4 – 0,55.
а – реакционные ячейки плоские, б – реакционные ячейки в форме шариков

На рис. 5 представлены зависимости скорости распространения волны СВС от параметра γ , выбранного из области устойчивого распространения волны СВС, рассчитанные при использовании модели реакционных ячеек плоской формы (на рис. 5, а) и реакционных ячеек в форме шариков (на рис. 5, б). С увеличением параметров γ и c_1 скорость волны увеличивается.

Из проведенных исследований выявлено, что от формы реакционных ячеек зависит величина скорости распространения реакционной волны СВС. Для реакционных ячеек в форме шариков она выше, чем для плоских реакционных ячеек. Это обусловлено большей реакционной поверхностью на единицу массы вещества для реакционных ячеек в форме шариков.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках выполнения государственного задания № 10.1329.2014/К.

Литература

1. Алдушин А.П., Хайкин Б.И. К теории горения смесевых систем, образующих конденсированные продукты реакции // Физика горения и взрыва. 1974. Т. 10, № 3. С. 313–323.
2. Хайкин Б.И. К теории процесса горения в гетерогенных конденсированных средах // Процессы горения в химической технологии и металлургии. Черноголовка: Изд-во ОИХФ АН СССР, 1975. С. 227–244.
3. Алдушин А.П., Каспарян С.Г., Шкадинский К.Г. Распространение фронта экзотермической реакции в конденсированных смесях, образующих двухфазные продукты // Горение и взрыв: матер. IV Все-союз. симпоз. по горению и взрыву. М.: Наука, 1977. С. 207–212.
4. Чернецова В.В., Шкадинский К.Г. Математическое моделирование макрокинетики взаимодействия во фронте горения гетерогенных составов с конденсированными продуктами реакции // Химическая физика процессов горения и взрыва: матер. XII симпозиума по горению и взрыву. Ч. I. Черноголовка, 2000. С. 153–155.
5. Шульц Д.С., Крайнов А.Ю. Численное моделирование нестационарного горения безгазовых составов на основе модели диффузионной кинетики // Известия вузов. Физика. 2013. Т. 56, № 9/3. С. 223–225.

6. Шульц Д.С., Крайнов А.Ю. Численное моделирование безгазового горения с учётом гетерогенности структуры и зависимости диффузии от температуры // Физика горения и взрыва. 2012. Т. 48, №5. С. 142–147.

7. Мержанов А.Г., Мукасян А.С. Твердопламенное горение. М.: ТОРУС ПРЕСС, 2007. 336 с.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О ТЕЧЕНИИ ВЯЗКОЙ ЖИДКОСТИ В ИЗОГНУТОМ КАНАЛЕ С ПРИМЕНЕНИЕМ ТЕХНОЛОГИИ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ

Е.И. Херай

Приведены результаты численного расчета течения жидкости в изогнутом канале. Показана эффективность применения параллельного программирования для расчетов.

NUMERICAL SOLUTION OF THE PROBLEM OF FLOW OF A VISCOUS FLUID IN A CURVED CHANNEL WITH THE USE OF PARALLEL PROGRAMMING

E.I. Hergay

Results of numerical calculation of fluid flow in a curved channel is showed. Efficiency of parallel programming for the calculations is illustrated.

Параллельные вычисления – современная многогранная область вычислительных наук, бурно развивающаяся и являющаяся наиболее актуальной в ближайшее время. Актуальность данной области складывается из множества факторов, и в первую очередь исходя из потребности в больших вычислительных ресурсах для решения прикладных задач моделирования процессов в физике, биофизике, химии и др. К тому же традиционные последовательные архитектуры вычислителей и схемы вычислений находятся в преддверии технологического предела. В то же время технологический прорыв в области создания средств межпроцессорных и межкомпьютерных коммуникаций позволяет реализовать одно из ключевых звеньев параллелизма – эффективное управление в распределении вычислений по различным компонентам интегрированной вычислительной установки [1].

Процессы течения вязких жидкостей представляют большой интерес для ряда отраслей науки и промышленности. Отдельным классом могут быть выделены задачи о течении в каналах различной формы вязкой жидкости при неизотермических условиях. В данном случае рассматривается изогнутый канал. Такие задачи встречаются в технологии переработки полимерных материалов, которая сопровождается сложными гидродинамическими и теплофизическими процессами. Аналитическое решение такого класса задач очень сложно получить в силу сложного вида нелинейных уравнений, описывающих течение, а также соответствующих граничных условий. В связи с этим большое распространение для исследования движения вязкой жидкости получили численные методы [2].

Рассматривается плоское установившееся течение ньютоновской несжимаемой жидкости в изогнутом канале. Жидкость подается в канал через входное сечение с постоянным расходом, на стенках выполняются условия прилипания, на выходе – «мягкие» граничные условия. Решение поставленных задач сводится к отысканию стационарных полей скорости и давления, а также распределения изолиний функции тока, которые характеризуют картину течения.