

DREAM

<http://dream-journal.org>

ISSN 2410-9908

DOI: 10.17804/2410-9908.2020.4

Diagnostics, Resource and Mechanics
of materials and structures

<http://dream-journal.org>

4
2020

July-August

Editor-in-Chief: **Eduard S. Gorkunov**, RAS Academician (Russia)
Deputy Editors-in-Chief: **Sergey V. Smirnov**, **Sergey V. Gladkovsky**

Editorial Council

Chairman: **Eduard S. Gorkunov**, RAS Academician (Russia)

Anatoly A. Burenin (Russia)
Irina G. Goryacheva (Russia)
Janez Grum (Slovenia)
Mikhail P. Lebedev (Russia)
Leopold I. Leontiev (Russia)
Evgeny V. Lomakin (Russia)
Valery P. Matveenko (Russia)
Nikolay A. Makhutov (Russia)
Mitko M. Mihovski (Bulgaria)
Nikita F. Morozov (Russia)
Vladimir V. Moskvichev (Russia)
Sergey V. Panin (Russia)
Vasily M. Fomin (Russia)
Shao Wen-zhu (China)

Editorial Board

Boris V. Artemyev (Moscow)
Vladimir A. Bataev (Novosibirsk)
Aleksandr K. Belyaev (St.-Peterburg)
Vera V. Berezovskaya (Ekaterinburg)
Sergey V. Burov (Ekaterinburg)
Vladimir O. Vaskovsky (Ekaterinburg)
Dmitry I. Vichuzhanin (Ekaterinburg)
Mladen N. Georgiev (Sofia, Bulgaria)
Vladimir G. Degtyar (Miass)
Igor G. Emelyanov (Ekaterinburg)
Sergey M. Zadvorkin (Ekaterinburg)
Alexander G. Zalazinsky (Ekaterinburg)
Anatoly V. Konvalov (Ekaterinburg)
Vladimir N. Kostin (Ekaterinburg)
Aleksey V. Makarov (Ekaterinburg)
Vladimir A. Mironov (Ekaterinburg)
Radik R. Mulyukov (Ufa)
Vitaly V. Muravyov (Izhevsk)
Aleksandr P. Nichipuruk (Ekaterinburg)
Oleg A. Plekhov (Perm)
Anna M. Povlotskaya (Ekaterinburg)
Evgenii Yu. Prosviryakov (Ekaterinburg)
Nataliya B. Pugacheva (Ekaterinburg)
Igor Yu. Pyshmintsev (Chelyabinsk)
Anatoly B. Rinkevich (Ekaterinburg)
Roman A. Savray (Ekaterinburg)
Alexander S. Smirnov (Ekaterinburg)
Yury V. Subachev (Ekaterinburg)
Alexander I. Ulyanov (Izhevsk)
Yulia V. Khudorozhkova (Ekaterinburg)

Elena E. Verstakova, editor of the English translation
Irina M. Tsiklina, editor of Russian texts
Anna V. Garieva, maker-up
Galina V. Torlopova, associate editor
Raul N. Shakirov, site admin

Postal address: Institute of Engineering Science, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 34 Komsomolskaya st., 620049,
Ekaterinburg, Russian Federation
phone: +7 (343) 375-35-83,
fax: +7 (343) 374-53-30
e-mail: dream-journal@mail.ru
<http://dream-journal.org>

Главный редактор: Горкунов Эдуард Степанович – академик РАН, д.т.н.
Заместители главного редактора: **Сергей Витальевич Смирнов**, д.т.н.; **Сергей Викторович Гладковский**, д.т.н.

Редакционный совет:

Председатель совета – Горкунов Эдуард Степанович, академик РАН, д.т.н. (Россия)

Буренин Анатолий Александрович, член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (Россия)
Горячева Ирина Георгиевна, академик РАН, д.ф.-м.н. (Россия)
Грум Янез, Ph.D, (Республика Словения)
Лебедев Михаил Петрович, член-корр. РАН, д.т.н. (Россия)
Леонтьев Леопольд Игоревич, академик РАН, д.т.н. (Россия)
Ломакин Евгений Викторович, член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (Россия)
Матвеев Валерий Павлович, академик РАН, д.т.н. (Россия)
Махутов Николай Андреевич, член-корр. РАН, д.т.н. (Россия)
Миховски Митко Минков, д.т.н. (Республика Болгария)
Морозов Никита Федорович, академик РАН, д.ф.-м.н. (Россия)
Москвичев Владимир Викторович, д.т.н. (Россия)
Панин Сергей Викторович, д.т.н. (Россия)
Фомин Василий Михайлович, академик РАН, д.ф.-м.н. (Россия)
Шао Вэнь-чжу, профессор (Китай)

Редакционная коллегия:

Главный редактор – **Горкунов Эдуард Степанович**, академик РАН, д.т.н. (Екатеринбург)

Зам. главного редактора – **Смирнов Сергей Витальевич**, д.т.н. (Екатеринбург)

Зам. главного редактора – **Гладковский Сергей Викторович**, д.т.н. (Екатеринбург)

Артемьев Борис Викторович, д.т.н., (Москва)
Батаев Владимир Андреевич, д.т.н. (Новосибирск)
Беляев Александр Константинович, член-корр. РАН, д.ф.-м.н., (Санкт-Петербург)
Березовская Вера Владимировна, д.т.н., (Екатеринбург)
Буров Сергей Владимирович, к.т.н. (Екатеринбург)
Васьковский Владимир Олегович, д.ф.-м.н. (Екатеринбург)
Вичужанин Дмитрий Иванович, к.т.н. (Екатеринбург)
Георгиев Младен Николов, д.т.н. (София, Республика Болгария)
Дегтярь Владимир Григорьевич, академик РАН, д.т.н. (Миасс)
Емельянов Игорь Георгиевич, д.т.н. (Екатеринбург)
Задворкин Сергей Михайлович, к.ф.-м.н. (Екатеринбург)
Залазиский Александр Георгиевич, д.т.н. (Екатеринбург)
Коновалов Анатолий Владимирович, д.т.н. (Екатеринбург)
Костин Владимир Николаевич, д.т.н. (Екатеринбург)
Макаров Алексей Викторович, член-корр. РАН, д.т.н. (Екатеринбург)
Миронов Владимир Александрович, д.м.н. (Екатеринбург)
Мулюков Радик Рафикович, член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (Уфа)
Муравьев Виталий Васильевич, д.т.н. (Ижевск)
Ничипурук Александр Петрович, д.т.н. (Екатеринбург)
Плехов Олег Анатольевич, д.ф.-м.н. (Пермь)
Поволоцкая Анна Моисеевна, к.т.н. (Екатеринбург)
Просвиряков Евгений Юрьевич, д.ф.-м.н. (Екатеринбург)
Пугачева Наталия Борисовна, д.т.н. (Екатеринбург)
Пышминцев Игорь Юрьевич, д.т.н. (Челябинск)
Ринкевич Анатолий Брониславович, член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (Екатеринбург)
Саврай Роман Анатольевич, к.т.н. (Екатеринбург)
Смирнов Александр Сергеевич, к.т.н. (Екатеринбург)
Субачев Юрий Владимирович, к.т.н. (Екатеринбург)
Ульянов Александр Иванович, д.т.н. (Ижевск)
Худорожкова Юлия Викторовна, к.т.н. (Екатеринбург)

Верстакова Елена Евгеньевна – редактор перевода текста на английский язык

Циклина Ирина Михайловна – редактор текста

Гариева Анна Валерьевна – верстальщик текста

Торлопова Галина Викторовна – помощник редактора

Шакиров Рауль Нурувич, к.т.н. – администратор сайта журнала

Адрес редакции:

Россия, 620049, г. Екатеринбург, ул. Комсомольская, д. 34., ИМАШ УрО РАН

телефон: +7 (343) 375 35 83, факс +7 (343) 374-53-30

e-mail: dream-journal@mail.ru

<http://dream-journal.org>

CONTENTS

| | |
|---|----|
| Vandyshev A. B. A systematic analysis of the parameters of disk-type membrane-catalytic devices for producing high-purity hydrogen from methane and diesel fuel | 6 |
| Vykhodets V. B., Kurennykh T. E., Nikolaev A. Yu., Suzdaltsev A. V. and Zaikov Yu. P. Determination of lithium content in solids by nuclear reaction technique | 28 |
| Kamantsev I. S., Loginov Yu. N., Belikov S. V., Stepanov S. I., Karabanalov M. S., and Golodnov A. I. Fracture behavior of cellular structures obtained by selective laser melting | 35 |
| Pegov V. I. and Moshkin I. Yu. Applying the method of plane sections for evaluating the parameters of flight vehicles under multiphase flow | 48 |
| Burmasheva N. V. and Prosviryakov E. Yu. Studying the stratification of hydrodynamic fields for laminar flows of vertically swirling fluid | 62 |

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|--|----|
| Вандышев А. Б. Системный анализ параметров мембранно-каталитических устройств дискового типа получения высокочистого водорода из метана и дизельного топлива | 6 |
| Выходец В. Б., Куренных Т. Е., Николаев А. Ю., Суздальцев А. В., Зайков Ю. П. Определение содержания лития в твердых телах методом ядерных реакций | 28 |
| Каманцев И. С., Логинов Ю. Н., Беликов С. В., Степанов С. И., Карабаналов М. С., Голоднов А. И. Особенности разрушения ячеистых структур, полученных лазерным селективным сплавлением | 35 |
| Пегов В. И., Мошкин И. Ю. Применение метода плоских сечений для определения характеристик летательных аппаратов при многофазном обтекании | 48 |
| Бурмашева Н. В., Просвиряков Е. Ю. Исследование стратификации гидродинамических полей для слоистых течений вертикально завихренной жидкости | 62 |

Received: 04.02.2020**Revised:** 25.04.2020**Accepted:** 19.06.2020**DOI:** 10.17804/2410-9908.2020.4.006-027

A SYSTEMATIC ANALYSIS OF THE PARAMETERS OF DISK-TYPE MEMBRANE-CATALYTIC DEVICES FOR PRODUCING HIGH-PURITY HYDROGEN FROM METHANE AND DIESEL FUEL

A. B. Vandyshev

*Institute of Engineering Science, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,
34, Komsomolskaya St., Ekaterinburg, 620049, Russian Federation*

✉ vandyshev@imach.uran.ru

Corresponding author: E-mail: vandyshev@imach.uran.ru

Address for correspondence: 34 Komsomolskaya St., 620049, Ekaterinburg, Russian Federation

Tel.: +7(343)362 30 25; fax: +7(343)374 53 30

Mathematical simulation is used to analyze systematically the results of testing an individual disk-type membrane-catalytic module for producing high-purity hydrogen from methane, with a capacity of about $0.3 \text{ m}^3\text{H}_2/\text{h}$, and the design data of a membrane-catalytic reactor based on 32 individual disk-type modules for producing high-purity hydrogen from diesel fuel, with a capacity of $7.45 \text{ m}^3\text{H}_2/\text{h}$.

The used mathematical model adequately and on a good quantitative level describes the experimental and design data known from the literature. In terms of the used model representations, possible ways of increasing both the capacity of disk-type membrane-catalytic devices and the efficiency of extracting high-purity hydrogen from the original hydrocarbon material are considered.

Keywords: mathematical simulation, membrane-catalytic systems, high-purity hydrogen, methane, diesel fuel.

References

1. Gallucci F., Fernandez E., Corengia P., Van Sint Annalanda M. Recent advances on membranes and membrane reactors for hydrogen production (Review). *Chemical Engineering Science*, 2013, vol. 92, pp. 40–66. DOI: 10.1016/j.ces.2013.01.008.
2. Dittmar B., Behrens A., Schödel N., Rüttinger M., Franco Th., Straczewski G., Dittmeyer R. Methane steam reforming operation and thermal stability of new porous metal supported tubular palladium composite membranes. *Int. J. Hydrogen Energy*, 2013, vol. 38 (21), pp. 8759–8771. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2013.05.030.
3. Shigarov A., Kirillov V., Landgraf I. Computational study of Pd-membrane CH_4 steam reformer with fixed catalyst bed: Searching for a way to increase membrane efficiency. *Int. J. Hydrogen Energy*, 2014, vol. 39, no. 35, pp. 20072–20093. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2014.10.018.
4. Vandyshev A.B., Kulikov V.A. Analysis of parameters of high-purity hydrogen production from methane in a laboratory-scale membrane reformer with an ultrathin palladium membrane. *Chemical and Petroleum Engineering*, 2015, vol. 51, nos. 3–4, pp. 250–256. DOI 10.1007/s10556-015-0032-1.
5. Kirillov V.A., Shigarov A.B. Biofuels as a promising source of hydrogen for fuel cell power plants. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2016, vol. 50, iss. 4, pp. 351–365. DOI: 10.1134/S0040579516040369.

6. Vandyshev A.B., Kulikov V.A. Estimate of high-purity hydrogen production efficiency in membrane-catalytic systems from steam reforming products of gasoline, kerosene, and diesel oil. *Chemical and Petroleum Engineering*, 2018, vol. 53, nos. 9–10, pp. 593–597. DOI: 10.1007/s10556-018-0386-2.
7. Shirasaki Y., Tsuneki T., Ota Y., Yasuda I., Tachibana S., Nakajima H., Kobayashi K. Development of membrane reformer system for highly efficient hydrogen production from natural gas. *Int. J. Hydrogen Energy*, 2009, vol. 34, iss. 10, pp. 4482–4487. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2008.08.056.
8. Murav'ev L.L., Vandyshev A.B., and Makarov V.M. Modeling of the membrane extraction of hydrogen from multicomponent gaseous mixtures. *Teor. Osn. Khim. Tekhnol.*, 1999, vol. 33, no. 2, pp. 190–192.
9. Vandyshev A.B. Analyzing the parameters of membrane catalytic systems for extraction of highly pure hydrogen from hydrocarbon feedstock with the application of mathematical modeling. *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures* (DREAM open-access journal), 2016, iss. 4, pp. 6–46. DOI: 10.17804/2410-9908.2016.4.006-045. URL: https://dream-journal.org/DREAM_Issue_4_2016_Vandyshev_A.B._006_045.pdf
10. Vandyshev A.B., Kulikov V.A. Analysis of the calculated parameters of a model membrane-catalytic converter for the production of high-purity hydrogen from methane. *Chemical and Petroleum Engineering*, 2018, vol. 54, nos. 1–2, pp. 31–37. DOI: 10.1007/s10556-018-0434-y.
11. Vandyshev A.B., Kulikov V.A. Analysis of parameters and modes for producing high-purity hydrogen from natural gas in membrane-catalytic devices. *Chemical and Petroleum Engineering*, 2017, vol. 53, nos. 1–2, pp. 49–55. DOI: 10.1007/s10556-017-0293-y.
12. Analysis of the Efficiency of a Pd/Ag Membrane with a Thickness of 2.25 Microns on a Porous Ceramic Substrate in a Laboratory Membrane Reactor. *Chemical and Petroleum Engineering*, 2019, vol. 55 (3), pp. 129–135. DOI: 10.1007/s10556-019-00592-y.
13. Shigarov A.B., Kirillov V.A., Amosov Y.I., Brayko A.S., Avakov V.B., Landgraf I.K., Urusov A.R., Jivulko S.A., Izmaylovich V.V. Membrane reformer module with Ni-foam catalyst for pure hydrogen production from methane: Experimental demonstration and modeling. *Int. J. Hydrogen Energy*, 2017, vol. 42, no. 10, pp. 6713–6726. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2016.12.057.
14. Kirillov V.A., Shigarov A.B., Amosov Yu.I., Belyaev V.D., Gerasimov E.Yu. Production of Pure Hydrogen from Diesel Fuel by Steam Pre-Reforming and Subsequent Conversion in a Membrane Reactor. *Petroleum Chemistry*, 2018, vol. 58, no. 2, pp. 103–113. DOI: 10.1134/S0965544118020020.
15. Vandyshev A.B., Kulikov V.A. Analysis of the results of testing an individual disk-type membrane-catalytic module for obtaining high-purity hydrogen from methane. *Chemical and Petroleum Engineering*, 2020, vol. 55, nos. 9–10, pp. 725–732. DOI 10.1007/s10556-020-00686-y.
16. Poristye pronitsaemye materialy: spravochnik [Porous Permeable Materials: Handbook, ed. by S.V Belov]. Moscow, Metallurgiya publ., 1987, 335 p.
17. Zhivulko S.A., Avakov V.B., Landgraft I.K., Urusov A.R. Experience of practical implementation of hydrocarbon fuel conversion technology with hydrogen extraction from the reaction zone. *Trudy V Vserossiyskoy konferentsii* [The 5th All-Russian Conference “Fuel Elements and Power Installation Based on Them” : Proceedings], Suzdal, 2018, pp. 62–64. (In Russian).
18. Shigarov A.B., Kirillov V.A. Modeling of membrane reactor for steam methane reforming: From granular to structured catalysts. *Theor. Found. Chem. Eng.*, 2012, vol. 46, no. 2, pp. 97–107. DOI: 10.1134/S004057951202011X.
19. Vandyshev A.B., Kulikov V.A. Evaluation of design parameters for a 32- module disk-type membrane-catalytic reactor for producing high-purity hydrogen from diesel fuel. *Chemical and Petroleum Engineering*, 2020, vol. 55, nos. 9–10, pp. 815–820. DOI: 10.1007/s10556-020-00698-8.

20. Vandyshev A.B., Makarov V.M., Usova T.B. Analyzing the conditions of hydrogen extraction from multicomponent hydrogen-containing gas mixtures by means of triple diagrams C-H-O. IMACH UrO RAN, 1998, deposited in VINITI 09.12.98. (In Russian).
21. Lukyanov B.N., Andreev D.V., Parmon V.N. Catalytic reactors with hydrogen membrane separation. *Chemical Engineering Journal*, 2009, vol. 154, p. 258–266. DOI: 10.1016/j.cej.2009.04.023.

Подана в журнал: 04.02.2020

УДК 66.071.6.001.57

DOI: 10.17804/2410-9908.2020.4.006-027

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ ПАРАМЕТРОВ МЕМБРАННО-КАТАЛИТИЧЕСКИХ УСТРОЙСТВ ДИСКОВОГО ТИПА ПОЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОЧИСТОГО ВОДОРОДА ИЗ МЕТАНА И ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА

А. Б. Вандышев

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт машиноведения Уральского отделения Российской академии наук,
34, ул. Комсомольская, г. Екатеринбург, Российская Федерация*

✉ vandyshv@imach.uran.ru

Ответственный автор. Адрес электронной почты: vandyshv@imach.uran.ru

Адрес для переписки: ул. Комсомольская, 34, 620049, г. Екатеринбург, Российская Федерация

Тел.: +7 (343) 362–30–25; факс: +7 (343) 374–53–30

Методом математического моделирования проведен системный анализ результатов испытаний единичного мембранно-каталитического модуля дискового типа получения высококислотного водорода из метана производительностью около $0,3 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ и проектных расчетных данных мембранно-каталитического реактора на базе 32 единичных модулей дискового типа получения высококислотного водорода из дизельного топлива производительностью $7,45 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$.

Используемая математическая модель адекватно и на хорошем количественном уровне подтверждает известные в литературе экспериментальные и проектные данные. В рамках используемых модельных представлений рассмотрены возможные пути повышения как производительности мембранно-каталитических устройств дискового типа, так и экономичности извлечения высококислотного водорода из исходного углеводородного сырья.

Ключевые слова: математическое моделирование, мембранно-каталитические системы, высококислотный водород, метан, дизельное топливо.

1. Введение

К настоящему времени сохраняется достаточно устойчивый интерес к экспериментальному и теоретическому изучению устройств получения высококислотного водорода (99,999 %) из метана, природного газа и других углеводородов, связанный с развитием мембранно-каталитических (МК) систем, основанных на совмещении извлечения водорода на мембранах из палладия и его сплавов с каталитическими процессами [1–6]. Принцип и высокая эффективность МК-систем для получения высококислотного водорода экспериментально подтверждены наиболее представительными результатами длительных (~3000 ч) испытаний мембранного конвертора производительностью до $40 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ [7]. Важное место при изучении закономерностей и разработке МК-систем получения высококислотного водорода из различных видов углеводородного сырья отводится созданию математических моделей, адекватно описывающих результаты испытаний, проектных расчетов и лабораторных исследований.

Адекватность математической модели [8, 9], разработанной для системы *высокотемпературный конвертор – высокотемпературный мембранный аппарат* получения высококислотного водорода из углеводородного сырья, подтверждена на достаточном количестве примеров МК-устройств, главным образом панельного и трубчатого типов [4, 9–12], включая и МК-конвертор производительностью до $40 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ [7].

Цель работы – проанализировать с помощью математической модели [8, 9] новые экспериментальные данные испытаний индивидуального МК-модуля дискового типа [13] получения высокочистого водорода из метана, а также результаты проектного расчета МК-реактора [14] на базе 32 единичных МК-модулей дискового типа для производства высокочистого водорода из продуктов предварительной паровой конверсии дизельного топлива.

2. Анализ параметров единичного МК-модуля дискового типа получения высокочистого водорода из метана

Предварительный анализ [15] результатов испытаний единичного МК-модуля дискового типа [13] подтвердил его достаточно высокую эффективность при получении высокочистого водорода из метана.

Ниже детально рассмотрены конструктивные особенности перспективного мембранно-каталитического устройства. Схема единичного МК-модуля дискового типа [13] представлена на рис. 1. Конструктивно единичный МК-модуль [13] состоял из мембранного элемента дискового типа (рис. 1, поз. 1) с мембраной из сплава 75 % Pd–25 % Ag толщиной 50 мкм на пористой подложке и двухсторонней площадью 0,0323 м², а также катализатора конверсии метана на нетрадиционном носителе в виде двух дисковых пластин (рис. 1, поз. 2) из высокопористого ячеистого материала (ВПЯМ) [16], размещенных с обеих сторон мембранного элемента. Дисковые каталитические пластины, изготовленные из никеля чистотой 99,9 %, имели пористость 95 % [13] и представляли собой достаточно прочный каркас с ячеистой структурой. На поверхность ячеистого каркаса дисковых пластин нанесен активный слой Ni/MgO-катализатора.

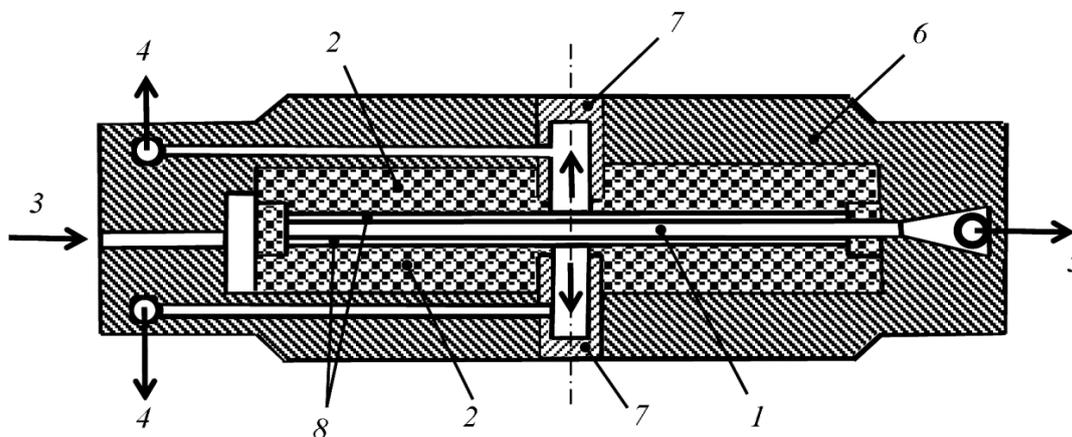


Рис. 1. Схема МК-модуля дискового типа с параллельной подачей реакционной смеси на обе стороны мембранного элемента [13]: 1 – двухсторонний дисковый мембранный элемент с общей площадью мембран 0,0323 м²; 2 – катализаторные дисковые пластины; 3 – подача реакционной смеси; 4 – выход сбросного газа; 5 – выход высокочистого водорода; 6 – корпус МК-модуля дискового типа; 7 – перегородка; 8 – каналы высотой ~0,7 мм между мембраной и каталитической пластиной

Мембранный элемент (рис. 1, поз. 1) и дисковые каталитические пластины (рис. 1, поз. 2) помещены в общий корпус (рис. 1, поз. 6), обогреваемый снаружи. По сравнению с традиционным гранулированным Ni/Al₂O₃ катализатором конверсии метана нетрадиционный носитель из ВПЯМ с активным Ni/MgO слоем обладают рядом преимуществ, таких как высокая теплопроводность и низкое гидравлическое сопротивление [13]. Благодаря устойчивой форме дисковой каталитической пластины удалось создать канал (рис. 1, поз. 8) высотой порядка 0,7 мм [13] между мембраной и катализатором для свободного прохождения разде-

ляемой водородосодержащей газовой смеси. Кроме того, в центре МК-модуля на выходе сбросного газа установлены перегородки (рис. 1, поз. 7), ограничивающие байпасные потоки реакционной смеси вне свободного канала (рис. 1, поз. 8). Подача исходной смеси метана с водяным паром осуществлялась через канал 3, а выход сбросного газа и высокочистого водорода – соответственно через каналы 4 и 5 (рис. 1).

Известно, что в каждом из 112 МК-модулей панельного типа, входящих в состав мембранно-каталитического конвертора производительностью до 40 м³ H₂/ч [7], был использован монолитный рифленый никелевый катализатор, установленный близко к поверхности мембраны без прямого контакта с ней, также образующий свободный канал между катализатором и мембраной. В этом канале, по мнению авторов [7], и осуществлялось селективное извлечение водорода из разделяемой газовой смеси, совмещенное с каталитическими процессами.

Несмотря на конструктивные особенности МК-модуля дискового типа [13], принцип его работы укладывается в рамках упрощенной технологической схемы для системы (ВТК–ВТМА) с катализатором конверсии метана в надмембранном пространстве мембранного аппарата, и лежащей в основе математической модели [8, 9] (рис. 2). Роль предварительного конвертора, аналогичного ВТК (рис. 2), в МК-модуле дискового типа (рис. 1) выполняет свободное от мембраны кольцо дисковых каталитических пластин из ВПЯМ шириной 10 мм.

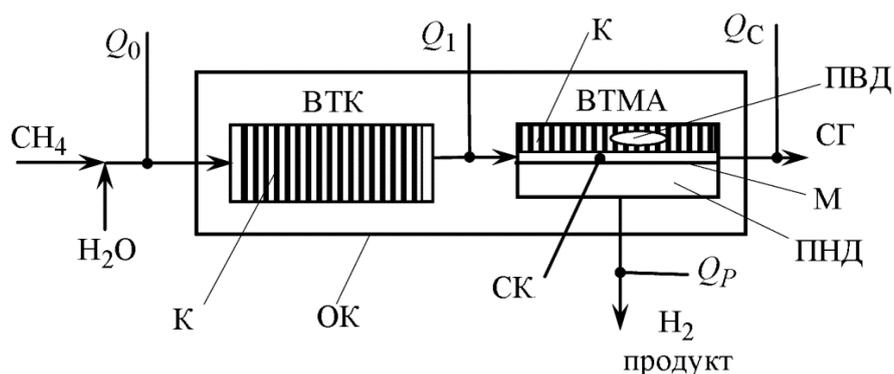


Рис. 2. Упрощенная схема системы ВТК-ВТМА: ВТК – высокотемпературный конвертор метана; ВТМА – высокотемпературный мембранный аппарат; ПВД – полость высокого давления; ПНД – полость низкого давления; СК – свободный канал 0,7 мм; СГ – сбросной газ; К – катализатор конверсии метана; М – водородоселективная мембрана площадью 0,0323 м²; ОК – общий корпус; Q₀, Q₁, Q_c, Q_p – газовые потоки по ходу технологической схемы

В предварительном конверторе МК-модуля дискового типа (или ВТК на рис. 2) исходная смесь водяного пара с метаном согласно обратимым химическим реакциям (1, 2) в присутствии катализатора конверсии метана превращается в смесь простых газов (H₂, H₂O, CO₂, CO, CH₄), поступающих далее на извлечение водорода в свободный канал высотой ~0,7 мм между мембраной и катализатором (рис. 1, поз. 8):



Анализ параметров индивидуального МК-модуля дискового типа проводили с помощью математической модели [8, 9] мембранного извлечения высокочистого водорода в режиме идеального вытеснения из продуктов паровой конверсии углеводородов, учитывая

ющей отток водорода через сплошную мембрану из палладиевого сплава под действием перепада давлений и химическое взаимодействие между компонентами газовой фазы при мембранном извлечении водорода.

Математическая модель [8, 9] основана на уравнениях материального баланса по атомам водорода, кислорода и углерода, законе Дальтона для газовой смеси, законе действующих масс для обратимых химических реакций (1 и 2) и уравнении локальной диффузионной характеристики (3) для участка площади мембраны ΔF , вытекающей из закона Ричардсона–Сиверта:

$$\Delta Q_P = \frac{\gamma}{\delta} \sqrt{p_v} \cdot \Delta F \cdot \left(\sqrt{\frac{X_{H_2, H} - X_{H_2, K}}{2}} - \sqrt{X_{пред.}} \right), \quad (3)$$

где: ΔQ_P – поток высокочистого водорода через участок площади ΔF ; γ – коэффициент удельной водородопроницаемости мембраны; δ – толщина мембраны; p_v – абсолютное давление над мембраной; p_H – абсолютное давление под мембраной; $X_{пред.}$ – концентрационный предел ($X_{пред.} = p_H/p_v$); $X_{H_2, H}$ и $X_{H_2, K}$ – концентрации водорода в начале и конце участка площади мембраны ΔF .

Для проведения анализа методом математического моделирования выбран вариант дискового МК-модуля с параллельной подачей реакционной смеси с двух сторон мембранного диска (рис. 1). При этом приняты следующие технологические параметры: абсолютное давление в полости высокого давления (рис. 1, ПВД) $p_v = 1,3$ МПа [13], а абсолютное давление в полости низкого давления (рис. 1, ПНД) $p_H = 0,1$ МПа [13]. Рабочая температура принята равной 650 °С, как некоторая средняя величина в заявленном в работе [13] диапазоне температур 639 – 668 °С для элементов конструкции МК-устройства. Коэффициент удельной водородопроницаемости Pd–Ag мембраны при средней рабочей температуре 650 °С задан равным $\gamma = 0,017 \text{ см}^3 \text{ H}_2 \cdot \text{мм} / (\text{см}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{ат}^{0,5})$.

Проанализированы два штатных технологических режима [13] при отношении $\text{H}_2\text{O}/\text{CH}_4 = 3$ (1-й режим) и при отношении $\text{H}_2\text{O}/\text{CH}_4 = 2,5$ (2-й режим). Расходы исходной парометановой смеси приняты для 1-го режима $Q_0 = 0,48 \text{ м}^3/\text{ч}$ [13], а для 2-го режима – $Q_0 = 0,35 \text{ м}^3/\text{ч}$ [13]. Здесь и далее по тексту объемные расходы приведены к нормальным условиям.

Результаты анализа с помощью модели [8, 9] для указанных выше 2 штатных технологических режимов [13] представлены графически (рис. 3). Расчетная производительность по высокочистому водороду единичного МК-модуля дискового типа при фиксированных начальных технологических условиях с увеличением расчетной площади мембраны увеличивается и достигает максимальной величины $Q_p = 0,323 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ для 1-го режима (рис. 3, кривая 1) и $Q_p = 0,301 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ для 2-го режима (рис. 3, кривая 2).

Максимальные расчетные площади мембраны для этих режимов совпадают с установленной площадью мембраны $F_{уст.} = 0,0323 \text{ м}^2$ (рис. 3, линия 8). Отличие максимальных расчетных Q_p от экспериментальных значений для 1-го и 2-го штатных режимов [13] незначительно и составляет порядка 10 % (рис. 3, линия 9 и 10).

По мере извлечения водорода расчетные концентрации водорода (рис. 3, кривые 3, 4) и метана (рис. 3, кривые 5, 6) для 2 исследованных штатных режимов уменьшаются с увеличением расчетной площади мембраны. При этом конечные концентрации водорода над поверхностью мембраны (рис. 3, кривые 3, 4) при $F_{расч.} = F_{уст.}$ составляют 0,189 и 0,162 моль. долей (табл. 1) соответственно для 1-го и 2-го штатных режимов, что существенно выше величины концентрационного предела $X_{пред.} = p_H/p_v = 0,1/1,3 = 0,077$ моль. долей (рис. 3, линия 7) и свидетельствует о недостаточно полном извлечении водорода.

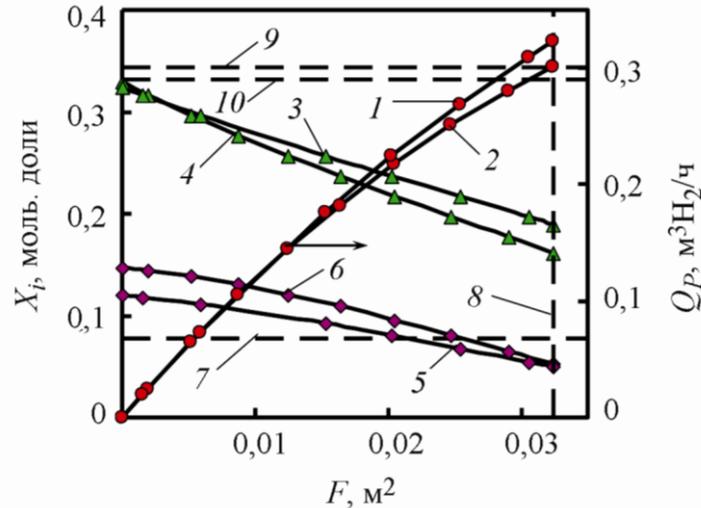


Рис. 3. Зависимости производительности Q_p (1, 2), а также концентраций водорода X_{H_2} (3, 4) и метана X_{CH_4} (5, 6) от площади мембраны F единичного МК-модуля дискового типа: 1, 3, 5 – 1-й технологический режим; 2, 4, 6 – 2-ой технологический режим; 7 – уровень концентрационного предела $X_{пред.} = 0,077$ моль. доли; 8 – уровень установленной площади мембраны $F_{уст.} = 0,0323$ м²; 9 – уровень экспериментальной производительности $Q_p = 0,29$ м³/ч для 1-го режима [13]; 10 – уровень экспериментальной производительности $Q_p = 0,273$ м³/ч для 2-го режима [13]

Дополнительно о недостаточно полном извлечении водорода с учетом того, что метан принимает косвенное участие в извлечении H_2 через смещение химического равновесия (1) вправо при отводе водорода через мембрану, свидетельствуют и концентрации остаточного метана (рис. 3, кривые 5, 6) при $F_{расч.} = F_{уст.}$.

В численном виде результаты анализа параметров единичного МК-модуля дискового типа для 1-го и 2-го штатных режимов представлены соответственно в 1-й и 2-й строках (табл. 1). Степени конверсии метана на выходе из МК-модуля дискового типа, рассчитанные по формуле (4) из работы [2] на основании составов сбросного газа, составили $СК = 0,85$ (1-й режим) и $СК = 0,88$ (2-й режим), что практически полностью совпало с экспериментальными величинами из работы [13].

$$СК = (X_{CO} + X_{CO_2}) / (X_{CO} + X_{CO_2} + X_{CH_4}), \quad (4)$$

где: X_{CO} , X_{CO_2} и X_{CH_4} – равновесные концентрации компонентов газовой фазы.

Степени извлечения водорода, рассчитанные по формуле (5) из работы [2], составили $Y_{H_2} = 0,82$ (1-й режим) и $Y_{H_2} = 0,89$ (2-й режим) и незначительно отличались от данных из работы [13] $Y_{H_2} = 0,77$ и $Y_{H_2} = 0,86$ (табл. 1):

$$Y_{H_2} = Q_p / (Q_p + Q_C \cdot X_{H_2,C}), \quad (5)$$

где: Q_p , Q_C – потоки высокочистого водорода и сбросного газа соответственно; $X_{H_2,C}$ – концентрация водорода в сбросном газе на выходе из индивидуального мембранного модуля дискового типа.

Таблица 1 – Параметры единичного МК-модуля дискового типа

| Режим | Расчетные параметры МК-модуля дискового типа при средней температуре 650 °С, $p_b = 1,3$ МПа, $p_n = 0,1$ МПа | | | | | | | | |
|-------|---|----------------------|---|---|------------------------------|--|---|-----------------|-----------------|
| | Q_0 , м ³ /ч | F , м ² | Q_p , м ³ Н ₂ /ч | J_{H_2} , м ³ Н ₂ /м ² ·ч | X_{H_2} , моль. доли | q_V , м ³ Н ₂ / м ³ сырья | q_M , м ³ Н ₂ / моль СН ₄ | СК | γ_{H_2} |
| 1 | 0,48 | 0,0323 0,0323* | 0,323 0,29* | 10 | 0,189 | 0,673 | 2,69 | 0,85 (0,85*) | 0,82 (0,77*) |
| 2 | 0,35 | 0,0323 0,0323* | 0,301 0,273* | 9,32 | 0,162 0,161* | 0,86 | 2,92 | 0,88 (0,87*) | 0,89 (0,86*) |
| 3 | 0,190 | 0,0323 0,0323* | 0,177 | 5,49 | 0,0778 | 0,932 | 3,73 | 0,994 | 0,95 |
| 4 | 0,156 | 0,0323 0,0323* | 0,166 | 5,14 | 0,0775 | 1,065 | 3,73 | 0,989 | 0,96 |
| 5 | 0,626 | 0,0323 0,0323* | 0,593 | 18,4 | 0,0587 | 0,947 | 3,79 | 0,993 | 0,994 |

*Данные из работы [13].

О недостаточно высокой экономичности извлечения водорода дополнительно свидетельствуют удельные показатели объемных выходов водорода (q_V) 0,673 и 0,86 м³Н₂/м³ сырья, а также мольных выходов водорода (q_M) 2,69 и 2,92 моль. Н₂/моль. СН₄, для 1-го и 2-го штатных режимов, соответственно (табл. 1). Для оценки интенсивности отвода водорода через мембрану рассчитали величины средних плотностей потоков диффузии водорода $J_{H_2} = Q_p/F_{расч.}$, которые составили 10 м³Н₂/(м²·ч) и 9,32 м³Н₂/(м²·ч) для 1-го и 2-го штатных режимов в 1-й и 2-й строках (табл. 1).

Проведенный методом математического моделирования анализ показал, что экспериментальные данные по производительности (основной показатель), степени конверсии метана и степени извлечения водорода (косвенные показатели) для единичного МК-модуля дискового типа в случае 1-го и 2-го штатных технологических режимов [13] достаточно хорошо представлены в рамках модельных представлений из работ [8, 9].

Термодинамическую вероятность углеродоотложения для 1-го и 2-го штатных режимов оценивали по безразмерному критерию $\omega = p_c/p_b$, предложенному ранее в работе [8], где p_c – давление углеродоотложения, а p_b – абсолютное давление газа в надмембранном пространстве. Величину давления углеродоотложения рассчитывали по формуле $p_c = X_{CO_2} \cdot K_6 \cdot p_0^0 / X_{CO}^2$, где X_{CO_2} и X_{CO} – равновесные мольные доли диоксида и оксида углерода в газовой фазе соответственно; p_0^0 – абсолютное стандартное давление (в нашем случае $p_0^0 = 0,1$ МПа); K_6 – константа химического равновесия (6), рассчитанная на основании термодинамических данных:



Оценка термодинамической вероятности углеродоотложения показала, что для исследованных 1-го и 2-го штатных технологических режимов [13] вероятность выпадения углерода отсутствует на всей протяженности площади мембраны, о чем свидетельствуют зависи-

мости $\omega - F$ (рис. 4, кривые 1, 2), лежащие выше границы углеродоотложения ($\omega = 1$) (рис. 4, линия 3).

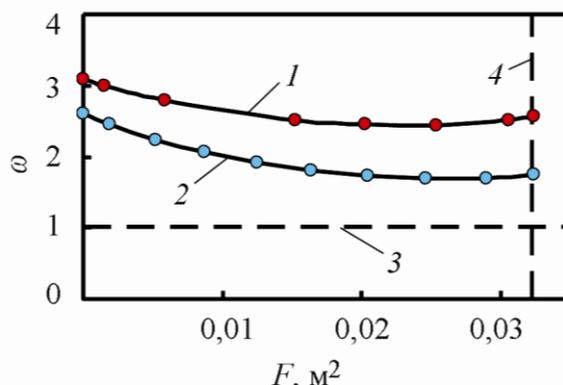


Рис. 4. Зависимости критерия термодинамической вероятности углеродоотложения ω от площади мембраны F : 1 – 1-й штатный режим ($\text{H}_2\text{O}/\text{CH}_4 = 3$); 2 – 2-й штатный режим ($\text{H}_2\text{O}/\text{CH}_4 = 2,5$); 3 – граница углеродоотложения ($\omega = 1$); 4 – граница установленной площади мембраны $F_{\text{уст.}} = 0,0323 \text{ м}^2$

В целях более полного использования сырья при получении высокочистого водорода в единичном МК-модуле дискового типа провели дополнительный анализ. При сохранении основных параметров единичного МК-модуля дискового типа для 1-го и 2-го штатных режимов [13] уменьшили расходы исходных паро-метановых смесей Q_0 с $0,48 \text{ м}^3/\text{ч}$ (1-й режим) до $0,19 \text{ м}^3/\text{ч}$ (3-й режим) и с $0,35 \text{ м}^3/\text{ч}$ (2-й режим) до $0,156 \text{ м}^3/\text{ч}$ (4-й режим). Результаты анализа 3-го и 4-го режимов методом математического моделирования представлены на рис. 5 и в табл. 1 (режимы 3 и 4). В этом случае расчетные максимальные производительности единичного МК-модуля дискового типа при сохранении равенства расчетной и установленной площади мембраны величин снизились и достигли $Q_p = 0,177 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ для 3-го режима (рис. 5, кривая 1) и $Q_p = 0,166 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ для 4-го режима (рис. 5, кривая 2). Это существенно ниже, чем для 1-го и 2-го штатных режимов. Интенсивность отвода водорода через мембрану также уменьшилась до величин средней плотности потока диффузии водорода $5,49 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{м}^2 \cdot \text{ч}$ (табл. 1, режим 3) и $5,14 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{м}^2 \cdot \text{ч}$ (4-й режим).

В отличие от 1-го и 2-го режимов зависимости Q_p от F (рис. 5, кривые 1, 2) выходят на насыщение при приближении концентраций водорода над мембраной к концентрационному пределу $X_{\text{пред.}} = p_{\text{H}}/p_{\text{в}} = 0,1/1,3 = 0,077$ моль. долей и свидетельствуют о достаточно полном извлечении водорода (рис. 5, линия 7).

Концентрации метана (рис. 5, кривые 5, 6) для 3-го и 4-го режимов также уменьшаются с увеличением площади мембраны до более низких значений по сравнению с 1-м и 2-м режимами.

Более высокую экономичность извлечения водорода с точки зрения расхода исходного сырья подтверждают удельные показатели объемного выхода (q_v) $0,932$ и $1,065 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{м}^3$ сырья (табл. 1, режимы 3, 4) соответственно для 3-го и 4-го режимов, а также мольного выхода водорода $q_m = 3,73$ моль. $\text{H}_2/\text{моль. CH}_4$ (табл. 1, режимы 3, 4) для обоих режимов. Высокую экономичность извлечения водорода также характеризуют степени конверсии метана на выходе из МК-модуля дискового типа, рассчитанные по формуле (3). Для 3-го режима $\text{СК} = 0,994$, для 4-го режима $\text{СК} = 0,989$ (табл. 1, режимы 3, 4). Также высокую экономичность извлечения водорода характеризуют степени извлечения водорода, рассчитанные по формуле (4), которые составили $Y_{\text{H}_2} = 0,95$ и $Y_{\text{H}_2} = 0,96$ для 3-го и 4-го режимов соответственно (табл. 1, режимы 3, 4).

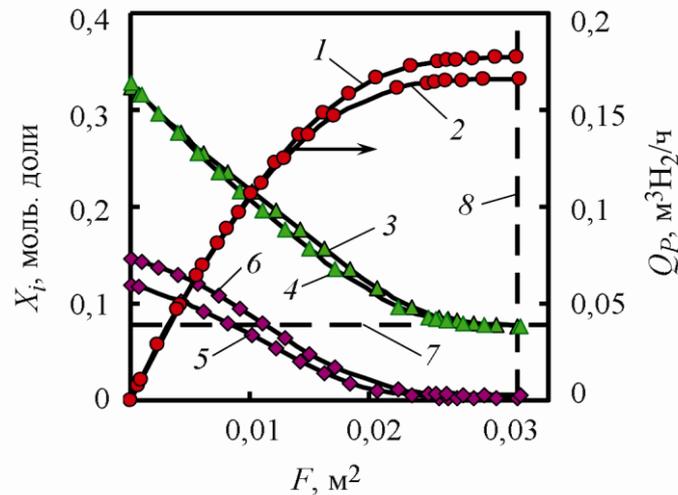


Рис. 5. Зависимости производительности Q_p (1, 2), а также концентраций водорода X_{H_2} (3, 4) и метана X_{CH_4} (5, 6) от площади мембраны F единичного МК-модуля дискового типа 1, 3, 5 – 3-й технологический режим; 2, 4, 6 – 4-й технологический режим; 7 – уровень концентрационного предела $X_{пред.} = 0,077$ моль. доли; 8 – уровень установленной площади мембраны $F_{уст.} = 0,0323$ м²

С целью дальнейшей оптимизации параметров единичного МК-модуля дискового типа рассмотрели еще один (5-й) режим со следующими исходными данными. Толщину мембраны из сплава 75 %Pd–25 %Ag на пористой подложке уменьшили с 50 до 20 мкм. Абсолютное давление над мембраной увеличили с 1,3 до 2,6 МПа, а абсолютное давление под мембраной увеличили с 0,1 до 0,15 МПа. Отметим, что более высокое давление под мембраной (p_n) обеспечивает подачу водорода-продукта потребителю не только самотеком, но и под избыточным давлением. Расход исходной парометановой смеси при отношении $H_2O/CH_4 = 3$ с $Q_0 = 0,48$ (для режима 1) увеличили до $Q_0 = 0,626$ м³/ч (режим 5). Среднюю рабочую температуру МК-устройства (650 °С), общую площадь мембраны (0,0323 м²) и коэффициент удельной водородопроницаемости $\gamma = 0,017$ см³H₂·мм/(см²·с·ат^{0,5}) оставили без изменений.

Результаты анализа для 5-го режима представлены в табл. 1. Расчеты показали, что за счет интенсификации процесса диффузионного отвода водорода через мембрану ($J_{H_2} = 18,4$ м³H₂/(м²·ч)) и увеличения потока исходного сырья ($Q_0 = 0,626$ м³/ч) максимальная расчетная производительность единичного МК-модуля дискового типа увеличилась до $Q_p = 0,593$ м³H₂/ч на той же установленной площади мембраны ($F_{уст.} = 0,0323$ м²), что в 1,83 раза больше максимального $Q_p = 0,323$ м³H₂/ч для 1-го штатного режима (табл. 1). Отметим, что практически такое же увеличение производительности МК-модуля дискового типа по данным оценок из работы [13], удалось достичь, но только при 10-и кратном уменьшении толщины мембраны

| | | |
|---|----|-------|
| с | 50 | до |
| | | 5 мкм |

при одинаковой степени извлечения водорода $Y_{H_2} = 70$ %.

При принятом для 5-ого режима комплексе условий более глубокое извлечение водорода осуществляется до концентрации водорода над поверхностью мембраны $X_{H_2} = 0,0587$ моль. долей (табл. 1), близкой к концентрационному пределу $X_{пред.} = p_n/p_v = 0,15/2,6 = 0,0577$ моль. долей. Как и для 3-го режима, высокую экономичность извлечения водорода характеризуют рассчитанные для 5-го режима степень конверсии метана $СК = 0,993$ и степень извлечения водорода $Y_{H_2} = 0,994$ на выходе из МК-модуля дискового типа. Расчетные величины удельных показателей объемного и мольного выходов

водорода для 5-го режима, как и для 3-его режима, достаточно высокие и составили $q_v = 0,947 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{м}^3 \text{ сырь\ddot{a}}$ и $q_M = 3,79 \text{ моль. H}_2/\text{моль. CH}_4$ (табл. 1).

Результатов анализа единичного МК-модуля дискового типа следует, что математическая модель [8, 9] адекватно и на хорошем количественном уровне описывает экспериментальные данные из работы [13]. В рамках модельных представлений [8, 9] рассмотрены возможные пути повышения, как производительности МК-устройства, так и экономичности извлечения высокочистого водорода из исходного углеводородного сырья.

Обращает на себя внимание достаточно высокий уровень конструкторских и технологических решений при создании единичного МК-модуля дискового типа [13], открывающий перспективы для дальнейшего развития подобных мембранно-каталитических систем получения высокочистого водорода из различных видов углеводородного сырья. Из сравнения параметров индивидуальных МК-модулей панельного [9] и дискового типа [13], приведенного в табл. 2, видно, что их производительности по высокочистому водороду достаточно близки.

Таблица 2 – Сравнение параметров единичных МК-модулей панельного [9] и дискового [13] типов

| Параметры мембранно-каталитических модулей | | |
|---|---|--|
| Параметры | МК-модуль панельного типа, производительность $0,39 \text{ м}^3 \text{ H}_2/\text{ч}$ [9] | МК-модуль дискового типа, производительность $0,3 \text{ м}^3 \text{ H}_2/\text{ч}$ [13] |
| Температура, °С | 550 | 650 |
| Отношение $\text{H}_2\text{O}/\text{C}$ | 3 | 3 |
| $Q_{\text{ПГ}}$, $\text{м}^3/\text{ч}$ | 0,1158 (0,0946*) | – |
| Q_{CH_4} , $\text{м}^3/\text{ч}$ | – | 0,12 (0,12**) |
| p_v , МПа | 0,9 (0,9*) | 1,3 (1,3**) |
| p_n , МПа | 0,073 (0,04*) | 0,1 (0,1**) |
| F , м^2 | 0,035 (0,092*) | 0,0323 (0,0323**) |
| Q_p , $\text{м}^3/\text{ч}$ | 0,39 (0,39*) | 0,323 (0,29**) |
| J_{H_2} , $\text{м}^3\text{H}_2/(\text{м}^2 \cdot \text{ч})$ | 11,1 (4,23*) | 10 (9**) |

Примечание. ПГ – природный газ: 88,5 % CH_4 ; 4,6 % C_2H_6 ; 5,4 % C_3H_8 и 1,5 % C_4H_{10} [7]; *Данные из работы [9], **данные из работы [13].

Известно, что из 112 мембранно-каталитических модулей панельного типа был сформирован и испытан МК-конвертор производительностью до $40 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ [7]. Индивидуальные мембранно-каталитические модули дискового типа [13] также могут представлять интерес с точки зрения наращивания производительности МК-устройств путем увеличения числа параллельно работающих модулей. Так, на базе 32 параллельно работающих индивидуальных мембранно-каталитических модулей дискового типа [13] в работе [14] представлены результаты проектного расчета мембранно-каталитического реактора с повышенной производительностью $Q_p = 7,45 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ для получения высокочистого водорода из продуктов предварительной паровой конверсии дизельного топлива.

3. Анализ проектных параметров мембранно-каталитического реактора на базе 32 МК-модулей дискового типа для получения высокочистого водорода из продуктов паровой конверсии дизельного топлива

В работе [14] представлены результаты проектного расчета мембранно-каталитического реактора (в составе топливного процессора) на базе 32 параллельно работающих индивидуальных мембранно-каталитических модулей дискового типа, расположенных в 8 секциях по 4 модуля в каждой (рис. 6 и 7). Мембранно-каталитический реактор [14] предназначен для получения высокочистого водорода с проектной производительностью $7,45 \text{ м}^3\text{Н}_2/\text{ч}$ из продуктов предварительной паровой конверсии дизельного топлива (ДТ).

Характеристики индивидуального МК-модуля дискового типа, лежащие в основе проектного расчета [14], экспериментально и теоретически исследованы в работе [13] на исходных паро-метановых смесях в качестве сырья.

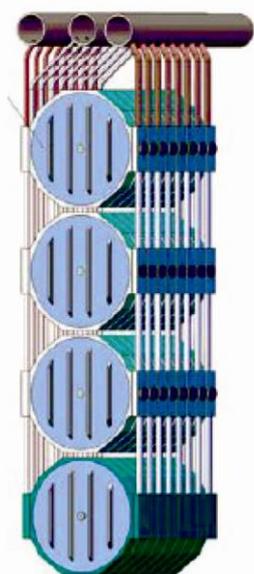


Рис. 6. МК-блок из 8 секций по 4 мембранно-каталитических модуля дискового типа в каждой [17]



Рис. 7. Внешний вид установки получения высокочистого водорода из углеводородного сырья на базе МК-реактора [17]

В настоящем разделе проверена адекватность математической модели [8, 9] и проанализированы возможные пути оптимизации параметров МК-реактора, работающего по схеме с параллельным распределением потока реакционной смеси [14].

Проектные расчеты в работе [14] выполнены на базе математической модели работ [13, 14, 18], основанной на уравнениях химической кинетики с учетом неизотермичности мембранно-каталитических модулей («кинетическая» модель), протестированной на результатах собственных испытаний единичного мембранно-каталитического модуля дискового типа [13]. В данном случае «кинетическая» модель привязана к дисковой геометрии МК-модулей и предполагает, что производительность мембранного модуля определяется диффузией реагентов через слой катализатора к поверхности мембраны (эффект «концентрационной поляризации»), теплопроводностью слоя катализатора и потоком водорода через Pd–Ag мембрану. Отметим, что «кинетическая» модель [13, 14, 18] использована авторами только для собственных исследований. Результаты проверки адекватности «кинетической» модели на экспериментальных данных других авторов неизвестны.

В каждом индивидуальном мембранно-каталитическом модуле дискового типа в качестве активного компонента использован Ni/MgO-катализатор конверсии метана, нанесенный на поверхность ячеистой пористой структуры дисковых пластин из «пеноникеля» (или высокопористого ячеистого материала ВПЯМ [16]) диаметром 160 мм и толщиной 4 мм, расположенные по обе стороны дискового мембранного элемента [13, 14].

Упрощенная технологическая схема установки получения высокочистого водорода производительностью $Q_p = 7,45 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ [14] из дизельного топлива на базе 32 параллельно работающих мембранно-каталитических модулей дискового типа с использованием модельных представлений для системы (ВТК–ВТМА) [8, 9] представлены на рис. 8.

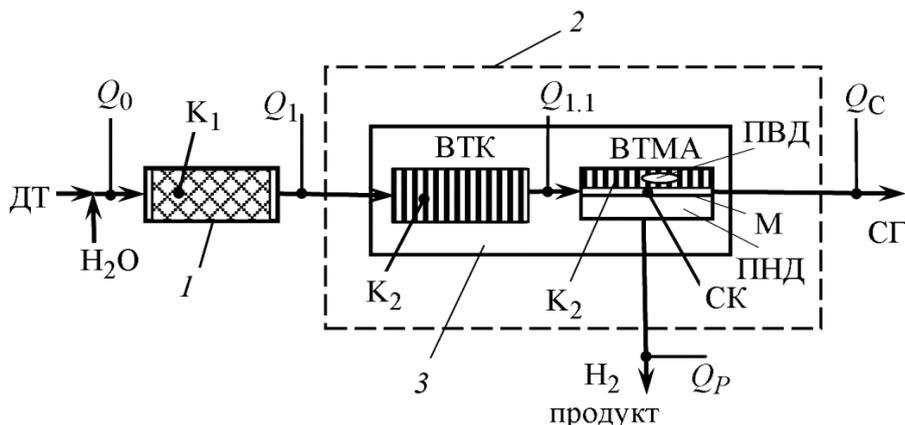
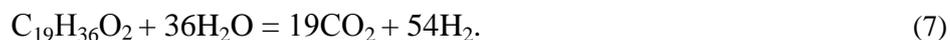


Рис. 8. Упрощенная технологическая схема установки получения высокочистого водорода из дизельного топлива: 1 – отдельный реактор предварительной паровой конверсии дизельного топлива; 2 – МК-реактор на базе 32 МК-модулей дискового типа с общей площадью мембран $F_{\text{уст.}} = 1,0336 \text{ м}^2$; 3 – МК-модуль дискового типа; ВТК – высокотемпературный конвертер метана; ВТМА – высокотемпературный мембранный аппарат; ПВД – полость высокого давления; ПНД – полость низкого давления; М – мембрана; СК – свободный канал 0,7 мм; ОК – общий корпус МК-модуля дискового типа; ДТ – дизельное топливо; СГ – сбросной газ; K_1 – катализатор конверсии ДТ; K_2 – катализатор конверсии метана; $Q_0, Q_1, Q_{1.1}, Q_c, Q_p$ – газовые потоки по ходу технологической схемы

Предварительно методика анализа параметров установки получения высокочистого водорода производительностью $Q_p = 7,45 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ [14] из дизельного топлива на базе 32-х параллельно работающих мембранно-каталитических модулей дискового типа отработана в работе [19] с учетом более сложного атомного состава дизельного топлива по сравнению с метаном.

При проведении анализа первоначально оценили основные параметры отдельного традиционного каталитического реактора предварительной паровой конверсии ДТ (рис. 8, поз. 1). Для проведения проверочных расчетов приняты следующие исходные данные: дизельное топливо, согласно данным работы [5], отвечает химической формуле $\text{C}_{19}\text{H}_{36}\text{O}_2$; отношение водяного пара к углеродному атому углеводородного сырья в исходной смеси $\text{H}_2\text{O}/\text{C} = 3$; средняя рабочая температура в реакторе предварительной конверсии принята равной $520 \text{ }^\circ\text{C}$; абсолютное давление задано равным 1,3 МПа [14]. Объемный выходной поток продуктов предварительной паровой конверсии ДТ принят, как и в работе [14] $Q_1 = 13 \text{ м}^3/\text{ч}$.

Исходная смесь дизельного топлива с водяным паром в реакторе предварительной конверсии (рис. 8, поз. 1) согласно водородообразующей реакции (7) и сопряженных обратимых химических реакций (1, 2), превращается в смесь простых газов $\text{H}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{CO}_2, \text{CO}, \text{CH}_4$:



С помощью методики для тройных диаграмм С–Н–О [20], учитывая неизменность состава по атомам водорода, кислорода и углерода в исходной смеси и продуктах паровой конверсии ДТ, рассчитали равновесный состав газовой смеси на выходе из отдельного реактора паровой конверсии дизельного топлива (рис. 8, поз. 1). Результаты расчетов состава продуктов паровой конверсии ДТ, приведенные в табл. 3, практически не отличались от данных работы [14]. Дополнительно с помощью методики [20] оценили объемный расход исходной смеси водяного пара и дизельного топлива на входе в отдельный реактор предварительной паровой конверсии ДТ, который составил величину $Q_0 = 10,5 \text{ м}^3/\text{ч}$ (табл. 3).

Таблица 3 – Технологические параметры реактора предварительной паровой конверсии дизельного топлива

| Ре-жим | $\text{H}_2\text{O}/\text{C}$ | $t_{\text{ср.}}, \text{ }^\circ\text{C}$ | $Q_0, \text{ м}^3/\text{ч}$ | $Q_1, \text{ м}^3/\text{ч}$ | Концентрации продуктов паровой конверсии дизельного топлива на выходе из реактора, об. % | | | | |
|--------|-------------------------------|--|-----------------------------|-----------------------------|--|----------------------|---------------|-------------|---------------|
| | | | | | H_2 | H_2O | CO_2 | CO | CH_4 |
| 1 | 3 | 520 | 10,5 | 13 | 12,9 | 60,6 | 10,5 | 0,5 | 15,5 |
| | 3* | 520* | – | 13* | 12,8* | 60,4* | 9,9* | 0,5* | 16,4* |

*Данные из работы [14].

Далее продукты предварительной паровой конверсии дизельного топлива с общим расходом $Q_1 = 13 \text{ м}^3/\text{ч}$ (рис. 8) и абсолютным давлением 1,3 МПа подаются на вход каждого из 32-х параллельно работающих индивидуальных мембранно-каталитических модулей дискового типа со средней рабочей температурой, принятой равной $650 \text{ }^\circ\text{C}$.

Анализ параметров МК-реактора (рис. 8, поз. 2) из 32 мембранно-каталитических модулей дискового типа проводили с помощью математической модели [8, 9]. Для проведения анализа МК-реактора приняты следующие исходные технологические параметры: абсолютное давление в полости высокого давления (ПВД) $p_v = 1,3 \text{ МПа}$ [14], абсолютное давление в полости низкого давления (ПНД) $p_n = 0,1 \text{ МПа}$ [14]. Средняя рабочая температура каждого из 32 МК-модулей дискового типа принята равной $650 \text{ }^\circ\text{C}$. Суммарная установленная площадь мембран из палладиевого сплава толщиной 50 мкм на пористой подложке в МК-реакторе [14] составляет $F_{\text{уст.}} = 0,0323 \cdot 32 = 1,0336 \text{ м}^2$. Коэффициент удельной водородопроницаемости Pd–Ag мембраны при рабочей температуре $650 \text{ }^\circ\text{C}$, как и ранее, принят равным $\gamma = 0,017 \text{ см}^3\text{H}_2 \cdot \text{мм} / (\text{см}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{ат}^{0,5})$.

Проходя через слой катализатора конверсии метана дискового типа, свободного от мембраны, соотношение продуктов конверсии в реакционном газе изменяется за счет более высокой средней рабочей температуры ($650 \text{ }^\circ\text{C}$) и при неизменном абсолютном давлении $p_v = 1,3 \text{ МПа}$. На входе в мембранную часть каждого из 32 МК-модулей дискового типа суммарный объемный расход продуктов конверсии дизельного топлива по нашей оценке составил $Q_{1,1} = 14,3 \text{ м}^3/\text{ч}$, а расчетный равновесный химический состав: $\text{H}_2 = 27,12$; $\text{H}_2\text{O} = 48,81$; $\text{CO}_2 = 11,41$; $\text{CO} = 3,1$ и $\text{CH}_4 = 9,55$ об. %. Именно этот состав водородосодержащей газовой смеси подается в канал между мембраной и катализатором высотой порядка 0,7 мм [13, 14], где и подвергается мембранному извлечению водорода, сопряженному с вовлечением в этот процесс метана через смещение химического равновесия (1) вправо при отводе водорода через мембрану.

Результаты анализа методом математического моделирования представлены графически на рис. 9. Расчетная производительность МК-реактора (рис. 9, кривая 1) с ростом расчетной площади мембраны увеличивается и при $F_{\text{расч.}} = 1,033 \text{ м}^2$ близкой к установлен-

ной $F_{уст.} = 1,0336 \text{ м}^2$ (рис. 9, линия 8) достигает максимального значения $Q_P = 7,67 \text{ м}^3 \text{ Н}_2/\text{ч}$, что достаточно близко к проектной величине $Q_P = 7,45 \text{ м}^3 \text{ Н}_2/\text{ч}$ из работы [14], отмеченной на рис. 9 линией 7. Расхождение с проектной производительностью минимально и составляет около 3 %.

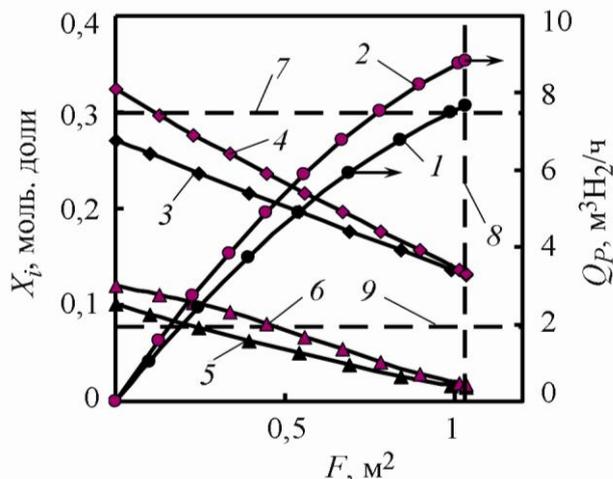


Рис. 9. Расчетные зависимости производительности Q_P (1, 2), концентраций водорода X_{H_2} (3, 4) и концентраций метана X_{CH_4} (5, 6) от площади мембраны F мембранно-каталитического реактора [14]: 1, 3, 5 – дизельное топливо; 2, 4, 6 – метан; 7 – уровень проектной производительности МК-реактора $Q_P = 7,45 \text{ м}^3 \text{ Н}_2/\text{ч}$; 8 – уровень общей установленной площади мембраны $F_{уст.} = 1,0336 \text{ м}^2$; 9 – уровень концентрационного предела $X_{пред.} = 0,077$ моль. долей

По мере извлечения водорода его концентрация (рис. 9, кривая 3) уменьшается с увеличением площади мембраны и при $F_{расч.} = 1,033 \text{ м}^2$, практически равной $F_{уст.} = 1,0336 \text{ м}^2$ достигает величины $X_{\text{H}_2} = 0,131$ моль. долей, что заметно больше величины концентрационного предела $X_{пред.} = p_{\text{H}_2}/p_{\text{в}} = 0,1/1,3 = 0,077$ моль. долей и свидетельствует о недостаточно полном извлечении водорода. Расчетная концентрация метана с увеличением площади мембраны также уменьшается и достигает величины $X_{\text{CH}_4} = 0,015$ моль. доли при $F_{расч.} = 1,033 \text{ м}^2$ (рис. 9, кривая 3).

В численном виде результаты анализа параметров получения высокочистого водорода из дизельного топлива в мембранно-каталитическом реакторе [14] представлены в 1-й строке табл. 4 (1-й режим). Удельный показатель объемного выхода водорода составил $q_v = 0,73 \text{ м}^3 \text{ Н}_2/\text{м}^3$ сырья, а мольного выхода водорода $q_m = 42,34$ моль. $\text{Н}_2/\text{моль}$ углеводорода. Последний показатель с учетом недостаточно полного извлечения водорода по величине близок к стехиометрическому коэффициенту при водороде (равному 54) для водородообразующей реакции (7). Кроме того, оценили общий объемный расход сбросного газа $Q_c = 9,1 \text{ м}^3/\text{ч}$ и химический состав на выходе из мембранной части всех МК-модулей дискового типа: $\text{H}_2 = 13,11$; $\text{H}_2\text{O} = 49,01$; $\text{CO}_2 = 32,19$; $\text{CO} = 4,23$; $\text{CH}_4 = 1,46$ об. %. Наша оценка параметров сбросного газа хорошо коррелирует с результатами проектного расчета из работы [18]: $Q_c = 9,14 \text{ м}^3/\text{ч}$ и концентрации $\text{H}_2 = 10,3$; $\text{H}_2\text{O} = 51,1$; $\text{CO}_2 = 31,3$; $\text{CO} = 2,5$; $\text{CH}_4 = 4,8$ об. %.

Таким образом, можно констатировать, что математическая модель [8, 9] адекватно и на хорошем количественном уровне описывает результаты проектного расчета по «кинетической» модели МК-реактора [14] получения высокочистого водорода из продуктов паровой конверсии ДТ.

Таблица 4 – Параметры получения высокочистого водорода в мембранно-каталитическом реакторе [14]

| Режим | Параметры МК-конвертора | | | | | | | | |
|-------|-------------------------|----------------------------|----------------------------|--------------------------------|--------------------------------------|--|----------------------------------|---|--|
| | $t, ^\circ\text{C}$ | $p_{\text{в}}, \text{МПа}$ | $p_{\text{н}}, \text{МПа}$ | $F_{\text{расч.}}, \text{м}^2$ | $Q_p, \text{м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ | $J_{\text{H}_2}, \text{м}^3\text{H}_2/(\text{м}^2\cdot\text{ч})$ | $\text{XH}_2, \text{моль. доли}$ | $q_{\text{v}}, \frac{\text{м}^3\text{H}_2}{\text{м}^3\text{сырья}}$ | $q_{\text{м}}, \frac{\text{моль H}_2}{\text{моль у.в.}}$ |
| 1 | 650 | 1,3 | 0,1 | 1,033 1,0336* | 7,67 7,45* | 7,42 | 0,131 | 0,73 | 42,3 |
| 2 | 650 | | | 1,0331 1,0336* | 8,84 | 8,56 | 0,133 | 0,84 | 3,37 |
| 3 | 650 | 2,6 | 0,15 | 1,033 1,0336* | 15,4 | 14,9 | 0,0586 | 0,86 | 49,8 |

*Данные из работы [14].

Это обстоятельство свидетельствует о том, что производительность МК-реактора с дисковыми мембранно-каталитическими модулями [14], согласно модельным представлениям [8, 9] определяется (лимитируется) только диффузионным отводом водорода через мембрану.

Дополнительно провели аналогичный анализ при тех же технологических условиях для МК-реактора [14], но при использовании в качестве сырья парометановой смеси (2-й режим) с исходным объемным расходом $Q_0 = 10,5 \text{ м}^3/\text{ч}$, таким же как для 1-го режима (дизельное топливо), с отношением $\text{H}_2\text{O}/\text{CH}_4 = 3$.

Упрощенная технологическая схема для этого режима представлена на рис. 10. Отметим, что в этом случае (2-й режим) исходная смесь $\text{H}_2\text{O}-\text{CH}_4$ подается непосредственно на входы всех 32 МК-модулей дискового типа без использования отдельного традиционного конвертора (рис. 8, поз. 1) Результаты анализа в графическом виде представлены кривыми 2, 4, 6 на рис. 9, а в численном виде – в табл. 4 (2-й режим). При использовании метана в качестве сырья максимальная производительность МК-реактора [14] достигает величины $Q_p = 8,84 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ при расчетной площади $F_{\text{расч.}} = 1,033 \text{ м}^2$, близкой к установленной площади мембраны $F_{\text{уст.}} = 1,0336 \text{ м}^2$. Для 2-го режима более высокая производительность МК-реактора при прочих равных условиях обусловлена повышенным содержанием атомов водорода в метане по сравнению с дизельным топливом (1-й режим).

Для 2-го режима удельный показатель объемного выхода водорода составил $q_{\text{v}} = 0,84 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{м}^3 \text{ сырья}$, а мольного выхода водорода – $q_{\text{м}} = 3,37 \text{ моль H}_2/\text{моль CH}_4$. Последний показатель с учетом недостаточно полного извлечения водорода по величине близок к стехиометрическому коэффициенту при водороде, равном 4 для водородообразующей реакции (1). Для представленных в табл. 4 1-го и 2-го режимов оценили среднюю плотность потока диффузии водорода через мембрану в мембранно-каталитическом реакторе [14], которая составила $J_{\text{H}_2} = 7,42 \text{ м}^3\text{H}_2/(\text{м}^2\cdot\text{ч})$ и $J_{\text{H}_2} = 8,56 \text{ м}^3\text{H}_2/(\text{м}^2\cdot\text{ч})$, соответственно для 1-го режима (дизельное топливо) и 2-ого режима (метан).

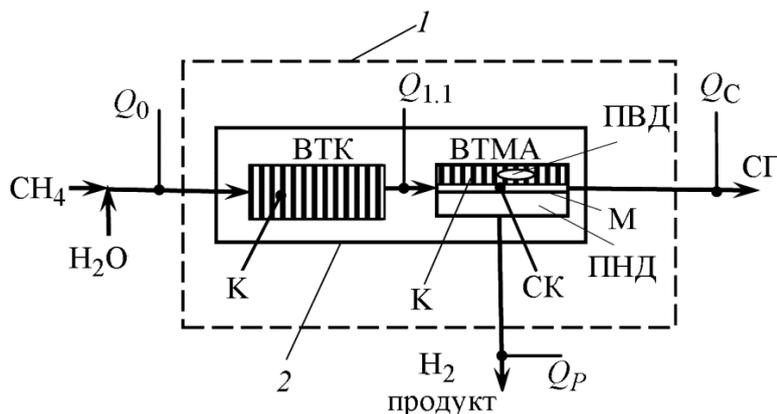


Рис. 10. Упрощенная технологическая схема получения высокочистого водорода из метана: 1 – МК-реактор на базе 32 МК-модулей дискового типа с общей площадью мембран $F_{уст.} = 1,0336 \text{ м}^2$; 2 – МК-модуль дискового типа; ВТК – высокотемпературный конвертор метана; ВТМА – высокотемпературный мембранный аппарат; ПВД – полость высокого давления; ПНД – полость низкого давления; М – мембрана; СК – свободный канал 0,7 мм; ОК – общий корпус МК-модуля дискового типа; СГ – сбросной газ; К – катализатор конверсии метана; Q_0 , $Q_{1.1}$, Q_c , Q_p – газовые потоки по ходу технологической схемы

Кроме того, для 2-го режима рассчитали состав сбросного газа на выходе из мембранной части МК-модулей дискового типа: $\text{H}_2 = 13,33$; $\text{H}_2\text{O} = 47,33$; $\text{CO}_2 = 33,06$; $\text{CO} = 4,56$; $\text{CH}_4 = 1,72$ об. %, который оказался достаточно близким к составу сбросного газа для 1-го режима (табл. 4). Приведенные результаты анализа МК-реактора из 32 мембранно-каталитических модулей дискового типа для 2-го режима показали, что в качестве сырья можно использовать исходные смеси водяного пара с метаном.

Оценку термодинамической вероятности углеродоотложения для 1-го режима (дизельное топливо) и 2-го режима (метан), как и в 1-м разделе, осуществляли по безразмерному критерию $\omega = p_c/p_v$ [8]. Результаты количественной оценки вероятности углеродоотложения в виде графических зависимостей безразмерного критерия углеродоотложения ω от площади мембраны F , представленные кривыми 1, 2 на рис. 11 соответственно для 1-го и 2-го режимов, лежат выше границы углеродоотложения (горизонтальная пунктирная линия 3 на рис. 11) во всем диапазоне расчетных площадей от 0 до $F_{уст.} = 1,0336 \text{ м}^2$ (вертикальная пунктирная линия 4 на рис. 10) и свидетельствуют об отсутствии выпадения углерода.

С целью оптимизации параметров МК-реактора с 32 мембранно-каталитическими модулями дискового типа дополнительно рассмотрели еще один 3-й режим со следующими исходными данными. Толщину мембраны из сплава 75 %Pd–25 %Ag на пористой подложке уменьшили с 50 до 20 мкм. Абсолютное давление над мембраной увеличили с 1,3 до 2,6 МПа, а абсолютное давление под мембраной увеличили с 0,1 до 0,15 МПа. Расход исходной смеси водяного пара с ДТ при отношении $\text{H}_2\text{O}/\text{C} = 3$ увеличили с $Q_0 = 10,5 \text{ м}^3/\text{ч}$ (для 1-го режима) до $Q_0 = 17,92 \text{ м}^3/\text{ч}$ (3-й режим).

Среднюю рабочую температуру отдельного конвертора дизельного топлива (520 °С), среднюю рабочую температуру МК-реактора (650 °С), общую установленную площадь мембраны ($1,0336 \text{ м}^2$) и коэффициент удельной водородопроницаемости $\gamma = 0,017 \text{ см}^3\text{H}_2\cdot\text{мм}/(\text{см}^2\cdot\text{с}\cdot\text{ат}^{0,5})$ оставили на прежнем уровне (рис. 8).

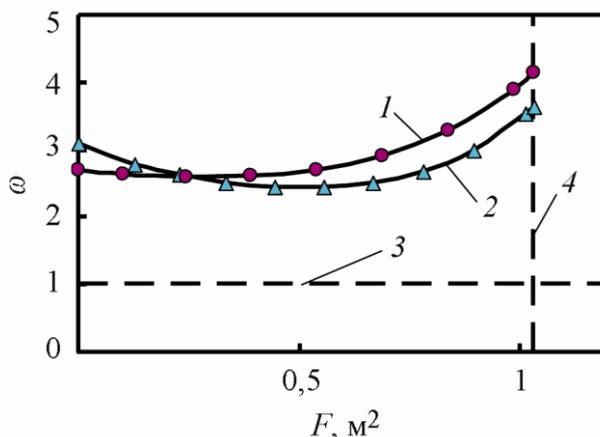


Рис. 11. Зависимости критерия термодинамической вероятности углеродоотложения ω от площади мембраны F : 1 – дизельное топливо; 2 – метан; 3 – граница углеродоотложения ($\omega = 1$); 4 – граница установленной площади мембраны $F_{уст.} = 1,0336 \text{ м}^2$

В численном виде результаты анализа для 3-го режима представлены в 3-й строке табл. 4. Расчеты показали, что за счет интенсификации процесса диффузионного отвода водорода через мембрану ($J_{\text{H}_2} = 14,9 \text{ м}^3\text{H}_2/(\text{м}^2 \cdot \text{ч})$) и увеличения потока исходного сырья ($Q_0 = 17,92 \text{ м}^3/\text{ч}$) максимальная расчетная производительность МК-реактора увеличилась до $Q_p = 15,4 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ на той же установленной площади мембраны ($F_{уст.} = 1,0336 \text{ м}^2$), что практически в 2 раза больше максимальной производительности $Q_p = 7,67 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ для 1-го штатного режима [14] (табл. 4).

При принятом для 3-ого режима комплексе условий извлечение водорода осуществляется до концентрации водорода над поверхностью мембраны $X_{\text{H}_2} = 0,0586$ моль. долей, близкой к концентрационному пределу $X_{пред.} = p_{\text{H}_2}/p_{\text{в}} = 0,15/2,6 = 0,0577$ моль. долей и свидетельствует о более полном извлечении водорода (табл. 4). Расчетные величины удельных показателей объемного и мольного выходов водорода для 3-ого режима составили

$q_v = 0,86 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{м}^3$ сырья и $q_M = 49,8$ моль. $\text{H}_2/\text{моль. CH}_4$ (табл. 4, строка 3).

Представляет интерес сравнить параметры МК-реактора с проектной производительностью $7,45 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ [14] и мембранно-каталитического конвертора с производительностью до $40 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ из работы [8]. Не смотря на различие конструктивных и технологических параметров для обоих МК-устройств такое оценочное сравнение можно провести при одинаковой площади мембраны. Общая площадь мембраны в МК-конверторе производительностью до $40 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ [7] составляла $10,3 \text{ м}^2$ [9, 21] и превышала общую площадь мембран в МК-реакторе с проектной производительностью $7,45 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ [14] в $10,3/1,0336 = 9,96$ раз (т. е. практически в 10 раз). В этом случае оценочная производительность МК-реактора с дисковыми МК-модулями при общей площади мембран $10,3 \text{ м}^2$ составит при условиях 1-го режима около $77 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$, а для условий 3-го режима (табл. 4) – $154 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$, что заметно выше, чем МК-конвертора с производительностью $40 \text{ м}^3\text{H}_2/\text{ч}$ [7]. Наиболее вероятной причиной более высокой оценочной производительности МК-реактора с дисковыми МК-модулями [14] являются технологические условия и конструктивные параметры, обеспечивающие более высокую интенсивность отвода водорода через мембрану.

4. Выводы

На примерах индивидуального мембранно-каталитического модуля дискового типа получения высокочистого водорода из метана и реактора из 32 МК-модулей этого типа для получения высокочистого водорода из дизельного топлива на хорошем количественном уровне подтверждена адекватность математической модели мембранного извлечения водорода в режиме идеального вытеснения с учетом химического взаимодействия в газовой фазе.

Расчетным путем с использованием модельных представлений показаны возможные пути повышения производительности и экономичности получения высокочистого водорода из метана и продуктов предварительной паровой конверсии дизельного топлива.

Практически полное совпадение всего комплекса расчетных параметров мембранно-каталитических устройств дискового типа по двум разным математическим моделям свидетельствует о том, что диффузионный отвод водорода через мембрану является основной лимитирующей стадией процесса мембранного извлечения водорода, совмещенного с каталитическими процессами. Другие факторы, присущие «кинетической» модели, такие как диффузия реагентов, через слой катализатора к поверхности мембраны (эффект «концентрационной поляризации»), неизотермичность мембранно-каталитических устройств и теплопроводность слоя катализатора не оказывают существенного влияния.

Математическую модель, адекватно описывающую экспериментальные и проектные данные, целесообразно использовать при проведении проектных и технологических расчетов, а также для выбора оптимальных параметров и режимов мембранно-каталитических устройств разных типов и геометрической формы для получения высокочистого водорода из различных видов углеводородного сырья.

Список литературы

1. Recent advances on membranes and membrane reactors for hydrogen production (Review) / F. Gallucci, E. Fernandez, P. Corengia, M. Van Sint Annalanda // *Chemical Engineering Science*. – 2013. – Vol. 92. – P. 40–66. – DOI: 10.1016/j.ces.2013.01.008.
2. Methane steam reforming operation and thermal stability of new porous metal supported tubular palladium composite membranes / B. Dittmar, A. Behrens, N. Schödel, M. Rüttinger, Th. Franco, G. Straczewski, R. Dittmeyer // *Int. J. Hydrogen Energy*. – 2013. – Vol. 38. – P. 8759–8771. – DOI: 10.1016/j.ijhydene.2013.05.030.
3. Shigarov A., Kirillov V., Landgraf I. Computational study of Pd-membrane CH₄ steam reformer with fixed catalyst bed: Searching for a way to increase membrane efficiency // *Int. J. Hydrogen Energy*. – 2014. – Vol. 39, no. 35. – P. 20072–20093. – DOI: 10.1016/j.ijhydene.2014.10.018.
4. Vandyshev A. B., Kulikov V. A. Analysis of parameters of high-purity hydrogen production from methane in a laboratory-scale membrane reformer with an ultrathin palladium membrane // *Chemical and Petroleum Engineering*. – 2015. – Vol. 51, nos. 3–4. – P. 250–256. – DOI 10.1007/s10556-015-0032-1.
5. Kirillov V. A., Shigarov A. B. Biofuels as a promising source of hydrogen for fuel cell power plants // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. – 2016. – Vol. 50, iss. 4. – P. 351–365. – DOI: 10.1134/S0040579516040369.
6. Vandyshev A. B., Kulikov V. A. Estimate of high-purity hydrogen production efficiency in membrane-catalytic systems from steam reforming products of gasoline, kerosene, and diesel oil // *Chemical and Petroleum Engineering*. – 2018. – Vol. 53, nos. 9–10. – P. 593–597. – DOI 10.1007/s10556-018-0386-2.
7. Development of membrane reformer system for highly efficient hydrogen production from natural gas / Y. Shirasaki, T. Tsuneki, Y. Ota, I. Yasuda, S. Tachibana, H. Nakajima,

- K. Kobayashi // *Int. J. Hydrogen Energy*. – 2009. – Vol. 34, iss. 10. – P. 4482–4487. – DOI: 10.1016/j.ijhydene.2008.08.056.
8. Murav'ev L. L., Vandyshev A. B., and Makarov V. M. Modeling of the membrane extraction of hydrogen from multicomponent gaseous mixtures // *Teor. Osn. Khim. Tekhnol.* – 1999. – Vol. 33, no. 2. – P. 190–192.
9. Vandyshev A. B. Analyzing the parameters of membrane catalytic systems for extraction of highly pure hydrogen from hydrocarbon feedstock with the application of mathematical modeling // *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures (DREAM open-access journal)*. – 2016. – Iss. 4. – P. 6–46. – DOI: 10.17804/2410-9908.2016.4.006-045. – Available at: https://dream-journal.org/DREAM_Issue_4_2016_Vandyshev_A.B._006_045.pdf
10. Vandyshev A. B., Kulikov V. A. Analysis of the calculated parameters of a model membrane-catalytic converter for the production of high-purity hydrogen from methane // *Chemical and Petroleum Engineering*. – 2018. – Vol. 54, nos. 1–2. – P. 31–37. – DOI: 10.1007/s10556-018-0434-y.
11. Vandyshev A. B., Kulikov V. A. Analysis of parameters and modes for producing high-purity hydrogen from natural gas in membrane-catalytic devices // *Chemical and Petroleum Engineering*. – 2017. – Vol. 53, nos. 1–2. – P. 49–55. – DOI: 10.1007/s10556-017-0293-y.
12. Analysis of the Efficiency of a Pd/Ag Membrane with a Thickness of 2.25 Microns on a Porous Ceramic Substrate in a Laboratory Membrane Reactor // *Chemical and Petroleum Engineering*. – 2019. – Vol. 55 (3). – P. 129–135. – DOI: 10.1007/s10556-019-00592-y.
13. Membrane reformer module with Ni-foam catalyst for pure hydrogen production from methane: Experimental demonstration and modeling / A. B. Shigarov, V. A. Kirillov, Y. I. Amosov, A. S. Brayko, V. B. Avakov, I. K. Landgraf, A. R. Urusov, S. A. Jivulko, V. V. Izmaylovich // *Int. J. Hydrogen Energy*. – 2017. – Vol. 42, no. 10. – P. 6713–6726. – DOI: 10.1016/j.ijhydene.2016.12.057.
14. Production of Pure Hydrogen from Diesel Fuel by Steam Pre-Reforming and Subsequent Conversion in a Membrane Reactor / V. A. Kirillov, A. B. Shigarov, Yu. I. Amosov, V. D. Belyaev, E. Yu. Gerasimov // *Petroleum Chemistry*. – 2018. – Vol. 58, no. 2. – P. 103–113. – DOI: 10.1134/S0965544118020020.
15. Vandyshev A. B., Kulikov V. A. Analysis of the results of testing an individual disk-type membrane-catalytic module for obtaining high-purity hydrogen from methane // *Chemical and Petroleum Engineering*. – 2020. – Vol. 55, nos. 9–10. – P. 725–732. – DOI 10.1007/s10556-020-00686-y.
16. Пористые проницаемые материалы : справочник / под ред. С. В. Белова. – М. : Металлургия, 1987. – С. 273–289.
17. Опыт практической реализации технологии конверсии углеводородного топлива с отбором водорода из зоны реакции / С. А. Живулько, В. Б. Аваков, И. К. Ланграфт, А. Р. Урусов // *Труды V Всероссийской конференции «Топливные элементы и энергоустановки на их основе»*, Суздаль, 2018. – С. 62–64.
18. Shigarov A. B., Kirillov V. A. Modeling of membrane reactor for steam methane reforming: From granular to structured catalysts // *Theor. Found. Chem. Eng.* – 2012. – Vol. 46, no. 2. – P. 97–107. – DOI: 10.1134/S004057951202011X.
19. Vandyshev A. B., Kulikov V. A. Evaluation of design parameters for a 32- module disk-type membrane-catalytic reactor for producing high-purity hydrogen from diesel fuel // *Chemical and Petroleum Engineering*. – 2020. – Vol. 55, nos. 9–10. – P. 815–820. – DOI 10.1007/s10556-020-00698-8.
20. Вандышев А. Б., Макаров В. М., Усова Т. Б. Анализ условий извлечения водорода из многокомпонентных водородосодержащих газовых смесей с помощью тройных диаграмм С-Н-О / *Ин-т машиноведения УрО РАН*. – Екатеринбург, 1998. – 18 с. – Деп. в ВИНТИ 09.12.98. – № 3610-В98.

21. Lukyanov B. N., Andreev D. V., Parmon V. N. Catalytic reactors with hydrogen membrane separation // Chemical Engineering Journal. – 2009. – Vol. 154. – P. 258–266. – DOI: 10.1016/j.cej.2009.04.023.

Received: 21.05.2020

Revised: 30.06.2020

Accepted: 24.07.2020

DOI: 10.17804/2410-9908.2020.4.028-034

DETERMINATION OF LITHIUM CONTENT IN SOLIDS BY NUCLEAR REACTION TECHNIQUE

V. B. Vykhodets^{1, a)}, T. E. Kurennykh^{1, b)*}, A. Yu. Nikolaev^{2, 3, c)},
A. V. Suzdaltsev^{2, 3, d)} and Yu. P. Zaikov^{2, 3, e)}

¹*M.N. Miheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,
18, S. Kovalevskoy St., Ekaterinburg, 620137, Russian Federation*

²*Institute of High-Temperature Electrochemistry, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,
22, S. Kovalevskoy St. / 20, Akademicheskaya St., Ekaterinburg, 620137, Russian Federation*

³*B. N. Yeltsin Ural Federal University,
19, Mira St., Ekaterinburg, 620002, Russian Federation*

a)  <http://orcid.org/0000-0001-9522-9147>;

b)  <http://orcid.org/0000-0001-9859-3374>;

c)  <http://orcid.org/0000-0001-5931-8812>;

d)  <http://orcid.org/0000-0003-3004-7611>;

e)  <http://orcid.org/0000-0001-6138-3955>

*Corresponding author: E-mail: kurennykh@imp.uran.ru

Address for correspondence: 18, S. ul. Kovalevskoy, Ekaterinburg, 620990, Ekaterinburg, Russian Federation

Tel.: +7 (343) 378 38 46

The acceleration method of nuclear reactions is used to measure the content of lithium and oxygen in zirconium oxides. The purpose of the study stems from the fact that there are no direct methods for determining lithium concentration in solids, while lithium is currently widely used for alloying alloys in aircraft construction, nuclear power engineering, electrochemical devices, and other fields of technology. It is shown that satisfactory metrological characteristics of the method are provided when using the ${}^6\text{Li}(d, p_0){}^7\text{Li}$ and ${}^7\text{Li}(d, p){}^8\text{Li}$ reactions at a deuteron energy of 650 keV.

Keywords: lithium, zirconium oxides, nuclear microanalysis, electrolysis, reduction.

Acknowledgment

The research was carried out within the state assignment from the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme Function, No. AAAA-A19-119012990095-0).

References

1. Elwyn A.J., Holland R.E., Davids C.N., Meyer-Schutzmeister L., Monahan J.E., Mooring F.P., Ray W. Absolute cross sections for deuteron-induced reactions on Li at energies below 1 Mev. *Physical Review C*, 1977, vol. 16, no. 5, pp. 1744–1756. DOI: 10.1103/PhysRevC.16.1744.
2. *Ion Beam Handbook for Material Analysis*, ed. by J.W. Mayer and E. Rimini, Academic Press, 1977, 488 p. ISBN 978-0-12-480860-7.
3. Choi Eu.Y., Lee J. Complete reduction of high-density UO_2 to metallic U in molten $\text{Li}_2\text{O-LiCl}$. *Journal of Nuclear Materials*, 2017, vol. 494, pp. 439–447. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2017.07.036.
4. Mullabaev A., Tkacheva O., Shishkin V., Kovrov V., Zaikov Y., Sukhanov L., Mochalov Y. Properties of the $\text{LiCl-KCl-Li}_2\text{O}$ system as operating medium for pyro-chemical reprocessing of spent nuclear fuel. *J. Nuclear Materials*, 2018, vol. 500, pp. 235–241. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2018.01.004.

5. Sakamura Y., Iizuka M., Kitawaki S., Nakayoshi A., Kofuji H. Formation and reduction behaviors of zirconium oxide compounds in LiCl–Li₂O melt at 923 K. *J. Nuclear Materials*, 2015, vol. 66, pp. 269–279. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2015.08.011.
6. Choi Eu.Y., Heo D.H. Reduction of zirconium oxide compounds by lithium metal as a reductant in molten LiCl salt. *J. Nuclear Materials*, 2018, vol. 512, pp. 193–198. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2018.10.015.
7. Baraboshkin A.N. *Elektrokristallizatsiya metallov iz rasplavlennykh solei* [Electrocrystallization of Metals from Molten Salts]. Moscow, Nauka Publ., 1976, 280 p. (In Russian).
8. The Stopping and Ranges of Ions in Matter-SRIM2013. Available at: <http://www.srim.org>

Подана в журнал: 21.05.2020

УДК 544.653.3

DOI: 10.17804/2410-9908.2020.4.028-034

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ЛИТИЯ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ МЕТОДОМ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ

В. Б. Выходец^{1, а)}, Т. Е. Куренных^{1, б)*}, А. Ю. Николаев^{2, 3, в)},
А. В. Суздальцев^{2, 3, г)}, Ю. П. Зайков^{2, 3, д)}

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов им. М.Н. Михеева
Уральского отделения Российской академии наук,
18, ул. С. Ковалевской, Екатеринбург, Российская Федерация

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской академии наук,
20, ул. Академическая, Екатеринбург, Российская Федерация

³Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
19, ул. Мира, Екатеринбург, Российская Федерация

а)  <http://orcid.org/0000-0001-9522-9147>;

б)  <http://orcid.org/0000-0001-9859-3374>;

в)  <http://orcid.org/0000-0001-5931-8812>;

г)  <http://orcid.org/0000-0003-3004-7611>;

д)  <http://orcid.org/0000-0001-6138-3955>

*Ответственный автор. Электронная почта: kurennykh@imp.uran.ru

Адрес для переписки: ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, Российская Федерация

Тел.: +7 (343) 378–38–46

Ускорительная методика ядерных реакций применена для измерения содержания лития и кислорода в оксидах циркония. Постановка исследования обусловлена тем, что для лития отсутствуют прямые методы определения его концентрации в твердых телах, а в настоящее время литий широко применяется для легирования сплавов в авиастроении, ядерной энергетике, электрохимических устройствах и других областях техники. Удовлетворительные метрологические характеристики методики обеспечиваются при использовании реакций ${}^6\text{Li}(d, p){}^7\text{Li}$ и ${}^7\text{Li}(d, p){}^8\text{Li}$ при энергии дейтронов 650 кэВ.

Ключевые слова: литий, оксиды циркония, ядерный микроанализ, электролиз, восстановление.

1. Введение

Литий и его соединения находят широкое применение в различных областях техники. В частности, в ядерной энергетике изотоп ${}^6\text{Li}$ служит промышленным источником для производства трития, а изотоп ${}^7\text{Li}$ используется как теплоноситель. В настоящее время литий-ионные аккумуляторы являются основным источником питания для всех автономных электрических устройств, включая смартфоны, электромобили и межпланетные зонды. Легирование литием придает уникальные свойства алюминиевым сплавам: повышает их прочность, модуль упругости, уменьшает плотность, многие литий-алюминиевые сплавы можно сваривать в отличие от алюминиевых. Сплавы с литием находят все более широкое распространение в авиационном машиностроении. В связи с этими и другими применениями лития актуальной является задача определения концентрации лития в металлических сплавах и оксидах. Цель работы – применение ускорительной методики ядерных реакций (NRA) для измерения концентрации лития в твердых телах и оценка метрологических характеристик методики NRA в этом случае. Постановка исследования обусловлена тем, что существующие

спектральные методы не обеспечивают получение надежных результатов для изотопов легких элементов, в том числе для лития, а методика NRA успешно применялась для многих изотопов легких элементов, например, ^2H , ^{16}O , ^{18}O , ^{14}N , ^{15}N , ^{12}C . Для измерения концентрации изотопов лития в твердых телах методика NRA практически не применялась, в то же время при облучении ускоренными дейтронами и протонами на изотопах лития протекают ядерные реакции $^6\text{Li}(d, p_0)^7\text{Li}$ и $^7\text{Li}(d, p)^8\text{Li}$ с большим выходом протонов [1, 2].

2. Образцы и методика

Апробация методики NRA для изотопов лития проводилась при исследовании процесса восстановления оксида ZrO_2 при электролизе расплава LiCl-KCl -(1 мас. %) Li_2O . Постановка такого исследования обусловлена тем, что расплавленные смеси на основе хлорида лития являются перспективными средами для осуществления ряда операций пирохимической переработки отработавшего ядерного топлива [3, 4]. Одной из таких операций является восстановление окисленного топлива при электролизе расплавов $\text{LiCl-Li}_2\text{O}$ или $\text{LiCl-KCl-Li}_2\text{O}$. Сущность операции заключается в том, что выделяющийся при электролизе указанных расплавов литий селективно восстанавливает оксиды актинидов до соответствующих металлов, которые используют для изготовления топлива. В составе отработанного ядерного топлива в значительном количестве присутствует ZrO_2 , данные о степени восстановления литием которого противоречивы [5, 6].

Для приготовления использовали индивидуальные хлориды LiCl и KCl , которые поэтапно нагревали под вакуумом, переплавляли в аргоне, после чего подвергали зонной перекристаллизации [7]. Оксид в готовый расплав добавляли в виде предварительно приготовленного концентрата $\text{LiCl-Li}_2\text{O}$ [4]. Все операции, включая хранение солей, выполнение экспериментов и вспомогательные операции проводили в сухом аргоновом боксе.

Электрохимические измерения и электролиз проводили в стальном контейнере с исследуемым расплавом, который дополнительно изолировали от атмосферы бокса в кварцевой пробирке с фторопластовой крышкой. В крышке размещали противоэлектрод, два рабочих молибденовых электрода с одинаковой геометрической поверхностью (эталонный Mo и погруженный в тигель MgO с порошком ZrO_2 электрод Mo/ZrO_2), термопару и квазиэлектрод сравнения Bi-Li . Для проведения измерений и электролиза использовали PGSTAT AutoLab 320N с ПО NOVA 1.11 (TheMetrOhm, Нидерланды). Температуру расплава измеряли и поддерживали при помощи термопары Pt/PtRh и модуля USB-TC01 (NationalInstruments, США). Электролиз вели при температуре расплава $650\text{ }^\circ\text{C}$ в импульсном гальваностатическом режиме, обеспечивающем выделение лития и фиксацию потенциала электрода при отключении тока.

По окончании электролиза восстановленный порошок ZrO_2 извлекали из тигля MgO и промывали в дистиллированном спирте. Для определения состава восстановленного порошка использовали рентгенофазовый (XRD) анализ, метод карботермического восстановления и NRA. В последнем случае для определения содержания кислорода и лития в исследуемом порошке восстановленного оксида циркония использовали реакции $^{16}\text{O}(d, p_0)^{17}\text{O}$, $^6\text{Li}(d, p_0)^7\text{Li}$ и $^7\text{Li}(d, p)^8\text{Li}$. Источником ускоренных дейтронов служил 2 МВ ускоритель Ван де Граафа, энергия частиц первичного пучка дейтронов 650 кэВ. Спектры ядерных реакций регистрировали с помощью кремниевого поверхностно-барьерного детектора площадью 1 см^2 . Дозу облучения образцов измеряли с помощью вторичного монитора с погрешностью около 1,5 %. Измерения методом ядерных реакций выполнены на порошках. Для этого частицы порошка впрессовывали в пластину индия. В результате вблизи наружной поверхности образца формировался слой толщиной не менее 2 мкм, содержащий только частицы оксида. Плоская поверхность образцов устанавливалась перпендикулярно оси первичного пучка.

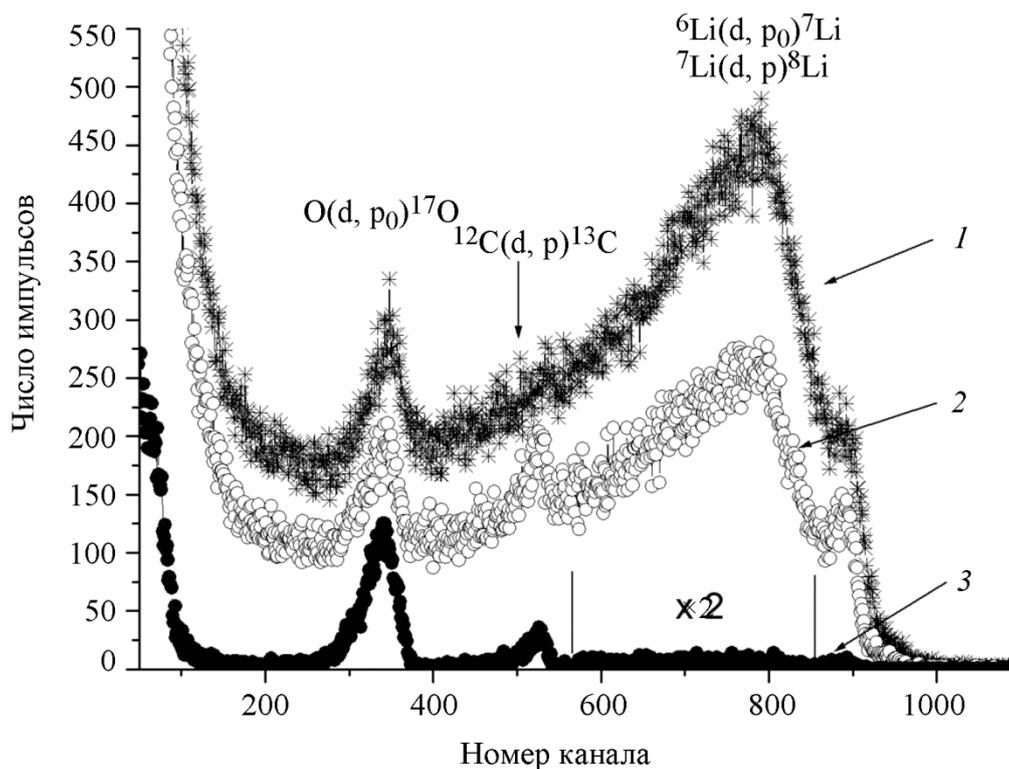
Для вычисления значений концентраций кислорода и лития использовалась процедура сравнения спектров от исследуемого образца и образцов-эталонов с постоянной по глубине

концентрацией кислорода и лития. В качестве эталонов использовался порошок ZrO_2 , содержание кислорода в котором в соответствии со стехиометрической формулой принималось равным 67 ат. % (26 мас. %), и Li_2ZrO_3 , содержание лития в котором в соответствии со стехиометрической формулой принималось равным 33,33 ат. % (9,06 мас. %). Значения концентраций вычислялись с использованием табулированных данных по тормозным способностям элементов [8].

3. Результаты и обсуждение

Вольтамперные характеристики электролиза свидетельствовали о протекании в различных диапазонах напряжений и временных интервалов как процессов выделения лития на катоде, так и расходования восстановленного лития на последующие химические реакции, например, на восстановление порошка ZrO_2 . После электролизных испытаний порошок ZrO_2 приобрел темно-серую окраску. Согласно данным XRD анализа порошок после отмытки от солей содержал фазы ZrO_2 , Li_2ZrO_3 и $ZrO_{0,334}$. По данным метода карбо-термического плавления в исходном порошке ZrO_2 содержалось $(26,3 \pm 0,95)$ мас. % кислорода, после восстановления наблюдалось понижение его содержания до $(22,7 \pm 1,5)$ мас. %.

На рисунке представлены спектры продуктов ядерных реакций.



Спектры ядерных реакций от исследуемого порошка и эталонов:
1 – Li_2ZrO_3 ; 2 – восстановленный ZrO_2 ; 3 – ZrO_2

Из спектра для восстановленного оксида циркония видно, что порошок содержит в значительном количестве литий. Спектры лития накладываются на спектр кислорода, и это осложняло определение концентрации кислорода в порошке. По этой причине для определения концентрации кислорода в порошке использовали процедуру вычитания спектров. Она, конечно, приводила к значительной ошибке в определении концентрации кислорода. Были сделаны попытки найти более корректную процедуру для определения концентрации кислорода, для этого проводили дополнительные эксперименты с облучением образцов не дейтронами, а протонами, измеряли концентрацию не только изотопа ^{16}O , но и ^{18}O , регистрировали

продукты реакций от изотопов лития ${}^6\text{Li}$ и ${}^7\text{Li}$, варьировали энергии дейтронов и протонов, но улучшить ситуацию не удалось.

Таким образом, можно констатировать, что изотопы лития являются благоприятными объектами для определения их концентрации в твердых телах с помощью методики NRA. С ее помощью концентрации лития на уровне 0,001 ат. % и выше могут быть измерены с точностью несколько процентов. Такой уровень измерений характерен в методике NRA для изотопов с высокими сечениями ядерных реакций. В то же время присутствие лития в образцах в значительных количествах будет осложнять измерение с помощью методики NRA низких концентраций изотопов других легких элементов, например кислорода, азота и углерода.

При обработке представленных на рисунке спектров было установлено, что восстановленный при электролизе порошок имеет следующий состав: $\text{ZrLi}_{0,87}\text{O}_{1,98}$. Погрешности в индексах лития и кислорода были на уровне 2–3 %. Из формульной записи состава оксида легко получить, что массовая доля кислорода в исследуемом порошке составила $(24,6 \pm 1)$ мас. %, Это значение, установленное с помощью методики NRA, в пределах статистической погрешности методик согласуется с таковым, полученным методом карботермического плавления: $(22,7 \pm 1,5)$ мас. %. Методики ядерных реакций и карботермического плавления очень сильно отличаются по принципам, и такое согласие, конечно, свидетельствует о надежности обеих методик. Выше отмечалось, что по данным XRD анализа восстановленный порошок содержал фазы ZrO_2 , Li_2ZrO_3 и $\text{ZrO}_{0,334}$. При использовании этих результатов и формульной записи оксида убеждаемся, что на 1 моль оксида ZrO_2 в восстановленном порошке приходится 0,67 моля цирконата лития Li_2ZrO_3 и 0,41 моля оксида $\text{ZrO}_{0,334}$. Таким образом, полученные в работе данные свидетельствуют о том, что при электролизе с высокой эффективностью происходило восстановление ZrO_2 преимущественно до оксидов циркония низшей валентности и цирконатов лития. Восстановления до металлического циркония в работе не обнаружено.

4. Заключение

В работе показано, что применение ускорительной методики ядерных реакций позволяет определять концентрации лития в твердых телах выше 0,001 ат. % с точностью до нескольких процентов от измеряемой величины. Этот уровень измерений достаточен для решения большинства задач, возникающих при использовании лития в авиастроении и других областях техники.

Получены новые данные о восстановлении диоксида циркония ZrO_2 при электролизе расплавов на основе хлорида лития. Установлено, что восстановление происходит преимущественно до оксидов циркония низшей валентности и цирконатов лития, при этом степень восстановления до металлического циркония крайне мала.

Благодарность

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Функция», № АААА-А19-119012990095-0).

Литература

1. Absolute cross sections for deuteron-induced reactions on Li at energies below 1 Mev / A. J. Elwyn, R. E. Holland, C. N. Davids, L. Meyer-Schutzmeister, J. E. Monahan, F. P. Mooring, W. Ray // Physical Review C. – 1977. – Vol. 16, no. 5. – P. 1744–1756. – DOI: 10.1103/PhysRevC.16.1744.
2. Ion Beam Handbook for Material Analysis / ed. by J. W. Mayer and E. Rimini. – Academic Press, 1977. – 488 p. – ISBN 978-0-12-480860-7.
3. Choi Eu. Y., Lee J. Complete reduction of high-density UO_2 to metallic U in molten $\text{Li}_2\text{O-LiCl}$ // Journal of Nuclear Materials. – 2017. – Vol. 494. – P. 439–47. – DOI: 10.1016/j.jnucmat.2017.07.036.

4. Properties of the LiCl-KCl-Li₂O system as operating medium for pyro-chemical reprocessing of spent nuclear fuel / A. Mullabaev, O. Tkacheva, V. Shishkin, V. Kovrov, Y. Zaikov, L. Sukhanov, Y. Mochalov // J. Nuclear Materials. – 2018. – Vol. 500. – P. 235–241. – DOI: 10.1016/j.jnucmat.2018.01.004.
5. Formation and reduction behaviors of zirconium oxide compounds in LiCl–Li₂O melt at 923 K / Y. Sakamura, M. Iizuka, S. Kitawaki, A. Nakayoshi, H. Kofuji // J. Nuclear Materials. – 2015. – Vol. 66. – P. 269–279. – DOI: 10.1016/j.jnucmat.2015.08.011.
6. Choi Eu. Y., Heo D. H. Reduction of zirconium oxide compounds by lithium metal as a reductant in molten LiCl salt // J. Nuclear Materials. – 2018. – Vol. 512. – P. 193–198. – DOI: 10.1016/j.jnucmat.2018.10.015.
7. Барабошкин А. Н. Электрокристаллизация металлов из расплавленных солей. – М. : Наука, 1976. – 280 с.
8. The Stopping and Ranges of Ions in Matter-SRIM2013. – URL: <http://www.srim.org>

Received: 14.06.2020

Revised: 15.07.2020

Accepted: 21.08.2020

DOI: 10.17804/2410-9908.2020.4.035-047

FRACTURE BEHAVIOR OF CELLULAR STRUCTURES OBTAINED BY SELECTIVE LASER MELTING

I. S. Kamantsev^{1, a)*}, Yu. N. Loginov^{2, b)}, S. V. Belikov^{2, 3, c)}, S. I. Stepanov^{2, d)},
M. S. Karabanalov^{2, e)}, and A. I. Golodnov^{2, f)}

¹Institute of Engineering Science, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,
34, Komsomolskaya St., Ekaterinburg, 620049, Russian Federation

²B.N. Yeltsin Ural Federal University,

19, Mira St., Ekaterinburg, 620002, Russian Federation

³M.N. Miheev Institute of Metal Physic, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,
18, S. Kovalevskoy St., Ekaterinburg, 620108, Russian Federation

- a)  <https://orcid.org/0000-0003-0775-4043>  ks@imach.uran.ru;
b)  <https://orcid.org/0000-0002-7222-2521>  j.n.loginov@urfu.ru;
c)  <https://orcid.org/0000-0002-4732-1448>  s.v.belikov@urfu.ru;
d)  <https://orcid.org/0000-0002-0554-8775>  s.i.stepanov@urfu.ru;
e)  <https://orcid.org/0000-0001-6619-2816>  m.s.karabanalov@urfu.ru;
f)  <https://orcid.org/0000-0003-2958-310X>  A.I.Golodnov@urfu.ru

*Corresponding author. E-mail: ks@imach.uran.ru

Address for correspondence: ul. Komsomolskaya, 34, Ekaterinburg, 620049, Russian Federation

Tel.: +7(343) 374 47 25; fax: +7(343) 374 53 30

An example of samples with a cellular architecture, obtained by selective laser melting, is used to study the influence of the building direction of cellular objects on the characteristics of fracture under cyclic loading. The origin of their fracture has been revealed. The mechanism providing increased fatigue fracture resistance of objects which, along with the cellular structure, have anisotropy of properties due to the technological features of their production has been determined.

Keywords: selective laser melting, cellular structures, high-cycle fatigue, fracture.

Acknowledgment

This work was partially supported within the framework of the event “Creation and Functioning of a Network of International Scientific and Methodological Centers for the Expansion of the Best International Practices of Training, Retraining, and Internship of Advanced Digital Economy Personnel in the Fields of Mathematics, Informatics, and Technology” (Agreement No. 075-15-2019- 1907 dated 09.12.2019) and in accordance with the research plan for the IES UB RAS, theme AAAA-A18-118020790145-0. The equipment installed in the Plastometriya collective use center, IES UB RAS, was used in the experimental investigation.

References

1. Soro N., Attar H., Wu X., Dargusch M.S. Investigation of the structure and mechanical properties of additively manufactured Ti-6Al-4V biomedical scaffolds designed with a Schwartz primitive unit-cell. *Materials Science and Engineering A*, A 745, 2019, pp. 195–202. DOI: 10.1016/j.msea.2018.12.104.

2. Golodnov A.I., Loginov Y.N., Stepanov S.I. Numeric loading simulation of titanium implant manufactured using 3d printing. *Solid State Phenomena*, vol. 284 SSP, 2018, pp. 380–385. DOI: 10.4028/www.scientific.net/SSP.284.380.
3. Popov V.V., Muller-Kamskii G., Kovalevsky A., Kolomiets A., Ramon J. Design and 3D-printing of titanium bone implants: brief review of approach and clinical cases. *Biomedical Engineering Letters*, 2018, 8 (4), pp. 337–344. DOI: 10.1007/s13534-018-0080-5.
4. Van Hengel I.A.J., Gelderman F.S.A., Athanasiadis S., Minneboo M., Weinans H., Fluit A.C., Van der Eerden B.C.J., Fratila-Apachitei L.E., Apachitei I., Zadpoor A.A. Functionality-packed additively manufactured porous titanium implants. *Materials Today Bio*, 2020, vol. 7. DOI: 10.1016/j.mtbio.2020.100060.
5. De Jonge C.P., Kolken H.M.A., Zadpoor A.A. Non-Auxetic Mechanical Metamaterials. *Materials*, 2019, 12 (4), 635. DOI: 10.3390/ma12040635.
6. Kilina P.N., Drozdov A.A., Sirotenko L.D. Formation samples with cellular structures by selective laser sintering of metal powders. *Metalloobrabotka*, 2015, no. 3 (87), pp. 29–31. (In Russian).
7. Cutolo A., Engelen B., Desmet W., Van Hooreweder B. Mechanical properties of diamond lattice Ti-6Al-4V structures produced by laser powder bed fusion: on the effect of the load direction. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 2020, vol. 104, pp. 103656 (1–15). DOI: 10.1016/j.jmbbm.2020.103656.
8. Kazantseva N.V., Ezhov I.V., Vinogradova N.I., Il'inykh M.V., Fefelov A.S., Davydov D.I., Oleneva O.A. & Karabanalov M.S. Effect of Built Geometry on the Microstructure and Strength Characteristics of the Ti-6Al-4V Alloy Prepared by the Selective Laser Melting. *Phys. Metals Metallogr.*, 2018, no. 119, pp. 1079–1086. DOI: 10.1134/S0031918X18110066.
9. Cain V., Thijs L., Van Humbeeck J., Van Hooreweder B., Knutsen R. Crack propagation and fracture toughness of Ti6Al4V alloy produced by selective laser melting. *Add. Man.*, 2015, vol. 5, pp. 68–76. DOI: 10.1016/j.addma.2014.12.006.
10. Kok Y., Tan X.P., Wang P., Nai M.L.S., Loh N.H., Liu E., Tor S.B. Anisotropy and heterogeneity of microstructure and mechanical properties in metal additive manufacturing: A critical review. *Materials and Design*, 2018, vol. 139, pp. 565–586. DOI: 10.1016/j.matdes.2017.11.021. Available at: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0264127517310493#>
11. Hartunian P., Eshraghi M. Effect of Build Orientation on the Microstructure and Mechanical Properties of Selective Laser-Melted Ti-6Al-4V Alloy. *J. Manuf. Mater. Process.*, 2018, 2 (4), 69. DOI: 10.3390/jmmp2040069.
12. Barba D., Alabort C., Tang Y.T., Viscasillas M.J., Reed R.C., Alabort E. On the size and orientation effect in additive manufactured Ti-6Al-4V. *Materials and Design*, 2020, vol. 186, 108235. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2019.108235>.
13. Stepanov S.I., Loginov Y.N., Kuznetsov V.P., Popov A.A. Effect of Annealing on the Structure and Properties of Titanium Alloy with Cellular Architecture for Medical Applications. *Metal Science and Heat Treatment*, 2018, 60 (5–6), pp. 315–321. DOI: 10.1007/s11041-018-0278-2.
14. Amin Yavari S., Ahmadi S.M., Pouran B., Schrooten J., Weinans H., Zadpoor A.A. Relationship between unit cell type and porosity and the fatigue behavior of selective laser melted meta-biomaterials. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 2015, vol. 43, pp. 91–100. DOI: 10.1016/j.jmbbm.2014.12.015.
15. Van Hooreweder B., Apers Y., Lietaert K., Kruth J.P. Improving the fatigue performance of porous metallic biomaterials produced by Selective Laser Melting. *Acta Biomaterialia*, 2017, vol. 47, pp. 193–202. DOI: 10.1016/j.actbio.2016.10.005.
16. Botvina L.R. *Kinetika razrusheniya konstruktsionnykh materialov* [Fracture Kinetics of Construction Materials]. Moscow, Nauka Publ., 1989, 230 p.
17. Kotsan'da S. *Ustalostnoye rastreskivaniye metallov* [Fatigue Cracking of Metals, transl. from Polish by G.N. Mekheda, S.Ya. Yarema, ed.]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1990, 632 p.

18. Volkov S.S. The Effect of Damage at An Ensemble of Microstructure Points on the Margin of Safety in Structurally Heterogeneous Materials // *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*, 2019, iss. 5, pp. 60–72. DOI: 10.17804/2410-9908.2019.5.060-072. Available at: http://dream-journal.org/issues/2019-5/2019-5_274.html (accessed: 13.08.2020).
19. Loginov Y., Stepanov S., Khanykova C. Inhomogeneity of deformed state during compression testing of titanium implant. In: *2017 MATEC Web of Conferences*, 13th International Scientific-Technical Conference on Dynamic of Technical Systems, DTS 2017, Rostov-on-Don, Sept. 13–15, 2017, vol. 132, 03009. DOI: 10.1051/mateconf/201713203009.
20. Maamoun A.H., Xue Y.F., Elbestawi M.A., Veldhuis S.C. Effect of Selective Laser Melting Process Parameters on the Quality of Al Alloy Parts: Powder Characterization, Density, Surface Roughness, and Dimensional Accuracy. *Materials*, 2018, 11 (12), 2343. DOI: 10.3390/ma11122343.
21. Gibson L. Ashby M. *Cellular Solids: Structure and Properties*, 2nd ed., Cambridge Solid State Science Series, Cambridge, Cambridge University Press, 1997. DOI: 10.1017/CBO9781139878326.
22. Xu Z.W., Liu A., Wang X.S. The influence of building direction on the fatigue crack propagation behavior of Ti6Al4V alloy produced by selective laser melting. *Materials Science and Engineering: A*, 2019, vol. 767, 138409. DOI: 10.1016/j.msea.2019.138409.

Подана в журнал: 14.06.2020

УДК 620.168

DOI: 10.17804/2410-9908.2020.4.035-047

ОСОБЕННОСТИ РАЗРУШЕНИЯ ЯЧЕЙСТЫХ СТРУКТУР, ПОЛУЧЕННЫХ ЛАЗЕРНЫМ СЕЛЕКТИВНЫМ СПЛАВЛЕНИЕМ

И. С. Каманцев^{1, а)*}, Ю. Н. Логинов^{2, б)}, С. В. Беликов^{2, 3, в)}, С. И. Степанов^{2, г)},
М. С. Карабаналов^{2, д)}, А. И. Голоднов^{2, е)}

¹Институт машиноведения УрО РАН, г. Екатеринбург, Российская Федерация

²Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Российская Федерация

³Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Российская Федерация

- ^{а)}  <https://orcid.org/0000-0003-0775-4043>  ks@imach.uran.ru;
^{б)}  <https://orcid.org/0000-0002-7222-2521>  j.n.loginov@urfu.ru;
^{в)}  <https://orcid.org/0000-0002-4732-1448>  s.v.belikov@urfu.ru;
^{г)}  <https://orcid.org/0000-0002-0554-8775>  s.i.stepanov@urfu.ru;
^{д)}  <https://orcid.org/0000-0001-6619-2816>  m.s.karabanalov@urfu.ru;
^{е)}  <https://orcid.org/0000-0003-2958-310X>  A.I.Golodnov@urfu.ru

*Ответственный автор. Электронная почта: ks@imach.uran.ru

Адрес для переписки: ул. Комсомольская, 34, г. Екатеринбург, 620049, Российская Федерация

Тел.: +7(343) 374–47–25; факс: +7(343) 374–53–30

В работе на примере образцов с ячеистой архитектурой, полученных лазерным селективным сплавлением, рассмотрено влияние направления синтеза объектов ячеистой формы на характеристики разрушения в условиях циклического нагружения. Выявлены особенности в характере их разрушения и установлен механизм, обеспечивающий повышенное сопротивление усталостному разрушению объектов, имеющих наряду с ячеистым строением анизотропию свойств, обусловленных технологическими особенностями получения.

Ключевые слова: селективное лазерное сплавление, ячеистые структуры, многоцикловая усталость, разрушение.

1. Введение

Развитие технологии селективного лазерного сплавления (СЛС) позволяет создавать изделия со сложной пространственной геометрией, которые сложно, а иногда и невозможно изготовить традиционными методами литья, деформационной и механической обработки. Ярким примером является изготовление материалов с ячеистой структурой [1, 2]. Изделия с подобными структурами нашли широкое применение в медицине [3, 4] и промышленности [5]. В настоящее время подробно изучено влияние технологических параметров на особенности формирования ячеистых структур [1, 6]. Одним из наиболее значимых параметров при селективном сплавлении является ориентация модели относительно направления печати [7, 8]. Для сплошных образцов выявлено влияние ориентации оси нагружения относительно направления печати образцов [9–13].

В то же время в известных работах по определению выносливости ячеистых структур внимания влиянию ориентации образца на долговечность [14, 15] и на сопротивление разрушению практически не уделяется. Особое внимание заслуживает изучение усталостных характеристик и особенностей сопротивления разрушению при циклических видах нагружения как наиболее опасных [16, 17]. Выявленные на различных структурных уровнях закономерности позволят создать модели и цифровые двойники, учитывающие анизотропию свойств таких изделий, что в свою очередь облегчит прогнозирование ресурса [18]. В то же время,

проведенные исследования ярко демонстрируют, что при разработке технологических процессов СЛС необходимо учитывать напряженно-деформированное состояние, возникающее при работе изделия [19].

Цель настоящей работы – выявление особенностей разрушения ячеистых образцов в зависимости от их ориентации относительно направления воздействия циклической нагрузки.

2. Материал исследования

Материалом исследований были выбраны ячеистые образцы прямоугольной формы. Модель ячеистой структуры и фотография боковой стороны образца представлены на рис. 1.

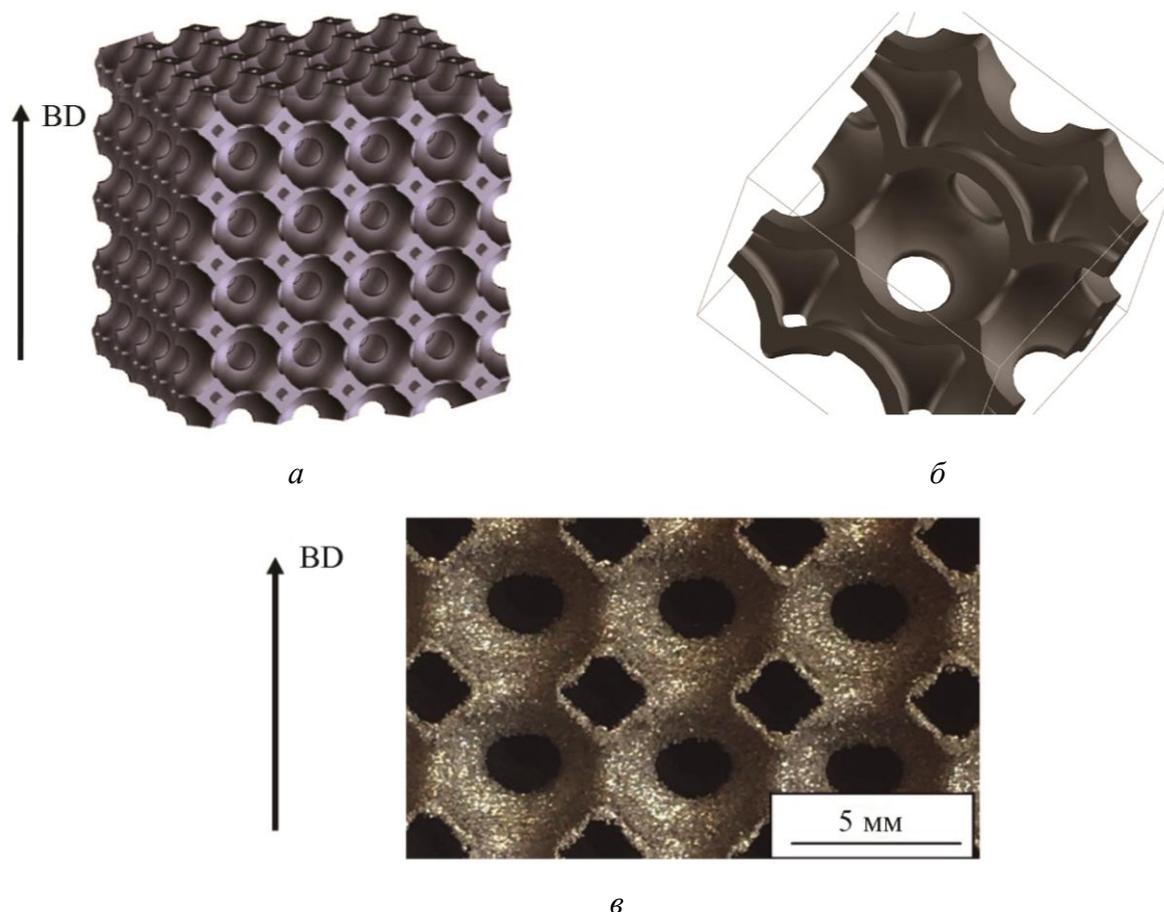


Рис. 1. Макет сетчатой структуры, состоящей из пересекающихся полых шаров (а), и сегмент ячеистой структуры, демонстрирующий наличие каналов и отверстий между пересекающимися сферами (б); фото боковой стенки (в)

Ячеистая структура образцов выполнена в виде объемной решетки с расположением узлов на поверхности полых шаров, соединенных перемычками. Такая геометрия обеспечила относительную плотность (80 %) на этапе электронной модели, которая может изменяться в результате особенностей процесса изготовления [20]. Можно отметить изменение формы нависающих стенок конструкции под собственным весом и изменение геометрии относительно электронной модели (рис. 1 в).

Образцы размером 20×20×20 мм были получены методом селективного лазерного сплавления титанового порошка марки Ti-6Al-4V на установке EOSINT 280 при параметрах, установленных производителем для порошка данной марки и толщине слоя 30 мкм в среде аргона при давлении 5,0 атм. Фракционный состав порошка характеризовался следующими значениями диаметра сферических частиц: D-values D10 ¼ 20 мкм; D50 ¼ 35 мкм; D90 ¼

45 мкм. Все образцы были получены в одной сессии СЛС без использования поддержек с применением кросс-штриховки с углом поворота между слоями 68° .

Образцы с ячеистой структурой были обработаны на электроискровом станке для придания параллельности сторон. Образцы имели размер $20 \times 20 \times 20$ мм и состояли из $4 \times 4 \times 4$ элементарных ячеек.

3. Методика эксперимента

Статическое нагружение образцов по схеме одноосного сжатия выполнялось на электромеханической испытательной машине INSTRON 3382 со скоростью перемещения захвата 1,8 мм/мин. В ходе нагружения фиксировались перемещение подвижного захвата и усилие, а также выполнялась видеозапись одной из боковых поверхностей. Условия испытаний и анализируемые механические свойства установлены ISO 13314.

Циклическое нагружение призматических образцов размером $20 \times 20 \times 20$ мм проведено на высокочастотной резонансной испытательной машине MIKROTRON 20 kN (RUMUL) при синусоидальном режиме приложения нагрузки по схеме одноосного «сжатия–сжатия» с коэффициентом асимметрии цикла $R = 0,1$. Испытания проведены в условиях мягкого нагружения с контролем по нагрузке. Максимальное усилие цикла составляло $F_{\max} = 1,6$ кН, что соответствовало максимальному условному напряжению в цикле 4 МПа. В ходе эксперимента контролировались изменения резонансной частоты колебания, величина перемещения подвижного захвата и количество циклов нагружения. В обоих случаях циклического и статического нагружения выполнялось наблюдение характера разрушения объекта оптическим методом.

Исследуемые образцы испытывались в двух направлениях. Осевое нагружение прикладывалось в направлении печати образцов (BD) и под углом 90° к направлению печати.

Микроструктурные и фрактографические исследования были проведены на двухлучевом электронно-ионном микроскопе ThermoFischer Scios II LowVac.

4. Результаты и обсуждение

Для нижней поверхности балки характерно провисание металла под собственным весом в процессе СЛС, что является особенностью в формировании геометрии образцов с ячеистой архитектурой. Верхняя поверхность отличается меньшей кривизной благодаря тому, что ранее кристаллизовавшиеся слои металла выступают поддержкой. В структуре наблюдается α' -мартенсит игольчатой морфологии вследствие высокой скорости охлаждения, обусловленной малым объемом ванны расплава и высокой скоростью теплоотвода в ранее кристаллизовавшиеся слои. Исходное β -зерно либо имеет равноосную форму, либо вытянуто вдоль направления синтеза в результате эпитаксиального роста. Относительно крупные поры (10–40 мкм) в основном располагаются по границам ванны расплава, по-видимому в результате объемного эффекта при кристаллизации металла или недостаточной глубины проплавления (рис. 2 а). Газовая пористость, представленная более мелкими порами (единицы мкм), имеет более равномерное распределение (рис. 2 б).

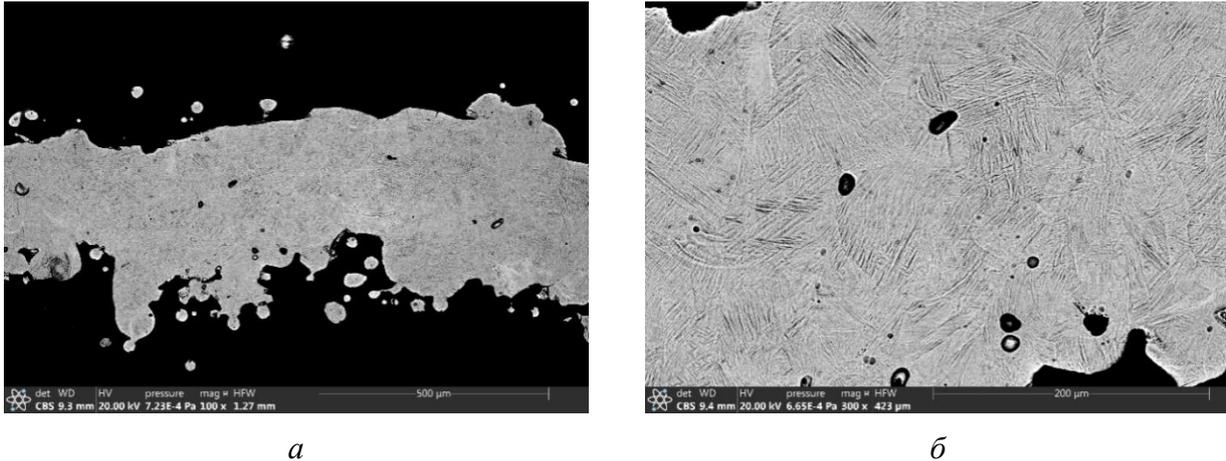


Рис. 2. Структура балки ячеистой структуры (направление синтеза вверх)

Согласно результатам механических испытаний установлено, что диаграмма сжатия демонстрирует характерное для пористых (>50 % пор) материалов поведение (рис. 3) [21]. Запись изображений боковой поверхности образцов как в ходе статического, так и при циклическом нагружении позволила проследить процесс разрушения и выявить закономерности в разрушении элементов архитектуры исследуемого материала (рис. 4 и 6). В условиях статического нагружения за участком упругой деформации (рис. 4 а) следует резкое падение нагрузки, связанное с выходом из строя первого сегмента ячеистой структуры (рис. 4 б). Далее следует участок плато, напряжения на котором изменяются скачкообразно в результате пластической деформации и «схлопывания» отдельных ячеек (рис. 4 в), однако среднее напряжение на этом участке меняется незначительно. На заключительном этапе после закрытия всех пор реализуется деформационное упрочнение монолитного материала, сопровождающееся ростом напряжения (рис. 4 г).

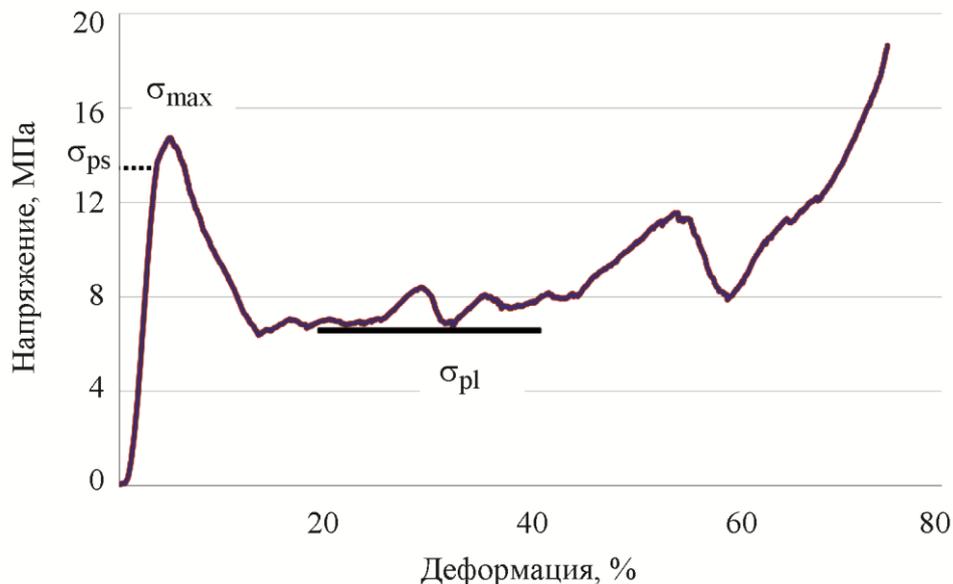


Рис. 3. Диаграмма статического сжатия

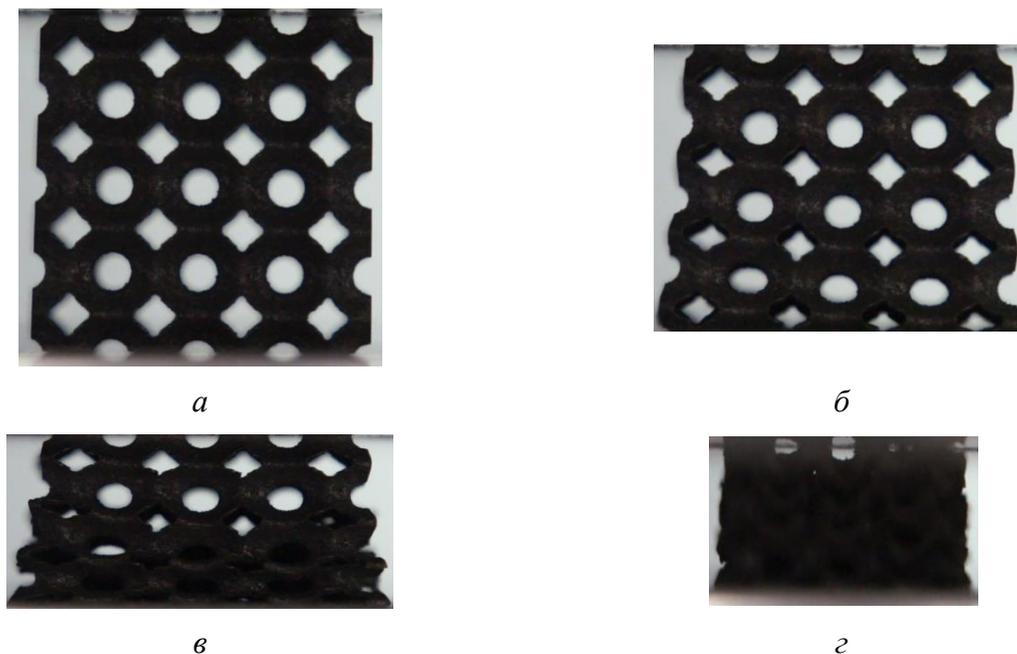


Рис. 4. Общий вид образца на различных стадиях статического сжатия:
а – стадия 1; б – стадия 2; в – стадия 3; г – стадия 4

По результатам предварительных испытаний установлено, что уровень напряжения, при котором происходит усталостное разрушение образца на базе $\approx 2 \times 10^5$ циклов, составляет примерно 0,3 от σ_{ps} (proof strength).

Как уже отмечалось, в зависимости от направления печати материал образца обладает выраженной анизотропией свойств и, как следствие, различным сопротивлением распространению трещин [22]. Кроме того, для материалов с ячеистой архитектурой, изготовленных методом СЛС, характерно нарушение формы, связанное с появлением овальности при печати сфероидальных элементов (рис. 1 в). Учет указанных особенностей при проектировании и изготовлении ответственных конструктивных элементов является важной прикладной инженерной задачей.

Типичное поведение ячеистого материала в условиях циклического нагружения отражено на графиках (рис. 5). Так, в исходном состоянии размах деформации в результате приложения нагрузки одинаков независимо от ориентации образца. Общее количество циклов до разрушения 3×10^5 и $1,4 \times 10^5$, т. е. отличается более чем в два раза при сохранении идентичной жесткости и без потери устойчивости.

В качестве информативного параметра, учитывающего потерю устойчивости, было выбрано положение траверсы, задающей среднее усилие. После сжатия образца на 0,1 мм эксперимент останавливался. При этом визуально наблюдались множественные растрескивания. Несмотря на это после полной разгрузки образец принимал свою исходную форму, а его несущая способность снижалась незначительно, т. е. объект находился в состоянии, предшествующем его катастрофическому разрушению.

На графике рис. 5 представлены совмещенные диаграммы статического перемещения траверсы (задает среднее усилие цикла), из которых видно, что начало потери устойчивости образцов, ориентированных вдоль параллельного направления приложения усилия в направлении ВД происходит после 2×10^5 циклов нагружения. В то время как при ориентации «направление приложения усилия перпендикулярно направлению печати ВД» начало потери устойчивости начинается до достижения 2×10^4 циклов нагружения.

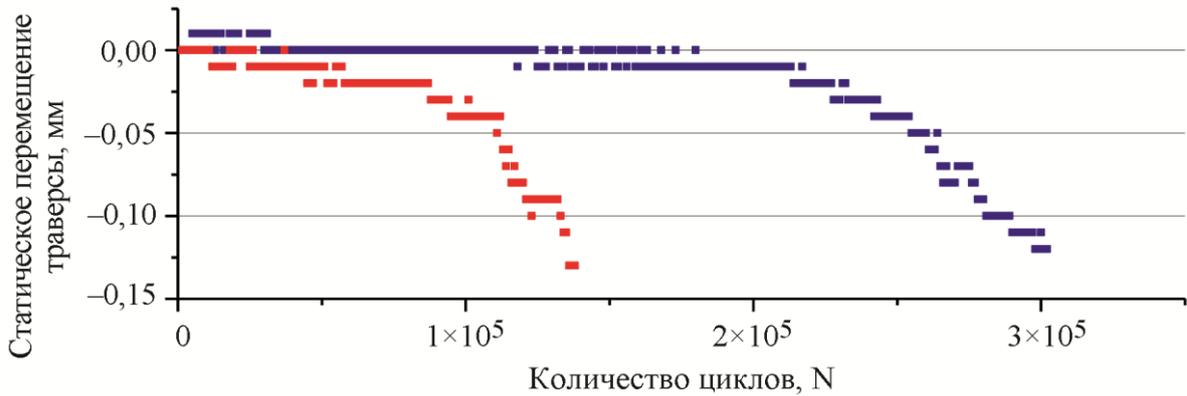


Рис. 5. Диаграммы циклического нагружения ячеистых образцов в направлении плоскости BD (-) и перпендикулярно BD (-)

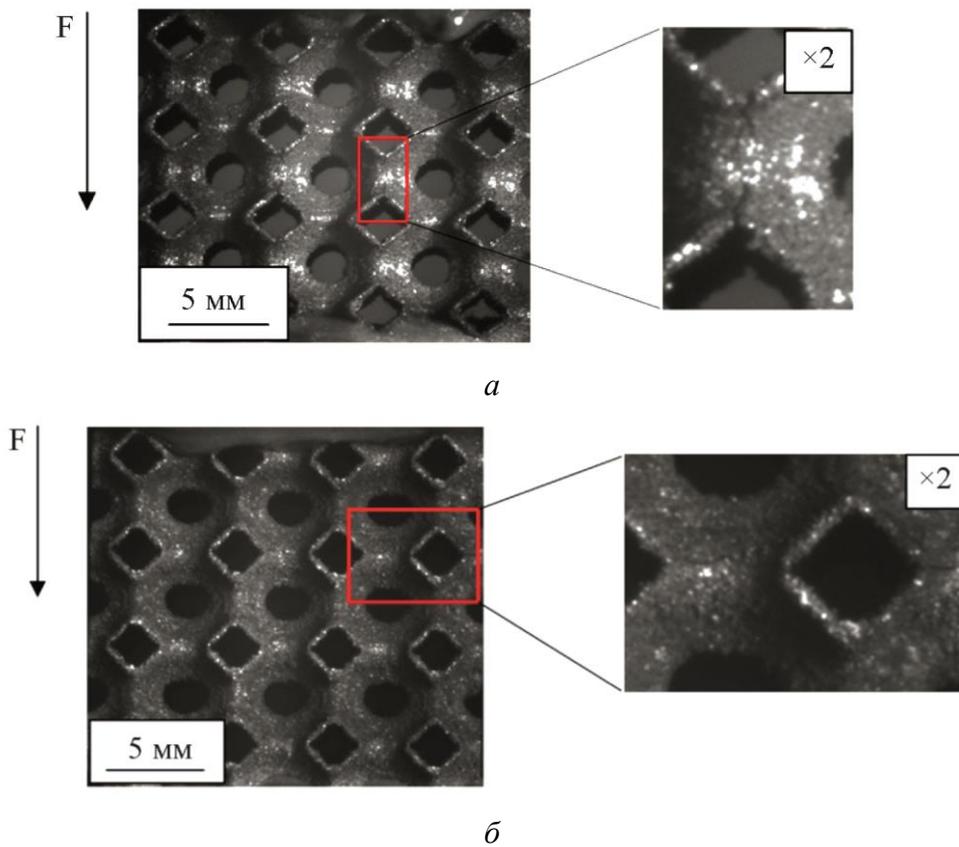


Рис. 6. Боковая поверхность ячеистого образца при различной ориентации относительно оси приложения циклического нагружения: *а* – ориентировка X0-BD; *б* – ориентировка BD

Из анализа оптических изображений (рис. 6), сделанных в ходе эксперимента, установлено, что в ходе усталостного нагружения при ориентации плоскости печати образцов вдоль оси нагружения и напряжениях, составляющих $\sigma_{max} = 0,3\sigma_{ps}$, первые признаки разрушения возникли при $N = 1,23 \times 10^5$ циклов. Разрушение происходило преимущественно в плоскости печати. При циклическом нагружении в направлении, перпендикулярном печати, траектория распространения магистральной трещины также совпадала с плоскостью печати. В обоих случаях разрушение ячеистых образцов реализовывалось поэтапным разрушением отдельных сегментов. Выявленной особенностью усталостного разрушения ячеистого образца является то, что при нагружении в направлении, перпендикулярном плоскости печати,

максимальное количество циклов составило $N = 3 \times 10^5$, что более чем в два раза превышает количество циклов нагружения для образца при его ориентации, реализующей нагружение вдоль плоскости печати.

Таким образом, возможная причина увеличения долговечности объекта при его ориентации, реализующей циклическое нагружение вдоль направления ВД, это выявленная особенность механизма разрушения материалов со сложной архитектурой – наличие двух конкурирующих процессов: разрушения в главной плоскости в результате приложения циклических нагрузок и разрушение отдельных элементов, связанное с особенностью синтеза исследуемого класса материалов. Предположение о протекании конкурирующих процессов разрушения в направлении ВД подтверждается результатами фрактографического анализа (рис. 7). При нагружении образцов в направлении, перпендикулярном плоскости ВД, рельеф сглаженный, характерный для усталостного разрушения. Разделение сегментов произошло в одной главной плоскости (рис. 7 а).

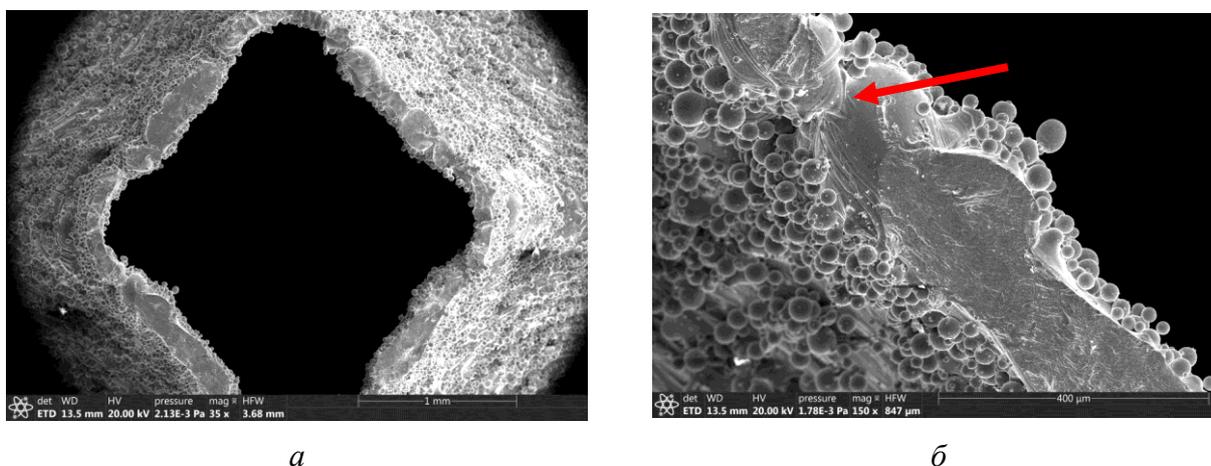


Рис. 7. Поверхность разрушения образца при нагружении перпендикулярно направлению ВД

Несмотря на наличие зон несплавления (рис. 7 б, указано стрелкой) вторичных трещин не наблюдается, т. е. локальные несплошности в виде непроплавов не являются концентраторами, вызывающими формирование вторичных трещин. В то же время наблюдаемые на изломах непроплавы являются «плоскими порами», вытянутыми поперек направления сплавления, в результате разрушение по этой плоскости облегчено.

В случае приложения циклических нагрузок вдоль направления ВД магистральная трещина также распространяется и в перпендикулярной плоскости (рис. 8).

При большем увеличении наблюдается множественное растрескивание ортогонально к плоскости распространения магистральной трещины (рис. 9). Как и в случае нагружения образца в направлении, перпендикулярном ВД, распространение трещин в большинстве случаев происходит в объеме материала, т. е. участки зон сплавления отдельных частиц порошка в данном случае не являются концентраторами. А трещины на боковой поверхности распространяются вдоль границ структурных элементов.

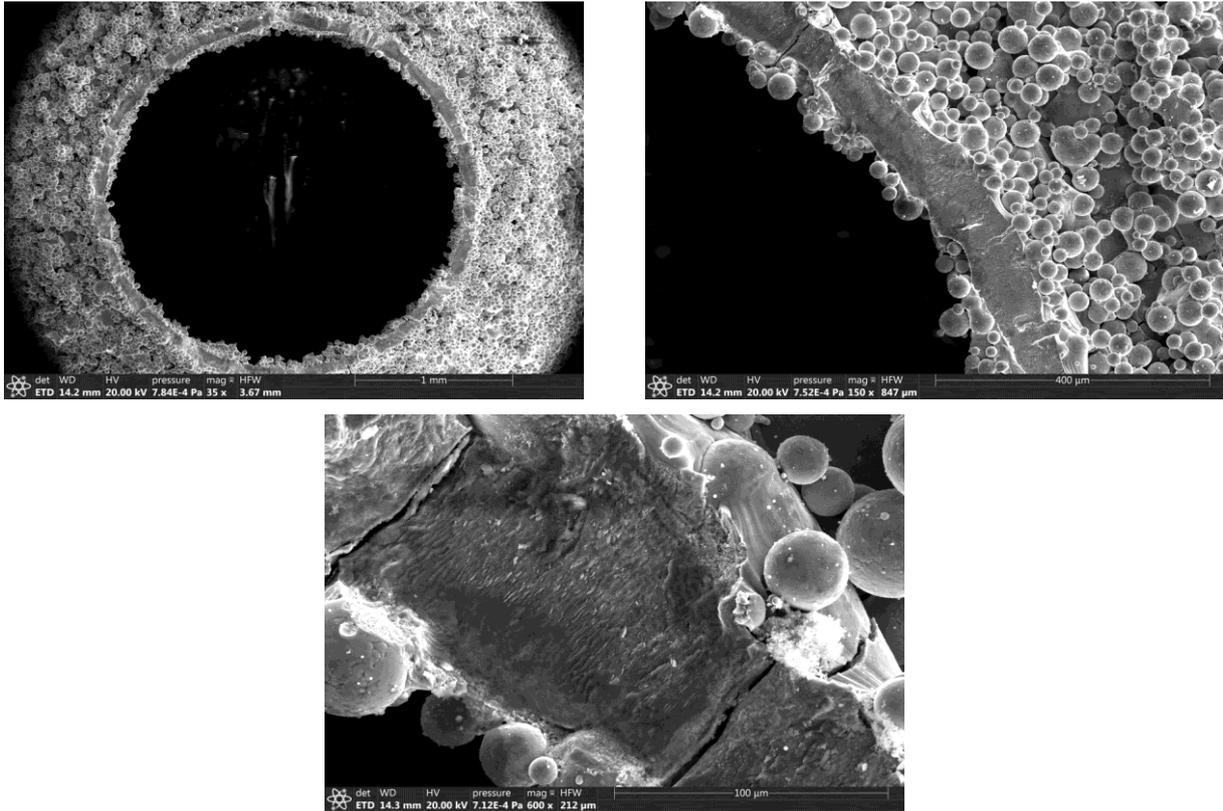


Рис. 8. Фрактограммы поверхности разрушения ячеистого образца при ориентации BD вдоль оси приложения нагрузки

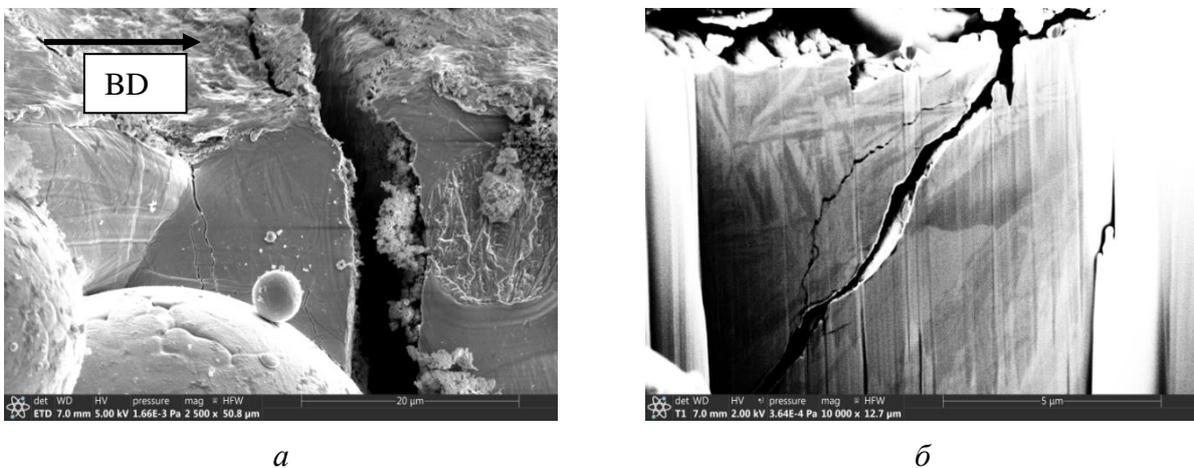


Рис. 9. Боковая поверхность стенки: *а* – РЭМ; *б* – ионное травление

Таким образом установлено, что причиной увеличения долговечности объекта при его ориентации, реализующей циклическое нагружение вдоль направления BD, является выявленная особенность механизма разрушения. Так, при данной ориентации в условиях циклического нагружения при усталостном разрушении наблюдаются два конкурирующих процесса: разрушение отдельных сегментов по плоскости печати и формирование вторичных трещин в перпендикулярном направлении, блокирующих распространение магистральной. Стоит отметить, что в условиях статического нагружения подобного эффекта не наблюдается.

5. Заключение

Продемонстрировано влияние направления синтеза объектов ячеистой формы, полученных лазерным селективным сплавлением, на характеристики разрушения в условиях циклического нагружения. Установлено, что при ориентации образца в направлении приложения усилия, совпадающем с направлением синтеза, усталостное разрушение носит сложный характер, обеспечивающий тем самым повышенное сопротивление усталостному разрушению. Выявленная особенность подчеркивает важность выбора ориентации модели для лазерной 3D-печати для рационального проектирования изделий.

Благодарности

Работа поддержана в рамках мероприятия «Создание и функционирование сети международных научно-методических центров для распространения лучших международных практик подготовки, переподготовки и стажировки продвинутых кадров цифровой экономики в областях математики, информатики, технологий» (Соглашение № 075-15-2019-1907 от 09.12.2019) и в соответствии с планом работ ИМАШ УрО РАН по теме АААА-А18-118020790145-0 в части определения характеристик сопротивления усталостному разрушению. Экспериментальная часть работы выполнена с использованием оборудования ЦКП «Пластометрия» ИМАШ УрО РАН.

Литература

1. Investigation of the structure and mechanical properties of additively manufactured Ti-6Al-4V biomedical scaffolds designed with a Schwartz primitive unit-cell / N. Soro, H. Attar, X. Wu, M. S. Dargusch // *Materials Science and Engineering A*. – 2019. – A 745. – P. 195–202. – DOI: 10.1016/j.msea.2018.12.104.
2. Golodnov A. I., Loginov Y. N., Stepanov S. I. Numeric loading simulation of titanium implant manufactured using 3d printing // *Solid State Phenomena*. – 2018. – Vol. 284 SSP. – P. 380–385. – DOI: 10.4028/www.scientific.net/SSP.284.380.
3. Design and 3D-printing of titanium bone implants: brief review of approach and clinical cases / V. V. Popov, G. Muller-Kamskii, A. Kovalevsky, A. Kolomiets, J. Ramon // *Biomedical Engineering Letters*. – 2018. – Vol. 8 (4). – P. 337–344. – DOI: 10.1007/s13534-018-0080-5.
4. Functionality-packed additively manufactured porous titanium implants / I. A. J. Van Hengel, F. S. A. Gelderman, S. Athanasiadis, M. Minneboo, H. Weinans, A. C. Fluit, B. C. J. Van der Eerden, L. E. Fratila-Apachitei, I. Apachitei, A. A. Zadpoor // *Materials Today Bio*. – 2020. – Vol. 7. – DOI: 10.1016/j.mtbio.2020.100060.
5. De Jonge C. P., Kolken H. M. A., Zadpoor A. A. Non-Auxetic Mechanical Metamaterials // *Materials*. – 2019. – Vol. 12 (4). – P. 635 (1–21). – DOI: 10.3390/ma12040635.
6. Килина П. Н., Дроздов А. А., Сиротенко Л. Д. Формирование образцов с ячеистой структурой методом селективного лазерного спекания металлических порошков // *Металлообработка*. – 2015. – № 3 (87). – С. 29–31.
7. Mechanical properties of diamond lattice Ti-6Al-4V structures produced by laser powder bed fusion: on the effect of the load direction / A. Cutolo, B. Engelen, W. Desmet, B. Van Hooreweder // *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*. – 2020. – Vol. 104. – P. 103656 (1–15). – DOI: 10.1016/j.jmbbm.2020.103656.
8. Effect of Built Geometry on the Microstructure and Strength Characteristics of the Ti-6Al-4V Alloy Prepared by the Selective Laser Melting / N. V. Kazantseva, I. V. Ezhov, N. I. Vinogradova, M. V. Il'inykh, A. S. Fefelov, D. I. Davydov, O. A. Oleneva & M. S. Karabanalov // *Phys. Metals Metallogr*. – 2018. – No. 119. – P. 1079–1086. – DOI: 10.1134/S0031918X18110066.

9. Crack propagation and fracture toughness of Ti6Al4V alloy produced by selective laser melting / V. Cain, L. Thijs, J. Van Humbeeck, B. Van Hooreweder, R. Knutsen // *Additive Manufacturing*. – 2015. – Vol. 5 – P. 68–76. – DOI: 10.1016/j.addma.2014.12.006.
10. Anisotropy and heterogeneity of microstructure and mechanical properties in metal additive manufacturing: A critical review / Y. Kok, X. P. Tan, P. Wang, M. L. S. Nai, N. H. Loh, E. Liu, S. B. Tor // *Materials and Design*. – 2018. – Vol. 139. – P. 565–586. – DOI: 10.1016/j.matdes.2017.11.021. – URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0264127517310493#!>
11. Hartunian P., Eshraghi M. Effect of Build Orientation on the Microstructure and Mechanical Properties of Selective Laser-Melted Ti-6Al-4V Alloy // *J. Manuf. Mater. Process*. – 2018. –2 (4). – P. 69. – DOI: 10.3390/jmmp2040069.
12. On the size and orientation effect in additive manufactured Ti-6Al-4V / D. Barba, C. Alabort, Y. T. Tang, M. J. Viscasillas, R. C. Reed, E. Alabort // *Materials and Design*. – 2020. – Vol. 186. – P. 108235. – DOI: 10.1016/j.matdes.2019.108235.
13. Effect of Annealing on the Structure and Properties of Titanium Alloy with Cellular Architecture for Medical Applications / S. I. Stepanov, Yu. N. Loginov, V. P. Kuznetsov, A. A. Popov // *Metal Science and Heat Treatment*. – 2018. – Vol. 60 (5–6). – P. 315–321. – DOI: 10.1007/s11041-018-0278-2.
14. Relationship between unit cell type and porosity and the fatigue behavior of selective laser melted metabiomaterials / S. Amin Yavari, S. M. Ahmadi, R. Wauthle, B. Pouran, J. Schrooten, H. Weinans, A. A. Zadpoor // *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*. – 2015. – Vol. 43. – P. 91–100. – DOI: 10.1016/j.jmbbm.2014.12.015.
15. Van Hooreweder B., Apers Y., Lietaert K., Kruth J.P. Improving the fatigue performance of porous metallic biomaterials produced by selective laser melting // *Acta Biomaterialia*. – 2017. – Vol. 47. – P. 193–202. – DOI: 10.1016/j.actbio.2016.10.005.
16. Ботвина Л. П. Кинетика разрушения конструкционных материалов. – М. : Наука, 1989. – 230 с.
17. Коцаньда С. Усталостное растрескивание металлов / пер. с польского Г. Н. Мехеда; под ред. С. Я. Яремы. – М. : Metallurgia, 1990. – 632 с.
18. Volkov S. S. The Effect of Damage at An Ensemble of Microstructure Points on the Margin of Safety in Structurally Heterogeneous Materials // *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*. – 2019. – Iss. 5. – P. 60–72. – DOI: 10.17804/2410-9908.2019.5.060-072. – URL: http://dream-journal.org/issues/2019-5/2019-5_274.html (accessed: 13.08.2020).
19. Loginov Y., Stepanov S., Khanykova C. Inhomogeneity of deformed state during compression testing of titanium implant // 2017 MATEC Web of Conferences, 13th International Scientific-Technical Conference on Dynamic of Technical Systems, DTS 2017, Rostov-on-Don, Sept. 13–15, 2017. – EDP Sciences, 2017. – P. 03009. – Vol. 132. – DOI: 10.1051/mateconf/201713203009.
20. Effect of Selective Laser Melting Process Parameters on the Quality of Al Alloy Parts: Powder Characterization, Density, Surface Roughness, and Dimensional Accuracy / A. H. Maamoun, Y. F. Xue, M. A. Elbestawi, S. C. Veldhuis // *Materials*. – 2018. – Vol. 11 (12). – P. 2343. – DOI: 10.3390/ma11122343.
21. Gibson L., & Ashby M. *Cellular Solids: Structure and Properties*. – 2nd ed. – Cambridge Solid State Science Series. – Cambridge : Cambridge University Press, 1997. – DOI: 10.1017/CBO9781139878326.
22. Xu Z. W., Liu A., Wang X. S. The influence of building direction on the fatigue crack propagation behavior of Ti6Al4V alloy produced by selective laser melting // *Materials Science and Engineering: A*. – 2019. – Vol. 767. – P. 138409. – DOI: 10.1016/j.msea.2019.138409.

Received: 16.06.2020**Revised:** 29.07.2020**Accepted:** 21.08.2020**DOI:** 10.17804/2410-9908.2020.4.048-061

APPLYING THE METHOD OF PLANE SECTIONS FOR EVALUATING THE PARAMETERS OF FLIGHT VEHICLES UNDER MULTIPHASE FLOW

V. I. Pegov^{a)}* and I. Yu. Moshkin^{b)}

South Urals Federal Research Center of Mineralogy and Geoecology,
Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,
Ilmen State Nature Reserve, Bldg. 1, Miass, 456300, Russian Federation
Academician V. P. Makeyev State Rocket Centre JSC,
1, Turgoyakskoye Hwy., Miass, 456300, Russian Federation

a) ✉ ofpat@mail.ru;

b) ✉ moshkin_igor@mail.ru

*Corresponding author. E-mail: ofpat@mail.ru

Address for correspondence: pr. Oktyabrya, 16, Room 103, OFPAT, 456318, Miass, Russian Federation

Tel.: +7 (351) 328 85 50

Numerical simulation of the underwater motion of flight vehicles launched from underwater is performed. The updated method of plane sections is used to determine the hydrodynamic parameters of flight vehicles under multiphase flow. Hydrodynamic loading can be evaluated through the determination of nonstationary boundaries of a gas cavity and the linear load on the water-flown aft. By the method of plane sections, the 3D boundary value problem of the cavitation flow of a flight vehicle at an attack angle resolves itself into a plane hydrodynamic problem, separate for each section of the cavity. The predicted results are compared with the experimental data. Validation and verification were performed by comparing the analysis results with the experimental data. The applicability of the method of plane sections to the determination of the hydrodynamic parameters of flight vehicles under multiphase flow is demonstrated.

Keywords: multiphase flow, cavitation, cavity, method of plane sections, mathematical and physical simulation.

Acknowledgment

The work was performed with the support from the South Urals Federal Research Center of Mineralogy and Geoecology (Ural Branch of the Russian Academy of Sciences) and the Academician V. P. Makeyev State Rocket Centre JSC under the state assignment to SU FRC MG UB RAS, theme No. 0431-2014-0001.

References

1. Degtiar V.G., Pegov V.I. Results of tryouts of cavitation launch technique for missiles. *Raketno-kosmicheskaya Tekhnika*, 1999, iss. 1 (43), part 2, pp. 20–35. (In Russian).
2. Poletaev B.I. Mathematical model of motion dynamics of a missile in the underwater part of the missile cavitation launch technique. In: *Problemy mashinovedeniya i mashinostroyeniya* [Problems of Machine Science and Mechanical Engineering]. – SPb. : SZGZTU Publ., 2001. – Iss. 24. – P. 24–37. (In Russian).

3. Logvinovich G.V. *Gidrodinamika techeny so svobodnymi granitsami* [Hydrodynamics of Flows with Free Boundaries]. Kiev, Naukova Dumka Publ., 1969, 216 p. (In Russian).
4. Logvinovich G.V., Buyvol V.N., Dudko A.S., Putilin S.I., Shevchuk Yu.R. *Techniya so svobodnymi poverkhnostyami* [Flows with Free Surfaces]. Kiev, Naukova Dumka, 1985. – 178 p. (In Russian).
5. Kapankin E.N., Gulnev S.I. Cavitation flow over a body by a vertical fluid stream. In: *Krylov Recitations: Reports*. Leningrad, 1973, pp. 14–26. (In Russian).
6. Degtyar V.G., Pegov V.I. *Gidrodinamika podvodnogo starta raket* [Hydrodynamics of Underwater Missile Launching]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 2009, 448 p. (In Russian).
7. Degtiar V.G., Murashev V.I., Perekhodyuk V.N. Solving problems of lateral loads at SLBM launch. In: *RKT Collected Papers*. Series XIV, 2000, iss. 2 (45), pp. 140–151. (In Russian).
8. Degtiar V.G., Moshkin I.Yu., Pegov V.I., Kalashnikov S.T., Khlybov V.I. *RU CNC_RNSG 2015613842* (08 Sept. 2014). (In Russian).
9. Kostin G.F., Degtiar V.G., Kalashnikov S.T., Savelyev V.N., Tyumentsev V.A., Khlybov V.I., Shvaleva R.K. Experimental-analytical methodology used to define parameters of sandy-grained roughness on burned surfaces of composite thermal-protective materials. *Konstruktii iz Kompozitsionnykh Materialov*, 2018, no. 3, pp. 29–39. (In Russian).
10. Kostin G.F., Zakharyevich D.A., Kalashnikov S.T., Savelyev V.N., Shvaleva R.K. Methodology and results of evaluation of variations in thermal and physical characteristics of a carbon fiber composite on the basis of a phenol-formaldehyde binding agent under heating and decomposition. *Konstruktii iz Kompozitsionnykh Materialov*, 2018, no. 4, pp. 63–70. (In Russian).
11. Kalashnikov S.T., Mokin Yu.A., Shvaleva R.K. Design and experimental study of changes in the shape of small lateral surface distortions during ablation of carbon-composite thermal protection of the reentry vehicle model. *Konstruktii iz Kompozitsionnykh Materialov*, 2018, no. 4 (152), pp. 42–47. (In Russian).
12. Mokin Yu.A., Kalashnikov S.T., Shvaleva R.K. Estimate of variance of disturbance aerodynamic normal force coefficient of rotary body with small irregular surface distortions of composite thermal protection coating at supersonic flow. *Konstruktii iz Kompozitsionnykh Materialov*, 2020, no. 3, pp. 3–8. (In Russian).

Подана в журнал: 16.06.2020
УДК 621.455: 629.76.085.5
DOI: 10.17804/2410-9908.2020.4.048-061

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ПЛОСКИХ СЕЧЕНИЙ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК ЛЕТАТЕЛЬНЫХ АППАРАТОВ ПРИ МНОГОФАЗНОМ ОБТЕКАНИИ

В. И. Пегов^{а)}*, И. Ю. Мошкин^{б)}

¹Южно-Уральский федеральный научный центр минералогии и геоэкологии
Уральского отделения Российской академии наук,
к. 1, Ильменский заповедник, 456300, г. Миасс, Российская Федерация
²АО «Государственный ракетный центр имени академика В.П. Макеева»,
1, Тургоякское шоссе, 456300, г. Миасс, Российская Федерация

^{а)}  ofpat@mail.ru;

^{б)}  moshkin_igor@mail.ru

*Ответственный автор. Электронная почта: ofpat@mail.ru
Адрес для переписки: пр. Октября, 16, к. 103, ОФПАТ, 456318, г. Миасс, Российская Федерация
Тел.: +7 (351) 328–85–50

Проведено численное имитационное моделирование движения под водой летательных аппаратов, стартующих из-под воды. Применена модернизированная методика плоских сечений для определения гидродинамических характеристик летательных аппаратов при многофазном обтекании. Вычисление гидродинамических нагрузок заключается в определении нестационарных границ газовой каверны и погонной нагрузки на замытую кормовую часть. Трехмерная краевая задача о кавитационном обтекании летательного аппарата под углом атаки с помощью метода плоских сечений сводится к плоской гидродинамической задаче отдельно для каждого сечения каверны. Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными. Валидация и верификация проведены путем сравнения результатов расчетов с опытными данными. Показана возможность использования модернизированного метода плоских сечений для определения гидродинамических характеристик летательных аппаратов при многофазном обтекании.

Ключевые слова: многофазное обтекание, кавитация, каверна, метод плоских сечений, математическое и физическое моделирование.

1. Введение

При большой скорости движения под водой летательных аппаратов, стартующих из-под воды, возможно возникновение кавитации корпуса: у стенок обтекаемого тела вследствие местного понижения давления в потоке происходит вскипание воды. Газовые каверны на аппарате формируются также при прохождении аппаратом образующихся при старте газовых полостей или искусственным путем за счет подачи в область разрежения на теле воздуха или иного газа. С возникновением кавитации нарушается сплошность потока и изменяется силовое воздействие жидкости на тело. При совпадении направления силы тяжести и направления нисходящего вертикального потока возникают новые закономерности кавитационных течений, а образующиеся при этом каверны носят название вертикальных каверн. Для снижения гидродинамических нагрузок при выходе из контейнера и обеспечения устойчивого движения аппарата на подводном участке траектории применяют искусственную кавитацию, когда на корпус тела подводят газ из задонного объема через кольцевой зазор контейнера или установленного на аппарате газогенератора, а положение образующейся газовой

полости (каверны) фиксируют относительно корпуса путем организации схода струй воды с его насадка. Этот способ снижения нагрузок реализован на ряде изделий.

В процессе создания летательных аппаратов, которые движутся на подводном участке траектории в режиме кавитации в вертикальном направлении, проведены широкие экспериментальные и теоретические исследования кавитационного обтекания изделий в условиях значительного изменения вдоль оси каверны гидростатического давления. Для этого выполнены исследования кавитационного обтекания моделей вертикальным нисходящим потоком при различных углах атаки, баллистические испытания моделей аппарата в гидробассейнах и открытых водоемах и запуски полноразмерных макетов летательных аппаратов в натуральных условиях. Изучены форма каверны, унос газа из каверны, зависимости гидродинамических характеристик летательного аппарата от реализующихся при старте параметров каверн на участках движения аппарата в контейнере, в воде и при выходе из воды. Газ для образования каверны может поступать из пузыря, образующегося у верхнего среза контейнера, или подаваться из носовых газогенераторов аппарата; чаще используется комбинированный способ захвата газа из пузыря и работы носового газогенератора (рис. 1). Использование того или иного способа образования и развития каверны зависит как от схемы старта, так и от параметров уже выбранной схемы – скорости движения аппарата при выходе из пузыря и на подводном участке, размеров кавернообразующего насадка, количества газа, поступающего в пузырь для образования начальной каверны, интенсивности его подачи и др.

Одной из наиболее сложных проблем, возникающих при реализации кавитационного старта, является задача определения гидродинамических нагрузок. При решении этой задачи возникают значительные математические трудности вследствие сложности протекающих физических процессов. Поэтому значения гидродинамических сил и моментов определяются в основном по результатам баллистических и весовых испытаний моделей, испытаний макетов изделия с плавстанда и подводного носителя. Задача расчетно-теоретического определения гидродинамических характеристик летательного аппарата при кавитационном способе до настоящего времени остается актуальной. Для решения задачи необходимо определить изменяющуюся во времени форму границ каверны и рассчитать погонную нагрузку при смыкании границ каверны на корпус аппарата.

Цели работы – разработка метода определения гидродинамических характеристик летательного аппарата при многофазном обтекании на подводном участке траектории; сведение трехмерной краевой задачи о кавитационном обтекании летательного аппарата под углом атаки с помощью метода плоских сечений к плоской гидродинамической задаче отдельно для каждого сечения каверны; проведение сравнения расчетов с экспериментальными данными.

2. Материал и методика

Старт летательного аппарата из-под воды широко внедрен у нас и за рубежом с 60-х гг. При этом на подводном участке траектории аппараты испытывают наибольшие нагрузки, что приводит к повышенным требованиям к прочности аппарата и его стабилизации. В результате проведенных исследований было установлено, что наиболее эффективное снижение стартовых нагрузок можно достичь при переходе от режима сплошного обтекания к кавитационному обтеканию аппарата. Кавитационный способ был реализован на летательном аппарате РСМ-52 (ГРЦ Макеева) [1] и РСМ-45 (КБ «Арсенал») [2]. Кавитационное обтекание аппарата достигается формированием каверны при установке на носке аппарата кавитирующего устройства и источника наддува каверны – газогенератора, так что верхняя часть аппарата размещается в газовой каверне и на нее практически не действуют гидродинамические силы.

В исходном положении (рис. 1 а) аппарат 1 с размещенными на его носовой части квитирующим насадком 2 и газогенератором 3 находится в контейнере 4, на корме аппарата 3 закреплен обтюратор 5, частично перекрывающий проходное сечение кольцевого зазора.

В контейнере располагается пороховой аккумулятор давления *б*, верхний срез контейнера загерметизирован мембраной, старт аппарата осуществляется из незатопленного водой контейнера. После запуска порохового аккумулятора давления в контейнере быстро возрастает, при достижении избыточного давления в контейнере происходит вскрытие мембраны и над верхним срезом контейнера образуется газовый пузырь *7*. При прохождении газового пузыря за квитирующим насадком формируется газовая каверна *8*, которая защищает аппарат от набегающего потока воды. Длина каверны при движении в воде постепенно растет как за счет поступления газов газогенератора, так и за счет естественного расширения газа, находящегося в каверне, в соответствии с уменьшением гидростатического давления при вертикальном движении аппарата.

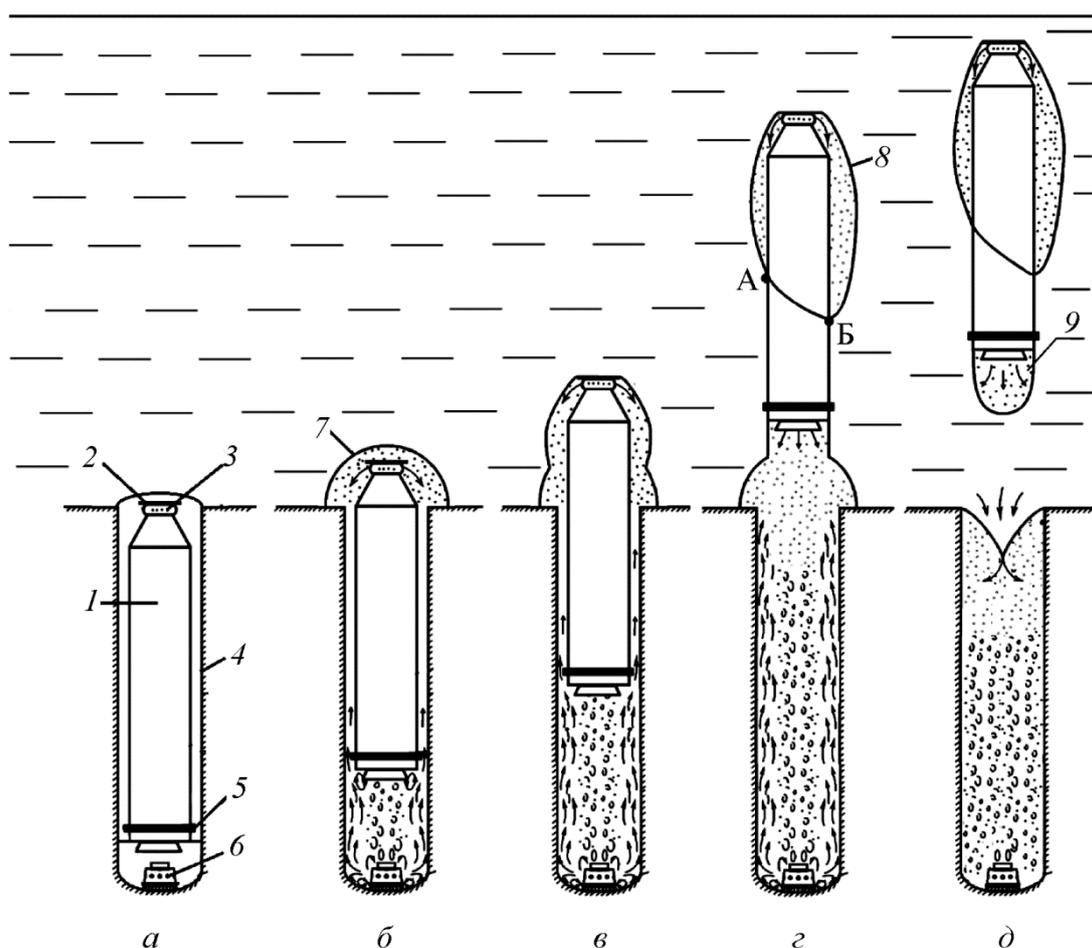


Рис. 1. Схема обтекания аппарата при кавитационном способе движения: *1* – летательный аппарат; *2* – квитирующий насадок; *3* – газогенератор наддува каверны; *4* – контейнер; *5* – обтюратор; *6* – пороховой аккумулятор давления; *7* – газовый пузырь; *8* – носовая каверна; *9* – донная каверна

Согласно гипотезе о «независимом расширении» поперечных сечений каверны трехмерная задача о кавитационном обтекании аппарата под углом атаки сводится к плоской гидродинамической задаче отдельно для каждого сечения [3, 4]. Однако этот метод нельзя непосредственно использовать в нашем случае, когда в потоке жидкости кроме каверны присутствует за квитирующим насадком еще и корпус аппарата. Конкретное поперечное сечение каверны может либо пересекаться с телом, либо нет, либо содержать его внутри себя. Это приводит дополнительно к задаче определения погонной нагрузки при пересечении границами каверны цилиндрического корпуса аппарата (рис. 1 *г, д*).

При расчете формирования каверны всю область, заполненную жидкостью, разобьем на жидкие слои горизонтальными плоскостями (рис. 1). В жидком слое радиус сечения каверны растет после прохождения его кавитирующим насадком, достигает своего наибольшего значения, а затем уменьшается. Расчет каверны будем проводить в каждом жидком слое согласно принципу «независимости расширения» сечения каверны S_k [3, 5]:

$$S_k(\xi, t) = S_n + \frac{2\pi}{a} C_{x0} R_n V_\xi (t - t_\xi) - \frac{4\pi C_{x0}}{a^2 \rho} \int_{t_\xi}^t \int_{t_\xi}^u \Delta P(\xi, \vartheta) du d\vartheta, \quad (1)$$

где $S_k = \pi r_k^2$, r_k – радиус каверны, $\Delta P(\xi, \vartheta) = P_\infty - P_k(\vartheta) - \rho g \xi$; P_∞ и P_k – давления в воде на уровне среза контейнера и в каверне; C_{x0} , S_n , R_n – коэффициент сопротивления, площадь и радиус насадка соответственно; ξ , t_ξ , V_ξ – соответственно координата сечения, время и скорость его прохождения насадком; ρ – плотность воды; a – эмпирический коэффициент ($a = 1,5 \dots 1,9$).

Для упрощения расчетов введем интегралы

$$J_0(u) = \frac{4\pi C_{x0}}{a^2 \rho} \int_0^u P_k(\vartheta) d\vartheta; \quad J_1(t) = \int_0^t J_0(u) du, \quad (2)$$

которые имеют постоянный и одинаковый нижний предел. Тогда уравнение (1) запишется в виде

$$S_k(\xi, t) = S_n + \frac{2\pi}{a} C_{x0} R_n V_\xi (t - t_\xi) - \frac{2\pi C_{x0}}{a^2 \rho} (P_\infty - \rho g \xi)(t - t_\xi)^2 + J_1(t) - J_1(t_\xi) - (t - t_\xi)J_0(t_\xi), \quad (3)$$

где $J_0(t_\xi)$, $J_1(t_\xi)$, $J_1(t)$, V_ξ и t_ξ выбираются из таблиц, организованных в процессе расчета.

При расчете продольного движения аппарата в контейнере будем рассматривать равноускоренное движение ($\ddot{x}_{p0} = const$), при котором осевая перегрузка аппарата будет минимальной. Требуемый массовый расход порохового аккумулятора давления при равноускоренном движении аппарата в контейнере и гидростатическом давлении P_∞ находится по формуле

$$\dot{m}_{\text{ПАД}} = \dot{m}_{\text{о.к.}} + \dot{m}_p \left(\frac{1}{x_p + \tau_{0\text{нач.}} / v S_u} + \frac{\rho(C_{x0} \dot{x}_{p0} - g)}{(v - \chi)kP_\infty} \right), \quad (4)$$

где m_0 – текущая масса газа в подаппаратном объеме; $\chi = S_{\text{обм}} / S_u$; $S_{\text{обм}}$ – проходное сечение в обтюраторе; S_u – площадь сечения цилиндра.

Используя рассчитанные формы каверны и области смыкания границ каверны на корпус аппарата, перейдем к задаче определения погонной нагрузки. Кавитирующий насадок, проходя сквозь плоскость жидкости, порождает элемент каверны, который расширяется по инерции, преодолевая внешнее избыточное давление. Через некоторый промежуток времени запас кинетической энергии исчерпывается, поперечное сечение каверны достигает максимальной площади, после чего начинает постепенно сужаться. Сечение каверны, кроме того,

испытывает сопротивление жидкости и сносится поперечным потоком. Наконец наступает такой момент, когда сечение каверны коснется с наветренной стороны поверхности тела (рис. 1 з, сеч. А) и начнется несимметричное смыкание каверны на цилиндрическую поверхность тела. Обычно форма кавитирующего насадка близка к диску и при вертикальном движении тела поперечное сечение каверны на протяжении всего своего развития, вплоть до момента начала смыкания на тело, остается близким к круговому, а скорость сноса его близка к скорости подводного носителя U .

Решение будем искать в конечной области, а именно – в кольцевом слое, ограниченном в начальный момент снаружи круговой цилиндрической поверхностью S_2 радиуса R_{20} , а внутри – поверхностью S_1 радиуса R_{10} ($R_{10} < R_{20}$), равного в начальный момент радиусу каверны. На рис. 2 представлена схема течения в кольцевом слое и принятые обозначения при решении задачи. Кроме того, будем считать жидкость идеальной невесомой и несжимаемой, а вызванное течение жидкости – потенциальным. На поверхности каверны S_I , как обычно, должно выполняться условие постоянства давления

$$P|_{S_I} = P_{\kappa}(t),$$

где $P_{\kappa}(t)$ – давление газов в каверне. При $t > 0$ на поверхности S_1 возникает поверхность контакта тела с жидкостью, размеры которой будут постепенно расти и определяться величиной центрального угла $2\theta_c$. На смоченной части поверхности тела S_T должно выполняться условие непротекания, т.е. производная от искомого потенциала скоростей φ по нормали \vec{h} должна удовлетворять равенству

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial n} \right|_{S_T} = U \cos \theta, \text{ при } -\theta_c \leq \theta \leq \theta_c. \quad (5)$$

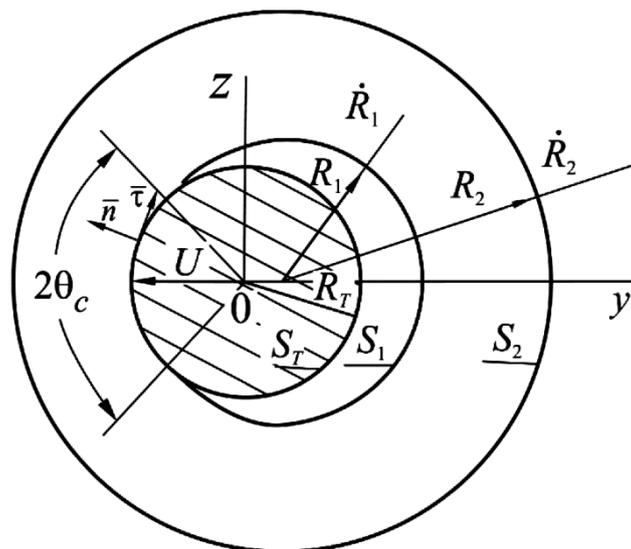


Рис. 2. Схема течения и принятые обозначения в кольцевом слое

В качестве внешней ограничивающей поверхности S_2 примем некоторую свободную поверхность, аналогичную, например, наблюдаемой в гидродинамических трубах с открытой рабочей частью. Граничное условие на этой свободной поверхности невесомой и несжимаемой жидкости можно записать в виде

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right|_{S_2} = \frac{1}{2} v_2^2(t, \theta), \quad (6)$$

где $v_2(t, \theta)$ – абсолютная скорость жидкости на свободной поверхности. Проводя интегрирование последнего уравнения по времени, найдем для каждого момента времени распределение потенциала на поверхности S_2

$$\varphi|_{S_2} = \varphi_2(t, \theta). \quad (7)$$

Таким образом, теоретическое решение поставленной задачи сведено к нахождению в кольцевом слое $R_{10} \leq r \leq R_{20}$ потенциала скоростей φ , удовлетворяющего уравнению Лапласа и граничным условиям (5) – (7). Эта краевая задача решена в работах [6, 7] аналитическим методом с помощью разложения в ряд искомой гармоничной функции φ . Аналитическое решение получено в виде зависимостей погонной нагрузки $\frac{dC_y^\alpha}{d\bar{x}}$ от кинетических параметров в кольцевом слое

$$\frac{dC_y^\alpha}{d\bar{x}} = \frac{4\alpha}{\pi} \left[(\cos\theta_c - \bar{K}_1) \cos\theta_c \bar{\theta}_c - \bar{K}_1 \sin\theta_c \right]. \quad (8)$$

А также значение коэффициента C_y^α как результат интегрирования по замкнутым на корпус слоям

$$C_y^\alpha = \frac{1}{\pi} (2\tilde{\theta}_c + \sin 2\tilde{\theta}_c - 4\bar{K}_{1n} \sin \tilde{\theta}_c). \quad (9)$$

Здесь значения $\tilde{\theta}_c$ и \bar{K}_{1n} берутся в нижнем кольцевом слое пересечения границ каверны, например точка Б (рис. 1 з). Из последнего равенства следует, что при полном смыкании нижнего слоя на цилиндр $\tilde{\theta}_c = \pi$, коэффициент $C_n^\alpha = 2,0$. Этот результат совпадает с известным результатом Г.А. Логвиновича, когда тело обтекается в режиме частичной кавитации [3].

Если значения \bar{K}_1 и \bar{K}_1 получаются для каждого слоя в процессе расчета формирования каверны, то $\bar{\theta}_c$ рассчитываем по формуле [6]:

$$\bar{\theta}_c = \frac{d\theta_c}{d\bar{t}} = \sum_{n=1}^{\infty} \bar{k}_n^{(1)} \sin n\theta_c, \quad (10)$$

где $\bar{k}_n^{(1)}$ – коэффициент из аналитического решения; $\bar{t} = \frac{tU}{R_T}$ – безразмерное время.

В формулах (8), (9) и (10) приняты следующие безразмерные величины:
 $C_y^\alpha = \frac{2Y}{\pi R_T^2 \rho U V}$; Y – боковая нагрузка на аппарат; V – продольная скорость; $\bar{y} = \frac{y}{R_T}$, $\bar{x} = \frac{\bar{y}}{\alpha}$;
 $\alpha = \frac{U}{V}$; $\bar{K}_1 = \frac{K_1}{U}$; $\bar{K}_1 = \frac{R_T}{U^2} K_1$; $\bar{k}_n^{(1)} = \frac{k_n^{(1)}}{U}$; $\bar{\theta}_c = \frac{R_T}{U} \frac{d\theta_c}{dt}$.

При кавитационном способе старта, как и при других способах, наибольшие изгибающие гидродинамические моменты возникают во время выхода аппарата из контейнера под действием поперечного потока жидкости, скорость которого определяется скоростью подводного носителя. Сравнительный анализ уровня нагрузок для различных способов старта можно определить безразмерным импульсом гидродинамического момента, действующего на аппарат за время выхода из контейнера \bar{J}_{mz} . На рис. 3 представлен безразмерный импульс момента \bar{J}_{mz} поперечной нагрузки относительно оси, лежащей в плоскости обтюлятора, за время выхода модели из контейнера, при $\bar{u} = 0,16$ зависимости от безразмерной длины каверны \bar{l}_K :

$$\bar{J}_{mz} = \frac{J_{mz \text{ кав}}}{J_{mz \text{ спл}}},$$

где $J_{mz \text{ кав}}$; $J_{mz \text{ спл}}$ – импульсы момента m_z ($m_z = C_y^\alpha \cdot \alpha(1 - \bar{l}_K)$) при кавитационном и сплошном обтекании; $\bar{u} = U/V_{пу}$; U – скорость подводного носителя; $V_{пу}$ – скорость выхода аппарата из контейнера; $\bar{l}_K = l_K/L$; l_K – длина каверны; L – длина аппарата. Из графика рис. 3 следует, что при $\bar{l}_K = 0,8$ безразмерный импульс момента при кавитационном старте составляет примерно десятую часть импульса при обычном старте ($\bar{l}_K = 0$). Это свидетельствует о возможности достижения высокой эффективности кавитационного способа старта за счет длины каверны.

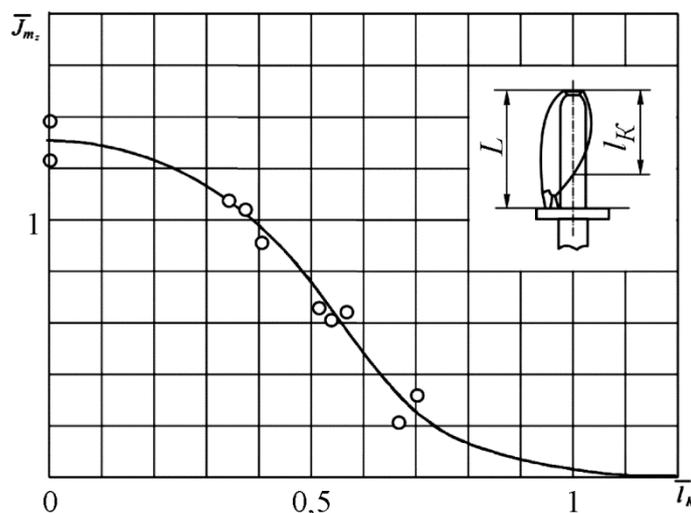


Рис. 3. Зависимость безразмерного импульса момента \bar{J}_{mz} от безразмерной длины каверны \bar{l}_K : сплошная линия – расчет; значки – эксперимент

В заключение отметим, что при известных зависимостях от времени коэффициента C_y^α и длины каверны l_K , пользуясь гипотезой плоских сечений, можно найти и все оставшиеся коэффициенты, например коэффициент вращательных производных $C_y^{wz} = C_y^\alpha (1 - \bar{x}_{ц.м.})$, поперечную присоединенную массу $\lambda_{22} = \rho \pi R_T^2 (1 - \bar{l}_K)$ и др. [6].

3. Результаты и обсуждение

В данном разделе приводятся результаты экспериментальных исследований моделей в гидротрубах, полученные в АО «Государственный ракетный центр имени академика В.П. Макеева» во время проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ. На рис. 4 представлены фотографии картины кавитационного обтекания модели. Для каждой фотографии указаны значения числа кавитации, угла атаки, относительного диаметра диска. Фотографии на рис. 4 (в двух проекциях) позволяют получить информацию о размерах и форме замытой водой части модели. На рис. 5 и 6 представлены зависимости коэффициента сопротивления C_x и коэффициента нормальной силы C_y от числа кавитации σ и угла атаки α . Анализ картины течения позволяет выделить три основных режима кавитационного обтекания, характеризующихся различным взаимным положением модели и каверны и соответственно своими особенностями гидродинамических характеристик. На первом режиме – режим бесконтактного обтекания – модель полностью находится внутри каверны, с жидкостью взаимодействует только кавернообразующий насадок. В этом случае сопротивление и нормальная сила тела равны сопротивлению и нормальной силе кавернообразующего насадка. Для насадка в виде диска, установленного перпендикулярно оси аппарата, коэффициент сопротивления C_x равен

$$C_x = 0,82(1 + \sigma) \cos \alpha \bar{d}_H^2,$$

а коэффициент нормальной силы равен нулю ($C_y = 0$). После касания хвостовой частью модели границ каверны происходит переход ко второму режиму обтекания, при котором корпус модели пересекает границу каверны. Увеличение числа кавитации $\sigma > \sigma_{\max}$ приводит к дальнейшему уменьшению размеров каверны, длина каверны становится меньше длины тела, хвостовая часть каверны смыкается на корпусе тела, что характерно для третьего режима обтекания – обтекания с частичной кавитацией. Переход от второго к третьему режиму обтекания сопровождается быстрым падением несущих свойств летательного аппарата.

Полученная система уравнений (раздел 2) была реализована в программном комплексе CNC_RNSG_[8], разработанном Южно-Уральским федеральным научным центром минералогии и геоэкологии УрО РАН совместно с АО «Государственный ракетный центр имени академика В.П. Макеева» в рамках государственного задания ЮУ ФНЦ МиГ УрО РАН по теме № 0431-2014-0001. Этот программный комплекс был оттестирован на экспериментальных данных, полученных на большой скоростной гидродинамической трубе 23К25. Валидация и верификация проведены путем сравнения результатов расчетов с опытными данными. Программный комплекс зарегистрирован в Роспатенте. Для проверки имитационного моделирования проведено сравнение расчетов с экспериментальными данными, полученными в гидробассейне, где были проведены пуски крупномасштабной модели летательного аппарата из контейнера.

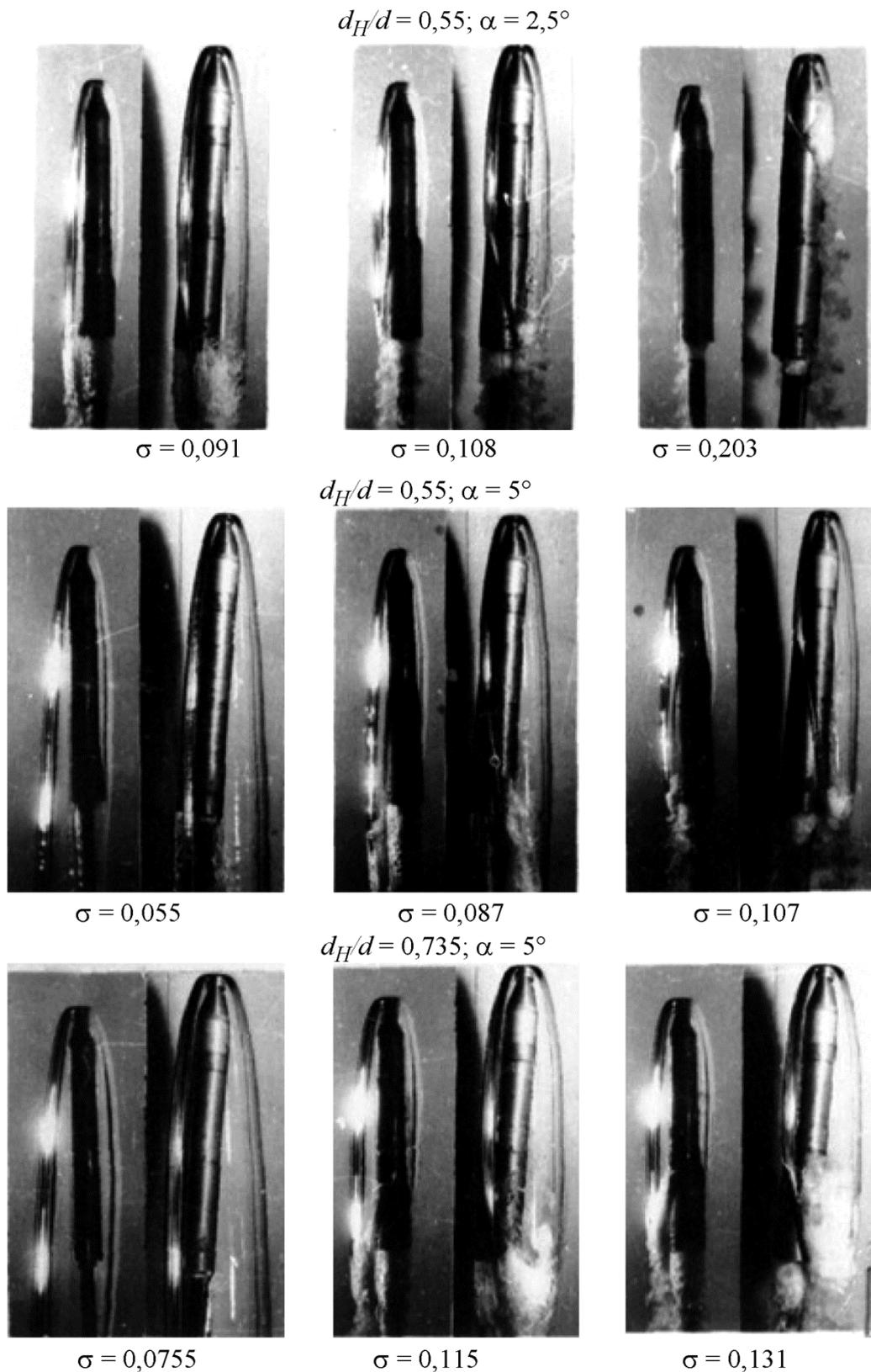


Рис. 4. Фотографии кавитационного обтекания модели

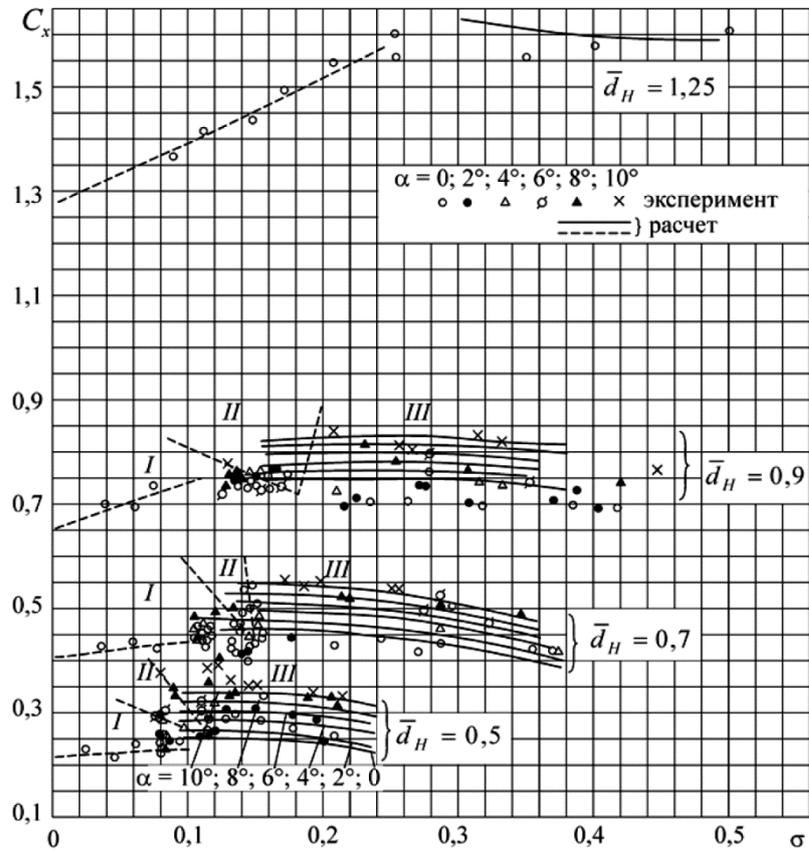


Рис. 5. Зависимости коэффициента сопротивления C_x от числа кавитации σ

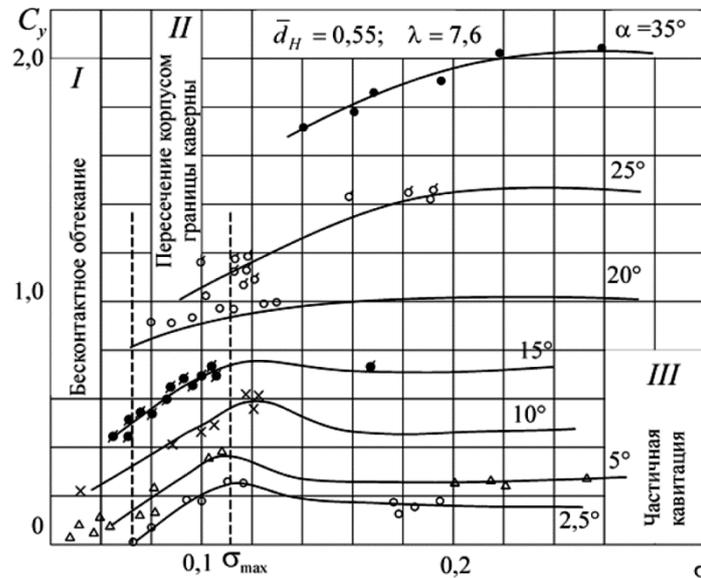


Рис. 6. Зависимость коэффициента нормальной силы C_y от числа кавитации σ

На рис. 7 приведено сравнение расчетных профилей каверн с экспериментальными данными, полученными на экспериментах в большой скоростной гидродинамической трубе, красной линией обозначен профиль каверны, полученный расчетным путем. Результаты предоставлены для трех режимов обтекания: обтекание в суперкаверне, когда летательный ап-

парат полностью находится в каверне; обтекание при развитой кавитации, когда большая поверхность летательного аппарата находится в каверне; обтекание при частичной кавитации. Моделирование процесса разделения каверны летательного аппарата от газовой полости, образующейся у верхнего среза контейнера, проводилось в гидробассейне. На рис. 8 представлено сравнение расчетных и экспериментальных профилей каверны для крупномасштабной модели летательного аппарата, полученных с помощью видеосъемки в гидробассейне. Расчетные профили каверны удовлетворительно согласуются с экспериментальными (рис. 7 и 8). В работах [9–12] приведены результаты определения характеристик летательного аппарата при многофазном обтекании при больших и гиперзвуковых скоростях при входе в атмосферу.

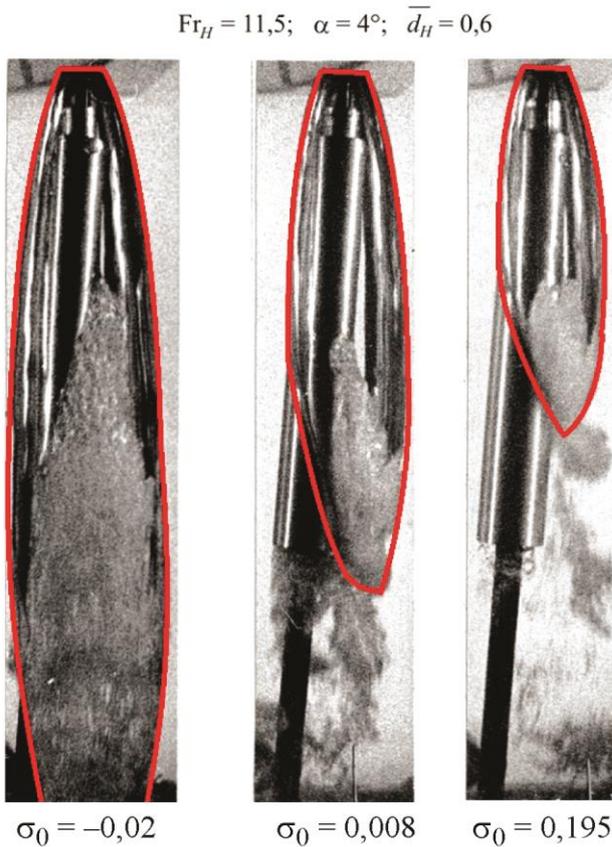


Рис. 7. Сравнение расчетных профилей каверн с экспериментальными данными в большой скоростной гидродинамической трубе, красной линией обозначен профиль, полученный расчетным путем

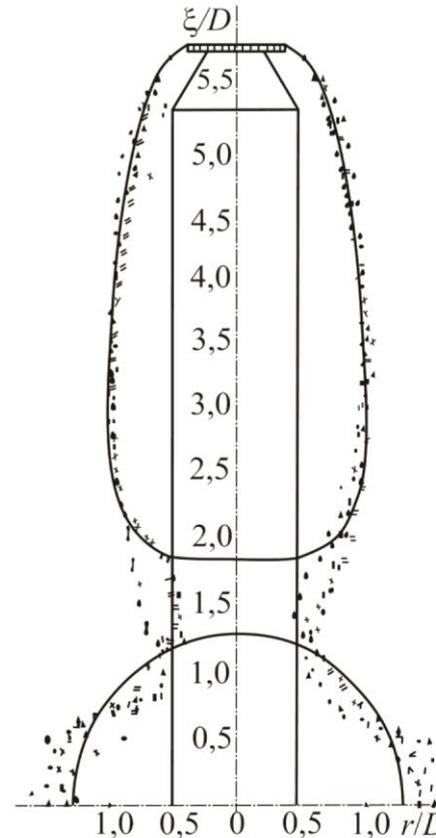


Рис. 8. Сравнение расчетных профилей каверн с экспериментальными, полученными в гидробассейне: сплошная линия – расчет; значки – эксперимент

4. Заключение

На основе метода плоских сечений разработан математический метод определения характеристик летательных аппаратов при многофазном обтекании. Трехмерная краевая задача о кавитационном обтекании летательного аппарата под углом атаки в воде с помощью метода плоских сечений сводится к плоской гидродинамической задаче отдельно для каждого сечения каверны. Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными. Валидация и верификация проведены путем сравнения результатов расчетов с опытными данными. Полученные расчетные профили каверны удовлетворительно согласуются с экспериментальными. Показана возможность использования модернизированного метода плоских сечений для определения

гидродинамических характеристик летательных аппаратов при многофазном обтекании. Создан программный комплекс, позволяющий проводить имитационное моделирование движения под водой летательных аппаратов, стартующих из-под воды.

Благодарность

Работа выполнена при поддержке Южно-Уральского федерального научного центра минералогии и геоэкологии УрО РАН и АО «Государственный ракетный центр имени академика В.П. Макеева» в рамках государственного задания ЮУ ФНЦ МиГ УрО РАН по теме № 0431-2014-0001.

Литература

1. Дегтярь В. Г., Пегов В. И. Результаты экспериментальной отработки кавитационного способа старта ракет // РКТ. – 1999. – Вып. 1 (43), ч. 2. – С. 20–35.
2. Полетаев Б. И. Математическая модель динамики движения ракеты на подводном участке кавитационного способа старта ракет // Проблемы машиноведения и машиностроения : межвуз. сб. – СПб : СЗГЗТУ, 2001. – Вып. 24. – С. 24–37.
3. Логвинович Г. В. Гидродинамика течений со свободными границами. – Киев : Наукова думка, 1969. – 216 с.
4. Течения со свободными поверхностями / Г. В. Логвинович, В. Н. Буйвол, А. С. Дудко, С. И. Путилин, Ю. Р. Шевчук. – Киев : Наукова думка, 1985. – 295 с.
5. Капанкин Е. Н., Гульнев С. И. Кавитационное обтекание тел вертикальным потоком жидкости // XXII Всесоюзная науч.-техн. конференция по теории корабля (Крыловские чтения 1973 г.), Ленинград, 1973 г. : краткие тезисы докладов. – Ленинград : Судостроение, 1973. – С. 14–26.
6. Дегтярь В. Г., Пегов В. И. Гидродинамика подводного старта ракет. – М. : Машиностроение, 2009. – 448 с.
7. Дегтярь В. Г., Мурашев В. И., Переходюк В. Н. Решение задач поперечных нагрузок при старте БРПЛ // Ракетно-космическая техника : сборник статей. Серия XIV. – Миасс : ГРЦ Макеева, 2000. – Вып. 2 (45). – С. 140–151.
8. Программа для ЭВМ CNC_RNSG : свидетельство о регистрации RU 2015613842 / Дегтярь В. Г., Мошкин И. Ю., Пегов В. И., Калашников С. Т., Хлыбов В. И. – № 2014619029 ; заявл. 08.09.2014 ; опубл. 26.03.2015.
9. Методология экспериментальных и расчетных работ по определению параметров песочно-зернистой шероховатости обгарных поверхностей / Г. Ф. Костин, В. Г. Дегтярь, С. Т. Калашников, В. Н. Савельев, В. А. Тюменцев, В. И. Хлыбов, Р. К. Швалева // Конструкции из композиционных материалов. – 2018. – № 3. – С. 29–39.
10. Методика и результаты оценки изменения теплофизических характеристик углепластика на основе фенолформальдегидного связующего при нагреве и разложении / Г. Ф. Костин, Д. А. Захарьевич, С. Т. Калашников, В. Н. Савельев, Р. К. Швалева // Конструкции из композиционных материалов. – 2018. – № 4. – С. 63–70.
11. Калашников С. Т., Мокин Ю.А., Швалева Р. К. Расчетно-экспериментальное исследование изменения формы малых искажений боковой поверхности в процессе абляции углепластикового теплозащитного покрытия модели спускаемого летательного аппарата // Конструкции из композиционных материалов. – 2018. – Вып.4 (152). – С. 42–47.
12. Мокин Ю. А., Калашников С. Т., Швалева Р. К. Оценка дисперсии коэффициента возмущающей аэродинамической нормальной силы тела вращения с малыми случайными искажениями поверхности композитного теплозащитного покрытия при сверхзвуковом обтекании // Конструкции из композиционных материалов. – 2020. – № 3. – С. 3–8.

Received: 25.06.2020
Revised: 22.07.2020
Accepted: 21.08.2020
DOI: 10.17804/2410-9908.2020.4.062-078

STUDYING THE STRATIFICATION OF HYDRODYNAMIC FIELDS FOR LAMINAR FLOWS OF VERTICALLY SWIRLING FLUID

N. V. Burmasheva^{a)*} and E. Yu. Prosviryakov^{b)}

*Institute of Engineering Science, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,
 34, Komsomolskaya St., Ekaterinburg, 620049, Russian Federation*

^{a)}  <https://orcid.org/0000-0003-4711-1894>  nat_burm@mail.ru;
^{b)}  <https://orcid.org/0000-0002-2349-7801>  evgen_pros@mail.ru

*Corresponding author. E-mail: nat_burm@mail.ru
 Address for correspondence: 34 Komsomolskaya St., Ekaterinburg, 620049, Russian Federation
 Tel.: +7 (343) 375 35 76; fax: 374 53 30

The article proposes an approach to estimating the number of stratification points in hydrodynamic fields. The article provides a method allowing one to estimate from above the number of zero points of hydrodynamic fields (points and stratification zones). The application of the proposed methodology is illustrated by several examples of the analysis of the exact solution to the problem of describing steady laminar flows of a viscous incompressible fluid in an infinite horizontal layer. In example 1, convection is induced by setting the shear stress field at one of the layer boundaries. The features of the background temperature profile, which is a seventh-degree polynomial, are discussed. It is shown that this component of the temperature field is a nonmonotonic function and that the obtained exact solution for the temperature field can describe the stratification of the considered fluid layer into one, two or three zones relative to the reference value. Example 2 illustrates evaluating the number of the zero points of the velocity field components in a vertically swirling fluid, in which convective flows are initiated by thermocapillary forces at the upper boundary of the layer. The exact solution studied in this example is a sixth-degree polynomial, which can have at most two zeros inside the region under consideration. This means that this exact solution is able to describe the stratification of the fluid layer into three zones, in each of which the test speed takes values of the same sign.

Keywords: laminar flow, vertically swirling fluid, exact solution, thermocapillary convection, tangential stresses, zero field points, field stratification.

References

1. Nalivkin D.V. *Uragani, buri i smerchi* [Hurricanes, Storms and Tornadoes]. Leningrad, Nauka, 1969, 487 p. (In Russian).
2. Monin A.S., Kamenkovich V.M. *Okeanologiya. Fizika okeana. T. I. Gidrofizika okeana* [Oceanology. Physics of the ocean. Vol. I: Ocean Hydrophysics]. Moscow, Nauka, 1987, 466 p. (In Russian).
3. Alekseenko S.V., Kuybin P.A., Okulov V.L. *Vvedenie v teoriyu koncentrirovannikh vikhrey* [Introduction to Concentrated Vortex Theory]. Novosibirsk, Institut teplofiziki im. S.S. Kutateladze Publ., 2003, 504 p. (In Russian).
4. Lavrent'ev M.A., Shabat B.V. *Problemi gidrodinamiki i ikh matematicheskie modeli* [Problems of Hydrodynamics and their Mathematical Models, 2-nd education]. Moscow, Nauka, 1973, 407 p. (In Russian).

5. Burmasheva N.V., Prosviryakov E.Yu. A large-scale layered stationary convection of an incompressible viscous fluid under the action of shear stresses at the upper boundary. Velocity field investigation. *Vestn. Sam. gos. tekhn. univer. Ser. Fiz.-mat. nauki*, 2017, vol. 21, no. 1, pp. 180–196. DOI: 10.14498/vsgtu1527 (In Russian).
6. Shvarts K.G. Plane-parallel advective flow in a horizontal layer of an incompressible fluid with an internal linear heat source. *Fluid Dynamics*, 2018, vol. 53, no. 1, pp. S24–S28. DOI: 10.1134/S0015462818040237.
7. Burmasheva N.B., Prosviryakov E.Yu. Exact solution for the layered convection of a viscous incompressible fluid at specified temperature gradients and tangential forces on the free boundary. *AIP Conference Proceedings*, 2017, vol. 1915, iss. 1. DOI: 10.1063/1.5017353.
8. Burmasheva N.V., Prosviryakov E.Yu. Convective layered flows of a vertically whirling viscous incompressible fluid. Velocity field investigation. *Vestn. Sam. gos. tekhn. univer. Ser. Fiz.-mat. nauki*, 2019, vol. 23, no. 2, pp. 341–360. DOI: 10.14498/vsgtu1670.
9. Burmasheva N.B., Prosviryakov E.Yu. Investigation of a velocity field for the Marangoni shear convection of a vertically swirling viscous incompressible fluid. *AIP Conference Proceedings*, 2018, vol. 2053, iss. 1. DOI: 10.1063/1.5084449.
10. Bekezhanova V.B., Rodionova A.V. Longwave stability of two-layer fluid flow in the inclined plane. *Fluid Dynamics*, 2015, vol. 50, no. 6, pp. 723–736. DOI: 10.1134/S0015462815060010.
11. Andreyev V.K., Bekezhanova V.B. The free-parameter solution of the convection equations in a vertical cylinder with a volume heat source. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 2013, vol. 77, no. 6, pp. 595–602. DOI: 10.1016/j.jappmathmech.2014.03.004.
12. Burmasheva N.B., Larina E.A., Prosviryakov E.Yu. Unidirectional convective flows of a viscous incompressible fluid with slippage in a closed layer. *AIP Conference Proceedings*, 2019, vol. 2176, iss. 1. DOI: 10.1063/1.5135147.
13. Burmasheva N.B., Prosviryakov E.Yu. Temperature field investigation in layered flows of a vertically swirling viscous incompressible fluid under two thermocapillary forces at a free boundary. *DReaM*, 2019, iss. 1, pp. 6–42. DOI: 10.17804/2410-9908.2019.1.006-042.
14. Burmasheva N.V., Prosviryakov E. Yu. Thermocapillary convection of a vertical swirling liquid. *Theor. Found. Chem. Eng.*, 2020, vol. 54, no. 1, pp. 230–239. DOI: 10.1134/S0040579519060034.
15. Bekezhanova V.B. Convective instability of Marangoni-Poiseuille flow under a longitudinal temperature gradient. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2011, vol. 52, no. 1, pp. 74–81. DOI: 10.1134/S0021894411010111.
16. Burmasheva N.V., Prosviryakov E.Yu. Exact solution of Navier—Stokes equations describing spatially inhomogeneous flows of a rotating fluid. *Trudy Instituta Matematiki i Mekhaniki UrO RAN*, 2020, vol. 26, no. 2. pp. 79–87. (In Russian).
17. Birikh R.V., Pukhnachev V.V., Frolovskaya O.A. Convective flow in a horizontal channel with non-newtonian surface rheology under time-dependent longitudinal temperature gradient. *Fluid Dynamics*, 2015, vol. 50, no. 1, pp. 173–179. DOI: 10.1134/S0015462815010172.
18. Burmasheva N.V., Prosviryakov E.Yu. A class of exact solutions for two–dimensional equations of geophysical hydrodynamics with two Coriolis parameters. *The Bulletin of Irkutsk State University. Series Mathematics*, 2020, vol. 32, pp. 33–48. DOI: 10.26516/1997-7670.2020.32.33. (In Russian).
19. Goncharova O.N. Two-layer fluid flows with evaporation at an interface in the presence of an anomalous thermocapillary effect. *Izvestiya of Altai State University*, 2015, no. 1–2 (85), pp. 101–105. DOI: 10.14258/izvasu(2015)1.2-18. (In Russian).

20. Aleksandrov A.D., Kolmogorov A.N., Lavrent'ev M.A. *Matematika, eyo soderganie, metody i znachenie. T. 1* [Mathematics, its contents, methods and meaning. Vol. 1]. Moscow, Izdatelstvo Akademii nauk SSSR Publ., 1956, 536 p. (In Russian).
21. Shafarevich I.R. *O reshenii uravneniy vishikh poryadkov (metod Shturma)* [On solving equations of higher degrees (Sturm method)]. Moscow, Gostekhizdat Publ., 1954, 24 p. (In Russian).
22. Bashmakova I.G. On the proof of fundamental theorem of algebra. In: *Istoriko-matematicheskie issledovaniya* [Historical and Mathematical Research. Issue 10]. Moscow, GITL Publ., 1957, pp. 257–305. (In Russian).
23. Demidovich B.P. *Lekcii po matematicheskoy teorii ustoychivosti: uchebnoe posobie* [Lectures on Mathematical Theory of Stability: Educational book]. Sankt-Peterburg, Lan', 2008, 480 p. (In Russian).
24. Petrov A.G. Exact solution of the Navier–Stokes equations in a fluid layer between the moving parallel plates. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2012, vol. 53, no. 5, pp. 642–646. DOI: 10.1134/S0021894412050021.
25. Shmiglevskiy Yu.D. *Analiticheskie issledovaniya dinamiki zhidkosti i gaza* [Analytical Studies of Fluid and Gas Dynamics]. Moscow, Editorial URSS, 1999, 232 p. (In Russian).
26. Kochin N.E., Kibel' I.A., Roze N.B. *Teoreticheskaya gidrodinamika. Chast' 2.* [Theoretical Hydrodynamics. Part 2]. Moscow: FIZMATLIT Publ., 1963, 728 p. (In Russian).
27. Loytsyanskiy L.G. *Mekhanika zhidkosti i gaza* [Fluid and Gas Mechanics]. M. : DROFA Publ., 2003, 840 p. (In Russian).
28. Shvarts K.G. Advective Flow of a rotating fluid layer in a vibrational field. *Russian Journal of Nonlinear Dynamics*, 2019, vol. 15, no. 3, pp. 261–270. DOI: 10.20537/nd190305.
29. Aristov S.N., Shvarts K.G. Advective flow in a rotating liquid film. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2016, vol. 57, no. 1, pp. 188–194. DOI: 10.1134/S0021894416010211.
30. Gershuni G.Z., Zhukhovitskii E.M. *Convective Stability of Incompressible Fluids* [Original Russian text published in Gershuni G.Z., Zhukhovitskii E.M. Konvektivnaya ustoichivost' neszhimaemoy zhidkosti. Moscow, Nauka, 1972, 392 p.], Israel Program for Scientific Translations, Jerusalem, Keter Publishing House, 1976, 330 p.
31. Landau L.D., Lifshitz E.M. *Fluid Mechanics (Volume 6 of A Course of Theoretical Physics)* [Original Russian text published in Landau L.D., Lifshitz E.M. Teoreticheskaya fizika. Tom 6. Gidrodinamika. Moscow, FIZMATLIT, 1986, 736 p.], Oxford, Pergamon Press, 1987, 536 p.
32. Boussinesq J. *Theorie analytique de la chaleur. Vol. 2*, Paris, GauthierVillars, 1903, 625 p.
33. Oberbeck A. Uber die warmeleitung der flussigkeiten bei der berucksichtigung der stromungen infolge von temperaturdifferenzen. *Annal. Phys. Chem.*, 1879, bd. 7, № 6, s. 271–292.
34. Aristov S.N., Prosviryakov E.Yu. Nonuniform convective Couette flow. *Fluid Dynamics*, 2016, vol. 51, no. 5, p. 581–587. DOI: 10.1134/S001546281605001X.
35. Aristov S.N., Prosviryakov E.Y. On laminar flows of planar free convection. *Rus. J. Nonlin. Dyn.*, 2013, vol. 9, no. 4, pp. 651–657. DOI: 10.20537/nd1304004. (In Russian).
36. Zaytsev M.L., Akkerman V.B. Hypothesis on reduction of overdetermined systems of differential equations and its application to equations of hydrodynamics. *Vestn. Voronezh. gos. univer. Ser.: Fizika. Matematika*, 2015, no. 2, pp. 5–27. (In Russian).
37. Tikhonov A.N., Samarskiy A.A. *Uravneniya matematicheskoy fiziki* [Equations of Mathematical Physics]. Moscow, Nauka, 1966, 742 p. (In Russian).
38. Pirov R. On compatibility conditions and manifolds of solutions to one class of overdetermined systems of second order partial differential equations. *Ufa Math. Journal*, 2016, vol. 8, no. 2, pp. 58–64. DOI: 10.13108/2015-0-2-58.

39. Targ S.M. Coriolis force. In: *Fizicheskaya entsiklopediya* [Physical Encyclopedia. Vol. 2]. Moscow, Sovetskaya entsiklopediya Publ., 1990, 704 p. (In Russian).
40. Coriolis G. Sur les equations du mouvement relative des systemes de corps. *Journ. Ecole polytechn.*, 1835, vol. 15, no. 24, pp. 142–154.
41. Lopez-Mariscal M. Further Coriolis correlation considerations. *Physics Today*, 2012, vol. 65, iss. 11, pp. 8–9. DOI: 10.1063/PT.3.1764.
42. Graney Ch.M. Coriolis effect, two centuries before Coriolis. *Physics Today*, 2011, vol. 64, iss. 8, pp. 8–9. DOI: 10.1063/PT.3.1195.
43. Tartishnikov E.E. *Matrichniy analiz i lineynaya algebra* [Matrix Analysis and Linear Algebra]. Moscow, MGU Publ., 2005, 372 p. (In Russian).

Подана в журнал: 25.06.2020

УДК 532.51:517.958

DOI: 10.17804/2410-9908.2020.4.062-078

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРАТИФИКАЦИИ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ ДЛЯ СЛОИСТЫХ ТЕЧЕНИЙ ВЕРТИКАЛЬНО ЗАВИХРЕННОЙ ЖИДКОСТИ

Н. В. Бурмашева^{a)*}, Е. Ю. Просвиряков^{b)}

*Институт машиноведения УрО РАН, ул. Комсомольская,
34, г. Екатеринбург, Российская Федерация*

^{a)}  <https://orcid.org/0000-0003-4711-1894>  nat_burm@mail.ru;

^{b)}  <https://orcid.org/0000-0002-2349-7801>  evgen_pros@mail.ru

*Ответственный автор. Электронная почта: nat_burm@mail.ru

Адрес для переписки: ул. Комсомольская, 34, г. Екатеринбург, Российская Федерация

Тел.: +7 (343) 375–35–76; факс: 374–53–30

В статье предложен подход к оценке числа точек стратификации гидродинамических полей. В статье приведен метод, с помощью которого можно оценить сверху число нулевых точек гидродинамических полей (точек и зон стратификации). Применение предлагаемой методики проиллюстрировано на нескольких примерах анализа точного решения задачи описания установившихся слоистых течений вязкой несжимаемой жидкости в бесконечном горизонтальном слое. В первом из них конвекция индуцируется заданием поля касательных напряжений на одной из границ слоя. Обсуждаются особенности профиля фоновой температуры, являющейся многочленом седьмой степени. Показано, что данная компонента поля температуры является немонотонной функцией и полученное точное решение для поля температуры может описывать стратификацию рассматриваемого слоя жидкости на одну, две или три зоны относительно отсчетного значения. Второй пример посвящен оценке числа нулевых точек компонент поля скорости вертикально завихренной жидкости, конвективные течения в которой инициируются термокапиллярными силами на верхней границе слоя. Исследуемое в этом примере точное решение есть полином шестой степени, который может иметь не более двух нулей внутри рассматриваемой области. Это означает, что данное точное решение способно описывать расслоение слоя жидкости на три зоны, в каждой из которых исследуемая скорость принимает значения одного знака.

Ключевые слова: слоистое течение, вертикально завихренная жидкость, точное решение, термокапиллярная конвекция, касательные напряжения, нулевые точки поля, расслоение поля.

1. Введение

Известно [1–4], что на свойства течений жидкости значительное влияние оказывают движущиеся в них вихри, вследствие чего изучение условий генерации и структуры вихрей становится крайне важным. Однако теоретическое исследование вихрей и влияния их интенсивности на масштабы межвихревого взаимодействия далеко от завершения, потому отыскание новых точных решений, описывающих вихревые течения жидкости, является актуальным. Особый интерес среди этих решений вызывают классы точных решений, сохраняющие нелинейные свойства исходных уравнений движения жидкости.

Чаще всего точные решения, описывающие установившиеся течения, являются полиномиальными [5–19], причем эти полиномы имеют высокую степень, что делает их анализ весьма нетривиальной задачей. Полученные точные решения являются суперпозицией нескольких монотонных полиномов, каждый из которых вносит вклад в структуру гидродинамического поля. Для оценки числа нулей многочленов с постоянными коэффициентами раз-

работан математический аппарат линейной алгебры: теорема Декарта [20] о числе перемен знаков в ряду коэффициентов, ряд Штурма [21], основная теорема алгебры об оценке количества нулей многочлена его степенью [22], критерий Рауса–Гурвица [23] и др. Однако в случае, когда значения коэффициентов заранее неизвестны, разработанные для полиномов методы оказываются мало пригодны.

Кроме того, не всегда получаемое точное решение описывается полиномиальной зависимостью, иногда решение для исследуемого гидродинамического поля есть некоторая нелинейная функция общего вида [16, 18, 24–29]. И в таких ситуациях перечисленные общие математические методы неприменимы вовсе, при том что потребность в анализе таких решений остается.

В данной статье предложен один способ определения верхней оценки числа критических точек основных гидродинамических полей, которые могут и не описываться полиномами, а являться некоторыми нелинейными функциями. Применение предлагаемого подхода к оценке числа критических точек полей проиллюстрировано на примере точного решения системы уравнений тепловой конвекции для вертикально завихренной жидкости. Стоит отметить, что предложенный в статье подход применим и к другим задачам механики слоистых течений вязкой несжимаемой жидкости, а также к задачам из различных разделов математической физики, где возникает подобная проблема.

2. Система уравнений Обербека–Буссинеска для слоистых течений

В случае установившихся слоистых течений $(V_x(x, y, z); V_y(x, y, z); 0)$ система уравнений тепловой конвекции в приближении Буссинеска [5; 7–9; 12–14; 30–35] принимает вид:

$$\begin{aligned} V_x \frac{\partial V_x}{\partial x} + V_y \frac{\partial V_x}{\partial y} &= -\frac{\partial P}{\partial x} + \nu \Delta V_x; \\ V_x \frac{\partial V_y}{\partial x} + V_y \frac{\partial V_y}{\partial y} &= -\frac{\partial P}{\partial y} + \nu \Delta V_y; \\ \frac{\partial P}{\partial z} &= g\beta T; \end{aligned} \quad (1)$$

$$V_x \frac{\partial T}{\partial x} + V_y \frac{\partial T}{\partial y} = \chi \Delta T; \quad (2)$$

$$\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} = 0. \quad (3)$$

Уравнения (1) являются проекциями векторного уравнения движения жидкости на оси декартовой системы координат $Oxyz$, уравнение теплопроводности (2) описывает изменение температурного поля, а уравнение (3) есть уравнение несжимаемости. В системе (1)–(4) через $P(x, y, z)$ обозначено отклонение давления от гидростатического, деленное на постоянную среднюю плотность ρ жидкости [30, 31]; $T(x, y, z)$ – отклонение от отсчетного значения температуры [30, 31]; ν, χ, β, g – коэффициенты кинематической вязкости, температуропроводности, температурного расширения жидкости и ускорение свободного падения соответственно; $\Delta = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$ – оператор Лапла-

са. Отметим, что система уравнений (1)–(3) является переопределенной, так как число уравнений превосходит число неизвестных [36–38].

Точное решение системы Обербека–Буссинеска (1)–(3) будем искать в виде [8, 9, 13, 14, 16, 18]:

$$V_x = U(z) + u(z)y, \quad V_y = V(z); \quad (4)$$

$$T = T_0 + T_1(z)x + T_2(z)y, \quad P = P_0(z) + P_1(z)x + P_2(z)y. \quad (5)$$

Поле скоростей (4) позволяет описывать вертикально завихренную жидкость (вертикальная компонента вектора завихренности $\Omega_z = \frac{\partial V_y}{\partial x} - \frac{\partial V_x}{\partial y} = -u(z)$) вне поля силы Кориолиса [5; 7–9; 12–14; 31; 39–42]. Разрешимость системы (1)–(3) обеспечивается тем, что при подстановке класса (4) уравнение несжимаемости (3) тождественно выполняется.

Подставим выбранный класс (4) и (5) в систему уравнений тепловой конвекции (1)–(3):

$$\begin{aligned} & (U + uy) \frac{\partial(U + uy)}{\partial x} + V \frac{\partial(U + uy)}{\partial y} = \\ & = -\frac{\partial(P_0 + P_1(z)x + P_2(z)y)}{\partial x} + v \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) (U + uy); \\ & (U + uy) \frac{\partial V}{\partial x} + V \frac{\partial V}{\partial y} = -\frac{\partial(P_0 + P_1x + P_2y)}{\partial y} + v \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) V; \\ & \frac{\partial(P_0 + P_1x + P_2y)}{\partial z} = g\beta(T_0 + T_1x + T_2y); \\ & (U + uy) \frac{\partial(T_0 + T_1x + T_2y)}{\partial x} + V \frac{\partial(T_0 + T_1x + T_2y)}{\partial y} = \chi \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) (T_0 + T_1x + T_2y); \\ & \frac{\partial(U + uy)}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} = 0. \end{aligned}$$

Откуда далее при использовании метода неопределенных коэффициентов [5; 7–9; 12–14] получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений для определения составляющих гидродинамических полей:

$$\begin{aligned} u'' &= 0; \quad T_1'' = 0; \quad P_1' = g\beta T_1; \quad \chi T_2'' = u T_1; \quad P_2' = g\beta T_2; \\ v V'' &= P_2; \quad v U'' = V u + P_1; \quad \chi T_0'' = U T_1 + V T_2; \quad P_0' = g\beta T_0. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь и далее штрихом обозначена производная по вертикальной координате z . Уравнения системы (6) интегрируются в том порядке, в котором они выписаны.

Точное решение системы (6) является полиномиальным:

$$T_1 = c_1 z + c_2, \quad P_1 = \frac{g\beta c_1}{2} z^2 + g\beta c_2 z + c_3, \quad T_2 = \frac{c_1 c_4}{12\chi} z^4 + \frac{c_2 c_4 + c_1 c_5}{6\chi} z^3 + \frac{c_2 c_5}{2\chi} z^2 + c_6 z + c_7;$$

$$\begin{aligned}
 P_2 &= \frac{g\beta c_1 c_4}{60\chi} z^5 + \frac{g\beta(c_2 c_4 + c_1 c_5)}{24\chi} z^4 + \frac{g\beta c_2 c_5}{6\chi} z^3 + \frac{g\beta c_6}{2} z^2 + g\beta c_7 z + c_8, \quad u = c_4 z + c_5; \\
 V &= \frac{g\beta c_1 c_4}{2520v\chi} z^7 + \frac{g\beta(c_2 c_4 + c_1 c_5)}{720v\chi} z^6 + \frac{g\beta c_2 c_5}{120v\chi} z^5 + \frac{g\beta c_6}{24v} z^4 + \frac{g\beta c_7}{6v} z^3 + \frac{c_8}{2v} z^2 + c_9 z + c_{10}; \\
 U &= \frac{g\beta c_1 c_4^2}{226800v^2\chi} z^{10} + \frac{g\beta c_4(7c_2 c_4 + 9c_1 c_5)}{362880v^2\chi} z^9 + \frac{g\beta c_5(7c_2 c_4 + c_1 c_5)}{40320v^2\chi} z^8 + \\
 &+ \frac{g\beta(c_2 c_5^2 + 5\chi c_4 c_6)}{5040v^2\chi} z^7 + \frac{g\beta(c_3 c_6 + 4c_4 c_7)}{720v^2} z^6 + \frac{g\beta c_5 c_7 + 3c_4 c_8}{120v^2} z^5 + \\
 &+ \frac{g\beta v c_1 + c_5 c_8 + 2v c_4 c_9}{24v^2} z^4 + \frac{g\beta c_2 + c_5 c_9 + c_4 c_{10}}{6v} z^3 + \frac{c_3 + c_5 c_{10}}{2v} z^2 + c_{11} z + c_{12}.
 \end{aligned} \tag{7}$$

Выражения для фоновой температуры T_0 и фонового давления P_0 здесь не приводятся ввиду их громоздкости и простоты дальнейшего интегрирования системы (6).

Для того чтобы полученное общее решение (7) описывало физические процессы, происходящие в жидкости, необходимо определить из краевых условий все возникшие в ходе интегрирования системы (6) константы. Поскольку система (6) является системой пятнадцатого порядка, требуется сформулировать пятнадцать условий, описывающих изменение основных гидродинамических характеристик на границах рассматриваемой области. Отметим, что выбор краевых условий не влияет на развиваемый в рамках статьи подход к оценке числа критических точек, а служит лишь для удобства интерпретации получаемых оценок.

3. Описание методики построения оценки числа точек стратификации

Пусть для некоторого однородного гидродинамического поля $F(z)$, изменяющегося при течении жидкости в слое $a \leq z \leq b$, получено точное решение в виде:

$$F(z) = k_0 + \sum_{i=1}^n k_i f_i(z). \tag{8}$$

Здесь $f_i(z)$ – линейно независимые, строго монотонные на $[a, b]$ функции (компоненты гидродинамического поля), а все коэффициенты $k_l (l = 0, 1, \dots, n)$ отличны от нуля. И пусть z_1 – нулевая точка исследуемого поля F . Тогда по определению нулевой точки $F(z_1) = 0$, или в силу представления (8)

$$k_0 + k_1 f_1(z_1) + \dots + k_n f_n(z_1) = 0. \tag{9}$$

Получившееся уравнение (9) можно рассматривать как однородное уравнение с постоянными коэффициентами $f_i(z_1)$ относительно неизвестных значений k_i . Если у поля F в слое (a, b) несколько таких нулей (обозначим их $z_j (j = 1, \dots, m)$), то аналогичным образом получим систему m однородных уравнений с постоянными коэффициентами $f_i(z_j)$ относительно параметров k_i :

$$\begin{aligned}
 k_0 + k_1 f_1(z_1) + \dots + k_n f_n(z_1) &= 0, \\
 &\dots \\
 k_0 + k_1 f_1(z_j) + \dots + k_n f_n(z_j) &= 0, \\
 &\dots \\
 k_0 + k_1 f_1(z_m) + \dots + k_n f_n(z_m) &= 0.
 \end{aligned}
 \tag{10}$$

Поскольку функции f_i – строго монотонные функции, то согласно определению монотонности для любых $z_1 \neq z_2$ выполняется неравенство $f_i(z_1) \neq f_i(z_2)$. Возьмем теперь два любых уравнения системы (10) и рассмотрим отношение коэффициентов, стоящих перед коэффициентами k_0 и k_1 :

$$\frac{f_1(z_{j_1})}{f_1(z_{j_2})} \neq 1 (j_1, j_2 = 1, \dots, m; j_1 \neq j_2).$$

Из этого неравенства следует, что все уравнения системы (10) линейно независимы.

Если число m нулевых точек (равное числу уравнений системы (10)) меньше числа $n+1$ неизвестных параметров k_i , то система (10) недоопределена. Ее можно рассматривать как m связей, накладываемых на неизвестные коэффициенты k_0, k_1, \dots, k_n . Следовательно, получаем $n-m+1$ независимых переменных. Задавая им произвольные значения, можно вычислить значения оставшихся m переменных, чтобы удовлетворить системе (10).

Если $m > n+1$, то система переопределена, и она не имеет решения из-за линейной зависимости уравнений рассматриваемой системы.

Если $m = n+1$, то система (10) становится системой $n+1$ однородного уравнения относительно $n+1$ коэффициента (k_0, k_1, \dots, k_n). Так как строки определителя системы линейно независимы, то он не обращается в нуль [43]. Следовательно, решение единственно, и это есть тривиальное решение. В этом случае точное решение для поля F описывает тождественно нулевое поле, что противоречит базовому предположению.

Таким образом, у однородного поля F внутри слоя $a \leq z \leq b$ может быть не более n нулевых точек. А следовательно, не более n точек стратификации.

Заметим, что непосредственно из этих рассуждений следует достижимость данной оценки. Действительно, если $m = n$, то система (10) есть система n линейно-независимых уравнений относительно $n+1$ неизвестных коэффициентов k_0, k_1, \dots, k_n . Такая система всегда имеет нетривиальное решение. Следовательно, всегда существует такой набор коэффициентов k_0, k_1, \dots, k_n , что поле F имеет n нулевых точек внутри исследуемого слоя $[a, b]$. При этом значения поля F на границах слоя (в точках a и b) не оказывают никакого влияния на достижимость построенной оценки.

4. Анализ точного решения

Проиллюстрируем метод, изложенный выше, на примере анализа скорости

$$V = \frac{g\beta c_1 c_4}{2520\nu\chi} z^7 + \frac{g\beta(c_2 c_4 + c_1 c_5)}{720\nu\chi} z^6 + \frac{g\beta c_2 c_5}{120\nu\chi} z^5 + \frac{g\beta c_6}{24\nu} z^4 + \frac{g\beta c_7}{6\nu} z^3 + \frac{c_8}{2\nu} z^2 + c_9 z + c_{10}$$

из точного решения (7). По теореме Гаусса [22] многочлен $V(z)$ как полином седьмой степени имеет не более семи действительных нулей, следовательно, у скорости V не может быть более семи застойных точек. Этот же результат можно получить, опираясь на описанный выше подход. Обозначим

$$f_i(z) = z^i \quad (i = 1, \dots, 7);$$

$$k_0 = c_{10}; \quad k_1 = c_9; \quad k_2 = \frac{c_8}{2\nu}; \quad k_3 = \frac{g\beta c_7}{6\nu};$$

$$k_4 = \frac{g\beta c_6}{24\nu}; \quad k_5 = \frac{g\beta c_2 c_5}{120\nu\chi}; \quad k_6 = \frac{g\beta(c_2 c_4 + c_1 c_5)}{720\nu\chi}; \quad k_7 = \frac{g\beta c_1 c_4}{2520\nu\chi}.$$

Несложно убедиться, что производная

$$f'(z) = \begin{cases} iz^{i-1}, & i = 2, \dots, 7; \\ 1, & i = 1 \end{cases}$$

может обращаться в нуль только в точке $z = 0$ (для $i = 2, \dots, 7$) или не имеет нулей вообще (если $i = 1$). Следовательно, функции $f_i(z)$ являются строго монотонными на интервале $(0, h)$ и оказываются справедливы выводы, сделанные при описании подхода к построению оценки на число нулевых точек произвольного однородного поля. Откуда незамедлительно следует, что в предельном случае, когда задаваемые граничные условия таковы, все коэффициенты k_0, \dots, k_7 оказываются отличными от нуля, у компоненты $V_y = V(z)$ вектора скорости V может быть не более семи застойных точек. Предложенный подход применительно к общему решению (7) для скорости V дает тот же результат, что и известные методы, но оказывается более полезным при рассмотрении именно краевых задач.

Замечание 1. Полученная выше оценка на число возможных критических точек исследуемого поля справедлива не только для задач конвекции вертикально завихренной жидкости, данный подход может быть применен и к исследованию течений, для которых вертикальная компонента завихренности равна нулю.

Пример 1. Полагая в (4) $u = 0$, получим однородное поле скоростей

$$V_x = U, \quad V_y = V.$$

В [7] для данного класса было получено точное решение, описывающее конвективные движения в бесконечном горизонтальном слое, вызванные неравномерным нагревом (охлаждением) границ слоя и заданием поля касательных напряжений на верхней его границе. В этом случае функция фоновой температуры T_0 после обезразмеривания принимала вид:

$$T_0(Z) = \frac{\delta Pe}{2520} f(Z)Z,$$

где $f(Z) = 15Z^6 - 77Z^5 + 147Z^4 + (a-105)Z^3 - 2aZ^2 + b$ (a, b – безразмерные параметры задачи);

$Pe = \frac{g\beta Bh^4}{\chi\nu}$ – число Пекле; $\delta = h/l$ – показатель геометрической анизотропии; $Z = z/h$ – без-

размерная вертикальная координата; h, l – характерные вертикальный и горизонтальный размеры слоя соответственно. Полином шестой степени $f(Z)$ есть линейная комбинация функций

$$f_1(Z) = 15Z^6 - 77Z^5 + 147Z^4 - 105Z^3 \text{ и } f_2(Z) = Z^3 - 2Z^2,$$

каждая из которых, является строго монотонной на интервале $(0,1)$. Таким образом, согласно описанному выше подходу, функция $f(Z)$ может иметь не более двух нулей. Следовательно, функция фоновой температуры T_0 допускает не более двух нулевых точек, что и было проиллюстрировано в [7] (рис. 1).

Замечание 2. При рассмотрении различных краевых условий может оказаться, что построенная для общего решения (7) оценка на число критических точек будет недостижима. Это может произойти по нескольким причинам: во-первых, часть из коэффициентов k_i могут обратиться в нуль, соответственно уменьшится число слагаемых в представлении решения (8); во-вторых, при подстановке конкретных значений констант, определяющих конкретную жидкость, может получиться такая ситуация, что в разложении (8) найдутся два или более слагаемых, сумму которых можно представить в виде многочлена вида $kf(z)$, что также приведет к уменьшению числа членов ряда (8). И нет оснований считать, что этими ситуациями исчерпывается круг причин, по которым в конкретной краевой задаче число застойных точек какого-то поля будет меньше, чем в случае общего подхода, представленного выше. Для наглядной иллюстрации приведенных рассуждений рассмотрим следующую краевую задачу.

Пример 2. В качестве граничных условий для общего решения (7) рассмотрим систему условий, описывающую влияние термокапиллярного эффекта, задаваемого на верхней границе $z = h$ бесконечного горизонтального слоя, на свойства потока жидкости [9, 10]. Будем полагать, что абсолютно твердая нижняя поверхность $z = 0$ является отсчетным уровнем измерения температуры:

$$T(x, y, 0) = 0.$$

Будем полагать, что задана скорость движения нижней границы [13, 14]

$$V_x(x, y, 0) = W \cos \alpha + \Omega y; \quad V_y(x, y, 0) = W \sin \alpha.$$

Верхнюю (свободную) поверхность $z = h$ считаем базовым уровнем отсчета приведенного давления. Полагаем, что задано однородное давление, совпадающее с атмосферным давлением, и по аналогии с заданием температуры принято за нуль:

$$P(x, y, h) = 0.$$

Будем также полагать, что на верхней границе задан термокапиллярный эффект:

$$\eta \frac{\partial V_x}{\partial z} = -\sigma \frac{\partial T}{\partial x}; \quad \eta \frac{\partial V_y}{\partial z} = -\sigma \frac{\partial T}{\partial y},$$

здесь η – коэффициент динамической вязкости; σ – температурный коэффициент поверхностного натяжения. Кроме того, на обеих границах слоя жидкости заданы источники теплового возмущения:

$$T(x, y, 0) = By; \quad T(x, y, h) = \vartheta + Cx.$$

С учетом структуры обобщенного решения (4) и (5) выбранные условия записываются в виде следующих равенств:

– на нижней границе слоя жидкости:

$$u(0) = \Omega; \quad T_0(0) = T_1(0) = 0; \quad T_2(0) = B; \quad U(0) = W \cos \alpha; \quad V(0) = W \sin \alpha;$$

– на верхней границе слоя:

$$u'(h) = 0; \quad T_0(h) = \vartheta; \quad T_1(h) = C; \quad T_2(h) = 0; \quad P_0(h) = P_1(h) = P_2(h) = 0; \\ \eta U'(h) = -\sigma T_1(h); \quad \eta V'(h) = -\sigma T_2(h).$$

Определяя с помощью системы условий (11) и (12) значение постоянных интегрирования c_i ($i = 1, \dots, 12$) в точном решении (7), получим частное решение. После перехода к безразмерной координате $Z = z/h \in [0, 1]$ компонента V принимает вид:

$$V = -\frac{bGr\delta^3}{12Ta} Z(Z-2)(Z^2-2Z+2) + \frac{\delta^5 Pe}{720} Z(Z^5-5Z^3+15Z-16) + \frac{2Re \cos \alpha}{Ta}, \quad (13)$$

где $Gr = \frac{Cg\beta l^4}{\nu^2}$; $Pe = \frac{Wl}{\chi}$; $Re = \frac{Wl}{\nu}$; $Ta = \frac{2\Omega l^2}{\nu}$ – числа Грасгофа, Пекле, Рейнольдса и модифицированное число Тейлора соответственно; $b = B/A$ – безразмерный параметр.

Скорость V течения жидкости в направлении оси Oy , как видно из (13), после подстановки краевых условий (11) и (12) в общее решение (7) остается полиномом шестой степени, следовательно, не может иметь более шести нулей. С другой стороны, оба многочлена, входящие в выражение (13) скорости V , являются строго монотонными внутри слоя $[0, 1]$. Таким образом, все необходимые условия оказываются выполнены. В результате чего получаем оценку, согласно которой в данном конкретном случае скорость V , определяемая выражением (13), допускает наличие не более двух критических точек. На рис. 2 представлены примеры соответствующих течений.

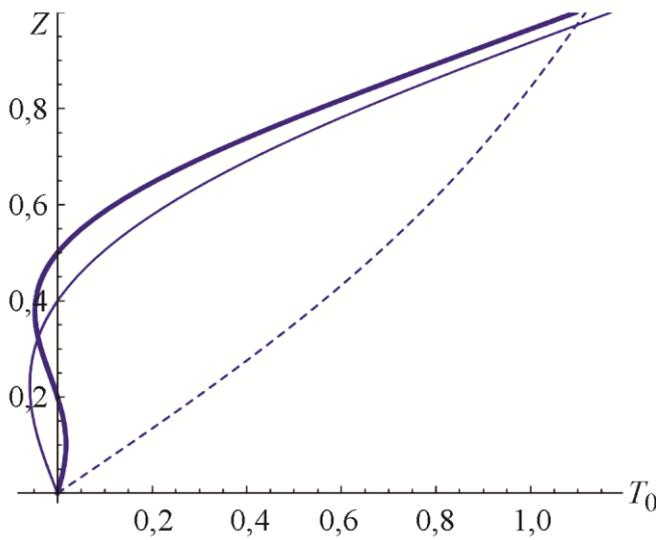


Рис. 1. Профили фоновой температуры T_0 при различном числе нулевых точек в рассматриваемом слое жидкости

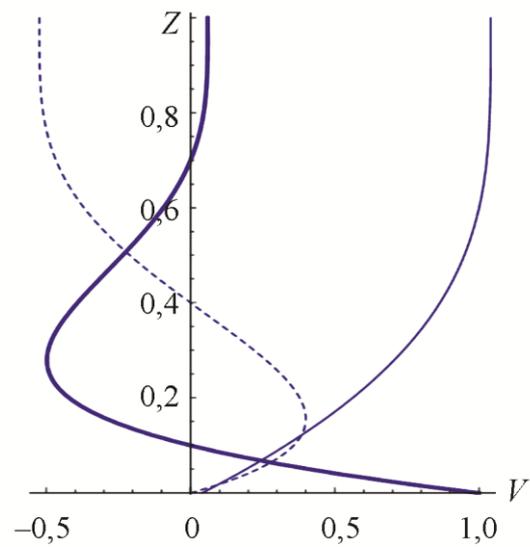


Рис. 2. Профили скорости V при различном числе застойных точек

Замечание 3. В некоторых ситуациях при построении оценок на возможное число критических точек помимо изложенного выше подхода следует учитывать дополнительные ограничения, вызванные спецификой решения. Такие ограничения могут обосновываться, например, зависимостью одних параметров краевой задачи от других ее параметров.

Пример 3. Для краевой задачи, описанной в *Примере 2*, рассмотрим получившееся точное решение для поля давления. Его однородная составляющая определяется выражением:

$$\begin{aligned}
 P_0 = & \frac{g\beta\vartheta h(-239500800 + 239500800Z^2)}{479001600} + \\
 & + \frac{B^2 g^2 \beta^2 h^6 (653400 - 1900800Z^2 + 3326400Z^4 - 3326400Z^5 + 1663200Z^6 - 475200Z^7 + 59400Z^8)}{479001600\nu\chi} + \\
 & + \frac{C^2 g^2 \beta^2 h^6 (2174040 - 3896640Z^2 + 2661120Z^5 - 997920Z^6 + 59400Z^8)}{479001600\nu\chi} + \\
 & + \frac{C^2 g\beta\sigma h^4 (-11975040 + 19958400Z^2 - 7983360Z^5)}{479001600\eta\chi} + \\
 & + \frac{BCg^2\beta^2\Omega h^8}{479001600\nu\chi^2} (-177804 + 449460Z^2 - 443520Z^4 + 121968Z^5 + 83160Z^6 - 15840Z^7 - \\
 & - 39600Z^8 + 27720Z^9 - 5544Z^{10}) + \\
 & + \frac{BCg^2\beta^2\Omega h^8 (-305844 + 531300Z^2 - 266112Z^5 + 63360Z^7 - 29700Z^8 + 7920Z^9 - 924Z^{10})}{479001600\nu^2\chi} + \\
 & + \frac{C^2 g^2 \beta^2 \Omega^2 h^{10} (12036 - 25056Z^2 + 29568Z^5 - 13860Z^6 - 8448Z^7 + 6600Z^8 - 924Z^{10} + 84Z^{12})}{479001600\nu\chi^3} +
 \end{aligned}
 \tag{14}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{C^2 g^2 \beta^2 \Omega^2 h^{10} (49886 - 86536Z^2 + 42768Z^5 - 8448Z^7 + 2475Z^8 - 154Z^{10} + 9Z^{12})}{479001600v^2\chi^2} + \\
 & + \frac{Cg\beta h^3 W \cos \alpha (19958400 - 39916800Z^2 + 19958400Z^4)}{479001600\chi} + \\
 & + \frac{Bg\beta h^3 W \sin \alpha (19958400 - 79833600Z^2 + 79833600Z^3 - 19958400Z^4)}{479001600\chi} + \\
 & + \frac{Cg\beta \Omega h^5 W \sin \alpha (-1995840 + 4656960Z^2 - 3326400Z^4 + 665280Z^6)}{479001600\chi^2} + \\
 & + \frac{Cg\beta \Omega h^5 W \sin \alpha (-7983360 + 13970880Z^2 - 7983360Z^5 + 1995840Z^6)}{479001600v\chi}.
 \end{aligned}$$

Многочлен $P_0(Z)$ в выражении (14) является полиномом десятой степени, следовательно, число его нулей не превосходит десяти. С другой стороны, этот полином представлен в виде суммы постоянного слагаемого и линейной комбинации одиннадцати многочленов различной степени. При рассмотрении конкретной жидкости число независимых параметров (значения продольных градиентов температуры B, C ; пространственное ускорение Ω ; толщина слоя h ; параметры скорости движения нижней границы W и α) значительно меньше одиннадцати, значит, не все из входящих в выражение (14) полиномов будут независимы. Кроме того, два из этих одиннадцати многочленов не являются строго монотонными внутри слоя $(0,1)$, поэтому применить оценку, построенную на основе предложенного выше подхода, формально не удастся. В таких случаях необходимо проводить дополнительное исследование, например использовать связь фоновой температуры T_0 и фонового давления P_0 , определяемую уравнением

$$P_0' = g\beta T_0$$

системы (6). Согласно этому уравнению, число нулевых точек температуры T_0 совпадает с числом экстремумов функции P_0 , а значит число нулевых точек фонового давления отличается от числа нулевых точек фоновой температуры не более чем на один.

5. Заключение

В статье на примере уравнений тепловой конвекции рассмотрен один подход к построению оценки на максимально возможное число нулевых точек исследуемых гидродинамических полей. Справедливость построенной оценки обосновывается доказательством соответствующего утверждения. Данный подход проиллюстрирован на примере трех краевых задач, описывающих конвективные движения в слоистых потоках вязкой несжимаемой жидкости при задании различных граничных условий. Ввиду того, что приведенное в статье доказательство вспомогательного утверждения не апеллирует никаким образом к механической интерпретации изучаемого явления, имеются основания утверждать, что данная методика применима не только к различным по физической трактовке процессам в механике жидкости, но и процессам, изучаемым в рамках некоторых разделов математической физики; причем эти процессы могут описываться нелинейными функциями общего вида.

Литература

1. Наливкин Д. В. Ураганы, бури и смерчи. – Л. : Наука, 1969. – 487 с.
2. Океанология. Физика океана. Т. I. Гидрофизика океана / под ред. А. С. Мони́на и В. М. Каменковича. – М. : Наука, 1978. – 466 с.
3. Алексеенко С. В., Куйбин П. А., Окулов В. Л. Введение в теорию концентрированных вихрей. – Новосибирск : Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе, 2003. – 504 с.
4. Лаврентьев М. А., Шабат Б. В. Проблемы гидродинамики и их математические модели. – 2-е изд. – М. : Наука, 1973. – 417 с.
5. Бурмашева Н. В., Просви́ряков Е. Ю. Крупномасштабная слоистая стационарная конвекция вязкой несжимаемой жидкости под действием касательных напряжений на верхней границе. Исследование поля скоростей // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. – 2017. – Т. 21, № 1. – С. 180–196. – DOI: 10.14498/vsgtu1527.
6. Шварц К. Г. Плоскопараллельное адвективное течение в горизонтальном слое несжимаемой жидкости с внутренним линейным источником тепла // Прикладная математика и механика. – 2018. – Т. 82, № 1. – С. 25–30.
7. Burmasheva N. V., Prosviryakov E. Yu. Exact solution for the layered convection of a viscous incompressible fluid at specified temperature gradients and tangential forces on the free boundary // AIP Conference Proceedings. – 2017. – Vol. 1915, iss. 1. – DOI: 10.1063/1.5017353.
8. Burmasheva N. V., Prosviryakov E. Yu. Convective layered flows of a vertically whirling viscous incompressible fluid. Velocity field investigation // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. – 2019. – Т. 23, № 2. – С. 341–360. – DOI: 10.14498/vsgtu1670.
9. Burmasheva N. V., Prosviryakov E. Yu. Investigation of a velocity field for the Marangoni shear convection of a vertically swirling viscous incompressible fluid // AIP Conference Proceedings. – 2018. – Vol. 2053, iss. 1. – DOI: 10.1063/1.5084449.
10. Бекежанова В. Б., Родионова А. В. О длинноволновой устойчивости двухслойного течения жидкости по наклонной плоскости // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. – 2015. – № 6. – С. 3–19.
11. Андреев В. К., Бекежанова В. Б. О решении со свободным параметром уравнений конвекции в вертикальном цилиндре при объемном прогреве // Прикладная математика и механика. – 2013. – Т. 77, № 6. – С. 832–841.
12. Burmasheva N. V., Larina E. A., Prosviryakov E. Yu. Unidirectional convective flows of a viscous incompressible fluid with slippage in a closed layer // AIP Conference Proceedings. – 2019. – Vol. 2176, iss. 1. – DOI: 10.1063/1.5135147.
13. Бурмашева Н. В., Просви́ряков Е. Ю. Исследование температурного поля в слоистых течениях вертикально завихренной вязкой несжимаемой жидкости при задании двух термокапиллярных сил на свободной границе // DReaM. – 2019. – № 1. – С. 6–42. – DOI: 10.17804/2410-9908.2019.1.006-042.
14. Бурмашева Н. В., Просви́ряков Е. Ю. Термокапиллярная конвекция вертикально завихренной жидкости // Теоретические основы химической технологии. – 2020. – Т. 54, № 1. – С. 114–124. – DOI: 10.31857/S0040357119060034.
15. Бекежанова В. Б. Конвективная неустойчивость течения Марангони–Пуазейля при наличии продольного градиента температуры // Прикладная механика и техническая физика. – 2011. – Т. 52, № 1 (305). – С. 92–100.
16. Бурмашева Н. В., Просви́ряков Е. Ю. Точное решение уравнений Навье–Стокса, описывающее пространственно неоднородные течения вращающейся жидкости // Труды Института математики и механики УрО РАН. – 2020. – Т. 26, вып. 2. – С. 79–87.
17. Бирих Р. В., Пухначев В. В., Фроловская О. А. Конвективное течение в горизонтальном канале с неньютоновской реологией поверхности при нестационарном продольном градиенте температуры // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. – 2015. – № 1. – С. 192–198.

18. Бурмашева Н. В., Просвирыков Е. Ю. Класс точных решений для двумерных уравнений геофизической гидродинамики с двумя параметрами Кориолиса // Известия Иркутского государственного университета. Серия Математика. – 2020. – Т. 32. – С. 33–48. – DOI: 10.26516/1997-7670.2020.32.33.
19. Гончарова О. Н. Двухслойные течения жидкостей с испарением на границе раздела при наличии аномального термокапиллярного эффекта // Известия Алтайского государственного университета. – 2015. – № 1–2 (85). – С. 101–105. – DOI 10.14258/izvasu(2015)1.2-18.
20. Александров А. Д., Колмогоров А. Н., Лаврентьев М. А. Математика, ее содержание, методы и значение. Т. 1. – М. : Издательство Академии наук СССР, 1956. – 536 с.
21. Шафаревич И. Р. О решении уравнений высших степеней (метод Штурма). – М. : Гостехиздат, 1954. – 24 с.
22. Башмакова И. Г. О доказательстве основной теоремы алгебры // Историко-математические исследования / под ред. Г. Ф. Рыбкина, А. П. Юшкевича. – М. : ГИТТЛ, 1957. – 820 с. – Вып. 10.
23. Демидович Б. П. Лекции по математической теории устойчивости : учебное пособие. – Санкт-Петербург : Лань, 2008. – 480 с.
24. Петров А. Г. Точное решение уравнений Навье–Стокса в слое жидкости между двумя движущимися параллельно пластинами // Прикладная механика и техническая физика. – 2012. – Т. 53, № 5. – С. 13–18.
25. Шмыглевский Ю. Д. Аналитические исследования динамики жидкости и газа. – М. : Эдиториал УРСС, 1999. – 232 с.
26. Кочин Н. Е., Кибель И. А., Розе Н. В. Теоретическая гидродинамика. Ч. 2. – М. : ФИЗМАТЛИТ, 1963. – 728 с.
27. Лойцянский Л. Г. Механика жидкости и газа. – М. : ДРОФА, 2003. – 840 с.
28. Shvarts K. G. Advective Flow of a rotating fluid layer in a vibrational field // Russian Journal of Nonlinear Dynamics. – 2019. – Vol. 15, no. 3. – P. 261–270. – DOI: 10.20537/nd190305.
29. Аристов С. Н., Шварц К. Г. Адвективное течение во вращающейся жидкой пленке // Прикладная механика и техническая физика. – 2016. – Т. 57, № 1 (335). – С. 216–223. – DOI: 10.15372/PMTF20160121.
30. Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. – М. : Наука, 1972. – 392 с.
31. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 6. Гидродинамика. – М. : ФИЗМАТЛИТ, 2001. – 736 с.
32. Boussinesq J. Theorie analytique de la chaleur. Vol. 2. – Paris : GauthierVillars, 1903. – 625 p.
33. Oberbeck A. Uber die warmeleitung der flussigkeiten bei der berucksichtigung der stromungen infolge von temperaturdifferenzen // Ann. Phys. Chem. – 1879. – Vol. 7. – P. 271–292.
34. Aristov S. N., Prosviryakov E. Yu. Nonuniform convective Couette flow // Fluid Dynamics. – 2016. – Vol. 51, no. 5. – P. 581–587. – DOI: 10.1134/S001546281605001X.
35. Аристов С. Н., Просвирыков Е. Ю. О слоистых течениях плоской свободной конвекции // Нелинейная динамика. – 2013. – Т. 9, № 4. – С. 651–657. – DOI: 10.20537/nd1304004.
36. Зайцев М. Л., Аккерман В. Б. Гипотеза об упрощении переопределенных систем дифференциальных уравнений и ее применение к уравнениям гидродинамики // Вестник ВГУ. Серия: Физика. Математика. – 2015. – № 2. – С. 5–27.
37. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. – М. : Наука, 1966. – 742 с.
38. Пиров Р. Об условиях совместности и многообразиях решений некоторых классов переопределенных систем дифференциальных уравнений в частных производных второго порядка // Уфимский математический журнал. – 2016. – Т. 8, № 2. – С. 59–65.

39. Тарг С. М. Кориолиса сила // Физическая энциклопедия / гл. ред. А. М. Прохоров. – М. : Советская энциклопедия, 1990. – 704 с. – Т. 2.
40. Coriolis G. Sur les equations du mouvement relative des systemes de corps // J. de l'Ecole Polytechnique. – 1835. – Vol. 15, no. 24. – P. 142–154.
41. Manuel Lopez-Mariscal. Further Coriolis correlation considerations // Physics Today. – 2012. – Vol. 65, iss. 11. – P. 8–9. – DOI: 10.1063/PT.3.1764.
42. Graney Ch. M. Coriolis effect, two centuries before Coriolis // Physics Today. – 2011. – Vol. 64, iss. 8. – P. 8–9. – DOI: 10.1063/PT.3.1195.
43. Тыртышников Е. Е. Матричный анализ и линейная алгебра. – М. : МГУ, 2005. – 372 с.