

2. Термодинамические и теплофизические свойства твердых ракетных топлив и их продуктов сгорания / под ред. В. Е. Алемасова. – М. : Министерство обороны СССР, 1977. – 316 с.

3. Корепанов М. А. Программа «Термодинамика» // Каталог инновационных разработок Ижевского государственного технического университета. – 2-е изд., доп. и перераб. – Ижевск : Изд-во ИжГТУ, 2001. – С. 95.

4. Моделирование начального участка работы РДТТ с учетом стохастического характера исходной информации / А. В. Алиев, О. В. Мищенко, В. И. Сарабьев, В. И. Бабин //

Химическая физика и мезоскопия. – 2006. – Т. 8. – № 3. – С. 304–310.

5. Моделирование работы регулируемого РДТТ с учетом воздействия случайных факторов / А. В. Алиев, О. В. Мищенко, А. Н. Лошкарев, В. И. Черепов // Интеллектуальные системы в производстве. – 2007. – № 2. – С. 5–12.

6. Вержбицкий В. М. Основы численных методов. – 3-е изд., стер. – М. : Высш. шк., 2009. – 840 с.

7. Алиев А. В., Мищенко О. В. Математическое моделирование в технике. – Ижевск : Ин-т компьютерных исследований, 2012. – 456 с.

O. V. Mishchenkova, PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Kalashnikov Izhevsk State Technical University
O. A. Voevodina, Post-graduate, Kalashnikov Izhevsk State Technical University

Application of LU- and QR-Methods to Solve the Task on Equilibrium Structure of Products of Chemical Reaction

The paper considers the task about composition of chemically reacting mix of gases as a task about solving the system of nonlinear equations. To solve this task, method of Newton-Rafson is used, in which LU-and QR-methods instead of Gauss method are applied at a stage of solving the linearized system of equations. Examples illustrating the efficiency of such an approach are given.

Keywords: chemically equilibrium composition, combustion products, mathematical model, system of nonlinear equations, method of Newton-Rafson, LU-method, QR-method.

Получено 02.06.14

УДК 532.529.2

М. М. Горохов, доктор физико-математических наук, профессор, Ижевский государственный технический университет имени М. Т. Калашникова

А. В. Корепанов, кандидат физико-математических наук, доцент, Ижевский государственный технический университет имени М. Т. Калашникова»

В. А. Тенев, доктор физико-математических наук, профессор, Ижевский государственный технический университет имени М. Т. Калашникова»

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ МНОГОМЕРНЫХ МНОГОФАЗНЫХ РЕАГИРУЮЩИХ ТЕЧЕНИЙ

Приводятся уравнения механики сплошных гетерогенных сред, кинетическое уравнение капельной среды, рассматриваются модели столкновений частиц, представлены уравнения сплошной среды из частиц для непрерывной модели столкновений.

Ключевые слова: кинетическое уравнение капельной среды, многофазные течения, модели столкновений частиц.

Уравнения механики сплошных гетерогенных сред

Феноменологическая теория многоскоростного континуума сформулирована и подробно описана в работах Р. И. Нигматулина [1], А. Н. Крайко [2], Л. Е. Стернина [3], И. М. Васенина [4]. Многоскоростной континуум представляет собой совокупность N континуумов, каждый из которых относится к своей компоненте смеси и заполняет один и тот же объем, занятый смесью. Для каждого из составляющих континуумов в каждой точке определяется плотность ρ_i (масса i -й составляющей в единице объема среды), скорость \mathbf{v}_i , ($i=1, \dots, N$) и другие параметры. Субстанциональная производная, связанная с движением i -й составляющей, имеет вид

$$\frac{d_i}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla. \quad (1)$$

Механика смесей строится на основе физических законов сохранения массы, импульса и энергии для каждой составляющей в некотором объеме смеси V , ограниченном поверхностью S , с учетом взаимодействия с внешней средой и с другими составляющими.

Уравнения масс имеют вид

$$\int_V \frac{\partial \rho_i}{\partial t} dV = - \int_S \rho_i v_i^n dS + \int_V \sum_{j=1, j \neq i}^N J_{ji} dV \quad (i=1, \dots, N), \quad (2)$$

где J_{ji} характеризует интенсивность перехода массы из j -й в i -ю составляющую в единице объема смеси и в единицу времени. Из закона сохранения массы при различных физико-химических превращениях имеем $J_{ji} = -J_{ij}$, $J_{ii} = 0$. Известная формула Гаусса – Остроградского записывается в виде

$\int_S \mathbf{A} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = \int_V \nabla^k A v^k dV$. После применения этой формулы из (2) следуют дифференциальные уравнения массы каждой составляющей

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_i \mathbf{v}_i = \sum_{j=1}^N J_{ji} \quad (i = 1, \dots, N). \quad (3)$$

Уравнение сохранения массы смеси в целом получается суммированием (3) по i :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = 0.$$

Уравнения импульсов каждой составляющей можно представить в виде

$$\int_V \frac{\partial \rho_i \mathbf{v}_i}{\partial t} dV = - \int_S \rho_i \mathbf{v}_i v_i^n dS + \int_S \sigma_i^n dS + \int_V \rho_i \mathbf{g}_i dV + \int_V \sum_{j=1, j \neq i}^N P_{ji} dV \quad (i = 1, \dots, N), \quad (4)$$

где первое слагаемое правой части соответствует притоку импульса i -й составляющей через поверхность S ; второе и третье слагаемые – воздействию внешних поверхностных и массовых сил, приходящихся на i -ю составляющую и характеризующихся тензором σ_i^{kl} и вектором \mathbf{g}_i ; P_{ji} представляет интенсивность обмена импульсом между i -й и j -й составляющими. Из закона сохранения импульса при различных взаимодействиях $P_{ji} = -P_{ij}$, $P_{ii} = 0$.

Интегральным соотношениям (4) после применения формулы Гаусса – Остроградского соответствуют дифференциальные уравнения импульсов каждой составляющей

$$\frac{\partial \rho_i \mathbf{v}_i}{\partial t} + \nabla^k \cdot \rho_i \mathbf{v}_i v_i^k = \nabla^k \sigma_i^k + \rho_i \mathbf{g}_i + \sum_{j=1}^N P_{ji} \quad (i = 1, \dots, N). \quad (5)$$

С учетом (1) и (3) эти уравнения можно переписать в виде

$$\rho_i \frac{d_i \mathbf{v}_i}{dt} = \nabla^k \sigma_i^k + \rho_i \mathbf{g}_i + \sum_{j=1}^N (P_{ji} - J_{ji}) \quad (i = 1, \dots, N). \quad (6)$$

Балансовые уравнения для энергии каждой составляющей имеют вид, аналогичный (2), (4):

$$\int_V \frac{\partial \rho_i E_i}{\partial t} dV = - \int_S \rho_i E_i v_i^n dS + \int_S \mathbf{c}_i^n dS + \int_V \rho_i \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{v}_i dV + \int_V \sum_{j=1, j \neq i}^N E_{ji} dV - \int_S \mathbf{q}_i^n dS \quad (i = 1, \dots, N). \quad (7)$$

Первое слагаемое в правой части соответствует притоку энергии i -й составляющей через поверхность S ; второе и третье слагаемые – работе внешних

поверхностных (характеризуемой вектором \mathbf{c}_i) и массовых сил, приходящихся на i -ю составляющую; пятое слагаемое представляет приток тепла через поверхность S , характеризующийся вектором \mathbf{q}_i . Из закона сохранения энергии при взаимодействиях $E_{ji} = -E_{ij}$, $E_{ii} = 0$.

Интегральным соотношениям (7) после применения формулы Гаусса – Остроградского соответствуют дифференциальные уравнения сохранения энергии составляющих

$$\frac{\partial \rho_i E_i}{\partial t} + \nabla^k \cdot \rho_i E_i v_i^k = \nabla \cdot (\mathbf{c}_i - \mathbf{q}_i) + \rho_i \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{v}_i + \sum_{j=1}^N E_{ji}, \quad (8)$$

или

$$\rho_i \frac{d_i \left(u_i + \frac{v_i^2}{2} \right)}{dt} = \nabla \cdot (\mathbf{c}_i - \mathbf{q}_i) + \rho_i \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{v}_i + \sum_{j=1}^N \left[E_{ji} - J_{ji} \left(u_i + \frac{v_i^2}{2} \right) \right] \quad (i = 1, \dots, N). \quad (9)$$

В формулах (3), (5), (8) для описания конкретных механизмов обмена массой, импульсом и энергией должны быть определены источниковые члены в правых частях уравнений.

Будем рассматривать среду, состоящую из несущей газовой фазы и полидисперсных частиц, увлекаемых газом. Обмен импульсом между газовой и дисперсной фазой осуществляется за счет силового взаимодействия, обусловленного вязкостью газа. Обмен массой между газовой и дисперсной фазами происходит при горении или испарении частиц, конденсации на поверхности частиц. Энергией фазы обмениваются вследствие скоростной и температурной неравновесности, а также при горении, испарении частиц, конденсации. Обмен массой, импульсом и энергией между различными фракциями частиц зависит от вида дисперсной фазы. Твердые монодисперсные частицы между собой не взаимодействуют, за исключением поверхностей разрыва (жгутование частиц, отражение от твердой поверхности). Жидкие полидисперсные частицы, движущиеся с различными скоростями, при соударениях могут сливаться (коагулировать) и дробиться. В этом случае частицы различных фракций обмениваются массой, импульсом и энергией. Для описания этого процесса необходимо строить модели взаимодействия частиц при столкновениях.

Кинетическое уравнение капельной среды

Кинетическая теория капельной среды с учетом вращения частиц при столкновениях построена и описана в работе И. М. Васенина и соавторов [4]. Вследствие разных начальных условий, различных масс и сопротивления капли движутся с различными скоростями. Если температура капель отличается от температуры газа, то между каплями и газовой средой будет происходить теплообмен. Образовавшиеся

в результате столкновения капли будут иметь размеры, скорости, температуры и моменты вращения, отличные от первоначальных. В процессе столкновений и некоторое время спустя жидкость в каплях движется нестационарно. Поэтому если столкновения происходят часто, то большее время капли будут находиться в нестационарном состоянии. В работе [4] для капли принята модель жидкой частицы, состояние которой однозначно определяется массой, вектором скорости, температурой, вектором момента количества движения, а также параметрами окружающего ее газа. Эти условия соответствуют допущениям:

1. Нестационарные возмущения, вызванные процессом взаимодействия капель, должны затухать до их следующего столкновения.

2. Температура не должна существенно изменяться по пространству внутри объема капли.

3. Поле скоростей в капле должно мало отличаться от поля скоростей эквивалентного твердого тела, скорость центра масс и угловая скорость вращения у которого совпадают со скоростью движения и вращения капли.

Для вывода кинетического уравнения в момент времени t рассматривается в окрестности точки \mathbf{r} в объеме $d\mathbf{r}$ группа частиц, параметры которых (масса, скорость, момент вращения, температура) находятся в диапазонах $(m, m + dm)$, $(\mathbf{v}, \mathbf{v} + d\mathbf{v})$, $(\mathbf{M}, \mathbf{M} + d\mathbf{M})$, $(T, T + dT)$.

Определим функцию распределения $f(m, \mathbf{v}, \mathbf{M}, T, \mathbf{r}, t)$ так, чтобы произведение $f(m, \mathbf{v}, \mathbf{M}, T, \mathbf{r}, t) \times dmdvd\mathbf{M}dT$ представляло собой число капель, которые в момент t находятся в объеме $d\mathbf{r}$. На каждую из частиц действуют со стороны газа сила сопротивления \mathbf{F} и момент силы \mathbf{B} . Величину теплового потока между каплей и газом обозначим q . Число частиц в группе в момент $t + dt$ не равно числу частиц в момент t , так как при столкновениях частицы изменяют свои параметры и, следовательно, выпадают из рассматриваемого ансамбля. С другой стороны, в данную группу поступают частицы, образовавшиеся при столкновениях капель других групп. При прочих равных условиях число частиц, выпадающих из рассматриваемой группы за счет столкновений, и число частиц, поступающих в нее, должно быть пропорционально фазовому объему $dmdvd\mathbf{M}dTdr$ и промежутку времени dt . Поэтому изменение числа частиц группы вследствие столкновений равно $Kdmdvd\mathbf{M}dTdrdt$, где K – скорость изменения числа частиц в единице фазового пространства, называемая интегралом столкновений. С помощью интеграла столкновений можно записать равенство

$$\begin{aligned} & f\left(m, \mathbf{v} + \frac{\mathbf{F}}{m}dt, \mathbf{M} + \frac{\mathbf{B}}{I}dt, T + \frac{q}{mc_s}dt, \mathbf{r} + \mathbf{v}dt, t + dt\right) \times \\ & \quad \times dmdvd\mathbf{M}'dT'd\mathbf{r}' - \\ & - f(m, \mathbf{v}, \mathbf{M}, T, \mathbf{r}, t) \times dmdvd\mathbf{M}dTdr = \\ & = Kdmdvd\mathbf{M}dTdrdt, \end{aligned} \quad (10)$$

где параметры со штрихом означают новые значения на концах рассматриваемых интервалов. Якобиан преобразования с точностью до малых порядка $(dt)^2$ имеет вид

$$\begin{aligned} & dv'd\mathbf{M}'dT'd\mathbf{r}' = \\ & = dvd\mathbf{M}dTdr \left(1 + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot \frac{\mathbf{F}}{m}dt + \nabla_{\mathbf{M}} \cdot \frac{\mathbf{B}}{I}dt + \frac{\partial}{\partial T} \frac{q}{mc_s}dt \right), \end{aligned} \quad (11)$$

где $\nabla_{\mathbf{v}}, \nabla_{\mathbf{M}}$ – операторы градиента в пространствах скоростей и моментов вращения частиц.

Разлагая в выражении (10) функцию f в ряд в момент $t + dt$ по промежутку dt в окрестности точки t и используя соотношение (11) между объемами фазового пространства, получим кинетическое уравнение для функции f :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot \frac{\mathbf{F}}{m} f + \nabla_{\mathbf{M}} \cdot \frac{\mathbf{B}}{I} f + \frac{\partial}{\partial T} \frac{q}{mc_s} f = K,$$

где $\nabla_{\mathbf{r}}$ – оператор градиента в пространстве \mathbf{r} .

Уравнения, описывающие движение множества частиц, существенно зависят от процесса столкновения капель, который преобразует сталкивающиеся частицы во вторичные капли с массами, скоростями, моментами и температурами, отличными от параметров исходных частиц. Наиболее часто используются модели столкновений.

1. Модель с коагуляцией частиц и «замороженными» осколками. По этой модели частицы сливаются, когда суммарный момент системы сталкивающихся частиц меньше некоторого критического значения. Если этот момент больше критического, то параметры осколков совпадают с параметрами исходных частиц. Эта модель может рассматриваться лишь как предельный случай с минимальным взаимодействием частиц при столкновениях, приводящих к дроблению.

2. Равновесная модель. При столкновении двух капель они сначала сливаются и в образовавшейся капле устанавливается термодинамическое равновесие. Если момент вращения образовавшейся частицы больше критического, то она распадается на два осколка с массами, равными массам первоначальных частиц. Другие параметры осколков равны между собой. Недостаток этой модели заключается в неучете реального распределения осколков по размерам.

3. Модели А. А. Шрайбера [5, 6]. В основе этих моделей лежит среднестатистическое рассмотрение изменения массы частицы-мишени под воздействием потока частиц-снарядов. Масса каждой частицы-снаряда m_j меньше массы частицы-мишени m_i . Изменение массы мишени Δm_i вычисляется по формуле $\Delta m_i = \Phi_{ij} m_j$, где Φ_{ij} – коэффициент, равный среднестатистическому значению относительной части массы частицы m_j , присоединяющейся к частице-мишени. Наряду с лидирующей частицей массы $m'_i = m_i + \Phi_{ij} m_j$ в этих моделях учитываются части-

цы-осколки. По одной модели осколки предполагаются монодисперсными с массами, равными массе снарядов. В другой модели рассматривается непрерывное распределение частиц по размерам.

Уравнения сплошной среды из частиц для непрерывной модели столкновений

Наиболее простой вид имеют уравнения, описывающие движение частиц, на основе непрерывной модели столкновения. Согласно непрерывной модели при всяком столкновении меньшей частицы m_2 с большей частицей-мишенью m_1 изменение массы $\Phi_{12}m_2$ равномерно распределяется по всем частицам фракции m_1 . Одновременно предполагается, что при столкновении уничтожаются сразу все n частиц фракции m_1 , а количество движения и температура этой фракции изменяются так, как будто происходит столкновение частиц m_1 с частицами массы $\frac{m_2}{n}$.

Уравнения непрерывной модели получаются из общих уравнений для переноса какого-либо признака частицы и имеют следующий вид [4]:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f(m)}{\partial t} + \nabla_r \cdot [f(m)\mathbf{v}_0] + \frac{\partial}{\partial m}[f(m)m_t] = \\ & = -f(m) \int_m^\infty \Phi(m_1, m)K(m_1, m)f(m_1)dm_1; \\ & m \frac{d\mathbf{v}_0}{dt} + mm_t \frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial m} = \\ & = \mathbf{F} + \int_0^m K(m, m_2)[\mathbf{v}_0(m_2) - \mathbf{v}_0(m)]m_2f(m_2)dm_2 + \quad (12) \\ & + \int_m^\infty K(m_1, m)[1 - \Phi(m_1, m)][\mathbf{v}_0(m_1) - \mathbf{v}_0(m)]mf(m_1)dm_1; \\ & mc_s \frac{dT_0}{dt} + mc_s m_t \frac{\partial T_0}{\partial m} = \\ & = q + \int_0^m K(m, m_2)[E_0(m_2) - E_0(m)]m_2f(m_2)dm_2 + \\ & + \int_m^\infty K(m_1, m)[1 - \Phi(m_1, m)][E_0(m_1) - E_0(m)]mf(m_1)dm_1, \end{aligned}$$

где

$$E(m_i) - E(m) = c_s [T_0(m_i) - T_0(m)] - \frac{|\mathbf{v}_0(m_i) - \mathbf{v}_0(m)|^2}{2}.$$

В уравнениях (12) кроме независимых пространственных переменных и времени присутствует переменная m , повышающая размерность задачи, поэтому вводится на оси масс подвижная система координат. В каждой точке \mathbf{r}, t ось масс делится на отрезки $[m_p(\mathbf{r}, t), m_{p+1}(\mathbf{r}, t)]$ и уравнение (12) для функции $f(m)$ интегрируется от m_p до m_{p+1} . Если в началь-

ный момент времени взять некоторое конечное число фракций частиц, то вследствие свойств непрерывной модели в процессе движения число фракций не будет меняться. Изменяться будут масса, число частиц, их количество движения и энергия. Функция $f(m)$ в любой момент времени может быть записана в виде

$$f(m, \mathbf{r}, t) = \sum_s N_s(\mathbf{r}, t)\delta(m - m_s).$$

Полагая $\frac{dm_p}{dt} = m_t(m_p)$ и учитывая свойства дельта-функции, получим систему уравнений

$$\frac{\partial N_s}{\partial t} + \nabla_r \cdot [\mathbf{v}_0(m)N_s] = -\sum_{j=s}^L K(m_j, m_s)\Phi(m_j, m_s)N_jN_s$$

для числа частиц каждой фракции.

После интегрирования от m_p до m_{p+1} уравнений (12) для остальных переменных получается система уравнений вида

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \nabla_r \cdot [\rho_s \mathbf{v}] = \\ & N_s \sum_{j=1}^s K(m_j, m_s)\Phi(m_j, m_s)\rho_j - \\ & - \rho_s \sum_{j=s}^L K(m_j, m_s)\Phi(m_j, m_s)N_j; \\ & \frac{\partial \rho_s u_{sk}}{\partial t} + \nabla_r \cdot [\rho_s u_{sk} \mathbf{v}] = \\ & = N_s \sum_{j=1}^s K(m_j, m_s)\rho_j(u_{jk} - u_{sk}) + \\ & + \rho_s \sum_{j=s}^L K(m_j, m_s)[1 - \Phi(m_j, m_s)]N_j(u_{jk} - u_{sk}) + \quad (13) \\ & + N_s u_{sk} \sum_{j=1}^s K(m_j, m_s)\Phi(m_j, m_s)\rho_j - \\ & - \rho_s u_{sk} \sum_{j=s}^L K(m_j, m_s)\Phi(m_j, m_s)N_j + N_s F_{ks}; \\ & \frac{\partial \rho_s c_s T_s}{\partial t} + \nabla_r \cdot [\rho_s c_s T_s \mathbf{v}] = N_s \sum_{j=1}^s K(m_j, m_s)\rho_j(E_j - E_s) + \\ & + \rho_s \sum_{j=s}^L K(m_j, m_s)[1 - \Phi(m_j, m_s)]N_j(E_j - E_s) + \\ & + N_s c_s T_s \sum_{j=1}^s K(m_j, m_s)\Phi(m_j, m_s)\rho_j - \\ & - \rho_s c_s T_s \sum_{j=s}^L K(m_j, m_s)\Phi(m_j, m_s)N_j + N_s q_s, \end{aligned}$$

где $s = 1, \dots, L$ – номер фракции; L – количество фракций; $\rho_s = m_s N_s$ – масса частиц s -й фракции

в единице объема; u_{sk} – проекция на ось x_k скорости капель этих фракций; T_s – ее температура.

Система уравнений замыкается уравнением для изменения массы частиц s -й фракции

$$\frac{dm_s}{dt} = \sum_{j=1}^s \Phi(m_s, m_j) K(m_s, m_j) \rho_j. \quad (14)$$

Рассмотренные модели взаимодействия дисперсных частиц, взятые из работ [4, 5, 6], успешно применялись при проведении численных исследований двухфазных течений в одномерной и многомерной постановках авторами этих работ. Это дает основание для их использования при численном моделировании трехмерных многофазных течений в областях со сложной геометрией.

Библиографические ссылки

1. Нигматуллин Р. И. Динамика многофазных сред. В 2 ч. – М. : Наука, 1987. – Т. 1 – 464 с., Т. 2. – 360 с.
2. Численное решение многомерных задач газовой динамики / М. Я. Иванов, А. В. Забродин, А. Н. Крайко, Г. П. Прокопов ; под ред. С. К. Годунов. – М. : Наука, 1976. – 400 с.
3. Стернин Л. Е., Шрайбер А. А., Подвысоцкий А. М. Двухфазные моно- и полидисперсные течения газа с частицами. – М. : Машиностроение, 1980. – 176 с.
4. Газовая динамика двухфазных течений в соплах / И. М. Васенин, В. А. Архипов, В. Г. Бутов [и др.]. – Томск : Изд-во Том. ун-та, 1986. – 286 с.
5. Шрайбер А. А., Лилютин В. Н., Яценко В. П. Гидромеханика двухкомпонентных потоков с твердым полидисперсным веществом. – Киев : Наук. думка, 1980. – 249 с.
6. Климова В. Л., Шрайбер А. А. Математическое моделирование трехфазного полидисперсного течения в соплах Лаваля // Матем. моделирование. – 1996. – 8:10. – С. 59–70.

M. M. Gorokhov, DSc (Physics and Mathematics), Professor, Kalashnikov Izhevsk State Technical University

A. V. Korepanov, PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Kalashnikov Izhevsk State Technical University

V. A. Tenenev, DSc (Physics and Mathematics), Professor, Kalashnikov Izhevsk State Technical University

Mathematical Models of Multidimensional Multiphase Reacting Flows

The paper presents heterogeneous continuum mechanics equations, drip medium kinetic equation, particle collisions models, continuum mechanics equations for continuous particle collision model.

Keywords: drip medium kinetic equation, multiphase flows, particle collision models.

Получено 06.06.14