

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«МОСКОВСКИЙ АВИАЦИОННЫЙ ИНСТИТУТ (НАЦИОНАЛЬНЫЙ  
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)» - МАИ

На правах рукописи



НАЗАРОВ ВЛАДИСЛАВ СЕРГЕЕВИЧ

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА  
В ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ УСТАНОВКАХ

01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
Кандидат физико-  
математических наук,  
Иванов И.Э.

Москва 2021

## Оглавление

Оглавление.....	2
Введение.....	6
1. ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ ГОМОГЕННОЙ КОНДЕНСАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА МОМЕНТОВ.....	17
1.1.    Физическая и математическая модели процесса гомогенной конденсации в газодинамических течениях.....	19
1.1.1.    Определение параметров процесса гомогенной нуклеации.....	24
1.1.2.    Модель Герца –Кнута для скорости роста капли .....	25
1.1.3.    Модель Hill-Young для скорости роста капли .....	26
1.1.4.    Модель Gyarmathy для скорости роста капли.....	26
1.1.5.    Замыкающие термодинамические соотношения.....	27
1.1.6.    Расчет коэффициента вязкости.....	28
1.2.    Численный метод решения системы Моментных уравнений .....	28
1.2.1    Решение задачи Римана.....	34
1.2.1.1 Метод HLL.....	34
1.2.1.2 Метод AUSM+.....	36
1.2.2 Аппроксимация вязких составляющих .....	38
1.2.3 Вычислительная сетка и методы ее адаптации.....	39
1.2.3.1 Алгебраические отображения.....	40
1.2.3.2 Адаптация сетки с помощью геометрической прогрессии .....	41
2. ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГОМОГЕННОЙ КОНДЕНСАЦИИ В ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ПОТОКАХ.....	43
2.1    Гомогенная конденсация в ударных трубах.....	43
2.2    Гомогенная конденсация (кластерообразование) в соплах .....	46
2.2.1    Физическая картина процесса гомогенной конденсации пара при адиабатическом расширении .....	46

2.2.2	Валидация модели гомогенной конденсации.....	48
2.2.2.1	Расчет с помощью кинетического метода.....	50
2.2.2.2	Расчет с помощью моментного метода и квазиодномерной модели. 54	
2.2.2.3	Расчет с помощью моментного метода и двухмерной модели течения идеального газа.....	58
2.2.2.4	Расчет с помощью моментного метода и двухмерной модели течения вязкого газа.....	61
2.2.3	Расчет конденсации в сопле гиперзвуковой ударной аэродинамической трубы.....	62
2.2.4	Конденсация перегретого водяного пара в микросопле.....	65
2.2.5	Конденсация ксенона в микросопле.....	69
2.3	Экспериментальное исследование течения газа в системе микросопло- струя-скиммер.....	72
2.3.1	Математическая модель вязкости аргона.....	73
2.3.2	Корректировка математической модели конденсации на базе теории Хагены.....	73
2.3.3	Геометрия расчетной области системы микросопло-струя-скиммер 75	
2.3.4	Расчетная сетка.....	76
2.3.5	Граничные условия.....	76
2.3.6	Результаты вычислений потока газа в системе микросопло-струя- скиммер.....	77
3. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕТЕРОГЕННОЙ КОНДЕНСАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА МОМЕНТОВ.....		79
3.1.	Математическая модель нуклеации.....	83
3.2.	Математическая модель средней скорости роста гетерогенной капли 84	
3.2.1	Явный метод вычисления температуры капли.....	85

3.3	Численное моделирование испарения гетерогенных капель и гетерогенной денуклеации .....	86
3.4	Эксперимент Смолдерса.....	88
3.4.1	Результаты моделирования .....	90
4.	ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГОМОГЕННОЙ-ГЕТЕРОГЕННОЙ КОНДЕНСАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА МОМЕНТОВ .....	93
4.1	Математическая модель гомогенно-гетерогенной конденсации.....	93
4.2	Численные моделирование гетерогенной нуклеации, денуклеации, испарения и средней скорости роста капли .....	96
4.3	Численное исследование гомогенно гетерогенной конденсации .....	97
4.4	Параметрическое исследование гомогенной-гетерогенной конденсации на модернизированном тесте Сода. ....	104
5.	ПОДХОД К ОСУЩЕСТВЛЕНИЮ ОЧИСТКИ ГАЗА ОТ МЕЛКОДИСПЕРСНЫХ ПРИМЕСЕЙ С ПОМОЩЬЮ УСТРОЙСТВА КОНДЕСАЦИОННО-ЭЖЕКЦИОННОГО ТИПА.....	112
5.1	Описание составных частей полезной модели .....	113
5.2	Система уравнений, описывающая гомогенную и гетерогенную конденсацию в эжекторе .....	115
5.2.1	Модель турбулентности .....	117
5.3	Численное моделирование функционирования эжектора в случае гомогенной конденсации.....	117
5.3.1.	Геометрические параметры эжектора.....	118
5.3.2.	Расчетная сетка.....	119
5.3.3.	Граничные условия .....	119
5.3.4.	Численное моделирование функционирования эжектора в случае гомогенной конденсации.....	120
5.4	Численное моделирование функционирования эжектора в случае гомогенно-гетерогенной конденсации .....	122
5.4.1.	Геометрия расчетной области.....	122

5.4.2.	Расчетная сетка.....	123
5.4.3.	Граничные условия .....	124
5.4.4.	Результаты численного моделирования функционирования эжектора в случае гомогенно-гетерогенной конденсации .....	125
5.5	Исследование течения газокапельной смеси в сопле.....	129
5.5.1	Оценка эффективности устройства и предложение по обеспечению работоспособности.....	131
	Заключение .....	133
	Список использованной литературы .....	136
	Приложение 1. Физические свойства конденсирующихся веществ .....	147

## Введение

Процессы фазовых превращений, такие как конденсация и испарения, сопровождают многие явления в природе и в современных технических приложениях. Конденсат воды может образовываться в областях разрежения на аэродинамических поверхностях при их обтекании влажным воздухом, на лопатках турбореактивных двигателей при резком расширении газа в ракетных соплах и т.д. Образование конденсата, может приводить к образованию областей повышения давления и температуры (скачков конденсации), что может сказываться на аэродинамических характеристиках летательных аппаратов (ЛА), параметрах двигательных и технологических установок. Иногда на поверхностях ЛА, в районе больших разрежений в обтекаемом потоке могут появляться наледи, что существенно искажает геометрию поверхности.

Однако конденсация играет не только негативную роль. Без конденсации не существовало бы ряда полезных приложений: обработка поверхностей пучками кластерных ионов [1], технология вакуумного напыления покрытий [2], разделение природного газа и других, - исследование и развитие которых активно ведется в последние годы.

Конденсация компонентов газовых смесей в соплах исследуется с середины прошлого века [32,33]. В монографиях [3-8, 33] рассмотрено влияние на газотермодинамические параметры течений в каналах и струях различных релаксационных процессов, например, спонтанной гомогенной конденсации газа, конденсации в присутствии частиц третьей (твердой) фазы с произвольным начальным массовым спектром и испарения. Описаны установки и теоретические методы для исследования указанных явлений в сверхзвуковых газовых и многофазных потоках. Разработаны модели релаксационных процессов, средства численного моделирования и проведены

комплексные исследования стационарных и нестационарных течений с конденсацией и высокотемпературной релаксацией однокомпонентных газов, влажного воздуха и запыленных сред в соплах в диапазоне чисел Маха от трансзвуковых до гиперзвуковых. В работах [18-29] приводятся экспериментальные исследования течений в соплах [18, 21, 22, 29], межлопаточных зазорах турбомашин [19, 20], эжекторах [27], струях и ударных трубах [23, 24, 26]. В основном получены данные о распределениях давления на стенках каналов (сопел), реже о распределении давления внутри поля течения. В ряде работ [21] получена информация о среднем размере капли (кластера) и концентрации капель на срезе сопла. Эти результаты широко используются для валидации численных алгоритмов, которые разработаны в последнее время.

Особую роль на ранних этапах исследования конденсирующихся течений в конических и клиновых соплах сыграли работы Хагена (Hagena, O.F.) [94, 95], в которых на основе обработки большого количества экспериментальных данных для конденсации в соплах и струях была предложена простая полуэмпирическая модель для определения среднего размера капли и средней концентрации капель (а следовательно и массовой доли) для широкого набора рабочих сред (конденсирующихся газов), параметров течения в сопле (давление и температура в камере сгорания) и геометрических параметров сопла (размер критического сечения и угол раствора сверхзвуковой части). Полуэмпирическая теория Хагена позволяет в ряде случаев произвести верификацию и валидацию численного алгоритма расчета конденсации в соплах и струях [30].

Методики расчета конденсации паров вещества в процессе расширения при течении в сверхзвуковых соплах или при истечении из звуковых сопел в вакуум или затопленное пространство пониженного давления используют в

основном методы макроскопического моделирования в рамках континуального подхода (уравнений механики сплошной среды) и модификаций классической теории нуклеации (КТН) [9-11, 14-17, 34-38]. Модернизированные подходы, устраняющие проблемы классической теории нуклеации в областях, близких к параметрам образования “критического зародыша” жидкой фазы, приведены в работах [39,40]. Классическая теория нуклеации (КТН) Беккера-Дьюринга-Зельдовича основана на так называемом «приближении капиллярности» [13, 14] или жидкокапельном приближении. Его суть заключается в том, что небольшие кластеры, вызывающие зарождение объемной жидкости из паров, рассматриваются как макроскопические сферические объекты. Это означает, что они имеют четко определенный радиус, объемную плотность жидкости внутри капли и объемную плотность пара за ее пределами.

По своей структуре КТН является феноменологической теорией и при «строгом» подходе применима только к большим кластерам. Когда критический кластер становится маленьким, чисто феноменологические соображения теряют свою силу. Действительно, в ряде экспериментов по зародышеобразованию было установлено, что КТН не может с приемлемой точностью предсказать скорости нуклеации. Часто в некоторых прикладных случаях большинство кластеров имеет размеры порядка нескольких нанометров. И этот тот диапазон, в котором предсказания КТН становятся некорректными. В этой ситуации, в качестве альтернативы предлагается например: полуфеноменологический подход, а именно: Кинетическая Теория Нуклеации Среднего Поля (Kalikmanov, V.I. Mean-field Kinetic Nucleation Theory (МКНТ)) [12, 13, 14], которая применима к кластерам произвольных размеров вплоть до мономеров. Этот подход представляет собой комбинацию



методов статистической термодинамики кластеров с термодинамическими данными о равновесных свойствах материала.

В последнее время получили широкое распространение микроскопические (кинетические) подходы. В работах [41-43] предложена математическая модель процесса конденсации водяного пара с использованием метода прямого статистического моделирования Монте-Карло. Кластеры образуются в результате столкновений частиц, учитываются следующие процессы: упругое столкновение молекул, рекомбинация молекул, ассоциация кластера и мономера, ассоциации кластеров, испарение мономера из кластера.

Широко используется квазихимическая модель конденсации [44,45]. В рамках квазихимической кластерной модели предполагается, что пар состоит из мономеров и молекулярных агрегатов – кластеров, образованных из мономеров, связанных силами молекулярного взаимодействия. Предполагается, что рост кластеров происходит за счет присоединения к ним мономера, а их разрушение – через потерю мономера. Однако для малых кластеров двухчастичная реакция маловероятна, так как возникают проблемы с отводом избыточного тепла реакции. В этом случае рост кластеров происходит за счет трехчастичных реакций. Когда кластер становится достаточно большим, чтобы поглотить энергию соударения и избыточное тепло, доминирующим становится рост кластера за счет двухчастичных реакций.

Моделирование процесса объемной конденсации газа можно проводить на базе кинетического уравнения для функции распределения капель по размерам [46,47]. Данный подход позволяет вычислить динамику развития функции нуклеации, однако он требует дополнительных вычислительных затрат на вычисление уровня прироста молекул и вероятности их прилипания.

На базе основного генерирующего уравнения (General Dynamic Equation, ОГУ) [46] с помощью перехода к интегродифференциальным уравнениям, были получены Моментные уравнения [48]. Такой подход спровоцировал появление Моментных Методов (ММ) [32,49-53], основанных на решении уравнений для моментов функции распределения капель по размерам. Данные подходы к моделированию требуют относительно небольших вычислительных затрат и органично сочетается с континуальным моделированием при эйлеровом подходе. Однако применение моментных методов ограничено случаем мелких капель, скорости и температура которых не сильно отличаются от соответствующих параметров газовой среды.

Впервые ММ был предложен Хулбуртом и Катцом [49], которые рассматривали его с точки зрения классической статистической механики. Однако ММ требует некоторых замыкающих соотношений. Обычно о форме функции распределения частиц по размерам (законе роста), чтобы «замкнуть» транспортные уравнения. Хилл [32] выдвинул форму моментных уравнений применимую для любого уровня роста капель, при помощи аппроксимации средней скорости роста капли. МакГрав преодолел проблему замыкания Моментных уравнений, предложив Квадратурный Метод Моментов (quadrature-method of moments QMOM) [52]. X. Zhu, Z. Lin с соавторами развили метод QMOM и использовали его для расчета конденсации водяного пара в соплах [76]. Марчисо и Фокс предложили Направленный Квадратурный ММ (direct quadrature method of moments DQMOM) [53], основанный на квадратурном методе. Основное преимущество двух этих методов в том, что моменты рассматриваются как взвешенные интегралы во внутренних координатах, расширенные использованием Гауссовского квадратурного метода таким образом, что не требуется никаких

предположений о виде функции распределения или о законе роста капель для замыкания моментных уравнений.

Первоначально Метод Моментов применялся к расчету гомогенной конденсации и использовал такие характеристики, получаемые в Классической Теории Нуклеации, как: скорость нуклеации - количество кластеров критического размера образуемого в единицу времени в единице массы (объема) рабочего тела, скорость роста кластера (капли) - изменение радиуса капли в единицу времени, и критический размер (радиус) кластера. Данные параметры входят в правые части системы моментных уравнений и определяют оба процесса протекающих при конденсации: процесс зародышеобразования (спонтанное возникновение кластеров критического размера, нуклеация) и рост кластеров за счет конденсации пара на их поверхности.

Разница между гетерогенной и гомогенной конденсациями в основном заключается в процессе нуклеации. Многими исследованиями подтверждается [54-58], что для капель энергетически более предпочтительно нуклеировать на поверхностях чужеродных частиц или уже существующих кластеров. Таким образом во многих случаях возможно строить модели гетерогенной конденсации из расчета, что образование кластеров или начало конденсации будет происходить на частицах, уже присутствующих в газе. Это позволяет рассматривать процесс нуклеации как «активацию»: насаждение частиц нуклеирующегося газа на поверхности твердых, устойчивых частиц другого вещества.

Одним из первых ученых, описавших функцию скорости роста гетерогенных кластеров был Флетчер (N.H. Fletcher) [58]. Сделал предположение, что во время нуклеации зародыши присоединяются к чужеродным частицам. При этом как частицы, так и зародыши имеют

сферическую форму, что позволило записать уравнение для вычисления термодинамического барьера. И тем самым это предположение позволило описать функцию гетерогенного зародышеобразования. Ряд ученых во главе Ханна Вакамаки (Hanna Vehkamäki) дополнили представление об активации частиц и предложили формулу для вычисления кинетического коэффициента [55].

Такой подход предпочтителен для рассмотрения гетерогенного образования кластеров на относительно крупных частицах. Альтернативным подходом является предположение, что капли смачиваются сразу целиком, модель мгновенного смачивания (instantaneous-wetting model) [59]. Позднее Луо (X. Luo) предложил подход, позволяющий без серьезных вычислительных затрат использовать ММ для моделирования гетерогенной конденсации [57].

Цели и задачи диссертационной работы. Цель диссертационной работы состоит в том, чтобы построить математическую модель вязкого течения многокомпонентной сжимаемой среды с учетом возможности осуществления фазового перехода в ней и расширить область возможных прикладных приложений конденсации в технологических установках. Расширить область применимости ММ в части моделирования гомогенно-гетерогенной конденсации. Разработать вычислительный алгоритм для численного решения системы уравнений данной математической модели. Разработать программный комплекс для проведения численных экспериментов и с помощью этого комплекса провести численные исследования течений газовых смесей и чистых газов с фазовыми переходами (гомогенная гетерогенная конденсация и испарение) в ударных трубах, соплах, эжекторах и струях. Провести верификацию предложенных моделей и валидацию вычислительного алгоритма. Разработать предложения по решению проблемы

очистки газа на теплоэлектростанциях от мелкодисперсных частиц, размер которых не превышает 1 мкм.

Для достижения поставленных целей были решены следующие задачи:

- Построение математической модели процессов фазовых переходов (гомогенной, гетерогенной и гомогенно-гетерогенной конденсации и испарения) в термодинамическом приближении при течении многофазной многокомпонентной смеси в каналах и струях, основываясь на ММ;
- Построение математического метода решения разработанной математической модели на основе метода конечного объема (метода Годунова повышенного порядка точности);
- Реализация вычислительного алгоритма в виде комплекса программ, позволяющего проводить численные эксперименты по расчету вязких течений с фазовыми переходами в многомерных каналах сложной геометрической формы и струях.
- Верификация и валидация математических моделей и алгоритмов на натуральных экспериментах и классических тестовых задачах
- Предложение способа осуществления очистки газа от смога, на базе вычислительного эксперимента.

Диссертация состоит из пяти глав и направлена на решение вышеуказанных задач

В первой главе рассматриваются подходы к моделированию конденсации в случае, когда доля конденсирующегося вещества не велика, а объемом занимаемым сконденсировавшимися каплями можно пренебречь. Приводится сравнение результатов численных экспериментов с натурными работами.

Дополнительно проводится исследование потока инертного газа в стимере. В модель конденсации добавлен учет испарения. Предложены численные модели для двух газов: воды и аргона.

Во второй главе рассматривается подход для моделирования гетерогенной конденсации. В модели ведется учет наличия чужеродных примесей и их влияние на образование зародышей капель. Приводится сравнение результатов численных экспериментов с натурными работами.

В третьей главе приведен новый подход к моделированию конденсации. Рассматриваются модель гомогенно-гетерогенного перехода в случае недостаточного количества чужеродных частиц для осуществления активации частиц в достаточном объеме.

В четвертой главе приведена численная схема решения системы уравнений в частных производных. Приводится адаптация решения ЗРР для методов HLL и AUSM. Дополнительно приводятся алгоритмы сгущения расчетной сетки

В пятой главе приведен новый подход к очистке газа от чужеродных частиц. Рассматриваются модели составных частей устройство: испарителя, эжектора, шламосборника. Дана оценка эффективности работы устройства в зависимости от количества примесей, содержащихся в газе. Приводится методика расчета физических параметров эжектора с конденсацией.

Научная новизна исследования:

- Доработана модель гомогенной конденсации в рамках ММ. Возможности доработанной модели существенно расширены за счет использования дополнительного уравнения для переноса массовой доли конденсирующейся фазы (т.е. суммы массовых долей жидкой и

газообразной фракции конденсирующегося вещества). Установлены значения коэффициентов аккомодации и нуклеации для конденсации воды на основе экспериментов и полуэмперической теории Хагены.

- Доработаны математическая модель и метод численного моделирования гетерогенной конденсации. В математическую модель введено новое уравнение, устанавливающее связь между количеством образовавшихся гетерогенных кластеров и количеством кластеров в смеси.
- Предложен новый подход, позволяющий вести учет наличия гомогенно-гетерогенного перехода при образовании кластеров в случае недостаточного количества активируемых частиц.
- В рамках диссертации предлагается один из новых способов использования конденсации. Предложен принцип осуществления очистки газов от мелкодисперсных примесей. В конструкции предлагается использовать чужеродные частицы в качестве ядер конденсации.

#### В процессе работы над диссертацией:

- Разработан новый подход, позволяющий вести учет наличия гомогенно-гетерогенного перехода при образовании кластеров в случае недостаточного количества активируемых частиц
- На базе метода конечного объема разработаны численные алгоритмы, позволяющие производить расчет течений многофазных многокомпонентных смесей с фазовыми превращениями.
- Разработана полезная модель, в рамках которой становится возможна очистка газа от мелкодисперсных примесей, используя методы мокрой очистки.

На защиту выносятся:

1. Математические модели и алгоритмы расчета гомогенной конденсации и испарения в газодинамических потоках в рамках Метода Моментов
2. Математическая модель и алгоритм расчета гетерогенной конденсации на мелкодисперсных примесях в газе на основе ММ.
3. Подход к моделированию гомогенно-гетерогенной конденсации в рамках ММ
4. Полезная модель осуществления очистки газа от мелкодисперсных примесей.



## 1. ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ ГОМОГЕННОЙ КОНДЕНСАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА МОМЕНТОВ

Гомогенная нуклеация — образование зародышей новой фазы (жидкой или твердой) в исходной (газообразной или жидкой) фазе вещества при отсутствии примесей за счет флуктуаций плотности и температуры.

В данной работе процесс гомогенной нуклеации описывается на базе Классической Теории Нуклеации (КТН) Беккера-Дюринга-Зельдовича [9-11]. Как уже отмечалось во введении КТН основана на «приближении капиллярности» или жидко-капельной модели. Главная идея этого приближения заключается в том, что любые кластеры (даже очень маленькие - наноразмерные), рассматриваются как макроскопические сферические объекты, имеющие свой радиус, свою объемную плотность жидкости внутри кластера, собственную удельную поверхностную энергию на границе раздела фаз и другие собственные макропараметры. Свободная энергия образования  $n$ -кластера (кластера, состоящего из  $n$  атомов или молекул вещества) имеющего форму шара с радиусом  $R$ ,  $\Delta G(n)$ ,  $\Delta G(n) = S\sigma - \frac{V}{v}\Delta\mu$ .

Здесь  $S$  - поверхность кластера  $S=4\pi R^2$ ,  $V$  - объем кластера  $V=4/3\pi R^3$ ,  $v$  - объем, одного атома (молекулы) жидкой фазы,  $\sigma$  - удельная поверхностная энергия частицы жидкой фазы,  $\Delta\mu$  - разность химических потенциалов газовой и жидкой фаз. Правая часть выражения для свободной энергии образования  $n$ -кластера содержит положительное “поверхностное” слагаемое равное энергии, необходимой для построения поверхности кластера и отрицательного “объемного” слагаемого ( $-n\Delta\mu$ ). “Поверхностное” слагаемое содержит произведение поверхностного натяжения пар-жидкость плоского слоя  $\sigma$  и площадь поверхности кластера и пропорционально  $n^{2/3}$ , а “объемное” слагаемое пропорционально  $n$ .

При малых  $n$  доминирующий положительный поверхностный член делает энергетически невыгодным создание очень маленького кластера из-за большой некомпенсированной поверхностной энергии. При больших  $n$  преобладает отрицательный объемный вклад. Максимум  $\Delta G(n)$  соответствует критическому кластеру размером  $n^*$  с критическим радиусом  $r^*$ . Это значение свободной энергии образования критического кластера представляет собой барьер свободной энергии, который термодинамическая система должна преодолеть, чтобы сформировать новую стабильную (жидкую) фазу. Кластеры с числом атомов (молекул) меньше критического  $n < n^*$  ( $R < r^*$ ) испаряются, тогда как кластеры с  $n > n^*$  ( $R > r^*$ ) служат центрами конденсации новой жидкой фазы. Таким образом при гомогенной нуклеации в случае метастабильности исходной фазы, предварительно очищенной от посторонних частиц, часть зародышей, при флуктуациях параметров среды, достигает критического размера и, после этого, они уже растут необратимо, становясь центрами конденсации новой фазы.

В рамках используемого в работе Метода Моментов (ММ) процесс конденсации рассматривается как совокупность двух этапов. Первый - нуклеация, то есть спонтанное образование кластеров (зародышей) капель. На втором этапе предполагается рост этих капель за счет конденсационного осаждения вещества на их поверхности [32].

Рост или уменьшение концентрации жидкой фракции влияет на изменение внутренней энергии в потоке за счет выделения (поглощения) скрытой теплоты конденсации. В свою очередь, изменение (повышение) внутренней энергии потока приводит к изменению (повышению) давления и влияет на образование скачков уплотнения, изменение показателя адиабаты и полное изменение структуры потока. Учет этих явлений возможен благодаря

определению скорости изменения концентрации жидкой фракции в системе моментных уравнений.

Интенсивность процесса конденсации характеризуется параметром перенасыщения  $S = p_v/p_s$ , который выражается как отношение давления паров конденсирующегося вещества к давлению насыщения при данной температуре. При  $S > 1$  происходит образование и рост зародышей, пока система не достигнет химического и термодинамического равновесия с окружающей средой.

### 1.1. Физическая и математическая модели процесса гомогенной конденсации в газодинамических течениях

Предполагается, что среда представляет собой многокомпонентный газ (несущий газ и пары конденсирующегося вещества) и кластеры (капли) конденсирующегося вещества. Каждая компонента газовой смеси является совершенным газом. В смеси газов и капель объемная доля жидкой фазы пренебрежимо мала, между каплями отсутствуют взаимные столкновения, и это значит, что жидко-капельная фаза не имеет собственного давления. Между газовой и жидкой фазой существует механическое и термическое равновесие. Между каплями отсутствуют взаимные столкновения.

В качестве математической модели динамики такой многокомпонентной двухфазной смеси взята система уравнений Навье-Стокса, записанная в слабо дивергентной форме в осесимметричной постановке, которая дополнена системой моментных уравнений:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = -\frac{\rho v}{y}, \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p - \tau_{yy})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv - \tau_{xy})}{\partial y} = -\frac{1}{y}(\rho v^2 - \tau_{yy}), \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uv - \tau_{yx})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v^2 + p - \tau_{xx})}{\partial y} = -\frac{1}{y}(\rho uv - \tau_{xx}), \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(u(\rho E + p) - (v\tau_{yy} + u\tau_{yx} - q_x))}{\partial x} + \frac{\partial(v(\rho E + p) - (v\tau_{yx} + u\tau_{xx} - q_y))}{\partial y} = -\frac{v(\rho E + p)}{y}. \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial(\rho Q_0)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u Q_0)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v Q_0)}{\partial y} = J - \frac{\rho Q_0 v}{y}, \quad (1.5)$$

$$\frac{\partial(\rho Q_1)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u Q_1)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v Q_1)}{\partial y} = r_* J + \dot{r} \rho Q_0 - \frac{\rho Q_1 v}{y}, \quad (1.6)$$

$$\frac{\partial(\rho Q_2)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u Q_2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v Q_2)}{\partial y} = r_*^2 J + 2\dot{r} \rho Q_1 - \frac{\rho Q_2 v}{y}, \quad (1.7)$$

$$\frac{\partial(\rho \alpha)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u \alpha)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v \alpha)}{\partial y} = \frac{4}{3} \pi \rho_l (r_*^3 J + 3\dot{r} \rho Q_2) - \frac{\rho Q_3 v}{y}. \quad (1.8)$$

$$\tau_{xx} = \frac{2}{3} \mu \left[ 2 \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{1}{y} u - \frac{\partial v}{\partial x} \right] \quad (1.9)$$

$$\tau_{yy} = \frac{2}{3} \mu \left[ -\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{1}{y} u + 2 \frac{\partial v}{\partial x} \right] \quad (1.10)$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left[ \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial x} \right] \quad (1.11)$$

$$q_x = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \quad (1.12)$$

$$q_y = -\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \quad (1.13)$$

Здесь  $\rho$  – плотность,  $p$  – давление,  $T$  – температура статическая,  $u$  – скорость вдоль направления  $x$ ,  $v$  – скорость вдоль направления  $y$ ,  $E$  – полная энергия в единице объема,  $\mu$  – коэффициент вязкости,  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности,  $Q_0, Q_1, Q_2$  – моменты функции распределения,  $\alpha$  – массовая доля сконденсировавшейся воды,  $J$  – скорость нуклеации,  $r_*$  – критический радиус,  $\dot{r}$  – скорость роста капли.

Физическая модель среды представляет собой смесь трех фракций (компонент): несущего газа, паров конденсирующегося вещества и капель конденсирующегося вещества. Количественно каждая фракция характеризуется своей массовой долей, то есть отношением массы компоненты в килограмме смеси к килограмму смеси, так что сумма массовых долей всех фракций равна единице. Для правильного представления материальных балансов (законов сохранения) в многофазной среде необходимо в математической модели использовать три уравнения описывающих эволюцию во времени и пространстве массовых долей трех фракций. Возможны и другие представления, например, одно уравнение описывающее эволюцию плотности смеси (уравнение неразрывности) и два уравнения для описания эволюции массовых долей двух фракций. Смесевая плотность определяется здесь как отношение килограмма смеси (сумме массовых долей фракций, умноженной на килограмм) к объему занимаемому этой смесью. В настоящей работе применяется следующий подход: в системе уравнений используется уравнение неразрывности (1.1) (для плотности смеси), уравнение для эволюции массовой доли жидкой фазы  $\alpha$  (1.8) и уравнение для эволюции массовой доли конденсирующейся фракции  $\alpha_{\max}$  (то есть суммы долей жидкой фракции и фракции пара  $\alpha_{\max} = \alpha + \alpha_{\text{пар}}$ , где  $\alpha_{\text{пар}}$  –

массовая доля паров конденсирующегося вещества). Новое уравнение приводится ниже

$$\frac{\partial(\rho\alpha_{\max})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\alpha_{\max})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v\alpha_{\max})}{\partial y} = -\frac{\rho\alpha_{\max}v}{y}. \quad (1.14)$$

Таким образом для корректного описания динамики неоднородности многофазной среды, введено уравнение распространения массовой доли конденсирующейся фазы (1.14). Добавление этого уравнения к системе (1.1 – 1.13) позволяет расширить класс решаемых задач для течений с конденсацией. Например, это позволяет рассмотреть задачи, в которых в начальном распределении параметров в разных зонах в расчетной области задано разное содержание конденсируемого вещества  $\alpha_{\max}$  или течения в каналах с изменяющимся во времени значением  $\alpha_{\max}$  во входном потоке.

Систему можно рассматривать как совокупность двух систем уравнений. Одна из которых это классическая система уравнений Навье-Стокса, а вторая – система моментных уравнений. Уравнения с (1.1) по (1.4) системы описывают динамику поведения смеси в двухмерном объеме, а уравнения с пятого по восьмое (уравнения моментов) и уравнение (1.14) описывают эволюцию изменения параметров жидкой капельной фазы.

Уравнения с (1.5) по (1.8) получаются из общего уравнения динамики [48], описывающего процесс зародышеобразования и динамики кластеров (капель) при гомогенной конденсации:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uf) + \frac{\partial}{\partial r}(rf) = \delta(r - r_*)J \quad (1.15)$$

Здесь функция  $f(x, t, r)$  - функция распределения капель по размеру,  $r$  - радиус капли,  $J$  - скорость гомогенной нуклеации,  $\delta(r - r_*)$  - дельта функция,  $r_*$  - радиус критического зародыша,  $\dot{r} = \frac{dr}{dt}$  - скорость роста зародыша (капли).

Вывод уравнений моментов заключается в последовательном умножении уравнения (15) на  $r^k$  ( $k$  – натуральное число) и интегрировании по радиусу в пределах от  $r_*$  до  $\infty$  :

$$\int_{r_*}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} (r^n f) dr + \int_{r_*}^{\infty} \nabla \cdot (r^n f \vec{v}) dr = f_* r_*^n \left( \frac{dr}{dt} \right)_* + \int_{r_*}^{\infty} n f r^{n-1} \frac{dr}{dt} dr \quad (1.16)$$

Где  $f_*$  - значение функции распределения в точке  $r_*$ . Два левых члена системы уравнений могут быть записаны в виде:

$$\int_{r_*}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} (r^n f) dr + \int_{r_*}^{\infty} \nabla \cdot (r^n f \vec{v}) dr = \frac{\partial}{\partial t} \int_{r_*}^{\infty} r^n f dr + \nabla \cdot \int_{r_*}^{\infty} r^n f \vec{v} dr + r_*^n f_* \frac{\partial r_*}{\partial t} + r_*^n f_* \vec{v} \cdot \nabla r_* \quad (1.17)$$

Последние два члена эквивалентны  $r_*^n f_* \frac{dr_*}{dt}$ . В результате получим:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{r_*}^{\infty} r^n f dr + \nabla \cdot \left[ \vec{v} \int_{r_*}^{\infty} r^n f dr \right] = f_* r_*^n \left[ \left( \frac{dr}{dt} \right)_* - \frac{dr_*}{dt} \right] + \int_{r_*}^{\infty} n f r^{n-1} \frac{dr}{dt} dr \quad (1.18)$$

Учитывая что  $J = f_* \left[ \left( \frac{dr}{dt} \right)_* - \frac{dr_*}{dt} \right]$ ,  $\rho Q_n = \int_{r_*}^{\infty} r^n f(x, t, r) dr$ , окончательно получаем бесконечная цепочка моментных уравнений - цепочка Хилла [32]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Q_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho U_i Q_k) = (r_*)^k J + k Q_{k-1} \dot{r}, \quad k = 1, \infty \quad (1.19)$$

Данная модель ограничивается четырьмя первыми моментами, которые имеют ясную физическую интерпретацию. В этом случае для единицы массы

смеси нулевой момент  $Q_0$  это числовая плотность кластеров (количество кластеров),  $Q_1$  сумма радиусов всех кластеров,  $Q_2$  сумма квадратов радиусов всех кластеров (оценка площади поверхности всех кластеров),  $Q_3$  сумма кубов радиусов всех кластеров (оценка объема всех кластеров). Вместо момента  $Q_3$  удобно использовать массовую долю жидкой фазы  $\alpha = \frac{4\pi}{3} \rho_l Q_3$ , где  $\rho_l$  - плотность жидкой фазы.

Таким образом ММ описывает эволюцию жидкой фазы конечным числом моментных уравнений, получаемых из общего уравнения (1.15).

### 1.1.1. Определение параметров процесса гомогенной нуклеации

Правые части уравнений моментов в системе (1.5)-(1.8) определяются с помощью параметров классической теории нуклеации [9-11, 59]. Согласно классической теории нуклеации параметр  $J$ , характеризующий скорость образования кластеров критического размера в единице объема, зависит от энергии Гибса и определяется следующим образом:

$$J = K \exp(-\Delta G^* / k_B T) \quad (1.20)$$

Где  $\Delta G^* = 4\pi r^{*2} \sigma / 3$  - энергия Гибса [60],  $K$  - кинетический коэффициент, который вычисляется согласно классической теории нуклеации определяется как:

$$K = S \frac{p_s^2}{(k_B T)^2} \hat{v}_{ml} \left( \frac{2\sigma}{\pi m} \right)^{1/2} \quad (1.21)$$

Где  $k_B$  - постоянная Больцмана,  $\hat{v}_{ml}$  - удельный объем одной молекулы,  $m$  - масса одной молекулы.



В работах [32,61-75] введены зависимости функции нуклеации от корректирующих множителей, учитывающих кривизну капли, стационарность процесса и добавлена корректировка начала нуклеации:

$$J = \frac{q_c}{(1+\eta)} \sqrt{\frac{2\sigma}{\pi m^3} \frac{\rho_v^2}{\rho_l}} \exp\left(-g \frac{4\pi}{3} \frac{r_*^2 \sigma}{R_v m T}\right) \quad (1.22)$$

$\frac{1}{1+\eta}$  - корректирующий множитель учета не стационарности

процесса [61],  $\eta = 2 \frac{\gamma_f - 1}{\gamma_f + 1} \frac{L}{R_v T} \left( \frac{L}{R_v T} - \frac{1}{2} \right)$ .

$q_c$  - коэффициент конденсации ( $q_c \approx 1$ );

$\sigma = k_\sigma \sigma_\infty$ ,  $\sigma_\infty$  - поверхностное натяжение плоской пленки;

$k_f$  - корректирующий множитель, учитывающий кривизну капли;

$g$  - множитель, корректирующий начало нуклеации;

$S = \frac{P_v}{P_s}$  - параметр перенасыщения.

Для определения величины скорости роста капли  $\frac{dr}{dt}$  используется одна

из следующих моделей: модель Герца-Кнута, модель Гуармати [63-75], Модель Хилла-Янга [32,62], - для свободномолекулярного и континуального режима обтекания кластера-капли потоком конденсирующегося вещества

### 1.1.2. Модель Герца –Кнута для скорости роста капли

Рост капли описывается моделью Герца-Кнута для свободномолекулярного режима обтекания кластера-капли потоком многокомпонентного газа:

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\beta}{\rho_l} \frac{p_v - p_{s,r}}{\sqrt{2\pi R_v T}} \quad (1.23)$$

$$p_{s,r} = p_s \exp \frac{2\sigma}{\rho_l R_v T r_{Hill}} - \text{давление насыщения на поверхности капли}$$

среднего по размерам радиуса

$\beta$  - множитель, корректирующий скорость роста капли

$$r_{Hill} = \begin{cases} \sqrt{\frac{Q_2}{Q_0}}, \text{если } \dots \alpha > 10^{-6} \\ 0, \dots \text{если } \dots \alpha \leq 10^{-6} \end{cases} \quad (1.24)$$

$$r_* = \begin{cases} \frac{2\sigma}{\rho_l R_v T \ln S}, \text{если } S > 1 \\ \infty, \text{если } S \leq 1 \end{cases} \quad (1.25)$$

### 1.1.3. Модель Hill-Young для скорости роста капли

Модель Hill-Young [62,63] выглядит следующим образом:

$$\frac{dr}{dt} = \frac{p_v}{\rho_l L \sqrt{2\pi R_v T}} \frac{C_{p_v} + C_{v_v}}{2} (T_s(p_v) - T) \quad (1.26)$$

$T_s$  - температура насыщения. насыщения,  $L$  - удельная теплота парообразования (конденсации).  $C_{p_v}$ .  $C_{v_v}$  - удельные теплоемкости паров конденсирующегося вещества при постоянном давлении и объеме.

### 1.1.4. Модель Gyarmathy для скорости роста капли

Модель Gyarmathy предложена и развита в работах [63,96,98]

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\lambda_v (T_s(p_v) - T) \left(1 - \frac{r^*}{r_{hill}}\right)}{\rho_l L \cdot r_{hill} \cdot (1 + 3.18 K_n)} \quad (1.27)$$

$\lambda_v$  - теплопроводность паров конденсирующегося вещества

$K_n$  - число Кнудсена, характеризующее режим обтекания капли паром

$K_n = \frac{l}{2r_{hill}}$ ,  $l$  - длина свободного пробега молекулы пара

$$l = \frac{1.5\mu_v\sqrt{R_v T}}{P_v} \quad (1.28)$$

$\mu_v$  - динамическая вязкость паров конденсирующегося вещества

### 1.1.5. Замыкающие термодинамические соотношения

Предполагается, что параметры смеси находятся в термодинамическом и калорическом равновесии. Тогда теплофизические свойства смеси и уравнения состояния для смеси (калорическое и термическое) записываются следующим образом:

$$C_{Vmixt} = (1 - \alpha_{max})C_{Va} + \alpha_{max}C_{VV} + \alpha(C_l - C_{VV}) \quad (1.29)$$

$$C_{Pmixt} = (1 - \alpha_{max})C_{Pa} + \alpha_{max}C_{PV} + \alpha(C_l - C_{PV}) \quad (1.30)$$

$$R_{mixt} = (1 - \alpha_{max})R_a + \alpha_{max}R_v - \alpha R_v \quad (1.31)$$

$$\gamma_f = \frac{C_{Pmixt}}{C_{Vmixt}} \quad (1.32)$$

Где  $C_{Va}, C_{Pa}$  - удельные теплоемкости при постоянном объеме и при постоянном давлении для несущего газа,  $C_{VV}, C_{PV}$  - то же для паров конденсирующегося вещества,  $C_{Vmixt}, C_{Pmixt}$  - то же для двухфазной смеси,  $C_l$  - удельная теплоемкость жидкости.  $R_a, R_v, R_{mixt}$  - газовые постоянные несущего газа, паров конденсирующегося вещества и двухфазной смеси,  $\gamma_f$  - показатель адиабаты смеси.

Калорическое и термическое уравнения состояния имеют следующий:

$$T = \frac{(E - u^2 / 2) + \alpha L_0}{(1 - \alpha_{\max})C_{Va} + \alpha_{\max}C_{VV} + \alpha(C_l - C_{VV})} \quad (1.33)$$

$$p = \rho TR_{mixt} \quad (1.34)$$

$$a_f^2 = \gamma_f \frac{p}{\rho} \quad (1.35)$$

$$L = L_1 T + L_0 \quad L_1 = C_{pV} - C_l \quad (1.36)$$

$T$  – температура смеси,  $a_f$  – скорость звука в смеси,  $L$  – удельная теплота парообразования.

Значения коэффициента поверхностного натяжения  $\sigma$ , давление насыщения  $p_s$ , плотность жидкой фазы  $\rho_l$  задаются с помощью параметрических зависимостей от температуры в ПРИЛОЖЕНИИ 1.

### 1.1.6. Расчет коэффициента вязкости

В нашем приближении мы считаем, что вязкость ламинарная и вычисляется при помощи соотношения Сазерленда:

$$\mu_l = \mu_0 \left( \frac{T}{273} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{273 + C}{T + C} \quad (1.37)$$

Где  $\mu_0 = 1.75 \cdot 10^{-5}$  Па\*с – динамическая вязкость для  $T = 273$  К,  $C = 122$  К

## 1.2. Численный метод решения системы Моментных уравнений

Для простоты изложения сначала рассмотрим метод конечного объема первого порядка точности на примере решения системы уравнений одномерной нестационарной газовой динамики, записанной в дивергентной форме:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial (p + \rho u^2)}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial [u(p + E)]}{\partial x} = 0 \end{cases} \quad (1.38)$$

В системе уравнений  $\rho$  – плотность,  $p$  – давление,  $u$  – скорость,  $E$  – полная энергия в единице объема.

Система (1.38) в более компактном виде может быть записана в векторной форме:

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{f}}{\partial x} = 0 \quad (1.39)$$

Где  $\vec{q} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{pmatrix}$  – вектор консервативных переменных;

$\vec{f} = \begin{pmatrix} \rho u \\ p + \rho u^2 \\ u(p + E) \end{pmatrix}$  – вектор потоков;

$\vec{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ p \end{pmatrix}$  – вектор элементарных переменных.

Дифференциальное уравнение в виде (1.39) изменим на новую интегральную форму уравнений, более приспособленную для представления слабого решения. Здесь под слабым решением мы будем понимать обобщенную функцию, определяемую интегральными равенствами,

полученными из соответствующих дифференциальных уравнений, начальных и краевых условий задачи.

Для этого выделим некоторый контрольный объем  $\Omega$ , рис. 1.1, по которому будем вести интегрирование системы (1.39). Применим обобщенную формулу Стокса к полученному интегралу от дивергенции (при двух независимых переменных это будет формула Грина). При этом введем направление обхода контура против часовой стрелки.

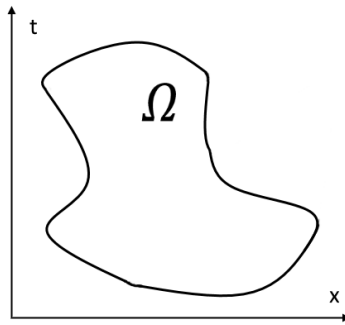


Рис. 1.1 – схема контрольного объема.

Отдельно, рассмотрим уравнение неразрывности, получаем

$$\iint_{\Omega} \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} \right) dx dt = \oint_{\partial \Omega} \rho dx - \rho u dt = 0 \quad (1.40)$$

Для всей системы уравнений

$$\iint_{\Omega} \left( \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} \right) dx dt = 0 \Leftrightarrow \oint_{\Gamma=\partial \Omega} (\vec{q} dx - \vec{f} dt) = 0 \quad (1.41)$$

Таким образом, произведен переход от дифференциальной формы записи исходной системы уравнений к интегральной форме. Интегральная форма записывается в виде равенства нулю интегралов по контуру (границе выделенного контрольного объема) от векторов консервативных переменных и потоков. Контурный интеграл представлен в виде суммы интегралов по

участкам 1-2, 2-3, 3-4, 4-1 контрольного объема на рис. 1.2 и на каждом участке аппроксимируем интеграл с использованием метода прямоугольников как произведение подынтегрального выражения в центре интервала на длину интервала интегрирования:

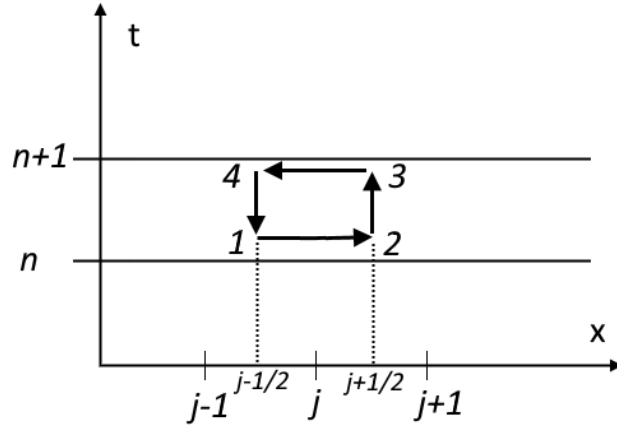


Рис. 1.2 – Схема разностной ячейки

$$\begin{aligned} \vec{q}_{12}(x_2 - x_1) - \vec{f}_{12}(t_2 - t_1) + \vec{q}_{23}(x_3 - x_2) - \vec{f}_{23}(t_3 - t_2) + \vec{q}_{34}(x_4 - x_3) - \\ - \vec{f}_{34}(t_4 - t_3) + \vec{q}_{41}(x_1 - x_4) - \vec{f}_{41}(t_1 - t_4) = 0 \end{aligned} \quad (1.42)$$

Из (2.5) с учетом равенств, справедливых для контрольного объема, построенного по декартовой расчетной сетке

$$x_3 - x_2 = 0, x_1 - x_4 = 0, t_2 - t_1 = 0, t_4 - t_3 = 0, x_2 - x_1 = \Delta x, x_4 - x_3 = \Delta x \quad (1.43)$$

Находим значения вектора консервативных переменных на интервале 3-4, принадлежащем новому слою:

$$\vec{q}_{43} = \vec{q}_{12} - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\vec{f}_{23} - \vec{f}_{14}) \quad (1.44)$$

В других обозначениях, где номер точки (j) – номер слоя (n):

$$\vec{q}_j^{n+1} = \vec{q}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\vec{f}_{j+1/2} - \vec{f}_{j-1/2}) \quad (1.45)$$

Величина с полуцелыми индексами обозначены потоки сохраняемых величин через границы расчетной ячейки за время  $\Delta t$  или потоки через боковые грани (2-3 и 4-1, рис 1.2) контрольного объема. Если скорость потока направлена в одну сторону с внешней нормалью к боковой грани, то поток отрицательный, значит, вытекает из контрольного объема, и наоборот.

Записывая систему (1.37) в развернутом виде, получаем систему разностных уравнений:

$$\begin{aligned}\rho_j^{n+1} &= \rho_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [(\rho u)_{j+1/2} - (\rho u)_{j-1/2}], \\ (\rho u)_j^{n+1} &= (\rho u)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ (p + \rho u^2)_{j+1/2} - (p + \rho u^2)_{j-1/2} \right], \\ E_j^{n+1} &= E_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left\{ [u(p + E)]_{j+1/2} - [u(p + E)]_{j-1/2} \right\}.\end{aligned}\tag{1.46}$$

Потоки через боковые грани  $\vec{f}_{j+1/2}, \vec{f}_{j-1/2}$  определяется из решения задачи о распаде произвольного разрыва (задача Римана).

Для решения задачи Римана воспользуемся численными методами типа Годунова: метод Хартена-Лакса-ван Лира или HLL (Hartex, Lax, van Leer, 1983), а также его модификацией HLLC (Toro, Spruce, Speares, 1994).

Для решения двумерных уравнений газовой динамики рассматривают, вместо потока через границы поток через грани ячейки. В интегральной форме система уравнений газовой динамики (1.38) без вязких составляющих будет иметь следующий вид

$$\oiint Q dx dy + F dy dt + G dt dx = 0\tag{1.47}$$

Интегрирование осуществляется по любой замкнутой поверхности, гомеоморфной сфере в трехмерном пространстве  $x, y, t$ . Интегралы в формуле (2.10) следует понимать, как поверхностные интегралы второго типа, т. е. как интегралы по ориентированной поверхности.



Рассмотрим ячейку с номером  $(i, j)$  для двух временных слоев (рис. 1.3) Грань  $1'2'3'4'$  ячейка на временном слое  $t = t_0$ ,  $1''2''3''4''$  на временном слое  $t = t_0 + \tau$ .

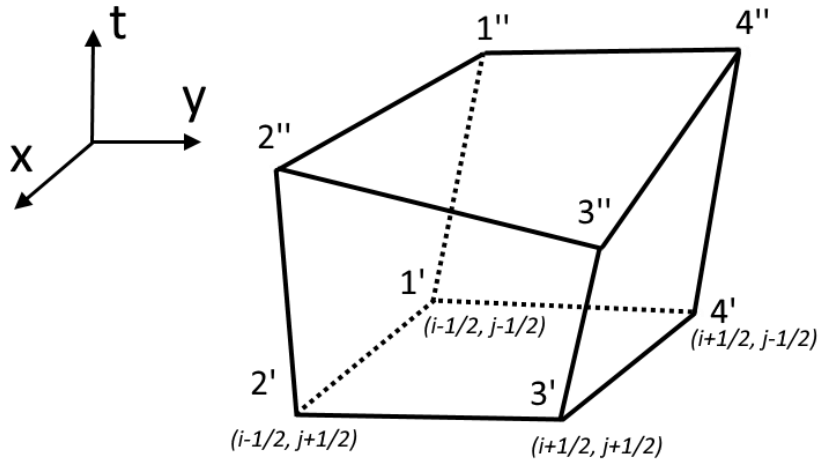


Рис. 1.3 - Многогранник преобразования координат ячейки расчетной области по временному слою.

Значения на боковых гранях на промежутке времени от  $t_0$  до  $t_0 + \tau$  примем постоянными. Так как плоскость в пространстве задается только тремя точками, в общем случае грани многоугольника  $1'2'3'4'1''2''3''4''$  не плоские.

В результате интегрирования боковых граней многоугольника  $1'2'3'4'1''2''3''4''$  получим следующее уравнение:

$$Q^{ij}\Omega^{ij} = Q_{ij}\Omega_{ij} - Q_{i+1/2j} - Q_{i-1/2j} - Q_{ij+1/2} - Q_{ij-1/2}. \quad (1.48)$$

Верхние индексы в формуле обозначают значения переменных на новом слое, нижние – на старом. Величины  $\Omega^{ij}$  и  $\Omega_{ij}$  – это площади основания на новом и старом временном слоях. Величины  $Q_{i+1/2j}$ ,  $Q_{i-1/2j}$ ,  $Q_{ij+1/2}$ ,  $Q_{ij-1/2}$  представляют из себя потоки массы через боковые грани многоугольника  $1'2'3'4'1''2''3''4''$ . Процедуру вычисления потоков рассмотрим на примере грани  $(i, j + 1/2)$ .

$$Q_{i,j+1/2} = Q_{i,j+1/2}\Omega_{i,j+1/2} + F_{i,j+1/2}\Phi_{i,j+1/2} + G_{i,j+1/2}\Psi_{i,j+1/2} \quad (1.49)$$

В полученном выражении величины  $\Omega_{i,j+1/2}$ ,  $\Phi_{i,j+1/2}$  и  $\Psi_{i,j+1/2}$  это проекции боковой грани на плоскости  $XY$ ,  $YT$  и  $XT$  соответственно [101]. Для расчета потока через грань необходимо знать величины  $Q_{i,j+1/2}$ ,  $F_{i,j+1/2}$  и  $G_{i,j+1/2}$ , которые определяются по значениям примитивных переменных на границе раздела ячеек, поиск которых осуществляется с помощью решения задачи Римана (Riemann problem) или, как ее еще называют, задачи распада разрыва (ЗРР).

Для решения задачи Римана для ускорения расчетов часто используют приближенные методы, к примеру, AUSM, AUSM+ и прочие модификации [102,103], Roe [104], HLL [105] и другие. Однако иногда есть необходимость в точном решении ЗРР, способ поиска которого предложил Годунов [101]. Метод Годунова решения ЗРР итерационный и очень требователен к вычислительным ресурсам, но он позволяет решить задачу Римана с наперед заданной точностью.

## 1.2.1 Решение задачи Римана.

### 1.2.1.1 Метод HLL

Для вычисления потока в задаче Римана, Harten, Lax и van Leer представили новый подход приближенного решения задачи Римана, основанный на определении значения вектора  $q$  между левой  $S_L$  и правой  $S_R$  характеристикой газодинамической части уравнений.

$$q(x,t) = \begin{cases} q_L & , \text{если } \frac{x}{t} \leq S_L \\ q^{HLL} & , \text{если } S_L \leq \frac{x}{t} \leq S_R \\ q_R & , \text{если } \frac{x}{t} \geq S_R \end{cases} \quad (1.50)$$

Если скорость движения грани попадает в интервал  $(S_L, S_R)$ , тогда мы рассчитываем значение  $q^{HLL}$ . В противном случае мы берем левые или правые значения консервативных переменных  $q$  в зависимости от того в какой интервал попадает скорость движения грани (рис. 1.4).

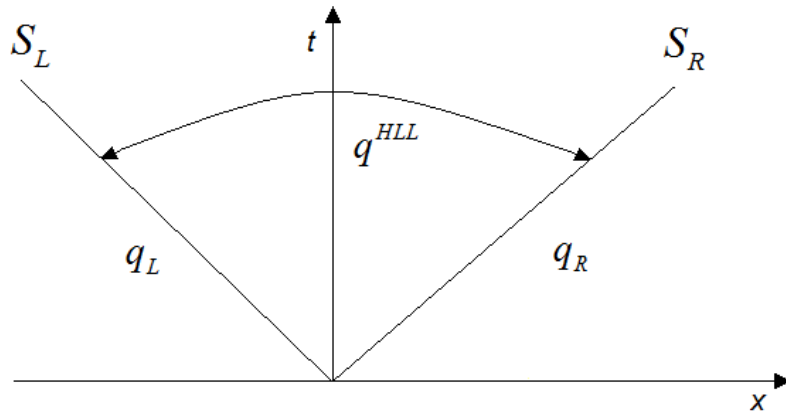


Рис. 1.4 – HLL аппроксимация задачи Римана.

Где  $q^{HLL}$  получается из

$$q^{HLL} = \frac{S_R q_R - S_L q_L + f_L - f_R}{S_R - S_L} \quad (1.51)$$

Характеристики  $S_R$  и  $S_L$  известны.

$$\begin{aligned} S_L &= \min(u_L - a_L, u_R - a_R), \\ S_R &= \min(u_L + a_L, u_R + a_R), \\ a &= \sqrt{\frac{\gamma P}{\rho}}. \end{aligned} \quad (1.52)$$

Аппроксимация состоит из трех постоянных состояний, разделенных на два волны. Поток HLL равен:

$$f^{hll} = \frac{S_R f_L - S_L f_R + S_L S_R (q_R - q_L)}{S_R - S_L} \quad (1.53)$$

Соответствующий поток для приближенного метода:

$$f_{j+1/2}^{hll} = \begin{cases} f_L & , \text{если } 0 \leq S_L \\ \frac{S_R f_L - S_L f_R + S_L S_R (q_R - q_L)}{S_R - S_L} & , \text{если } S_L \leq 0 \leq S_R \\ f_R & , \text{если } 0 \geq S_R \end{cases} \quad (1.54)$$

Такой подход позволяет сэкономить время для решения ЗРР, однако такой подход понижает точность решения уравнения.

Метод HLL дополнительно удобен тем, что он легко может быть применен к системе моментных уравнений путем изменения значений вектора потоков и вектора консервативных переменных на значения большей размерности.

### 1.2.1.2 Метод AUSM+

Система уравнений (1) - (15) решается явным методом контрольного объема второго порядка точности по пространству, при этом для аппроксимации невязких потоков используется схема Годунова совместно с приближенным методом AUSM+ решения задачи Римана, для аппроксимации вязких потоков используются центрально-разностная аппроксимация.

Потоки в методе AUSM+ разделяется на два потока: поток массы и поток давления:

$$F_{i+1/2} = \frac{\dot{m} + |\dot{m}|}{2} \Psi^+ + \frac{\dot{m} - |\dot{m}|}{2} \Psi^- + \tilde{p}N, \quad (1.55)$$

$$\Psi = (1 \quad u \quad v \quad E \quad Q_0 \quad Q_1 \quad Q_2 \quad \alpha \quad \alpha_{\max})^T, \quad (1.56)$$

$$N = (0 \quad n_x \quad n_y \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0)^T. \quad (1.57)$$

Индексы  $L$  и  $R$  введены для левой и правой ячеек соответственно.

Поток массы:

$$\dot{m} = M_{1/2} a_{1/2} \begin{cases} \rho_L, & M_{1/2} > 0, \\ \rho_R, & M_{1/2} \leq 0. \end{cases} \quad (1.58)$$

$$M_{1/2} = M^+ + M^- + M_p, \quad (1.59)$$

$$M^\pm = \begin{cases} \frac{1}{2}(M \pm |M|), & |M| \geq 1, \\ \pm \frac{1}{4}(M \pm 1)^2 \pm \frac{1}{8}(M^2 - 1)^2, & |M| < 1. \end{cases} \quad (1.60)$$

$$M_p = -K_p \max(1 - \sigma \frac{M_L^2 + M_R^2}{2}, 0) \cdot \frac{P_R - P_L}{\frac{\rho_R + \rho_L}{2} \cdot a_{1/2}} \quad (1.61)$$

$$a_{1/2} = \min(\tilde{C}_L, \tilde{C}_R) \quad (1.62)$$

$$\tilde{C}_{L,R} = \frac{C_{L,R}^2}{\max(C_{L,R}, |U_{L,R}|)} \quad (1.63)$$

$$C_{L,R} = 2 \frac{\gamma_{L,R} - 1}{\gamma_{L,R} + 1} \left( E_{L,R} + \frac{P_{L,R}}{\rho_{L,R}} \right) \quad (1.64)$$

Поток давления:

$$\tilde{p} = P^+ \Big|_{\alpha} \cdot P_L + P^- \Big|_{\alpha} \cdot P_R + P_u, \quad (1.65)$$

$$P^\pm = \begin{cases} \frac{1}{2}(1 \pm \text{sign}(M)), & |M| \geq 1, \\ \frac{1}{4}(M \pm 1)^2 (2 \mp M) \pm \alpha M (M^2 - 1)^2, & |M| < 1. \end{cases} \quad (1.66)$$

$$P_u = -K_u \cdot P^+ \cdot P^- \cdot \frac{\rho_L + \rho_R}{2} \cdot a_{1/2} \cdot (U_R - U_L) \quad (1.67)$$

Коэффициенты для решения ЗРР равны  $K_p = 0.25$ ,  $\sigma = 1$ ,  $K_u = 0.025$ ,  $\alpha = 3/16$ .

### 1.2.2 Аппроксимация вязких составляющих

Газодинамическую составляющую уравнений Навье-Стокса мы решали с помощью метода Годунова, однако для аппроксимации вязких членов уравнения Навье-Стокса нами использовался аналог центрально разностной схемы. Рассмотрим течение потока через  $(i, j)$  грань, изображенную на рисунок 1.7. Стрелочками схематически изображены направления потоков через грань.

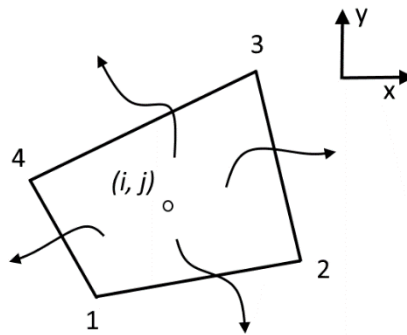


Рис. 1.7 –  $(i, j)$  ячейка расчетной области.

Рассмотрим, к примеру, аппроксимацию вязких составляющих для потока через грань 34. Для того, чтобы получить напряжения и рассчитать тепловые потоки через эту грань нам необходимо знать значения производных примитивных переменных в центре грани. Для производной по  $X$  в этой грани

мы используем шаблон, изображенный на рисунке 1.8 а), для поиска производной по  $Y$  используем шаблон, изображенный на рисунке 1.8. б).

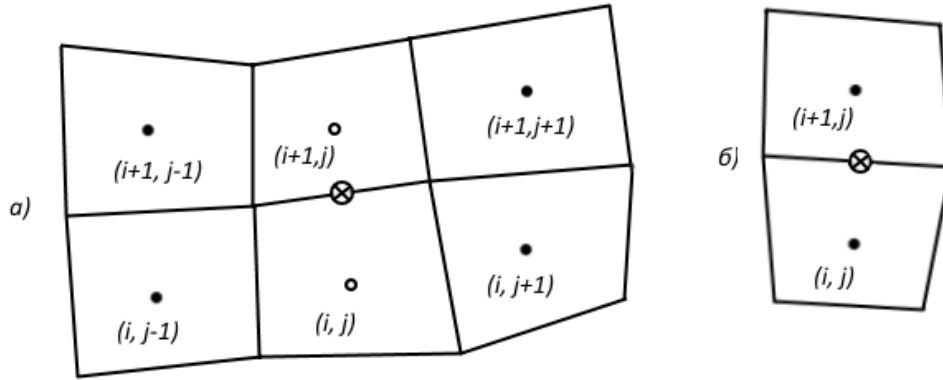


Рис. 1.8 – шаблоны вычисления производной

Таким образом подсчет производной примитивной переменной  $f$  по  $X$  будет производиться по следующей формуле

$$\frac{\partial f_{ij}}{\partial x} = \frac{1}{2} \left( \frac{f_{i+1,j-1} - f_{i+1,j+1}}{x_{i+1,j-1} - x_{i+1,j+1}} + \frac{f_{i,j-1} - f_{i,j+1}}{x_{i,j-1} - x_{i,j+1}} \right), \quad (1.68)$$

Для расчета производной по направлению  $Y$  используется следующее выражение

$$\frac{\partial f_{ij}}{\partial y} = \frac{f_{i+1,j} - f_{i,j}}{y_{i+1,j} - y_{i,j}}. \quad (1.69)$$

Расчет производной для грани 12 ищется аналогичным образом. Для производных на гранях 23 и 41 шаблоны меняются. В случае расчета производных вдоль этих граней производная по  $Y$  будет вычисляться по шаблону а) , а производная по  $X$  по шаблону б).

### 1.2.3 Вычислительная сетка и методы ее адаптации

Часто в расчетах возникают области интереса в которых хотелось бы иметь сетку содержащую большее количество ячеек для лучшего разрешения

взаимодействий потоков. Качественная сетка должна удовлетворять некоторым необходимым условиям: она должна плавно изменяться, быть близка к ортогональной, и локальные отношения сторон должны быть близки к единице. Для построения сетки использовались алгебраические отображения и служение путем построения геометрической прогрессии.

### 1.2.3.1 Алгебраические отображения

При вязком обтекании тела часто необходимо сгущать сетку вблизи обтекаемой поверхности для примера возьмем тело, изображенное на рисунке 1.9. Опишем сгущение сетки к одной из стенок.

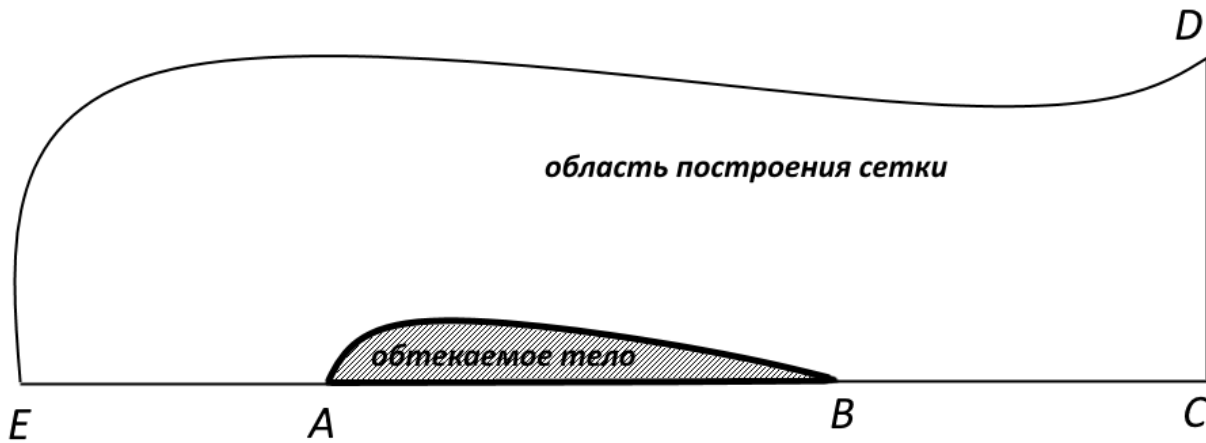


Рисунок 1.9 – пояснительный рисунок к методике построения сетки

Введем величину  $\eta^*$ , которая определяется следующим соотношением

$$\eta^* = \frac{\eta - \eta_A}{\eta_E - \eta_A}, \quad (1.70)$$

Где  $\eta_A$  и  $\eta_E$  это координаты поверхности, к которой сгущается сетка, и области, начиная с которой сетка сгущается,  $\eta$  – это текущая координата. Для определения координат необходимо определить величину  $s$ .

$$s = P\eta^* + (1 - P) \left( 1 - \frac{\text{th}[Q(1 - \eta^*)]}{\text{th}Q} \right), \quad (1.71)$$



Где  $P$  и  $Q$  – параметры, обеспечивающие контроль распределения точек сетки.  $P$  определяет наклон распределения вблизи поверхности сгущения,  $Q$  определяет отклонение от линейной зависимости  $s$  от  $\eta^*$ . Новые координаты могут быть получены из следующих соотношений.

$$\frac{x - x_A}{x_E - x_A} = s, \quad \frac{y - y_A}{y_E - y_A} = s \quad (1.72)$$

Сетка сгущалась к левому и правому краю колеблющейся пластины. На рис. 1.10 изображен фрагмент сетки у левого края колеблющейся пластины. Видно, что сгущение происходит равномерно как по направлению  $X$ , так и по направлению  $Y$

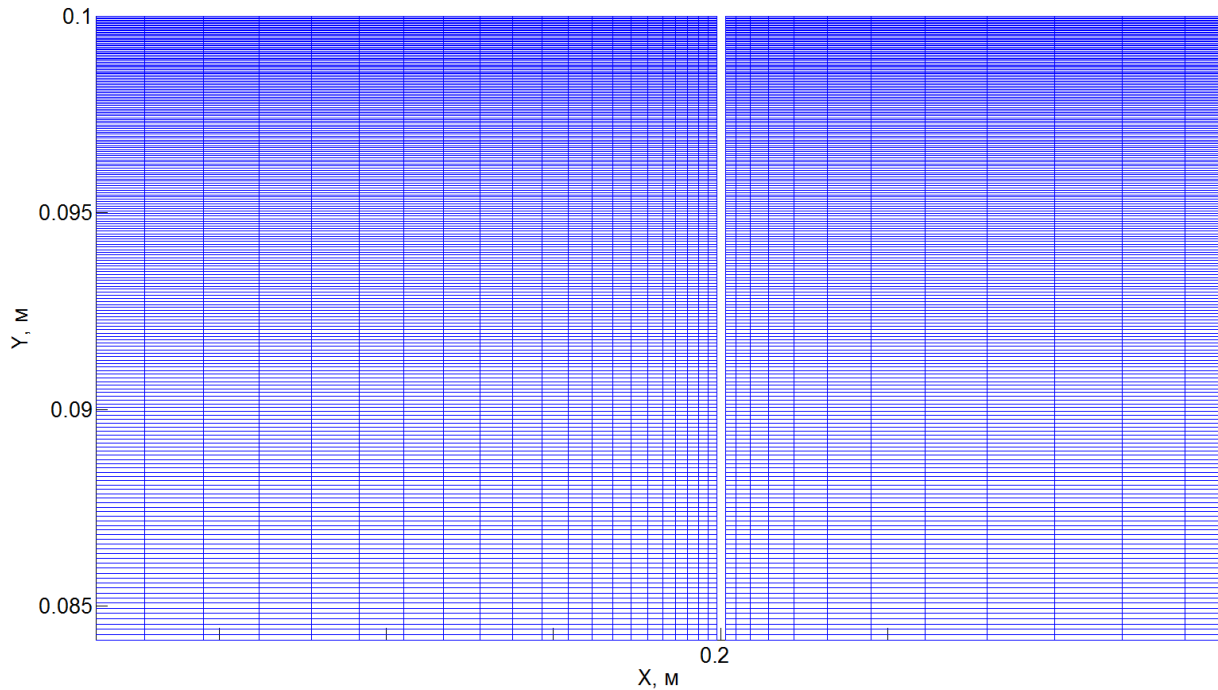


Рисунок 1.10 – Адаптация(сгущение) сетки к левому краю пластины.

### 1.2.3.2 Адаптация сетки с помощью геометрической прогрессии

Для адаптации сетки к пограничным слоям используется геометрическая прогрессия. Такой метод очень удобно использовать для сгущения сетки в пограничном слое. Сгущение происходит плавно, а соседние ячейки мало

отличаются друг от друга в размере, что позволяет производить более стабильные расчеты.

Каждый элемент сгущаемой сетки может быть найден с помощью простого соотношения:

$$x_i = x_0 + (x_n - x_0) \frac{k^i - 1}{k^n - 1} \quad (1.73)$$

Где  $x$  – это любая сгущаемая координата,  $k$  - коэффициент сгущения,  $n$  – общее количество координат в данном направлении,  $x_0$  - начальная координата,  $x_i$  - текущая координата, для которой вычисляется значение.

Пример сгущения сетки в сопле представлен на рисунке 1.11

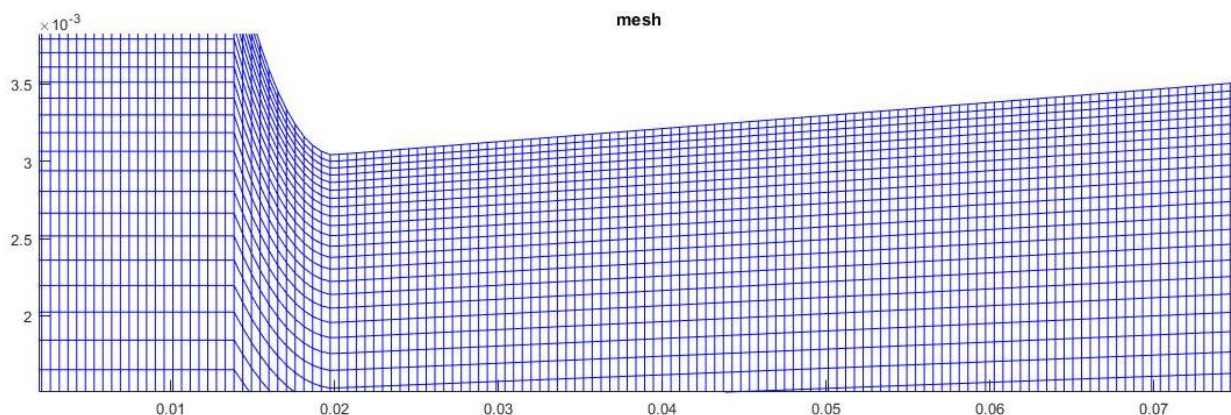


Рисунок 1.11. Пример расчетной сетки со сгущением путем геометрической прогрессии к верхней границе в сопле.

С целью валидации и верификации реализованного численного алгоритма решения одномерных и двумерных газодинамических задач были проведены многочисленные расчеты параметров течений газовых сред в ударных трубах, каналах, соплах и струях.

## 2. ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГОМОГЕННОЙ КОНДЕНСАЦИИ В ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ПОТОКАХ

В настоящее время существует значительное количество работ, в которых экспериментально [94, 70, 18, 19, 21, 22, 29] и численно рассматриваются течения с конденсацией в соплах [44, 50, 51, 62, 95, 115, 65, 66, 69, 72-74, 76-90], в межлопаточных промежутках турбин и вентиляторов [68, 70, 76, 75], в эжекторах [107, 112, 66, 69, 27], в каналах технологических устройств [56, 99, 108, 23-26] и струях [95].

### 2.1 Гомогенная конденсация в ударных трубах

Для изучения поведения конденсации в веере волн разрежения, возникающем в процессе распада разрыва в ударной трубе был разработан специальный тест.

Рассматривается начальная стадия течения, возникающего после разрыва мембраны в плоской ударной трубе (рисунок 2.1). Труба имеет длину в 1 метр, заполнена влажным азотом, мембрана расположена точно посередине, давление в камере высокого давления  $p_4 = 1.0$  бар, влажность  $S_4 = 0.82$ . В камере низкого давления  $p_1 = 0.3$  бар, влажность  $S_1 = 0.246$ . Температура везде  $T_1 = T_4 = 295\text{K}$ . Массовая доля водяного пара  $\alpha_{\max}$  в обеих камерах трубы в начале процесса составляет примерно 0.013744.

Расчет выполнялся с помощью алгоритма, реализующего метод моментов на равномерной расчетной сетке  $N = 1000$  ячеек ( $dx = 1/N$  м), с шагом по времени  $dt = 0.0005dx$  до момента времени  $t = 0.001$  с.

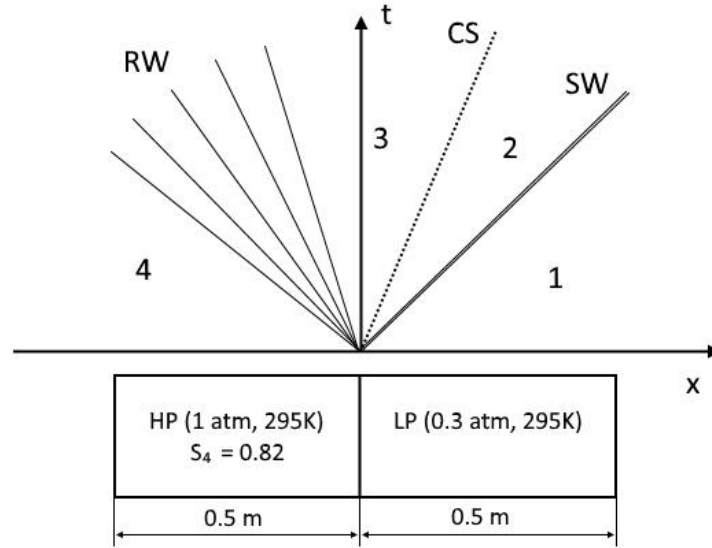


Рисунок 2.1. X-t диаграмма течения в ударной трубе.

На рисунке 2.1 изображена X-t диаграмма течения в ударной трубе возникающая в результате распада начального разрыва. В область камеры высокого давления распространяется веер волн разрежения (RW), в область камеры низкого давления – ударная волна (SW) и контактный разрыв (CS). Падение температуры в области распространения волн разрежения (RW) и, особенно, в области 3 (рисунок 1) приводит к появлению перенасыщения. Происходит образование кластеров и их рост с выделением теплоты конденсации. Наиболее активно процесс конденсации протекает вблизи замыкающей характеристики второго семейства веера RW в области 3. При этом траектории газа, исходящие из области, лежащей немного левее точки начального разрыва, практически мгновенно попадают в зону сильного разрежения и низких температур 3 (рисунок 1), что приводит к изменению параметров слева от контактного разрыва и формированию в начальный период времени в зоне между RW и CS веера волн сжатия, переходящего в ударную волну рисунок 2.2 а, б.

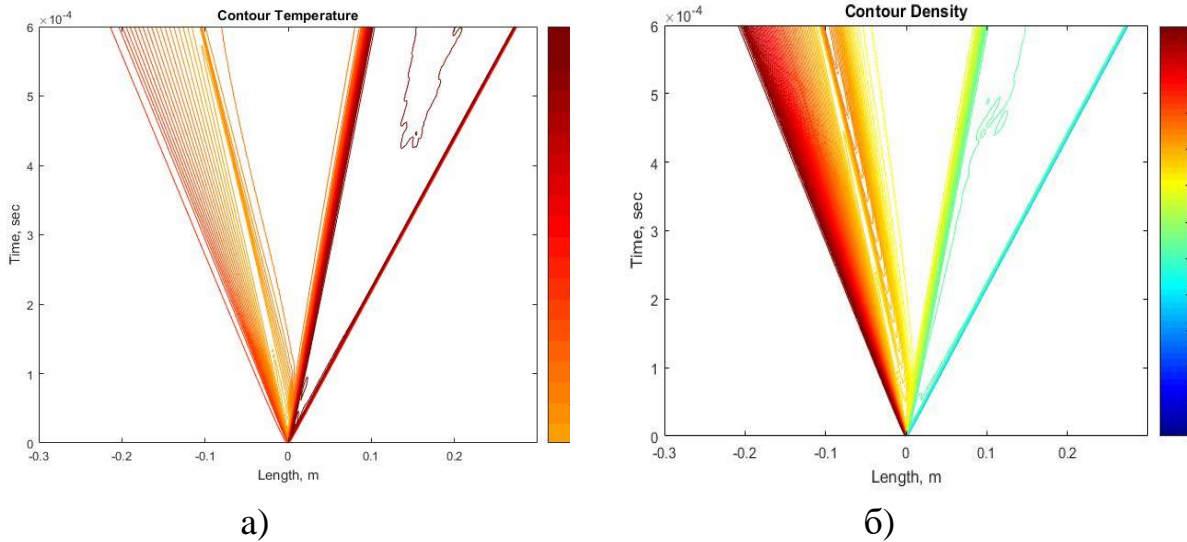


Рисунок 2.2. Изолинии поля температуры (а) и плотности (б)

На рисунке 2.3 показаны распределения давления вдоль трубы для адиабатического течения (синяя линия) и течения с конденсацией (красная линия). Видно резкое повышение давления в скачке конденсации в конце веера RW, а также небольшое повышение давления в зонах 3 и 2 (рисунок 2.1) по сравнению с адиабатическим случаем, что приводит к небольшому увеличению скорости ударной волны.

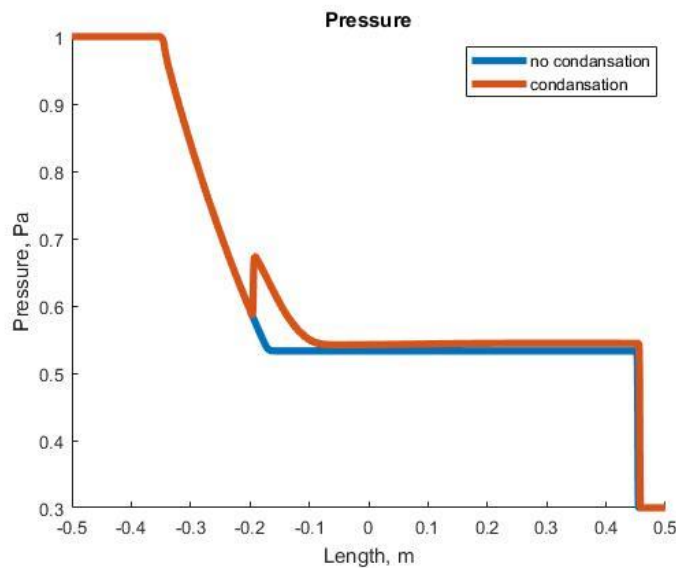


Рисунок 2.3. Распределение давления в момент  $t = 10^{-3}$  с.

Синяя линия - адиабатическое течение. Красная линия - течение с конденсацией. Такое бурное проявления конденсации произошло в результате значения параметра  $\beta = 1$  в формуле для скорости роста капли. Если значение  $\beta$  будет меньше то в тесте конденсация будет происходить менее интенсивно и как следствие скачок конденсации будет менее заметен.

## 2.2 Гомогенная конденсация (кластерообразование) в соплах

### 2.2.1 Физическая картина процесса гомогенной конденсации пара при адиабатическом расширении

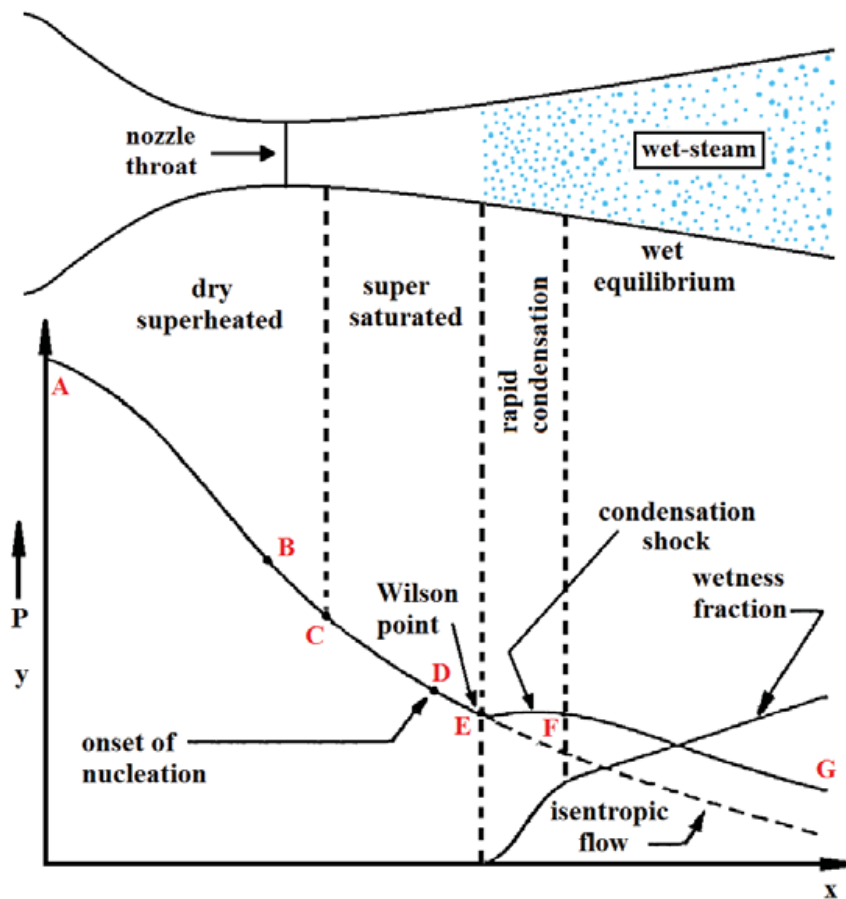


Рисунок 2.4 Схема гомогенной конденсации в сверхзвуковом сопле Лавалья [83]

Непрерывное адиабатическое расширение пара, конденсирующегося газа или смеси пара и несущего инертного газа встречается при течении в

соплах, в последних ступенях турбин на начальных участках недорасширенных струй. При этом температура парогазовой среды существенно снижается из-за быстрого расширения, пар сначала переохлаждается, и образуются зародыши мелких капель. Эта смесь пара и мелкодисперсных капель воды называется «влажным паром». Типичный процесс конденсации в соплах и паровых турбинах можно разделить на два типа: гомогенный и гетерогенный. Гомогенная конденсация происходит спонтанно и при отсутствии чужеродных центров конденсации (зародышей). Гетерогенная конденсация в основном происходит из-за посторонних (нерастворимых или растворимых) примесей в парогазовой среде. В потоках в паровой турбине гомогенная конденсация более значима, чем гетерогенная конденсация [85].

На рисунке 2.4 показана схема гомогенной конденсации паров воды в сверхзвуковом сопле. На входе в сопло поступает сухой (без капель) и перегретый (точка *A*) пар. В процессе движения вдоль сопла слева направо пар все время расширяется, ускоряется и охлаждается. В критическом сечении сопла (точка *B*) парогазовая среда достигает звуковой скорости и в области правее точки *B* распространяется со сверхзвуковой скоростью. В точке *C* парциальное давление пара становится равным давлению насыщенных паров (то есть при данной температуре пересекаются кривые адиабатического расширения пара и кривая насыщения). Пар становится переохлажденным или перенасыщенным. Однако пар остается сухим в течение некоторого промежутка времени (область между точками *C* и *D*). Состояние среды в данном промежутке, которое называется метастабильным (термодинамически неустойчивым), продолжается до тех пор, пока пересыщение не станет достаточно высоким и тогда начинается процесс зародышеобразования (нуклеации) со значительной скоростью. На рисунке 2.4 процесс образования

зародышей новой фазы (нуклеации) начинается в точке  $D$ . Нуклеация в сопле генерирует огромное количество капель субнанометрового размера ( $10^{17}$ – $10^{18}$  ядер на кг пара) [84]. При некотором значительном уровне переохлаждения (например, в точке  $E$ ) процесс нуклеации прекращается. Точка  $E$  называется точкой Вильсона. Зона между точкой  $D$  и точкой  $E$  известна как область нуклеации. Образующиеся капли жидкости быстро увеличиваются в размерах за счет процесса конденсации, и масса жидкой фазы быстро растет. Процесс конденсации сопровождается выделением скрытой теплоты конденсации (парообразования) в окружающую газовую (паровую) фазу. Скорость тепловыделения при быстрой конденсации довольно высока, и, как следствие этого происходит резкое увеличение температуры и давления пара (от точки  $E$  до точки  $F$ ). Это повышение давления в отечественной литературе называется скачком конденсации. После точки  $F$  пар возвращается в состояние термодинамического равновесия, в котором температура пара и капля остается близкой к уровню насыщения до точки  $G$ .

### 2.2.2 Валидация модели гомогенной конденсации

Течение газа в межлопаточных зазорах ступеней турбин газодинамически соответствует течению газа в плоском сопле, вследствие этого часто экспериментальные исследования основных закономерностей процесса конденсации выполнялись для плоских сверхзвуковых и звуковых сопел.

Поэтому валидационные и верификационные исследования алгоритмов расчета конденсационных процессов в газодинамических потоках проводятся для случая течения в соплах.

Моделируются условия эксперимента из работы [51]. Рассчитывается конденсация паров воды в азоте при течении в плоском сопле (рисунок 2.5).



Давление в ресивере считалось равным 60000 Па, температура 287 К, парциальное давление паров воды в ресивере 1000 Па (массовая доля паров воды  $\alpha_{\max} = 0.11$  ). Начало системы координат располагается в центре критического сечения сопла.

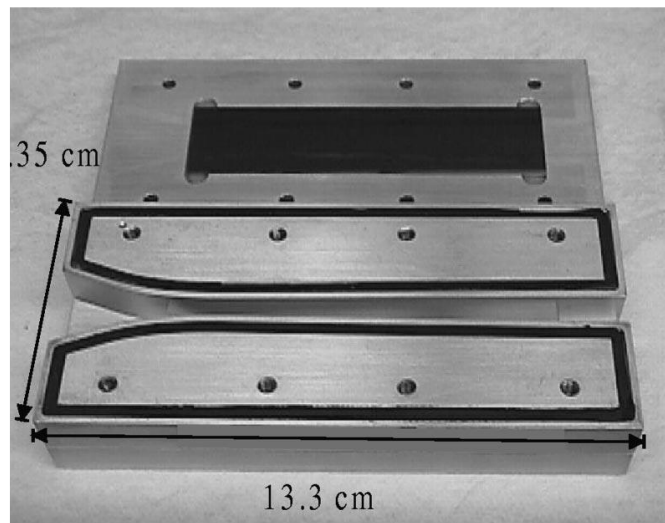


Рисунок 2.5. Экспериментальное сопло

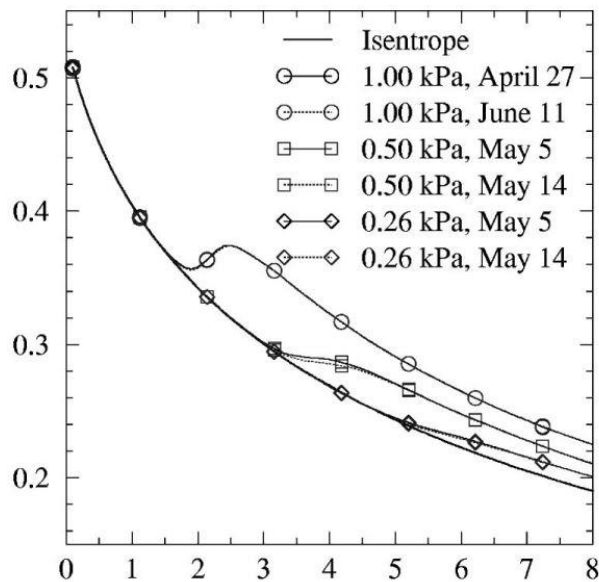
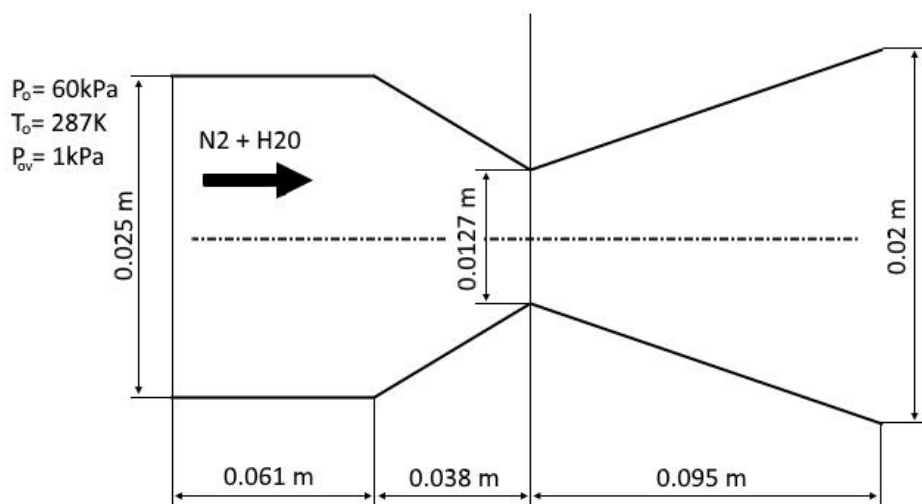


Рис. 2.6 Результаты физического эксперимента [51]. Зависимость давления в центре сверхзвуковой части сопла (статическое давление отнесено к давлению в ресивере) от расстояния от критического сечения в см.

Геометрия сопла и его расчетная схема приведена на рисунке 2.7. Все размеры указаны в метрах.



Рисунки 2.7. Расчетная схема плоского сопла

Для проведения еще и кроссверификационных расчетов конденсация при течение в данном сопле рассчитывалась двумя методами: - с помощью кинетического метода [87] (расчетное исследование выполнил Гидаспов В.Ю.) и с помощью моментного метода развитого в данной работе. Так как углы раствора сверхзвуковой части малы (рисунок 2.7) и течение в сопле имеет практически одномерный характер, то возможно использовать квазиодномерную модель газодинамического течения.

#### 2.2.2.1 Расчет с помощью кинетического метода.

В данном разделе приводится анализ результатов расчета квазиодномерного течения в сопле с помощью кинетического метода [87-89]. На рисунке 2.8 приводится рассчитанная  $p$ - $T$  диаграмма процесса, где синяя линия соответствует кривой зависимость давления насыщенного пара от температуры, а красная кривая - парциальному давлению паров воды вдоль

траектории движения газовой смеси в сопле. В начале процесса при  $T=287\text{ К}$  парциальное давление паров воды чуть ниже давления насыщения (влажность азота более 80%). Начальный участок красной кривой соответствует изэнтропическому расширению газовой смеси при течении вдоль оси сопла. По мере расширения газа в сопле и его охлаждения возникает состояние перенасыщения (переохлаждения) пара, которое “снимается” в результате возникновения спонтанной конденсации в районе точки “Вильсона”  $T \approx 220\text{ К}$ .

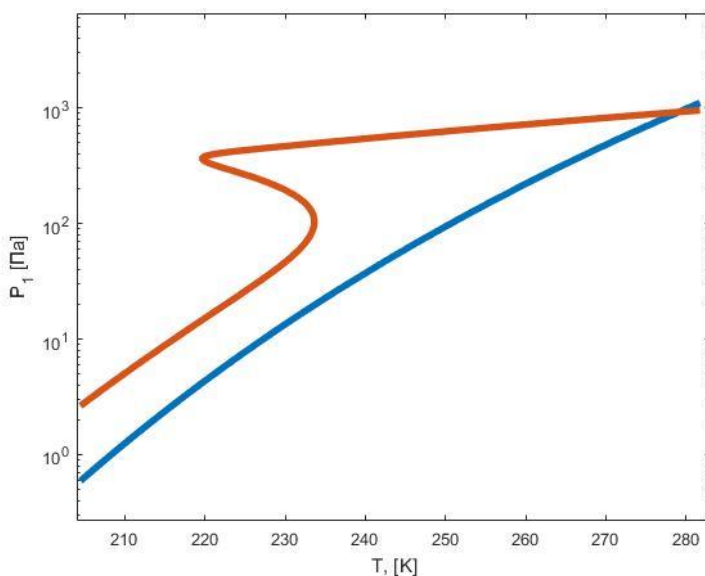


Рисунок 2.8. P-T диаграмма процесса конденсации в сопле [51]

В результате возникает много центров конденсации и рост кластеров с выделением тепла конденсации, что приводит к падению парциального давления паров воды, сближению кривых и переходу процесса конденсации в равновесную стадию.

На рисунке 2.9 представлено сравнение распределения давления в сопле с экспериментальными данными из [51]. Символы (кружки и квадраты) соответствуют экспериментально измеренному на стенке сопла давлению в адиабатическом (без конденсации) течении и течении с конденсацией.

Пунктирная линия соответствует результатам расчета адиабатического течения, сплошная линия – расчету течения с конденсацией с помощью кинетического подхода.

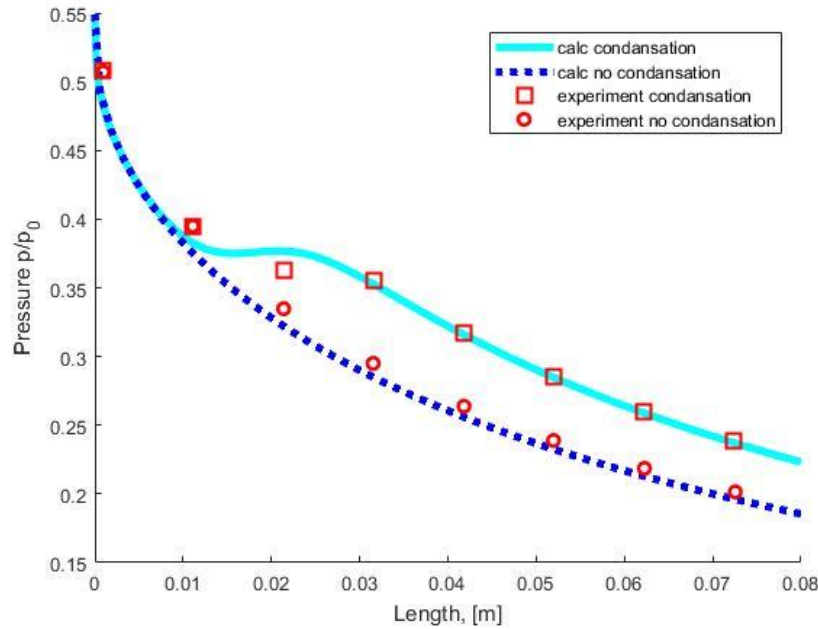
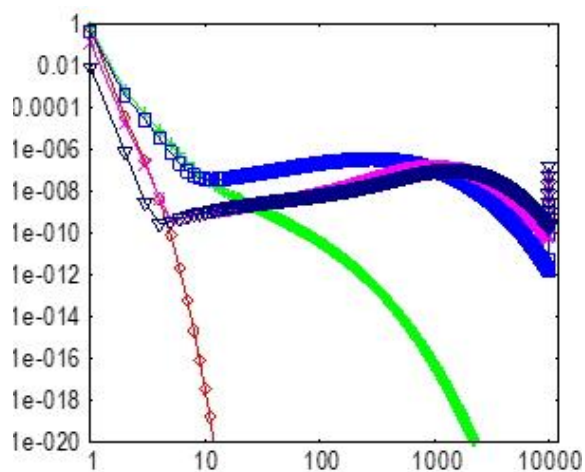
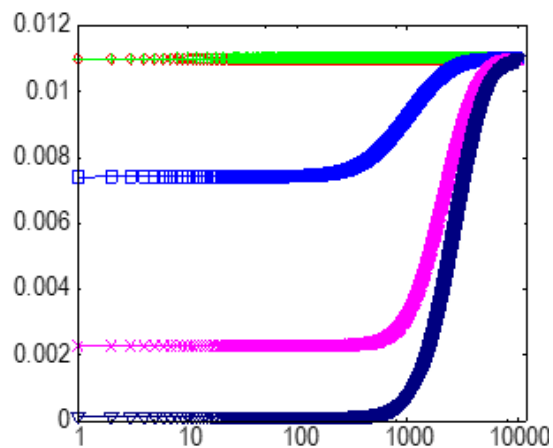


Рисунок 2.9. Распределение давления на стенке сопла. Круги – эксперимент [51], адиабатическое течение, квадраты – эксперимент, течение с конденсацией. Пунктирная линия – расчет адиабатического течения, сплошные линии – расчет течения с конденсацией с помощью кинетического подхода.

На рисунке 2.10а показана динамика изменения функции распределения кластеров по размерам. На рисунке 2.10б массовая доля воды, заключенная в кластерах размером от 1 –ого до  $i$ .



а



б

Рисунок 2.10. а) Функция распределения кластеров воды по размерам, (по оси абсцисс – число молекул в кластере, по оси ординат – число молей вещества данных кластеров в кг смеси  $\gamma_i$ , моль/кг), б) Масса воды, заключенная в кластерах размером от 1 до  $i$  отнесенная к массе смеси в кубическом метре, (по оси абсцисс – число молекул в кластере).

Можно отметить, что процесс конденсации начал влиять на макропараметры смеси в одном сантиметре от критики (рисунок 2.9). В 0.018 метрах от критики в мономерах содержится более 70 % массы, 30 % содержится в кластерах размером от 100 до 1000 молекул (рисунок 2.10б). При  $x=0.032$  м в мономерах содержится около 20 % массы воды, 80 % в кластерах размером более 800 молекул (рисунок 2.10б). Несмотря на то, что на первый взгляд функции распределения при 0.032 м и 0.090 м от критики отличаются слабо (рисунок 2.10а), тем не менее мономеров воды остается около 2% по массе, остальные молекулы воды содержатся в кластерах размером более 900 молекул. Большие кластеры растут за счет падения концентрации кластеров размером от 1 до 10 молекул, при практически неизменных концентрациях кластеров размером 10 – 800 молекул. На рисунке 2.10а, б пространственные координаты, которым соответствуют графики функции распределения кластеров по размерам и массовые доли кластеров: красная линия –  $x=0.0004$

м, зеленая –  $x=0.0018$ м, голубая –  $x=0.018$  м, оранжевая –  $x= 0.032$ м, синяя –  $x=0.09$  м.

### 2.2.2.2 Расчет с помощью моментного метода и квазиодномерной модели.

Задача о течении влажного азота в плоском сопле из [51] решена с помощью моментного метода, реализованного в случае квазиодномерного течения. Система уравнений квазиодномерной модели:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = -\frac{F'_x}{F} \rho u \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial p + \rho u^2}{\partial x} = -\frac{F'_x}{F} \rho u^2 \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial u(\rho E + p)}{\partial x} = -\frac{F'_x}{F} u(\rho E + p) \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial \rho Q_0}{\partial t} + \frac{\partial \rho u Q_0}{\partial x} = -\frac{F'_x}{F} \rho u Q_0 + J \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial \rho Q_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho u Q_1}{\partial x} = -\frac{F'_x}{F} \rho u Q_1 + Jr_* + \frac{dr}{dt} \rho Q_0 \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial \rho Q_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho u Q_2}{\partial x} = -\frac{F'_x}{F} \rho u Q_2 + Jr_*^2 + 2 \frac{dr}{dt} \rho Q_1 \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial \rho \alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho u \alpha}{\partial x} = -\frac{F'_x}{F} \rho u \alpha + \frac{4\pi}{3} \rho_1 (Jr_*^3 + 3 \frac{dr}{dt} \rho Q_2) \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial \rho \alpha_{\max}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u \alpha_{\max}}{\partial x} = -\frac{F'_x}{F} \rho u \alpha_{\max} \quad (2.8)$$

где  $F(x)$  – площадь поперечного сечения канала (сопла).

На рисунке 2.11 представлено сравнение распределения давления в сопле с экспериментальными данными из [51]. Символы (кружки и квадраты) соответствуют экспериментально измеренному на стенке сопла давлению в адиабатическом (без конденсации) течении и течении с конденсацией.

Пунктирная линия соответствует результатам расчета адиабатического течения, сплошная линия – расчету течения с конденсацией с помощью моментного метода.

На рисунке 9 представлено распределение вдоль сверхзвуковой части сопла массовой доли жидкой воды  $\alpha$ , на рисунок 2.13 – скорость нуклеации  $J$ , на рисунке 2.14 - общая концентрация кластеров (капель) воды  $Q_0$ , на рисунке 2.15 средний радиус кластера (капли)  $r_{hill}$  (1.24). Из расчетов конденсации в сопле по методу моментов следует, что нуклеация (образование кластеров) протекает в узкой зоне вблизи критического сечения ( $0.01\text{ м} < x < 0.018 \text{ м}$ ) рисунок 2.13, 2.14. В дальнейшем, ниже по течению, происходит только рост кластеров-капель за счет конденсации рис. 2.12, 2.14.

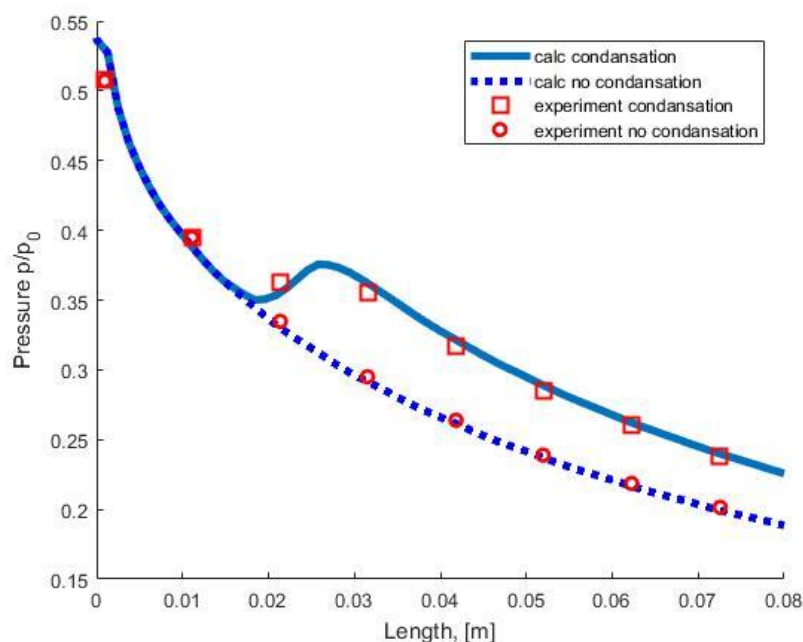


Рисунок 2.11. Распределение давления вдоль оси сопла. Кружки – эксперимент адиабатическое течение, квадраты – эксперимент течение с конденсацией. Пунктирная линия – расчет адиабатического течения, сплошные линии – расчет течения с конденсацией моментным методом.

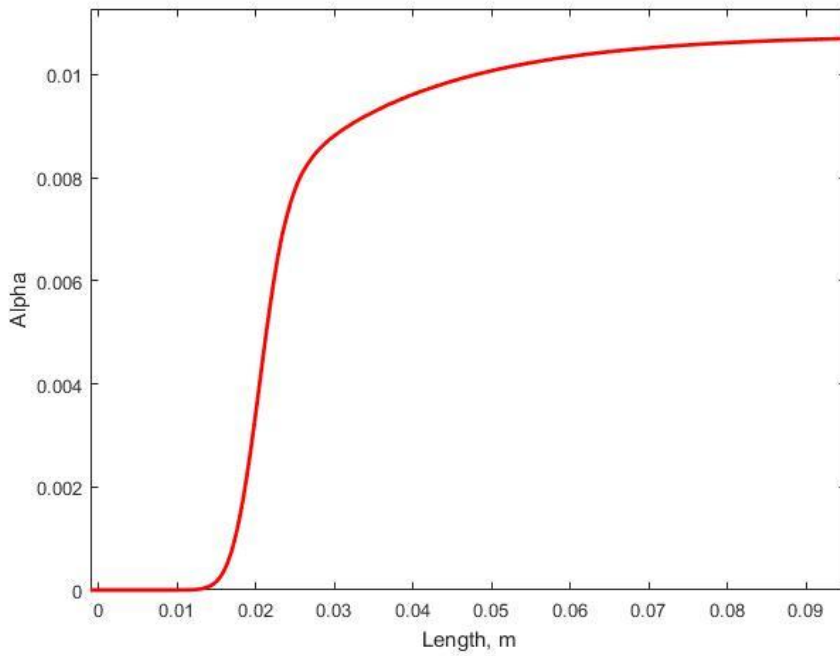


Рисунок 2.12. Распределение массовой доли воды  $\alpha$  вдоль оси сверхзвуковой части сопла

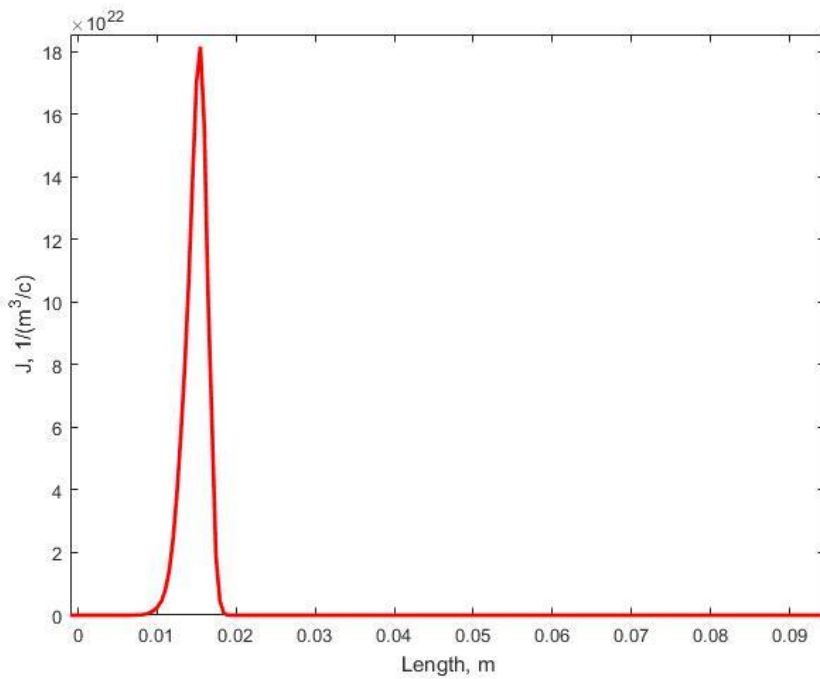


Рисунок 2.13 Скорость нуклеации  $J$  [клас/((с м³))] вдоль оси сверхзвуковой части сопла



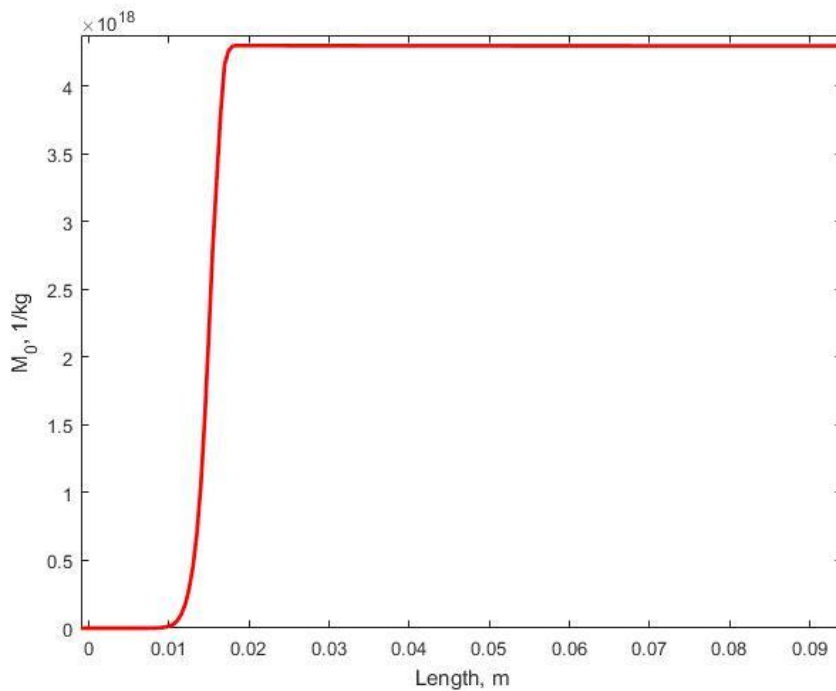


Рисунок 2.14 Концентрация кластеров воды  $M_0$  [класт/ кг<sup>3</sup> ] вдоль оси сверхзвуковой части сопла

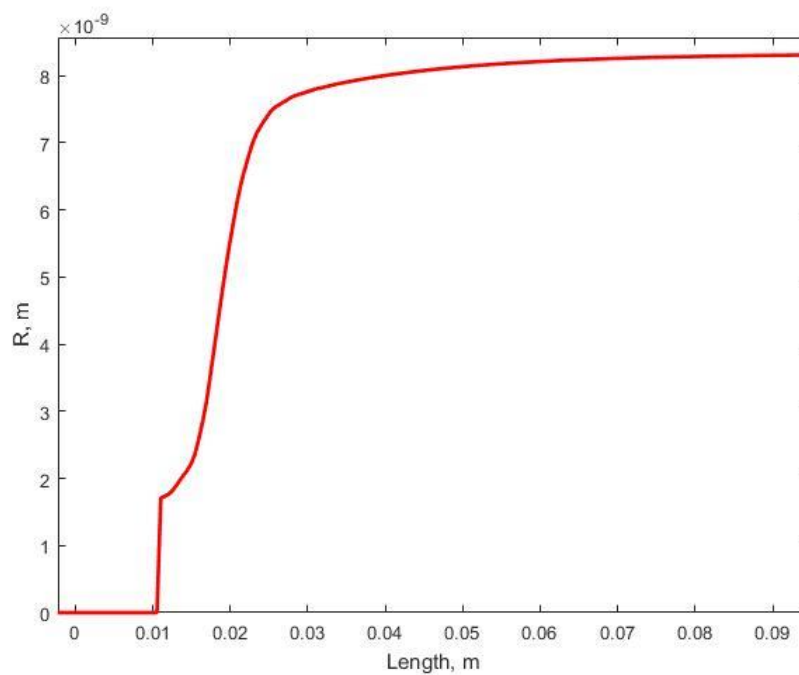


Рисунок 2.15 Распределение среднего радиуса кластера-капли вдоль оси сопла

Анализ результатов расчетов показывает, что моментный метод несколько задерживает начало нуклеации по сравнению с кинетическим методом, что приводит к некоторому отличию локальных параметров, оба метода правильно учитывают интегральные характеристики процесса конденсации (массовую долю конденсированной фазы и количество тепла конденсации выделившееся в поток) что приводит к хорошему совпадению результатов расчетов и экспериментов ниже сечения  $x=0.03$  м. в зоне, где процессы конденсации протекают менее интенсивно, чем в зоне  $0.01\text{ м} < x < 0.03$  м (рис. 6 и 8). Кинетический метод дает больше количественной информации о локальных параметрах жидкой фазы, в том числе и фактически функцию распределения кластеров по размеру. Моментный метод расходует меньшее количество вычислительных ресурсов, проще включается в газодинамические решатели для двумерных и трехмерных течений.

#### 2.2.2.3 Расчет с помощью моментного метода и двухмерной модели течения идеального газа.

Двухмерные расчеты проведены для сопла рисунок 2.5, рисунок 2.7 со сглаженной (как в физическом сопле) трансзвуковой частью. Расчеты проводились в приближении идеального (невязкого, нетеплопроводного газа). Результаты расчетов, полученные на сетке  $400 \times 100$  приведенные на рисунках 2.16-2.19 демонстрируют близкое к одномерному течение в реальном сопле. На выходе из сопла практически весь водяной пар сконденсировался. Совпадение с результатами экспериментов [51] хорошее как по положению волны конденсации, так и по распределению относительного давления вдоль плоскости симметрии Рисунки 2.16-2.19.

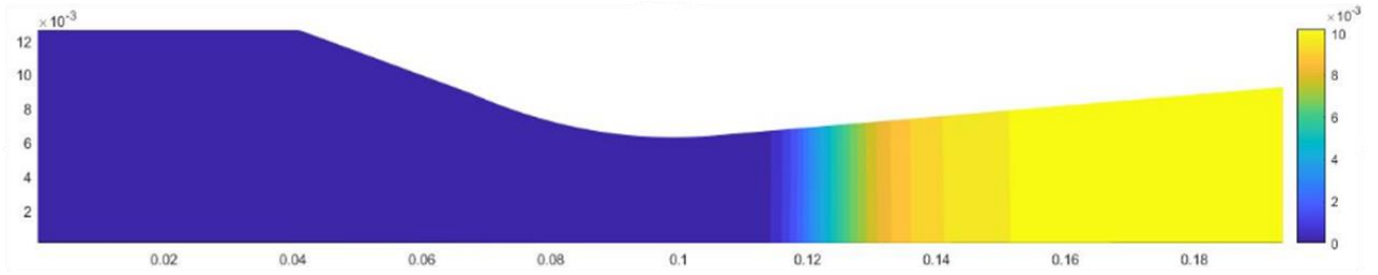


Рисунок 2.16. Поле параметра  $\alpha = \frac{4\pi}{3} \rho_l Q_3$  (массовой доли жидкой фазы) внутри сопла.

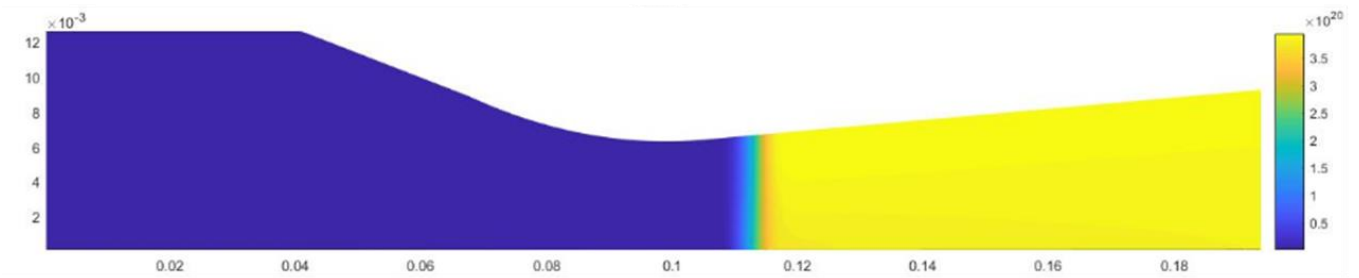


Рисунок 2.17 Поле параметра  $Q_0$  (количество кластеров единице объема) внутри сопла.

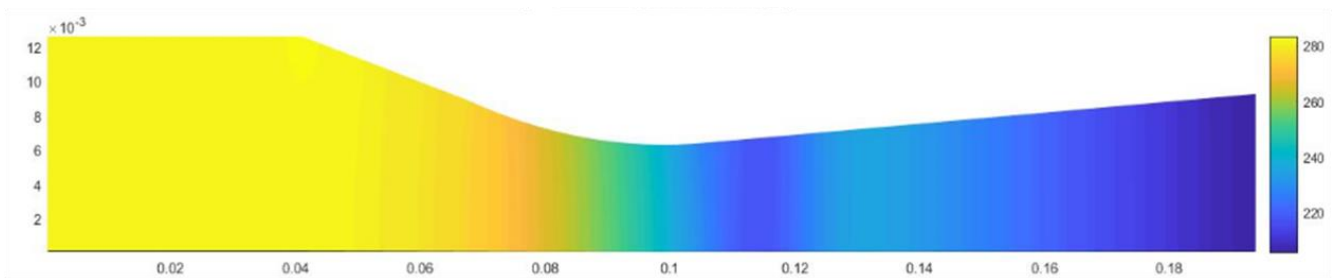


Рисунок 2.18 Поле температуры внутри сопла.

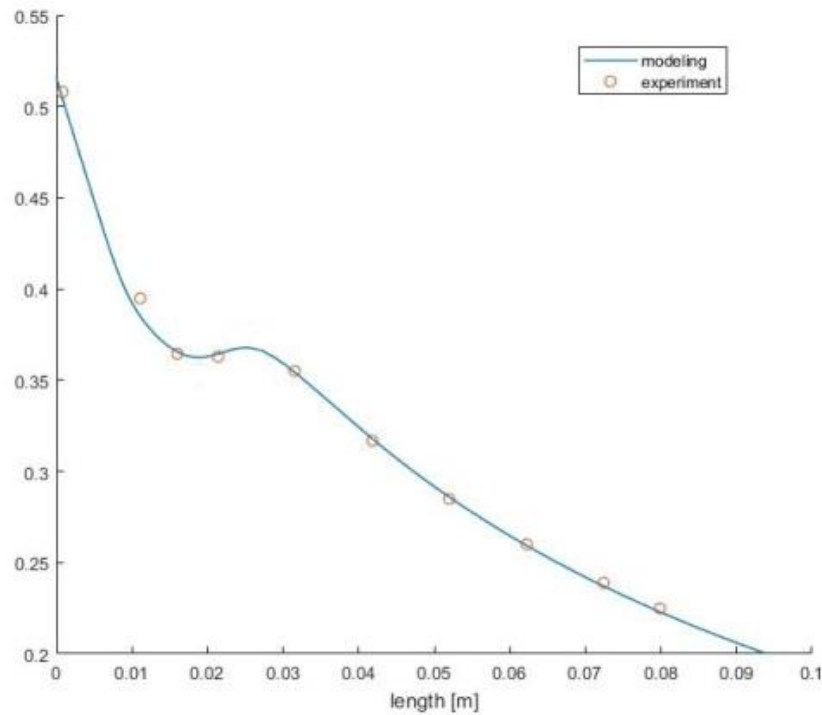


Рисунок 2.19 Распределение относительного давления вдоль оси в сверхзвуковой части сопла для двумерного расчета (кривая - расчет, кружки - эксперимент [51])

Для изучения влияния скругления трансзвуковой части сопла на процесс конденсации проведены расчеты течения в сопле с угловой точкой на контуре в критическом сечении. Результаты представлены на рисунках 2.20 – 2.22. Видно заметное отличие в распределении параметров конденсации (массовой доли жидкой фазы и концентрации кластеров) от ситуации в сопле со сглаженным контуром в сверхзвуковой части (рисунки 2.20, 2.21). Это отличие определяется возникновением системы косых скачков, возникающих вблизи угловой точки контура сопла в критическом сечении рисунок 2.22.

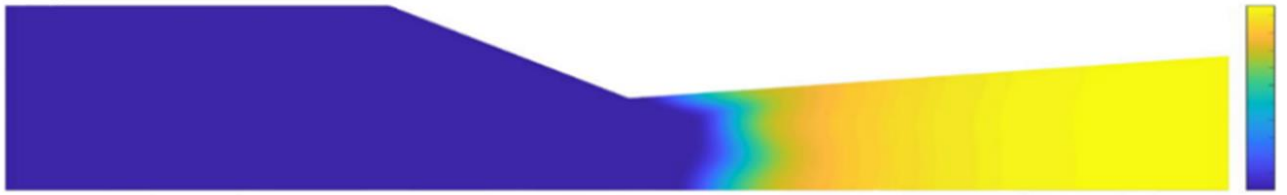


Рисунок 2.20. Массовая доля воды

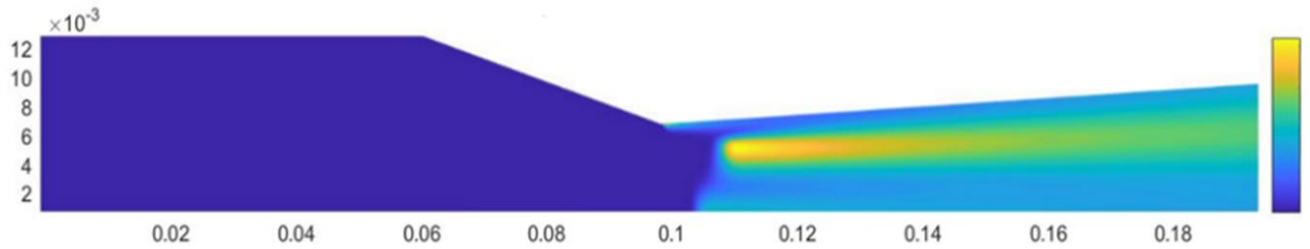


Рисунок 2.21. Концентрация кластеров

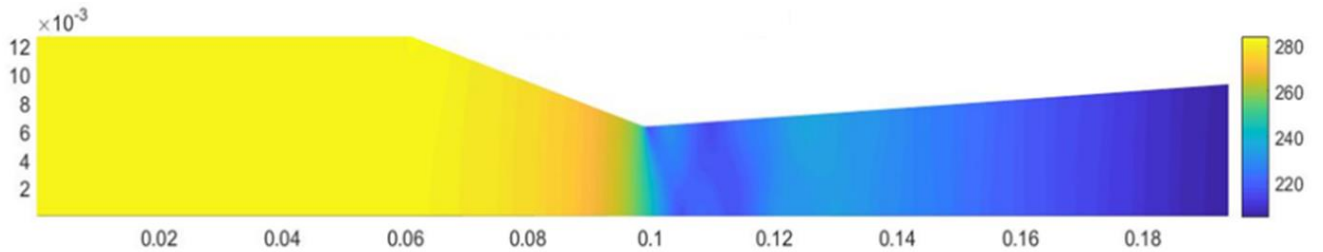


Рисунок 2.22 Температура

#### 2.2.2.4 Расчет с помощью моментного метода и двухмерной модели течения вязкого газа.

Для изучения влияния пограничного слоя нарастающего на стенке сопла на процесс конденсации проведены расчеты течения вязкого газа (1.1-1.14) в сопле со сглаженной трансзвуковой частью и небольшим противодавлением. Результаты представлены на рисунках 2.23 – 2.25. Анализ результатов на рисунке 2.16-2.18 и рисунке 2.23-2.25 показывает их хорошее совпадение, что указывает на слабое влияние вязких эффектов в этом расчетном случае.

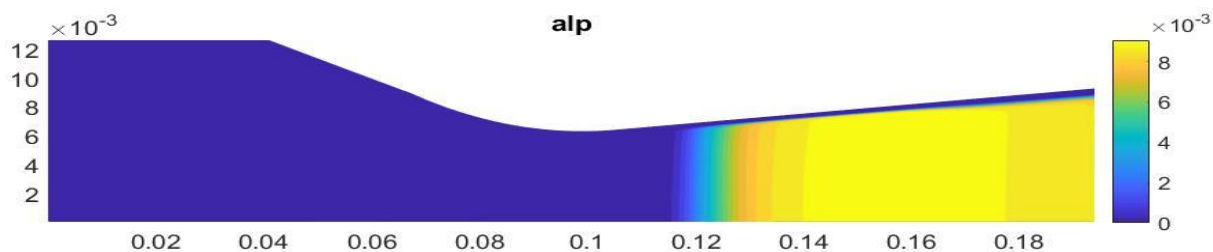


Рисунок 2.23. Массовая доля воды

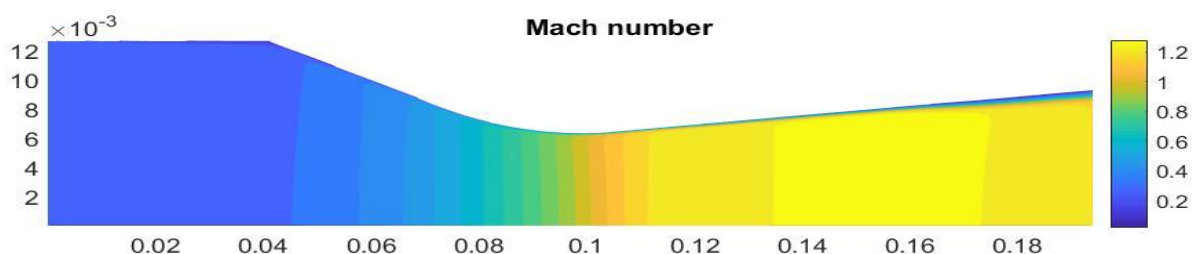


Рисунок 2.24. Концентрация кластеров

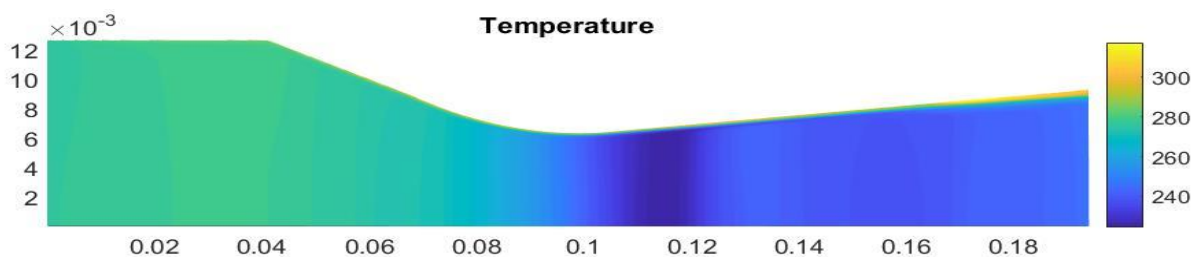


Рисунок 2.25. Температура

### 2.2.3 Расчет конденсации в сопле гиперзвуковой ударной аэродинамической трубы.

Сопла с высокой геометрической степенью расширения являются важным элементом установок для получения гиперзвуковых потоков. Так, например, в гиперзвуковых ударно волновых трубах используются конические сопла в месте соединения камеры низкого давления (КНД) и вакуумной камеры, при этом сверхзвуковая часть целиком располагается в вакуумной камере, дозвуковой частью служит примыкающая к торцу часть

КНД, а в критическом сечении расположена диафрагма, которая разрывается при падении диафрагме на торец КНД ударной волны возникающей от распада разрыва на другой диафрагме разделяющей камеры высокого и низкого давления.

Сверхзвуковая часть конического сопла установки для получения потоков с гиперзвуковой скоростью приведена на рисунке 2.26. Радиус критического сечения  $r^* = 4\text{мм}$ , радиус выходного сечения  $R = 43.5\text{мм}$ , длина сверхзвуковой части  $L = 168\text{мм}$ , геометрическая степень расширения  $\left(\frac{R}{r^*}\right)^2 = 118,266$ , среда - воздух. Давление на входе в сопло  $P_k = 1.9\text{ атм.}$ , температура  $T_k = 800\text{К}$ . Данным условиям соответствует течение идеального газа с числом Маха на выходе  $M = 7.15$ .

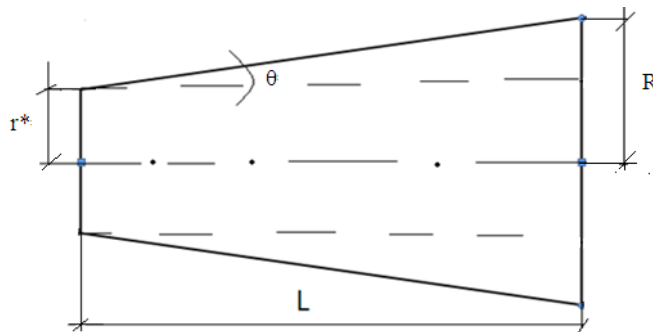


Рисунок 2.26 Сверхзвуковая часть сопла гиперзвуковой аэродинамической трубы.

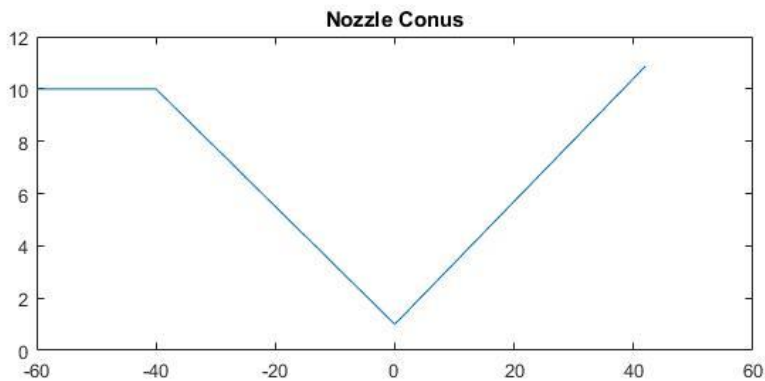


Рисунок 2.27. Расчетная схема гиперзвукового сопла.

Моделируется процесс конденсации паров воды в данном сопле. Массовая доля паров воды на входе принималась  $\alpha = 0.011$ , что соответствует влажности 0.8 в камере низкого давления ударной трубы при комнатной температуре.

Расчеты выполнялись с помощью моментного метода в квазиодномерной постановке (2.1) - (2.8).

Результаты расчетов адиабатического течения (синяя линия) и течения с конденсацией (красная линия) приведены на рисунок 2.28, 2.29.

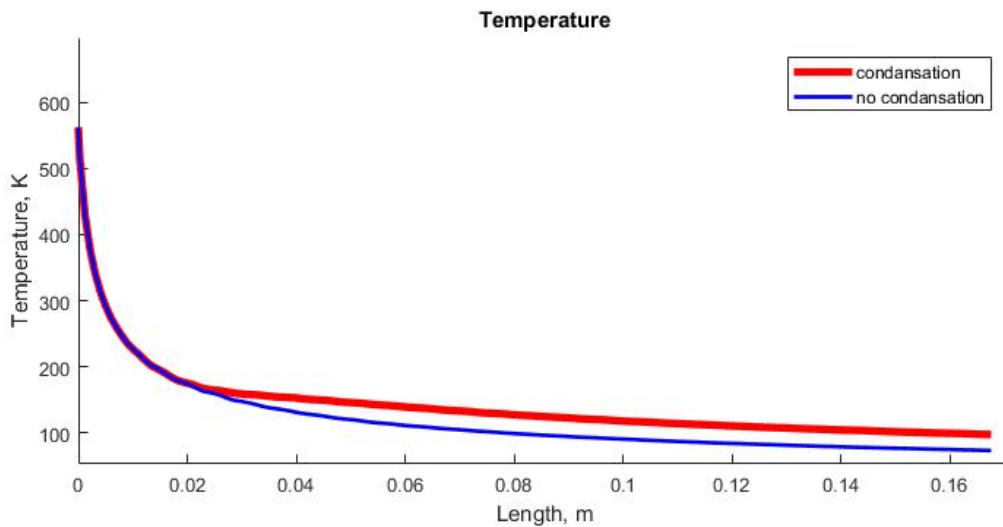


Рисунок 2.28. Распределение температуры вдоль оси сопла.

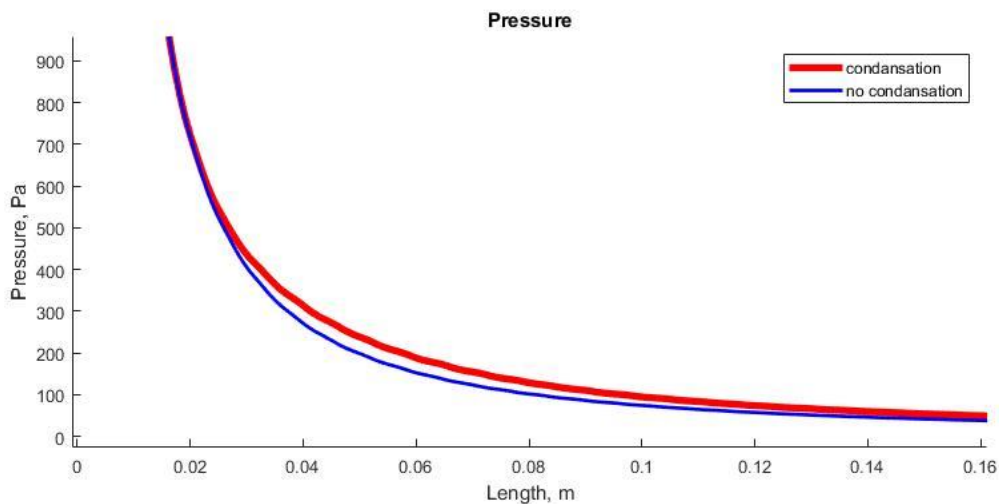


Рисунок 2.29. Распределение давления вдоль оси сопла.



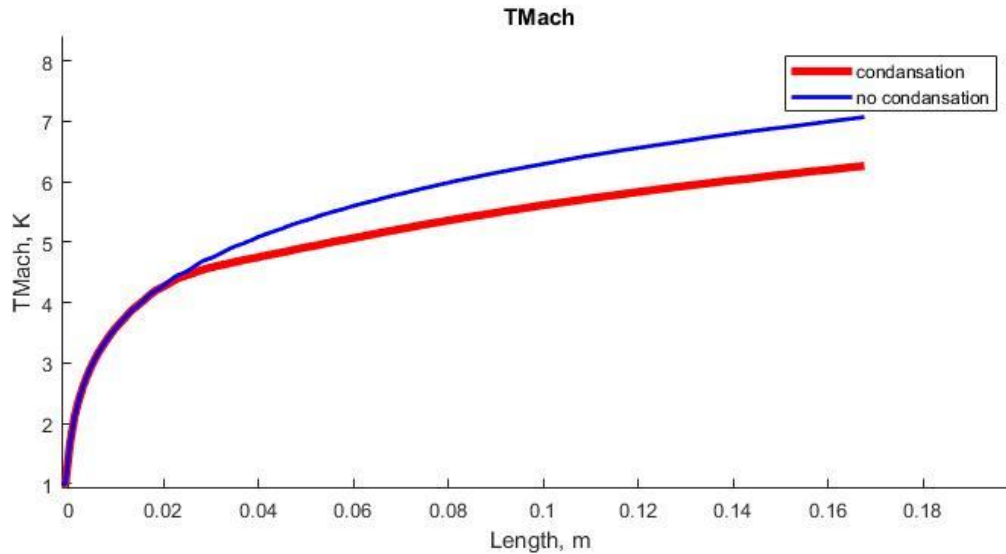


Рисунок 2.30. Распределение числа Маха вдоль оси сопла.

Из анализа результатов расчетов следует, что процесс конденсации начинается в 0.02 м ниже по течению от критического сечения. Конденсация приводит к повышению температуры (рисунок 2.28) и давления (рисунок 2.29) в сопле ниже по течению от сечения  $x=0.02$  м по сравнению с адиабатическим течением и уменьшению числа Маха потока. Так в выходном сечении сопла число Маха уменьшилось на единицу (рисунок 2.30) по сравнению с адиабатическим течением за счет возрастания скорости звука в потоке из-за конденсационных процессов.

#### 2.2.4 Конденсация перегретого водяного пара в микросопле

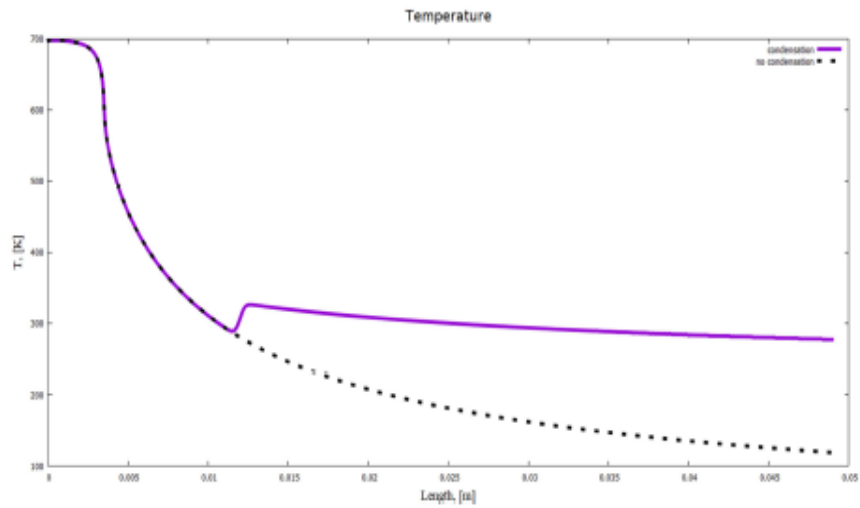
Численно моделируется осесимметричное установившееся течение чистого ксенона в коническом микросопле с большой геометрической степенью расширения ( $n=50$ ). Радиус критического сечения сопла  $r_{кр}=0.5$  мм., радиус входного сечения 3.0 мм, радиус выходного сечения 7.5 мм, длина конической сверхзвуковой части сопла 91.0 мм, длина конической дозвуковой части 5.0 мм, длина цилиндрической части дозвуковой части 2.0 мм.

Выполнено расчетное исследование течения водяного пара для трех расчетных случаев: а) Чистый водяной пар ( $\alpha_{\max} = 1.0$ ) – Рисунок 2.31, Таблица 1, б) Смесь водяного пара с азотом ( $\alpha_{\max} = 0.5$ ) – Таблица 2.1, в) Смесь водяного пара с азотом ( $\alpha_{\max} = 0.2$ ) – Таблица 2.1.

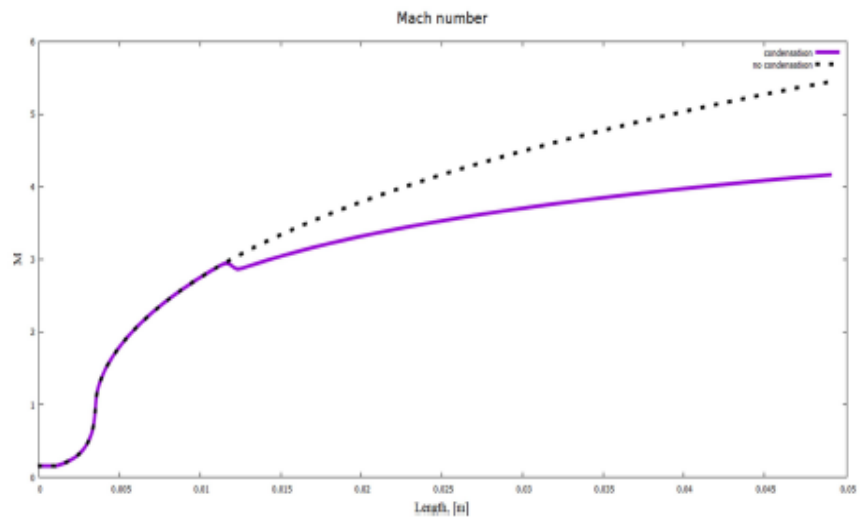
Давление в ресивере  $p_0 = 6$  атм, температура  $T_0 = 700$  К. Количество расчетных ячеек  $N = 1000$ . Расчет проводился методом установления до получения стационарного состояния течения.

На рис. 2.31 сплошными линиями показаны распределения температуры и числа Маха вдоль оси сопла. Пунктирные линии соответствуют адиабатическому течению (без конденсации).

Результаты расчетов трех случаев для разных  $\alpha_{\max}$  в виде параметров, характеризующие процесс конденсации на срезе сопла (температура, средний радиус капли и средняя концентрация кластеров воды), представлены в Таблице 2.1.



*A*



*B*

Рисунок 2.31. Распределение температуры (А) и числа Маха (Б) вдоль оси сопла для  $\alpha_{\max} = 1.0$  (чистый водяной пар). Пунктирная линия – течение без конденсации, сплошная линия – течение с конденсацией.

Из расчетов следует, что при уменьшении  $\alpha_{\max}$ , температура на срезе сопла снижается. Изменения числа Маха немонотонно при варьировании  $\alpha_{\max}$ . На величину числа Маха потока на срезе сопла влияют два разнонаправленных фактора: тепловой фактор (рост температуры приводит к росту скорости

звука) и расходный фактор (за счет конденсации уменьшается масса газа и увеличивается разреженность газовой среды - что похоже на отсос газа из сверхзвуковой части сопла (расходное сопло)). Совместное действие этих факторов приводит к немонотонной зависимости числа Маха на срезе от  $\alpha_{\max}$ . На рисунках 2.32–2.33 изображены распределения, при вышеуказанных  $\alpha_{\max}$ , среднего радиуса каплей  $R$  и массовой доли жидкой фазы  $\alpha$  в сравнении друг с другом.

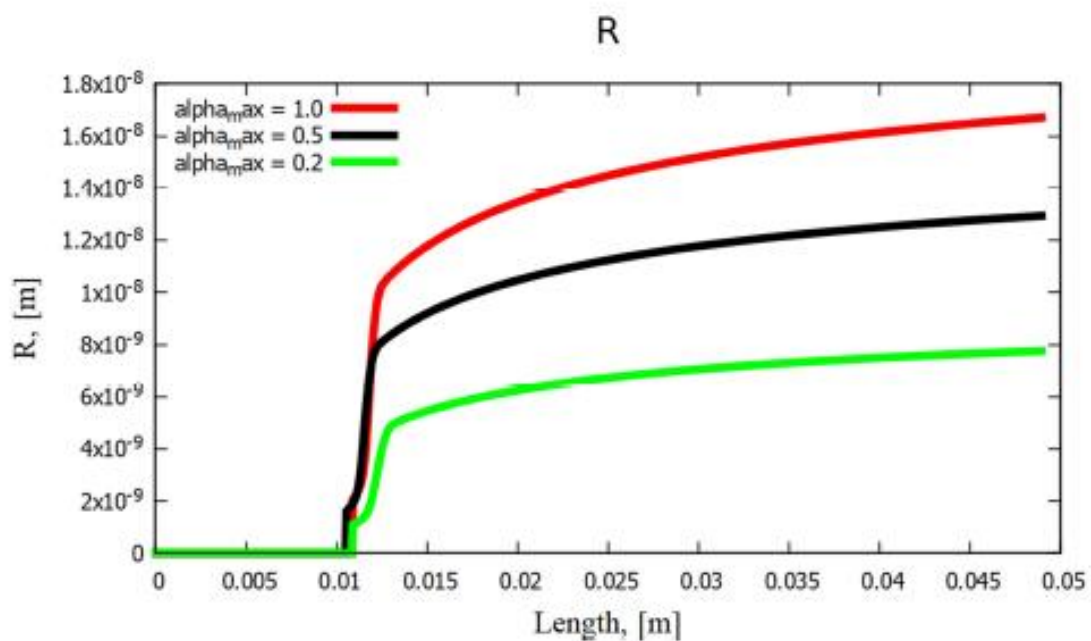


Рисунок 2.32. Средний радиус кластера-капли при различных  $\alpha_{\max}$ .

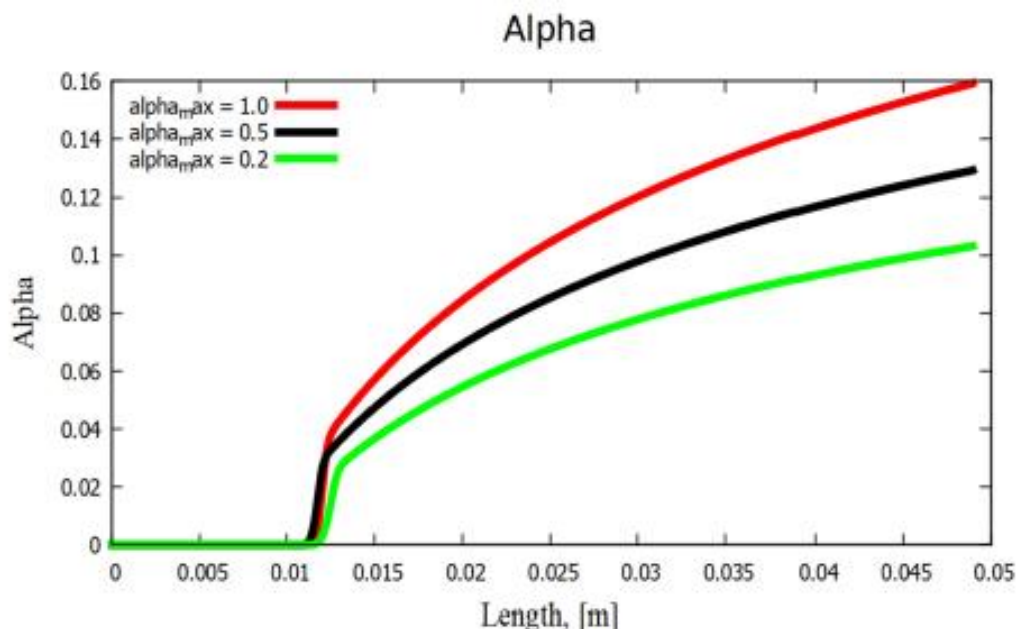


Рисунок 2.33. Массовая доля жидкой фазы при различных  $\alpha_{\max}$ .

Таблица 2.1. Параметры газа на срезе сопла при различных  $\alpha_{\max}$ .

	T, [K]	R, [м]	$M_0$ , [1/кг]
$\alpha_{\max}=1.0$	277.4	$1.67 \cdot 10^{-8}$	$7.96 \cdot 10^{18}$
$\alpha_{\max}=0.5$	266.3	$1.29 \cdot 10^{-8}$	$1.39 \cdot 10^{21}$
$\alpha_{\max}=0.2$	251.6	$7.75 \cdot 10^{-8}$	$5.14 \cdot 10^{21}$

### 2.2.5 Конденсация ксенона в микросопле

Коническое микросопло имеет следующие размеры: радиус критического сечения  $r_{\text{кр}}=0.00007$  м., радиус выходного сечения  $R=7r_{\text{кр}}$ , длина сверхзвуковой части  $L=120 r_{\text{кр}}$ . Температура в камере  $T_0=293$  К, давление на входе в сопло:  $P_0=3; 4; 4.5; 5$  атм.

Рабочая среда - газ ксенон. Данное сопло используется в установке генерации кластерных пучков, используемой в современных технологических установках планаризации поверхностей.

На рис. 31 показано поле чисел Маха в микросопле. Течение в микросопле характеризуется малыми числами Рейнольдса ( $Re=10^3 - 10^4$ ) из-за

малых размеров сопла, что приводит к появлению больших пограничных слоев внутри сопла. Из-за значительной толщины пограничного слоя степень расширения в микросопле значительно меньше, чем геометрическая степень расширения самого сопла. Вследствие этого максимального расширения и максимальной скорости поток ксенона достигает уже в струе, истекающей в вакуумную камеру (рисунок 2.34).

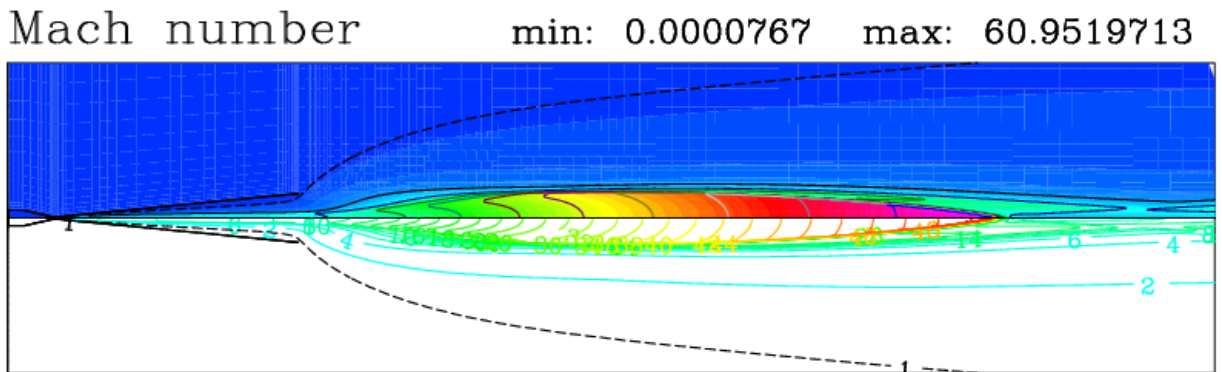


Рисунок 2.34. Поле чисел Маха в микросопле.

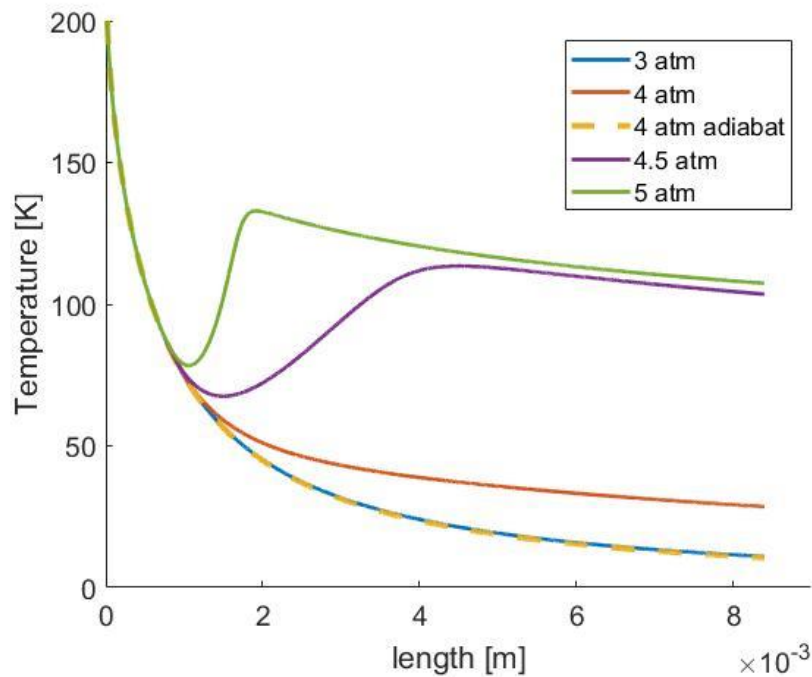


Рисунок 2.35. Распределение температуры вдоль оси микросопла при разных давлениях в камере микросопла.

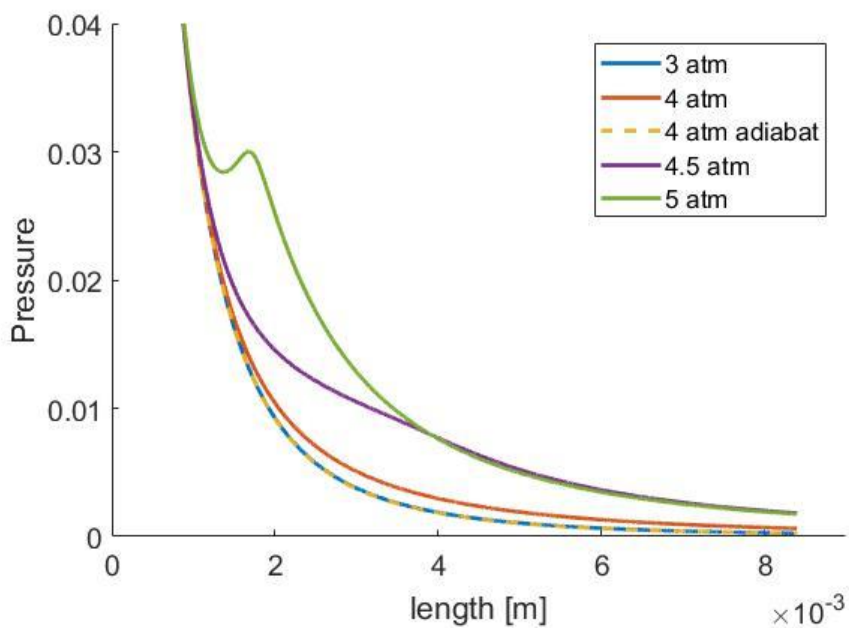


Рисунок 2.36. Распределение безразмерного давления вдоль оси микросопла при разных давлениях в камере микросопла.

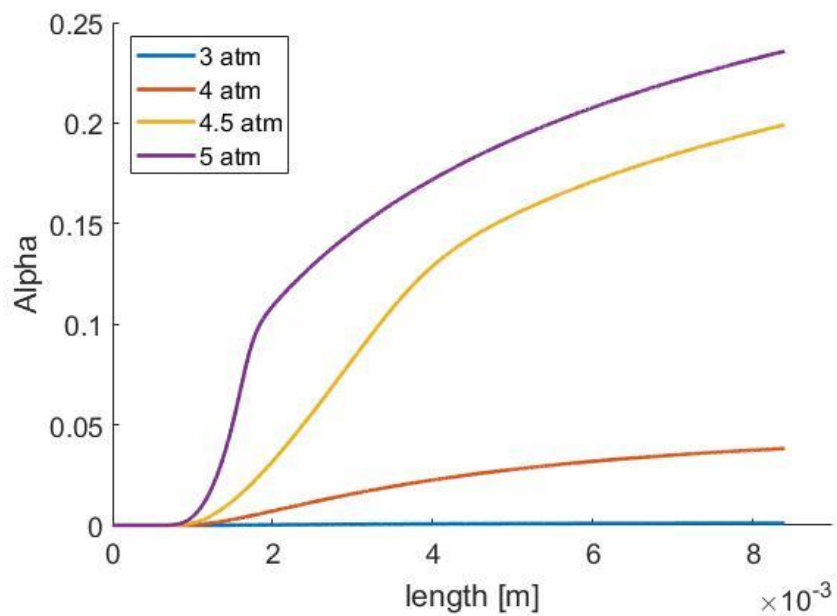


Рисунок 2.37. Распределение массовой доли жидкой фазы ксенона вдоль оси микросопла при разных давлениях в камере на входе в микросопло.

Анализ результатов рис. 2.36 – 2.37 показывает, что при давлении 3 атм. конденсация ксенона в пределах сопла не наступает. С возрастанием давления в камере сгорания сопла больше 4 атмосфер возникает конденсация и при давлении больше 4.5 атм. возникает скачек конденсации, который сдвигается влево ближе к критическому сечению при больших давлениях. Массовая доля ксенона в жидком состоянии может достигать 25% на среде микросопла при давлении 5 атм. рисунок 2.37.

### 2.3 Экспериментальное исследование течения газа в системе микросопло-струя-скиммер

Молекулярные кластеры инертных газов активно используются для получения новых материалов и для обработки поверхностей путем бомбардировки их пучком кластеров [92]

Удобным способом для получения кластеров является получение конденсата паров газа в результате сверхзвукового истечения газа из сопла. Полученные кластеры предполагается использовать для бомбардировки поверхности интегральных схем для достижения их большего порядка гладкости. Однако для достижения этой цели необходимо сепарировать кластеры при помощи скиммера.

Рассмотрена система сопло-скиммер, которая используется для получения кластеров Аргона. С помощью бомбардировками кластеров инертных газов в будущем предполагается доводить интегральные схемы до более высокого порядка гладкости в промышленном масштабе.

Рассмотрено распространение вязких теплопроводных, конденсирующихся паров Аргона в системе сопло-скиммер. Для моделирования конденсации рассматривается Метод Моментов (ММ). Для высоких концентраций конденсирующегося газа можно считать, что



температура капли и температура среды одинаковые [93]. В таком случае основное влияние на конденсацию окажут два параметра: коэффициент аккомодации  $\alpha$ , уровень роста капель  $\beta$ . Каждый из этих параметров может быть подобран для конкретного газа с использованием теории Хагены и Оберта [94,95].

Для метода моментов основные отличия при моделировании конденсации заключаются в вычислении параметров. Значения коэффициента поверхностного натяжения  $\sigma$ , давление насыщения  $p_s$ , плотность жидкой фазы  $\rho_l$  задаются с помощью параметрических зависимостей от температуры в ПРИЛОЖЕНИИ 1.

### 2.3.1 Математическая модель вязкости аргона

Формула вязкости для аргона В системе Температура претерпевает существенные перепады, поэтому необходим учет зависимости вязкости от температуры. В качестве основы для расчета вязкости взята модифицированная формула Сазерланда:

$$\mu = \begin{cases} \mu(T_*) \left(\frac{T}{T_*}\right)^a, & T < T_* \\ \mu(T_*) \left(\frac{T}{T_*}\right)^{3/2} \frac{T_* + S}{T + S}, & T \geq T_* \end{cases}, \quad (1.38)$$

Where  $\mu_0 = 1.255 \cdot 10^{-5}$  – dynamic viscosity for  $T_* = 150$ ,  $a = 0.945$ ,  $S = 128.35$ .

### 2.3.2 Корректировка математической модели конденсации на базе теории Хагены

На практике процесс конденсации был очень хорошо изучен в работах Хагены и Оберта [94,95]. Они показали, что формирование кластеров зависит от давления  $p_0$ , температуры  $T_0$ , и диаметра сопла  $d$ . Хагена показал, что

концентрация кластеров может быть вычислена с помощью следующего уравнения:

$$N = b \left( \frac{\Gamma^*}{1000} \right) \quad (1.39)$$

Где  $\Gamma^*$  - безразмерный параметр подобия конденсации (параметр Хагены)

$$\Gamma^* = 1650 P_0 d_{eq}^{0.85} T_0^{2.29} \quad (1.40)$$

$$d_{eq} = 0.736 d_* / \tan \varphi \quad (1.41)$$

Где  $\varphi$  угол раскрытия сопла.

Настройка велась для следующих параметров  $d_* = 750$  мкм,  $p_0 = 20000$  mbar,

$$T_o = 295 \text{ К}, r_{avg} = \left( \frac{Nm}{4/3 \pi \rho} \right), m = 6.63 \cdot 10^{-26} \text{ kg}, b = 100, a = 1.8.$$

Для данных параметров теория Хагены дает следующие значения:

$$N = 7.3 \cdot 10^5, r_{avg} = 0.21 \cdot 10^{-7} \text{ m}, n = 9.2 \cdot 10^{17} \text{ 1/m}^3.$$

В таблице 2.2 показана зависимость получаемых параметров в зависимости от коэффициента аккомодации и параметра  $g$ .

Таблица 2.2. Параметры теории Хагены

Коэффициент аккомодации $\beta$ ,	$g$	$n$	$r_{arg}, \text{ m}$	$\alpha$
0.2	2.5	$0.23 \cdot 10^{17}$	$0.72 \cdot 10^{-7}$	0.1984
0.1	2.0	$2.603 \cdot 10^{17}$	$0.325 \cdot 10^{-7}$	0.2054
0.1	1.6	$5.93 \cdot 10^{17}$	$0.251 \cdot 10^{-7}$	0.2143
0.1	1.325	$9.096 \cdot 10^{17}$	$0.2198 \cdot 10^{-7}$	0.2178

Лучшая аппроксимация была достигнута для значений параметров  $\beta = 0.1$ ,  $g = 1.325$ .

### 2.3.3 Геометрия расчетной области системы микросопло-струя-скиммер

Расчетная область состоит из сопла и соосно расположенного на некотором расстоянии от среза сопла скиммера (рисунок 2.38)

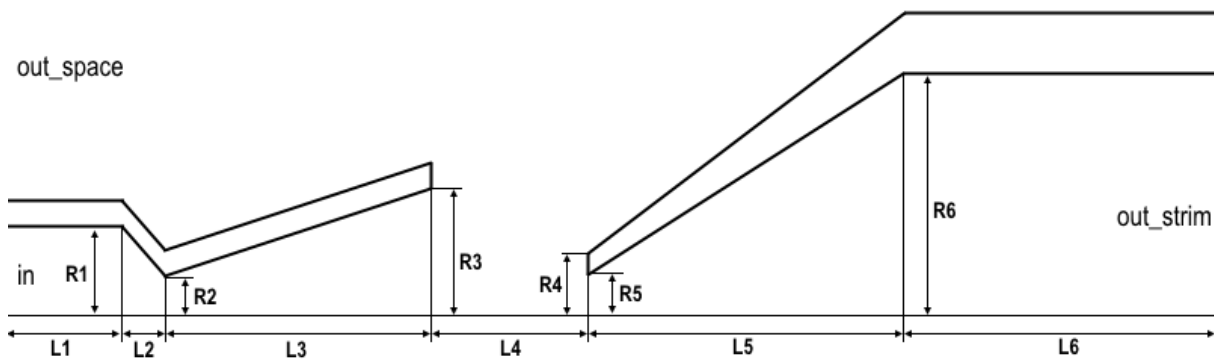


Рисунок 2.38. Геометрия расчетной области

Микросопло, начиная от критического сечения, имеет коническую форму, а стжиммер имеет форму полого усеченного конуса, соединенного с полым цилиндром. Размеры приведены в таблице 2.3.

Таблица 2.3. Геометрические размеры расчетной области.

Index	$R_j$ [m]	$L_j$ [m]
1	0.0007	0.0014
2	0.00007	0.0028
3	0.001418046	0.014
4	0.00046	0.01596
5	0.00025	0.039025

### 2.3.4 Расчетная сетка

Расчетная сетка состоит из четырехугольных ячеек, разделена на блоки, имеет сгущение к областям интереса (рисунок 2.39). Всего присутствует около 70 тысяч расчетных ячеек.

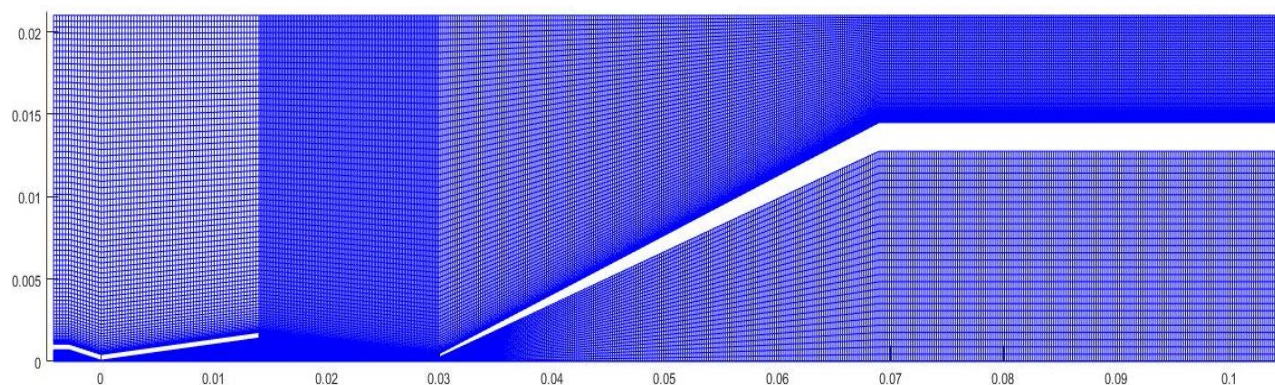


Рисунок 2.39. Расчетная сетка

### 2.3.5 Граничные условия

Чтобы расширение струи было достаточным для образования конденсата область за соплом имеет очень низкое давление. До создания дополнительной откачки конденсата во внутренней области стриммера создают еще большее разрежение. Для всех внешних областей (out\_space) считается, что давления на них одинаково. Входные условия приведены в таблице 2.4.

Таблица 2.4. Граничные условия.

Name	p [Pa]	rho [ $1/m^3$ ]
in	709275 (7 atm)	11.363
out_space	50	-
out_strimm	10	-

### 2.3.6 Результаты вычислений потока газа в системе микросопло-струя-скиммер

Течение в микросопле характеризуется наличием толстых пограничных слоев вблизи стенок, которые занимает большую часть внутренней области сопла. Это приводит из-за толщины вытеснения к существенному снижению реальной степени расширения потока в сопле по сравнению с геометрической степенью расширения, задаваемой контуром сопла. Наиболее сильно поток расширяется уже в ближнем поле струи за соплом.

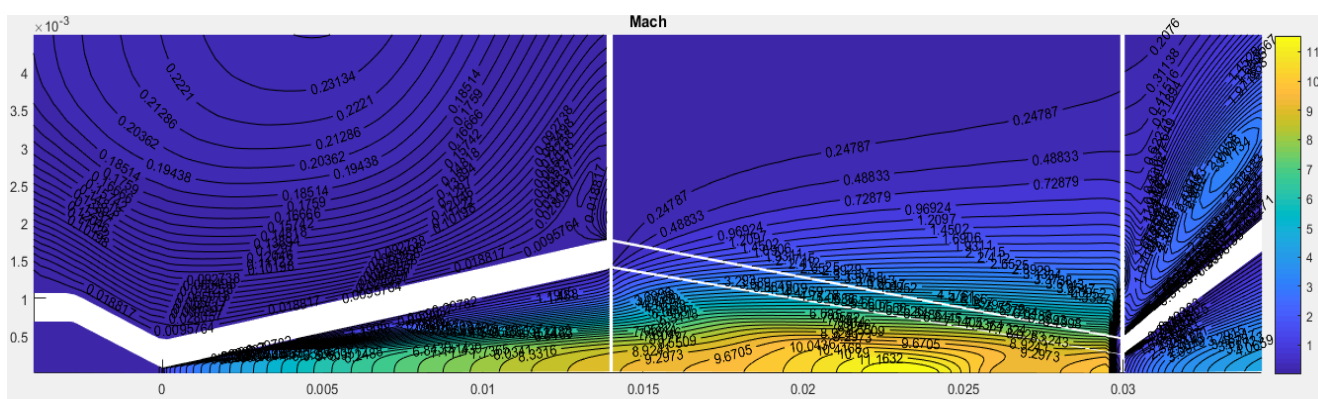


Рисунок 2.40. Изолинии распределения числа Маха в области интереса

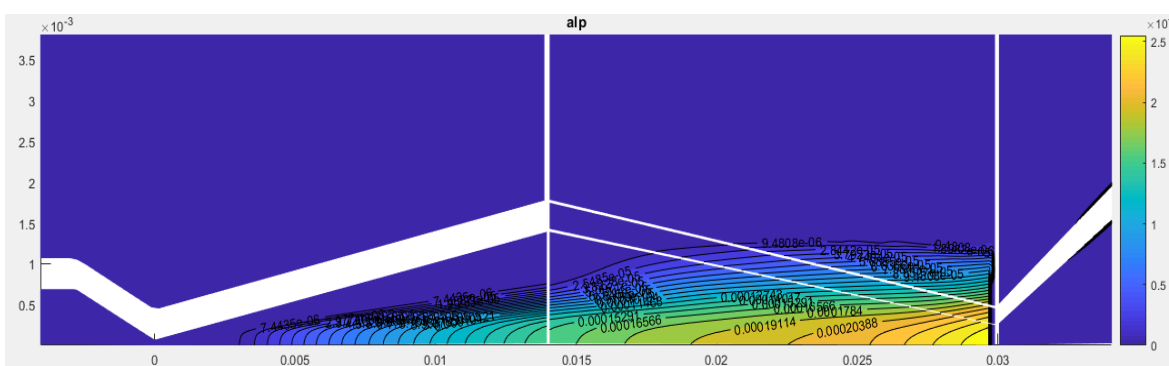


Рисунок 2.41. Изолинии массовой доли жидкой фракции в области интереса

Наблюдается нарастание жидкой фракции вдоль оси сопла. Интенсивность конденсации возрастает за срезом сопла (рисунки 2.40-2.42). Это можно объяснить наличием обширного пограничного слоя в сопле (рисунок 2.40). На скачке уплотнения перед скиммером жидкие капли

испаряются почти полностью (рисунок 2.41), что является следствием возрастания температуры после скачка.

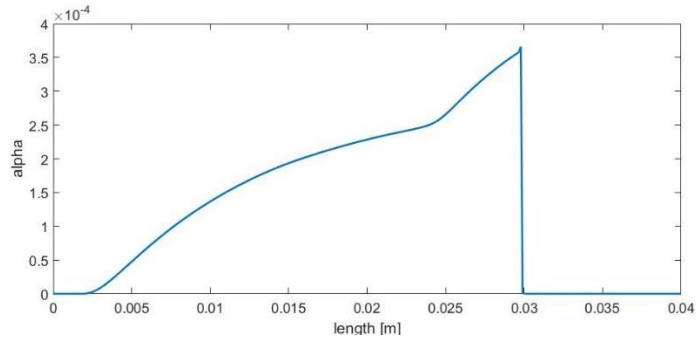


Рисунок 2.42. Массовая доля на оси симметрии

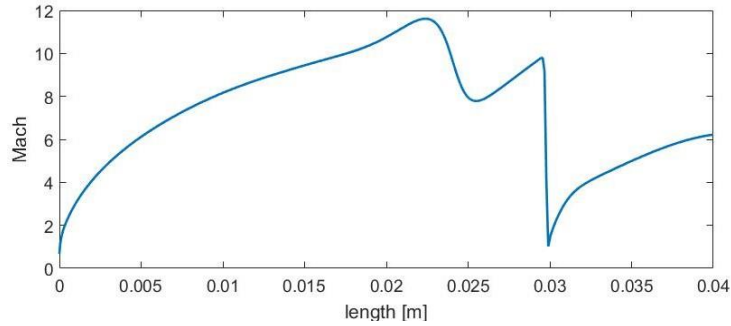


Рисунок 2.43. Число Маха на оси симметрии

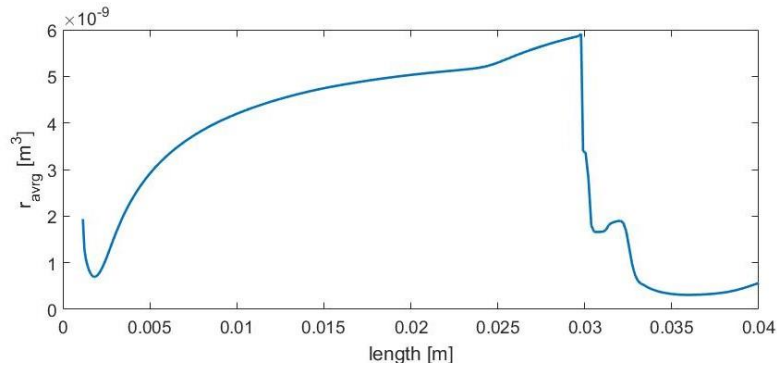


Рисунок 2.44. Средний радиус частиц на оси симметрии

### 3. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕТЕРОГЕННОЙ КОНДЕНСАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА МОМЕНТОВ

В отличие от гомогенной конденсации гетерогенная происходит на уже существующих примесях: каплях уже сконденсировавшегося газа, саже и других мелких частицах, - которые выступают в качестве ядер конденсации. Как и для гомогенной мы рассматриваем процесс конденсации, как два последовательных этапа: нуклеации и роста капель, - но в отличие от гомогенной, гетерогенная нуклеация происходит за счет увеличения числа существующих ядер конденсации, на которые нуклеируют (присоединяются) устойчивые, гомогенные кластеры, конденсирующейся жидкости, размер которых больше критического.

В рамках предлагаемого подхода к моделированию гетерогенной конденсации делаются следующие предположения:

- 1) Конденсация происходит в два этапа. Первый, как и в гомогенном случае, нуклеация, второй – рост капель;
- 2) Твердая частица покрывается влагой сразу вся целиком (Рисунок 2.1);
- 3) Функция распределения по размерам для твердых частиц известна заранее и не изменяется
- 4) Рост капли равномерен во всех направлениях

В рамках подхода условимся гетерогенную нуклеацию называть активацией.

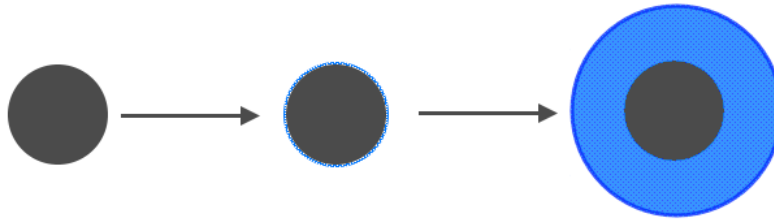


Рисунок 3.1. Схематическое изображение процесса гетерогенной конденсации

Дополнительно предполагается, что активация частиц происходит, только для частиц, радиус которых больше чем критический радиус устойчивого гомогенного зародыша (Рисунок 3.2). Считается, что остальные частицы не участвуют в процессе гетерогенной конденсации.

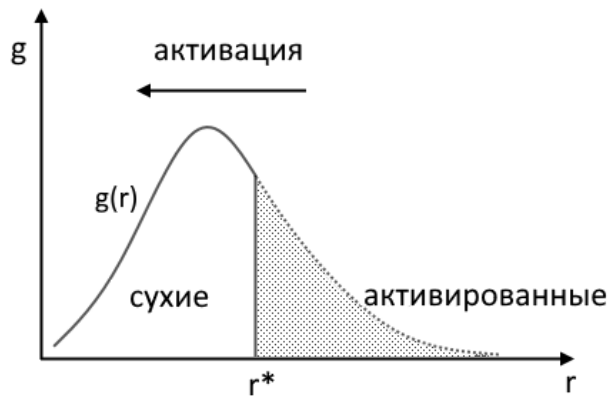


Рисунок .3.2. Схематическое изображение активации частиц

Главное генерирующее уравнение, описывающее эволюцию функции распределения  $f^{he}$  гетерогенных капель по размерам будет иметь следующий вид:

$$\frac{\partial f^{he}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j f^{he}) + \frac{\partial}{\partial r} (r \dot{f}^{he}) = J^{he}, \quad (3.1)$$



Где  $J^{he}$  это гетерогенная функция нуклеации, представляющая скорость активации гетерогенных частиц в единице объема. Система моментных уравнений для гетерогенной нуклеации может быть получена из уравнения (3.1) таким же образом, как и система (1.1) - (1.14):

$$\frac{\partial}{\partial t} M_k^{he} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j M_k^{he}) = \varphi_k^{he} + k M_{k-1}^{he} \dot{r}, \quad k = 1, \infty, \quad (3.2)$$

где  $M_k^{he}$  - это k-ый момент гетерогенной функции распределения  $f_k^{he}$ . Функция скорости изменения k-ого момента  $\varphi_k^{he}$  может быть получена из следующего соотношения [57]:

$$\varphi_k^{he} = \int_0^\infty r^k J^{he} dr. \quad (3.3)$$

Для моделирования конденсации удобно вместо третьего момента  $M_3^{he}$  удобно рассматривать уравнение для изменения массовой доли жидкости  $\alpha$ . Для этого необходимо преобразовать уравнение для третьего момента. Учтем, что

$$\varphi_3^{he} = \frac{d}{dt} \int_0^\infty r^3 g dr = \frac{\partial}{\partial t} \int_0^\infty r^3 g dr + \frac{\partial}{\partial x_j} u_j \int_0^\infty r^3 g dr. \quad (3.4)$$

Отсюда для третьего момента имеем:

$$\frac{\partial}{\partial t} M_3^{he} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j M_3^{he}) = \varphi_3^{he} + k M_2^{he} \dot{r} \quad (3.5)$$

Умножив уравнение (3.5) на  $\frac{4}{3} \pi \rho_l$  ( $\rho_l$  - плотность жидкости), получим уравнение для определения массовой доли жидкости  $\alpha$  :

$$\frac{\partial \rho \alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j \alpha}{\partial x_j} = 4 \pi \rho_l \dot{r} M_2^{he}, \quad (3.6)$$

Окончательно система уравнений для гетерогенно конденсирующегося газа в одномерной постановке будет иметь следующий вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0, \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} = 0, \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial u(\rho E + p)}{\partial x} = 0. \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial(M_0^{he})}{\partial t} + \frac{\partial(uM_0^{he})}{\partial x} = \varphi_0^{he}, \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial M_1^{he}}{\partial t} + \frac{\partial uM_1^{he}}{\partial x} = \varphi_1^{he} + \dot{r}\rho M_0^{he}, \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial M_2^{he}}{\partial t} + \frac{\partial uM_2^{he}}{\partial x} = \varphi_2^{he} + 2\dot{r}\rho M_1^{he}, \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial \rho \alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho u \alpha}{\partial x} = 4\pi \rho_1 \dot{r} M_2^{he} \quad (3.13)$$

Здесь  $\rho$  – плотность,  $p$  – давление,  $T$  – температура статическая,  $u$  – скорость вдоль направления  $x$ ,  $M_0, M_1, M_2$  - моменты функции распределения в единице объема.

Чтобы описать неоднородность среды, введено уравнение распространения массовой доли конденсирующейся фазы  $\alpha_{\max}$ . Это позволяет расширить класс решаемых задач. Например, это позволяет рассмотреть задачи с неоднородным содержанием конденсирующегося вещества в разных зонах расчетной области.

$$\frac{\partial(\rho \alpha_{\max})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u \alpha_{\max})}{\partial x} = 0. \quad (3.14)$$

где  $\alpha_{\max}$  - это массовая доля конденсирующейся фазы.

### 3.1. Математическая модель нуклеации

Предполагаю, что активируются только те частицы радиус которых меньше чем критический радиус частиц  $r_*$  (рисунок 3.2), который находится из условия максимума термодинамического барьера:

$$r_* = \frac{2\sigma}{RT\rho_l \ln S} \quad (3.15)$$

где  $\rho_l$  - плотность жидкости.

Предполагаю, что существование капель меньшего размера энергетически невыгодно. Количество капель, которое может быть образовано пропорционально количеству частиц примесей и может быть найдена как:

$$\varphi_k^{he} = \frac{d}{dt} \int_{r_*}^{\infty} r^k g dr. \quad (3.16)$$

Для случая равномерной функции распределения, имеющей размеры капель в диапазоне от  $r_{\min}$  до  $r_{\max}$  будет иметь следующий вид:

$$\varphi_k^{he} = - \frac{g_n}{r_{\max} - r_{\min}} r_*^k \frac{dr_*}{dt}, \quad (3.17)$$

где  $g_n$  - общее количество частиц в единице массы для сухой примеси.

Для вычисления производной  $dr_*/dt$  использовались значения  $r^*$  на текущем  $k$  и предыдущем  $k-1$  слоях:

$$\frac{dr_*}{dt} = \frac{r_*^k - r_*^{k-1}}{dt} \quad (3.18)$$

При этом отметим что с ростом перенасыщения  $S$  радиус  $r^*$  уменьшается и в итоге производная будет иметь отрицательный знак.

### 3.2. Математическая модель средней скорости роста гетерогенной капли

Рассматриваемая модель основана на модели Гуармати (Guarmathy) [96] с дальнейшим развитием, которое предложил Смолдерс (Smolders) [59].

Средняя скорость роста гетерогенной капли определяется тепловым потоком между каплей и окружающей средой:

$$\dot{H} = -\dot{M}L, \quad (3.19)$$

где  $L$  - удельная теплота парообразования, а  $\dot{M}$  - поток массы.

Поток массы и температуры могут быть описаны как функции текущего радиуса капли  $r$ :

$$\begin{cases} \dot{M} = 4\pi r^2 Nu_{\dot{M}} \frac{(p_v^{eq} - p_v) D_{mod}}{p} \frac{1}{2r}, \\ \dot{H} = 4\pi r^2 (T_d - T) \frac{k_m}{2r} \end{cases}, \quad (3.20)$$

Где  $Nu_{\dot{M}}$ ,  $Nu_{\dot{H}}$  - числа Нуссельта для потока массы и теплоты соответственно,  $D_{mod}$  - модифицированный коэффициент диффузии равный  $D_{mod} = D_m p / (R_v T_m)$ , где  $D_m = 2.54(T/295)^{2.085} / p$  для воды. Коэффициент теплопроводности  $k_m$ , коэффициент диффузии  $D_m$  определяются для средней температуры  $T_m$ :

$$T_m = \frac{1}{3}(2T_d + T) \quad (3.21)$$

Из формул (3.19) и (3.20) может быть получена неявная формула для вычисления температуры капли  $T_d$ :

$$Nu_{\dot{H}} k_m (T_d - T) = -Nu_{\dot{M}} L(T_d) D_m \frac{p_{v\infty} - p_v^{eq}}{p}. \quad (3.22)$$

Тогда скорость роста капли может быть выражена либо из закона сохранения массы или, либо из закона сохранения энергии:

$$\frac{dr_d^2}{dt} = \frac{Nu_{\dot{H}} \lambda}{\rho_l L} (T_d - T) = - \frac{Nu_{\dot{M}} D_{\text{mod}}}{\rho_l} \frac{p_v - p_v^{eq}}{p_a}. \quad (3.23)$$

### 3.2.1 Явный метод вычисления температуры капли

Чтобы найти температуру капли  $T_d$  необходимо воспользоваться неявными соотношениями (3.23). Неявное вычисление температуры очень затратная вычислительно процедура. Однако существует приближенная явная формула вычисления, которая имеет маленькую погрешность при небольших степенях насыщения [98]:

$$\left( \frac{T_d}{T_\infty} - 1 \right) = f(S_\infty, Ke_\infty) [C_1 + C_2]^{-1} (1 - \delta_1), \quad (3.24)$$

где

$$Ke_\infty = \frac{2\sigma}{\rho_l R_v T_\infty r_d}, \quad (3.25)$$

$$\delta_1 \approx \frac{0.5C_1^2 - C_2}{(C_1 + C_2)^2} (\ln S_\infty - Ke_\infty), \quad (3.26)$$

$$f(S_\infty, Ke_\infty) = \ln(S_\infty) - Ke_\infty, \quad (3.27)$$

$$C_1 = \frac{T_\infty}{\theta_\infty S_\infty} \left( \frac{p_\infty}{p_{s_\infty}} - S_\infty \right), \quad (3.28)$$

$$C_2 = \frac{L_\infty}{R_v T_\infty}, \quad (3.29)$$

Где коэффициент  $\theta$  вычисляется из следующего соотношения:

$$\theta = \frac{D_{\text{mod}} L Nu_{\dot{M}}}{k_m Nu_{\dot{E}}}, \quad (3.30)$$

Для чисел Нуссельта справедливы следующие соотношения:

$$Nu_{\dot{E}} = Nu_{\dot{H}} = \frac{Nu_{\dot{H}}^{ct}}{1 + (Nu_{\dot{H}}^{ct} / B_{\dot{H}})Kn}, \quad (3.31)$$

$$Nu_{\dot{M}} = \frac{Nu_{\dot{M}}^{ct}}{1 + (Nu_{\dot{M}}^{ct} / B_{\dot{M}})Kn}, \quad (3.32)$$

Смолдерс (Smolders) предложил приближенное вычисление для формул (3.31), (3.32) и положил для непрерывных чисел Нуссельта  $Nu_{\dot{M}}^{ct} = Nu_{\dot{H}}^{ct} = 2$ , значения  $B_{\dot{H}} = 0.49$  и  $B_{\dot{M}} = 0.62$  [59].

### 3.3 Численное моделирование испарения гетерогенных капель и гетерогенной денуклеации

Для моделирования испарения предполагаем, что деактивация частиц происходит по тому же пути, что и активация: для деактивации капель необходимо достигнуть первоначальных значений размеров кластеров твердых частиц (рисунок 3.3).

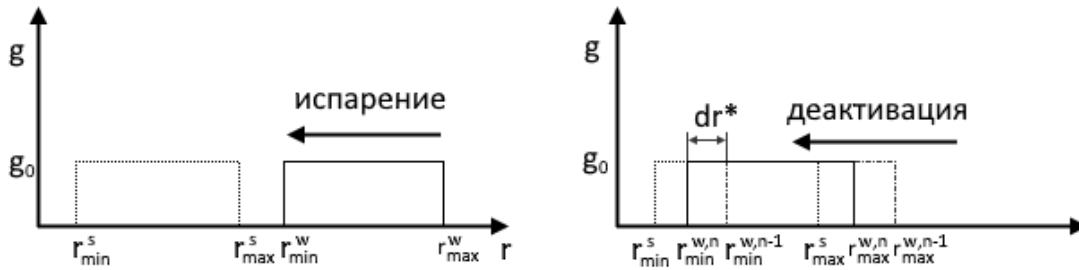


Рисунок 3.3. Схема процессов испарение и деактивации.

При этом деактивация начинается, если минимальный радиус частиц покрытых водяной пленкой (рисунок 3.3)  $r_{\min}^w$  достигает максимального радиуса первоначальных сухих частиц  $r_{\max}^s$ . Скорость деактивации частиц будет определяться из соотношения:

$$J_{deactiv} = \frac{g_o}{r_{max}^w - r_{min}^w} \frac{dr_{da}^*}{dt} \quad (3.33)$$

Окончательно форма моментных уравнений для деактивации будет иметь вид:

$$\frac{\partial(M_0^{he})}{\partial t} + \frac{\partial(uM_0^{he})}{\partial x} = J_{deactiv}, \quad (3.34)$$

$$\frac{\partial M_1^{he}}{\partial t} + \frac{\partial uM_1^{he}}{\partial x} = \dot{r} \rho M_0^{he}, \quad (3.35)$$

$$\frac{\partial M_2^{he}}{\partial t} + \frac{\partial uM_2^{he}}{\partial x} = 2\dot{r} \rho M_1^{he}, \quad (3.36)$$

$$\frac{\partial \rho \alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho u \alpha}{\partial x} = 4\pi \rho_1 \dot{r} M_2^{he} \quad (3.37)$$

Основное отличие в модели денуклеации предложенной Луо (Luo) [57] заключается в вычислении производной изменения скорости роста капли  $dr_{da}^*/dt$ . Для ее вычисления используются значения минимальных радиусов частиц на n-ом и на слое n-1 [97]:

$$\frac{dr_{da}^*}{dt} = \frac{r_{min}^n - r_{min}^{n-1}}{dt} \quad (3.38)$$

Математическая модель проверялась на эксперименте, проведенном на ударной трубе группой ученых во главе со Смолдерсом (Smolders) [59]. В эксперименте исследуется как конденсация, так испарение паров воды на нанометровых частицах. В эксперименте проводились измерения давления, температуры, уровня перенасыщения и среднего радиуса капель в контрольной точке на разных временных слоях.

### 3.4 Эксперимент Смолдерса

В экспериментальную установку (ударная труба) (рисунок 3.4) состоит их камеры высокого давления (КВД), трубы низкого давления (ТНД) длиной 12.8 м, вакуумная камера (ВК), и экспериментальная точка (ЭТ). Рассматривается поведение газочапельной смеси с твердыми воздушными примесями в трубе низкого давления (ТНД).

КВД заполнено чистым азотом с давлением 1.9 бар. ТНД заполнена смесью азота, водяных паров и примесью твердых частиц. Давление азота  $p = 0.997$  бар, давлением паров воды  $p_v = 2090$  Па, средний радиус частиц примеси  $r_n = 15$  нм, а их концентрация  $n_n = 2 \cdot 10^{12} \text{ м}^{-3}$ . Температура во всех частях экспериментальной установки сначала равна 294.3 К.

В начале эксперимента открывается ВК и специальными насосами поддерживается необходимое давление, чтобы поток в ВК имел число Маха равное 0.212. Веер волн разрежения движется по ТНД влево и отражается от перегородки между КВД и ТНД (рисунок 3.4). В веере волн разрежения происходит гетерогенная конденсация. После этого на 66 мкс открывается КВД, что порождает распространение ударной волны вдоль ТНД. За фронтом ударной волны капли полностью испаряются.



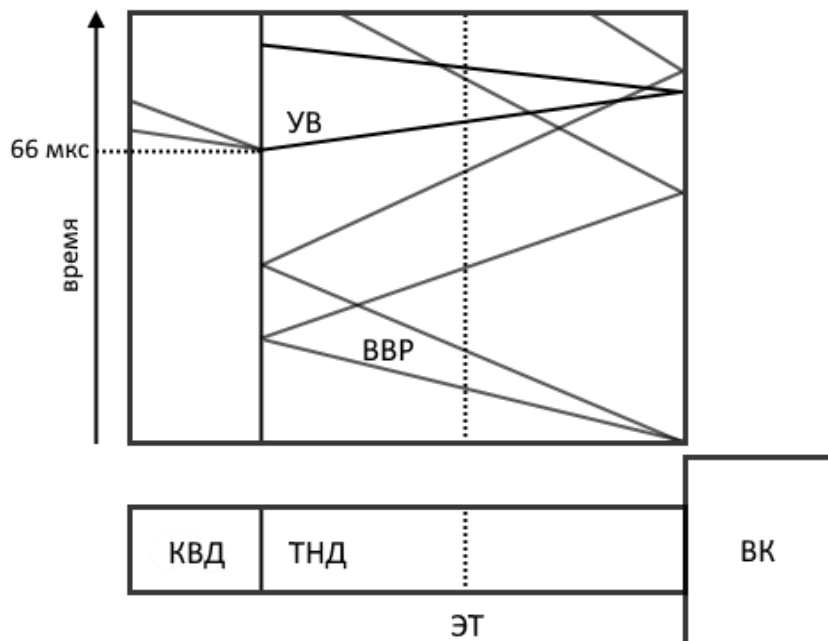


Рисунок 3.4. Схематическое изображение процедуры проведения эксперимента. ВВР – это веер волн разрежения, УВ – ударная волна.

В качестве расчетной области рассматривается длинная труба, имеющая три подобласти по 12.8 м, которые играют роль КВД, ТНД и ВК (рисунок 3.5). ЭТ располагается на расстоянии 6.17 м от линии раздела КВД и ТНД. Взаимодействие между КВД и ТНД начинается согласно эксперименту на 66 мкс.

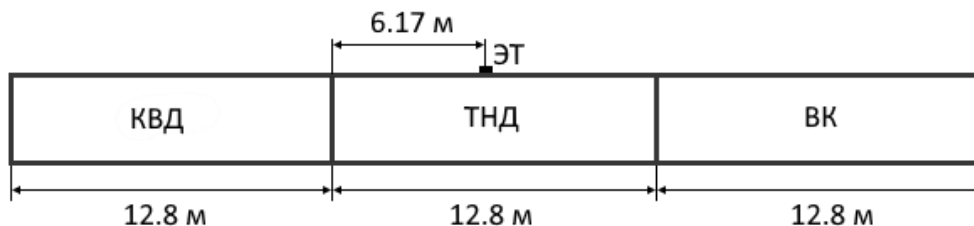


Рисунок 3.5. Схематическое изображение расчетной области.

На левой границе считается ТНД до 66 мкс ставится граничные условия твердая стенка. На правой границе ВК используются граничные условия

свободного потока. Для областей введены начальные условия согласно эксперименту, описанные в таблице 3.1.

Таблица 3.1. Начальные значения численного эксперимента

Физический параметр	КВД	ТНД	ВК	Единицы измерения
Давление	1.9	0.99909	0.565.	бар
Температура	293.4	293.4	293.4	К
$\alpha_{\max}$	1e-7	0.013297	0.013297	-

Для обеспечения числа Маха 0.212 на границе ТНД и ВК в ВК задается давление равное 0.565 бар [57]. Для предотвращения неустойчивой работы алгоритма из-за численных погрешностей считается, что в камере высокого давления присутствуют пары воды, но в очень низкой концентрации. Дополнительно считается, что размер радиусов примесей твердых частиц варьируется от  $r_{\min}^s = 10^{-8}$  м до  $r_{\max}^s = 2 \cdot 10^{-8}$  м.

#### 3.4.1 Результаты моделирования

Расчеты проводились на равномерной расчетной сетке в 2000 ячеек. Результаты расчетов до 90 мкс представлены на рисунках 3.6, 3.7, на которых точками показаны экспериментальные результаты, а сплошными линиями расчеты. Для давления (рисунок 3.6а) видно хорошее совпадения с результатами эксперимента. Однако на рисунке 3.6г видно, что для газа насыщение с 20 мкс по 40 мкс имеет гораздо большие пиковые значения, чем те, которые получены в эксперименте. Средний размер получаемых частиц в эксперименте перед ударной волной на 8% меньше перед ударной волной (рисунок 3.6в). Скачок давления полученный от ударной волны вызвал резкое

повышение давления, и температуры на 80 мкс. На рисунке 3.6б видно, что рост температуры оказался меньше экспериментального за ударной волной.

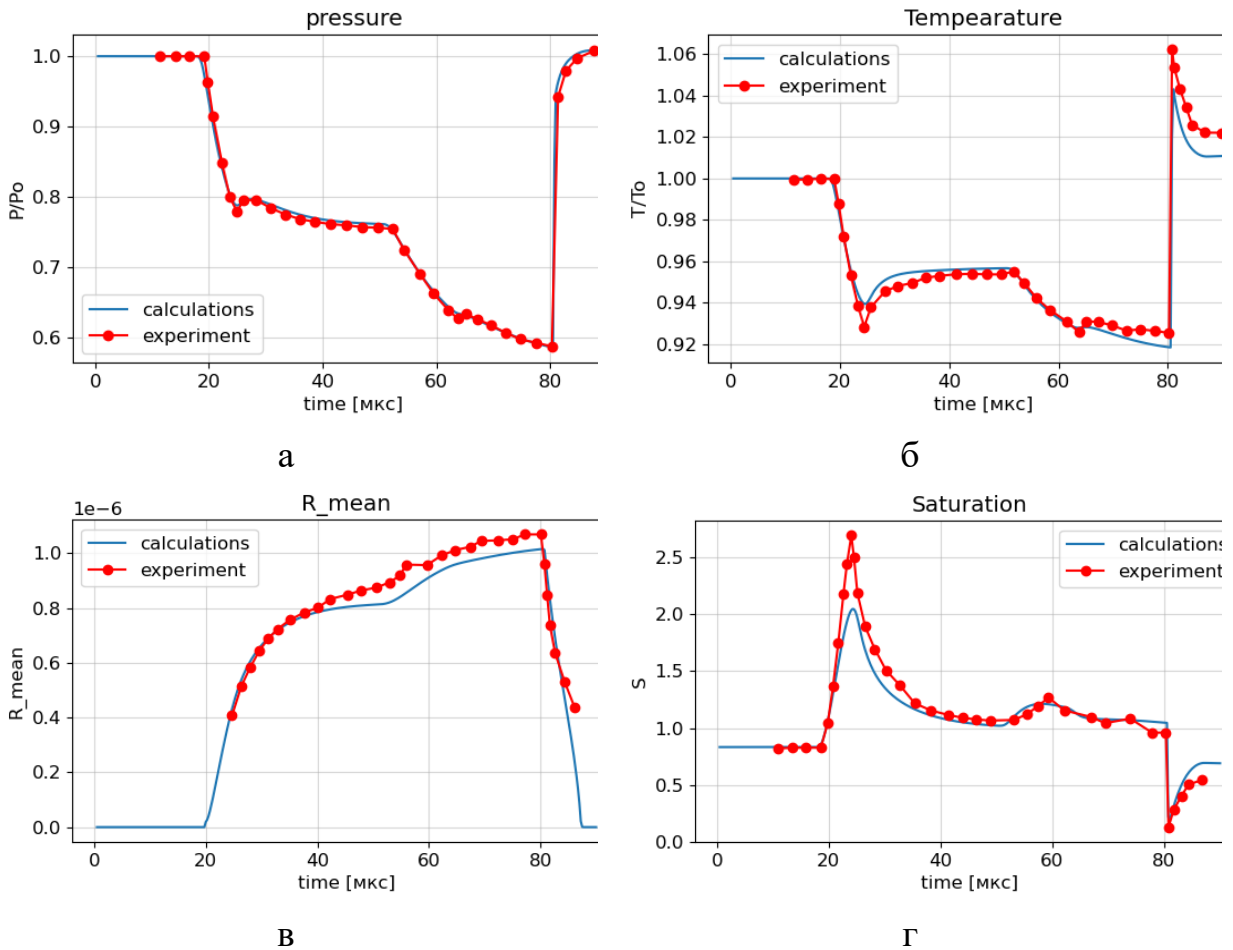


Рисунок 3.6. Сравнение результатов эксперимента и вычислений: а) давление, б) температура, в) средний радиус частиц [м], г) насыщение

На графике изолиний (рисунок 3.7) видно, что конденсация создает дополнительный скачок плотности в области ТНД который находится в ВВР.

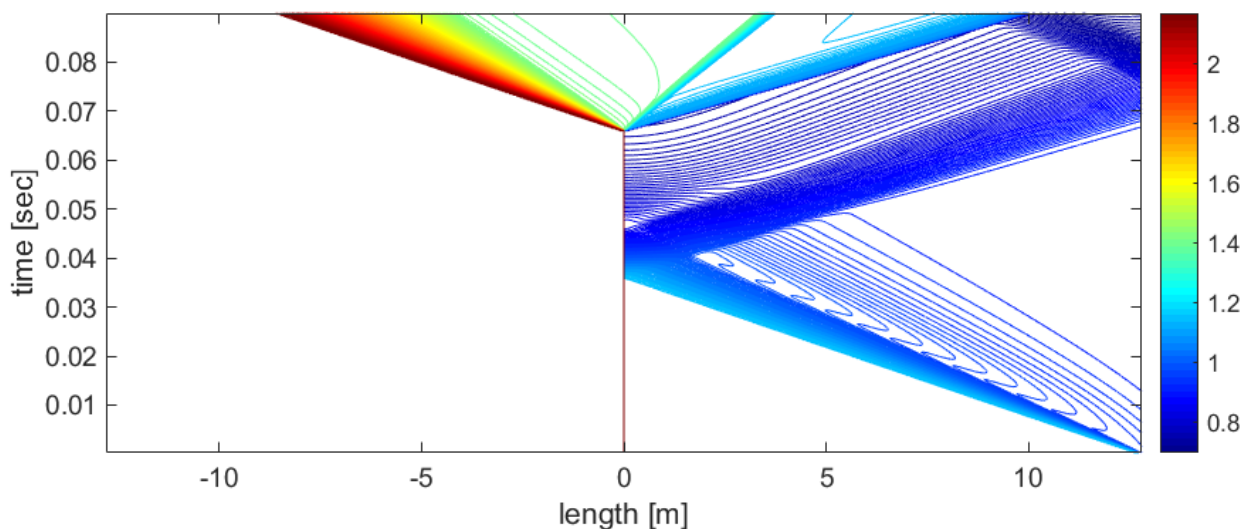


Рисунок 3.7. Изолинии плотности для областей КВД и ТНД.

Таким образом, модель мгновенного смачивания дала достоверные результаты для метода ММ при моделировании гетерогенной конденсации. Дополнение ММ в части функции деактивации частиц дает более естественный подход для моделирования деактивации в отличие от подхода основанном на критическом зародыше капли. Приведенное сравнение с экспериментом по конденсации в аэродинамической трубе подтверждает возможность использования ММ для моделирования гетерогенной конденсации.

Гетерогенная конденсация может сильно сказываться на параметрах потока, быть причиной скачков уплотнения и сильно зависит от функции распределения частиц по размеру. Малое количество примесей в эксперименте привело более чем 50-ти кратному увеличению первоначальных капель в размере, что могло бы способствовать очистке газа от примесей

#### 4. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГОМОГЕННОЙ-ГЕТЕРОГЕННОЙ КОНДЕНСАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА МОМЕНТОВ

Часто в прикладных приложениях возникают задачи, когда присутствуют одновременно гомогенная и гетерогенная конденсация [30]. Характер конденсации зависит от параметра насыщения. В случаях, когда степень насыщения  $S$  имеет очень большие значения в среде будет преобладать гомогенная конденсация. Будут образовываться зародыши и в случае, когда число чужеродных частиц недостаточно для осуществления конденсации по гетерогенному типу.

Для описания «расширенной» модели конденсации делается предположение, что гомогенная конденсация происходит только в тех случаях, когда число образующихся гетерогенных кластеров недостаточно, для того, чтобы все кластеры, которые могли бы образоваться в гомогенном случае стали бы активированы.

##### 4.1 Математическая модель гомогенно-гетерогенной конденсации

В рамках подхода к моделированию конденсации предполагается использование расширенной системы моментных уравнений. Дополнительно предполагается, что гомогенный и гетерогенный переходы происходят независимо и поэтому система моментных уравнений может быть представлена как совокупность двух систем моментных уравнений:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Q_0^{ho}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i Q_0^{ho}) = J^{ho} - \int_0^{\infty} J^{he} dr \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Q_1^{ho}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i Q_1^{ho}) = r_* \left( J^{ho} - \int_0^{\infty} J^{he} dr \right) + Q_0^{ho} \dot{r} \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Q_2^{ho}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i Q_2^{ho}) = (r_*)^2 \left( J^{ho} - \int_0^\infty J^{he} dr \right) + 2Q_1^{ho} \dot{r} \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial(\rho \alpha^{ho})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i \alpha^{ho})}{\partial x_i} = \frac{4}{3} \pi \rho_l \left( r_*^3 \left( J^{ho} - \int_0^\infty J^{he} dr \right) + 3\dot{r} \rho Q_2 \right) \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Q_0^{he}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i Q_0^{he}) = \varphi_0^{he} \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Q_1^{he}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i Q_1^{he}) = r_* \varphi_1^{he} + Q_0^{he} \dot{r} \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Q_2^{he}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i Q_2^{he}) = (r_*)^2 \varphi_2^{he} + 2Q_1^{he} \dot{r} \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial(\rho \alpha^{he})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i \alpha^{he})}{\partial x_i} = \frac{4}{3} \pi \rho_l \rho Q_2^{he} \dot{r} \quad (3.8)$$

Таким образом скорость гомогенной нуклеации связана с гетерогенной следующим образом:

$$J = J^{ho} - \int_0^\infty J^{he} dr \quad (3.9)$$

В случае, если число  $J^{ho}$  меньше чем  $J^{he}$  гомогенная конденсация не происходит, однако, в противном случае возможно как наличие гомогенной так и гетерогенной конденсации.

Для эволюции массовых долей паров конденсирующегося вещества и твердой фракции вводятся дополнительные уравнения:

$$\frac{\partial(\rho \alpha_{\max})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u \alpha_{\max})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v \alpha_{\max})}{\partial y} = -\frac{\rho \alpha_{\max} v}{y} \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial(l_{\max})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u l_{\max})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v l_{\max})}{\partial y} = -\frac{\rho l_{\max} v}{y} \quad (3.11)$$

Для системы моментных уравнений (3.1) – (3.11) делается предположение, что разные виды конденсации происходят отдельно, что может привести к тому, что восстановленная функция частиц по размерам будет иметь бимодальный вид. Оба вида конденсации ведут себя по-разному: возможно появление ситуаций, когда нуклеация и активация происходит в разное время.

#### 4.1.1. Замыкающие соотношения

Предполагается, что параметры смеси находятся в термодинамическом и калорическом равновесии. В отличие от рассмотренных гомогенного и гетерогенного случая в модели ведется учет массовой доли твердой фракции в воздушной смеси. Тогда теплофизические свойства смеси и уравнения состояния для смеси (калорическое и термическое) записываются следующим образом:

$$C_{Vmixt} = (1 - \alpha_{\max} - l_{\max})C_{Va} + \alpha_{\max}C_{VV} + \alpha(C_l - C_{VV}) + l_{\max}C_s \quad (3.12)$$

$$C_{Pmixt} = (1 - \alpha_{\max} - l_{\max})C_{Pa} + \alpha_{\max}C_{PV} + \alpha(C_l - C_{PV}) + l_{\max}C_s \quad (3.13)$$

$$R_{mixt} = (1 - \alpha_{\max})R_a + \alpha_{\max}R_V - \alpha R_V \quad (3.14)$$

$$\gamma_f = \frac{C_{Pmixt}}{C_{Vmixt}} \quad (3.15)$$

Где  $C_s$  - удельная теплоемкость твердой фракции.

Калорическое и термическое уравнения состояния имеют следующий:

$$T = \frac{(E - u^2 / 2) + \alpha L_0}{(1 - \alpha_{\max} - l_{\max})C_{Va} + \alpha_{\max}C_{VV} + \alpha(C_l - C_{VV}) + l_{\max}C_s} \quad (3.16)$$

$$p = \rho TR_{mixt} \quad (3.17)$$

$$a_f^2 = \gamma_f \frac{p}{\rho} \quad (3.18)$$

$$L = L_1 T + L_0 \quad L_1 = C_{PV} - C_l \quad (3.19)$$

Массовая доля воды вычисляется как сумма массовых долей жидкости  $\alpha$ , образовавшейся в гомогенном случае и гетерогенном случае:

$$\alpha = \alpha^{ho} + \alpha^{he} \quad (3.20)$$

#### 4.2 Численные моделирование гетерогенной нуклеации, денуклеации, испарения и средней скорости роста капли

Для системы уравнений (3.1) - (3.8) поиск некоторых осредненных значений будет вычисляться иначе, чем в случае чисто гомогенной или гетерогенной конденсации. Так, например, для вычисления среднего радиуса капли необходимо воспользоваться моментами  $Q_0^{ho}$ ,  $Q_1^{ho}$  и  $Q_0^{he}$ ,  $Q_1^{he}$ :

$$r_{mean} = \frac{Q_1^{ho} + Q_1^{he}}{Q_0^{ho} + Q_0^{he}} \quad (3.21)$$

Из-за неравномерности концентрации частиц функция гетерогенной нуклеации и денуклеации зависят от концентрации частиц в смеси. Таким образом, для вычисления этих функций необходимо знать количество частиц в единице массы g0.

Для вычисления скорости различных процессов предпочтительно использовать одну из предложенных ранее формул вычисления скорости роста зародышей.



#### 4.3 Численное исследование гомогенно гетерогенной конденсации

Для исследования влияние гомогенной конденсации в эксперименте Смолдерса проведена серия расчетов. В эксперименте [59] в КВД находился сухой воздух.

Если сделать предположение, что в камере высокого давления массовая доля воды была такой же, как и в остальных областях, то это может изменить результаты вычислительного эксперимента. Образование гомогенных кластеров, сопровождаемое тепловыделением, может поменять значение давления, перенасыщения и температуры Рисунки 3.1-3.3.

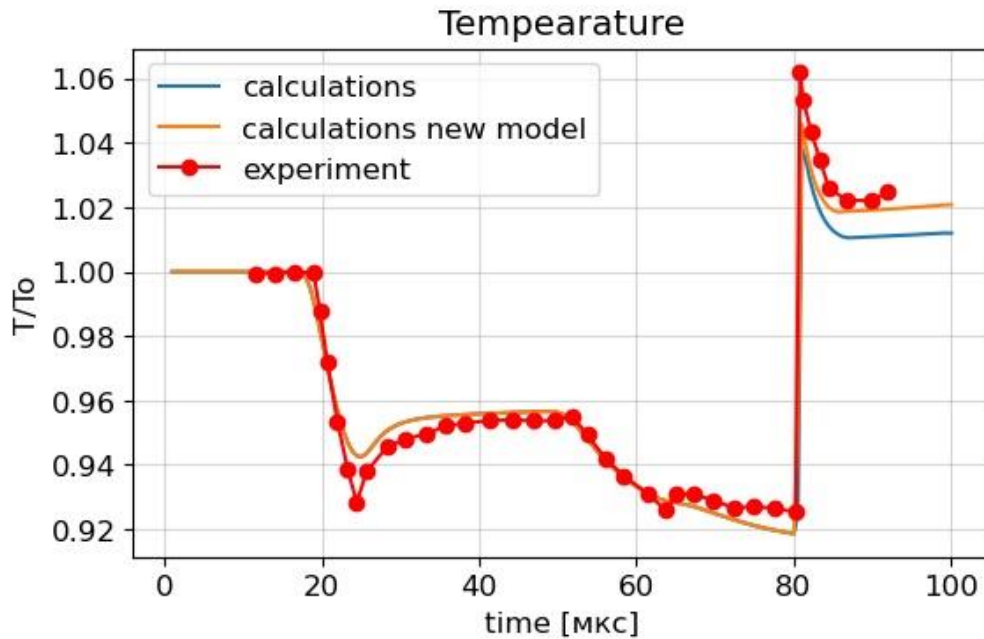


Рисунок 3.1. Распределение температуры в экспериментальной точке. Красным отмечены экспериментальные точки, синим - вычисления только в гетерогенной постановке, рыжим – результаты расчетов в гомогенно-гетерогенной постановке.

На рисунках 3.1, 3.2 видно более хорошее совпадение с экспериментом, однако давление за ударной волной стало выше (рисунок 3.3)

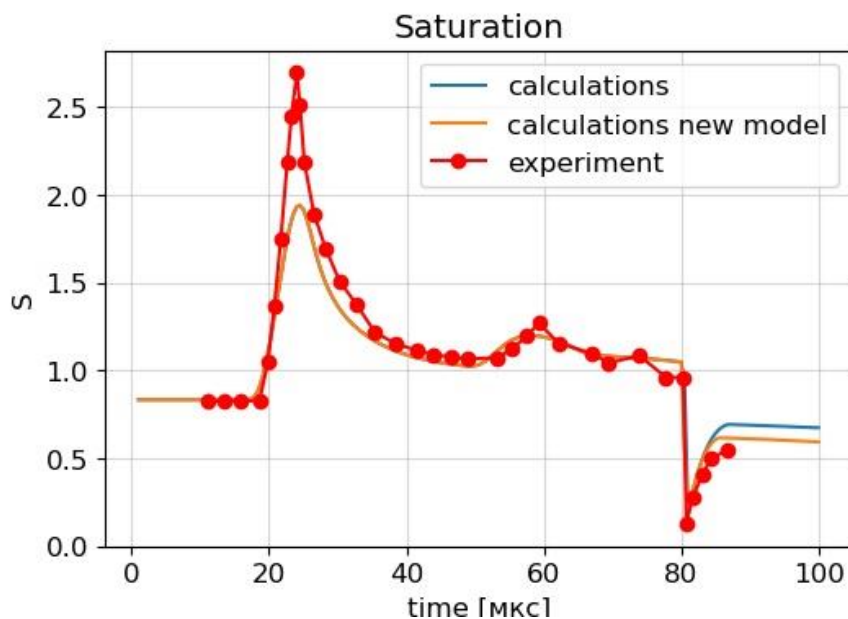


Рисунок 3.2. Распределение насыщения в экспериментальной точке. Красным отмечены экспериментальные точки, синим - вычисления только в гетерогенной постановке, рыжим – результаты расчетов в гомогено-гетерогенной постановке.

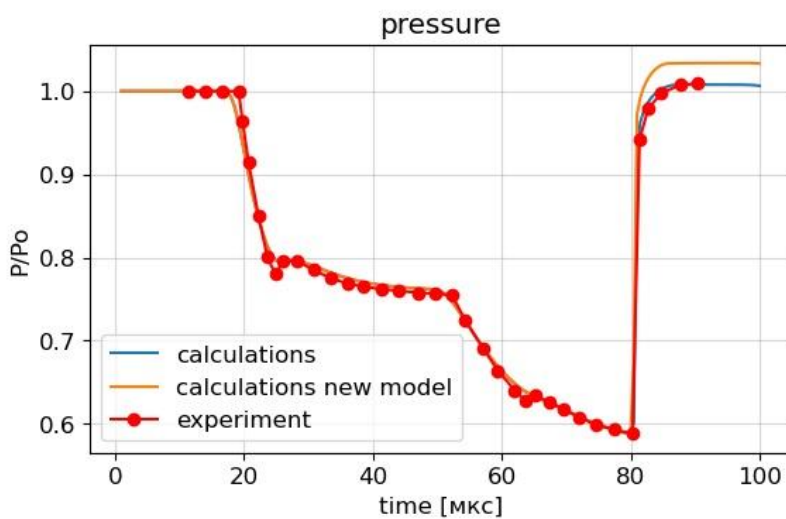


Рисунок 3.3. Распределение давления в экспериментальной точке. Красным отмечены экспериментальные точки, синим - вычисления только в гетерогенной постановке, рыжим – результаты расчетов в гомогено-гетерогенной постановке.

Это произошло в результате скачка конденсации в ВВР возникшем на границе КВД и ТНД, что привело к возрастанию давления за ударной волной (Рисунок 3.4)

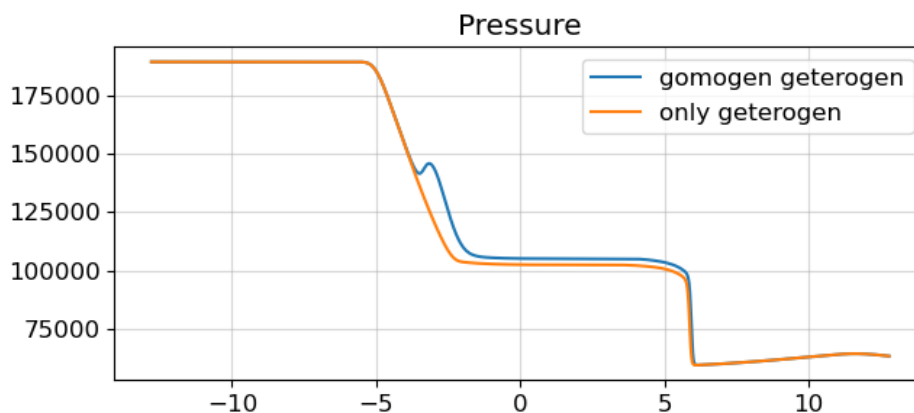


Рисунок 3.4. Распределение давление в Па на 80 мкс эксперимента. Синим изображен график модели с учетом гомогенной конденсации, рыжим – только гетерогенный случай.

Повышение давления привело к тому что сильно возросла степень насыщения и гомогенная конденсация стала преобладать из-за недостаточной концентрации твердых частиц (рисунки 3.5-3.7).

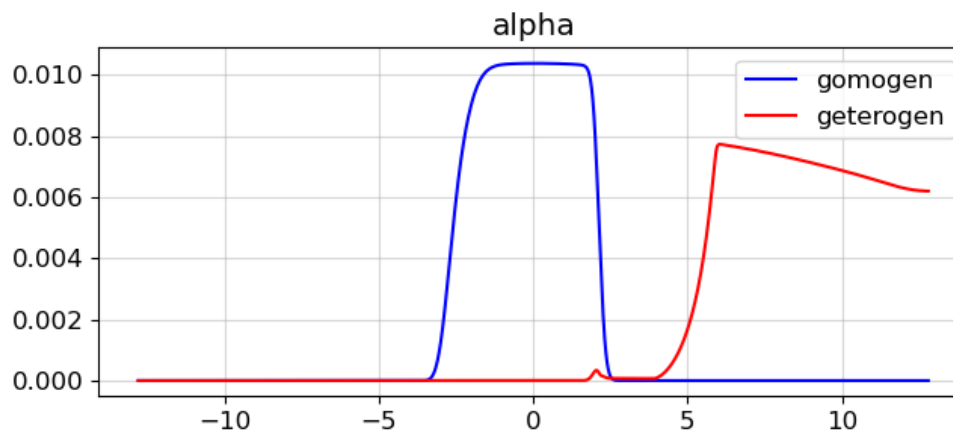


Рисунок 3.5. Распределение концентрации конденсата на 80 мкс эксперимента. Синим изображен график образовавшегося гомогенного конденсата, красным–гетерогенный случай.

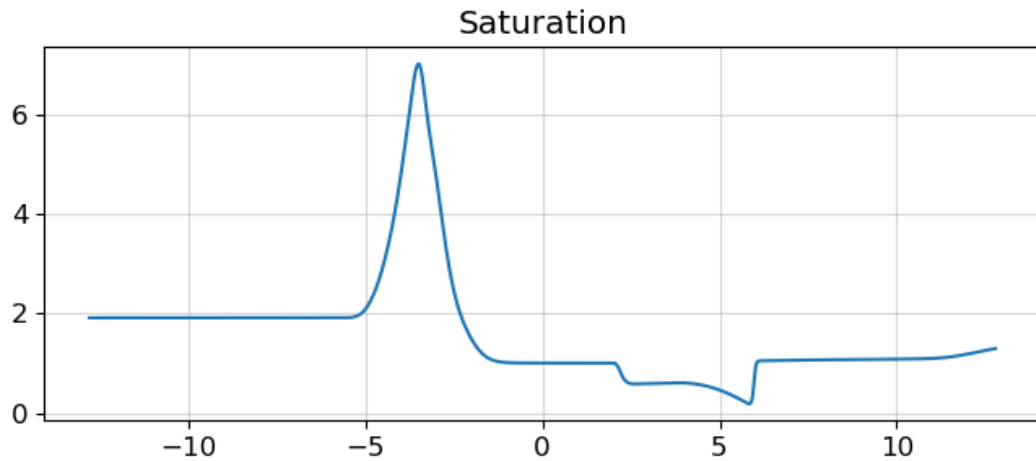


Рисунок 3.6. Распределение насыщения на 80 мкс эксперимента.

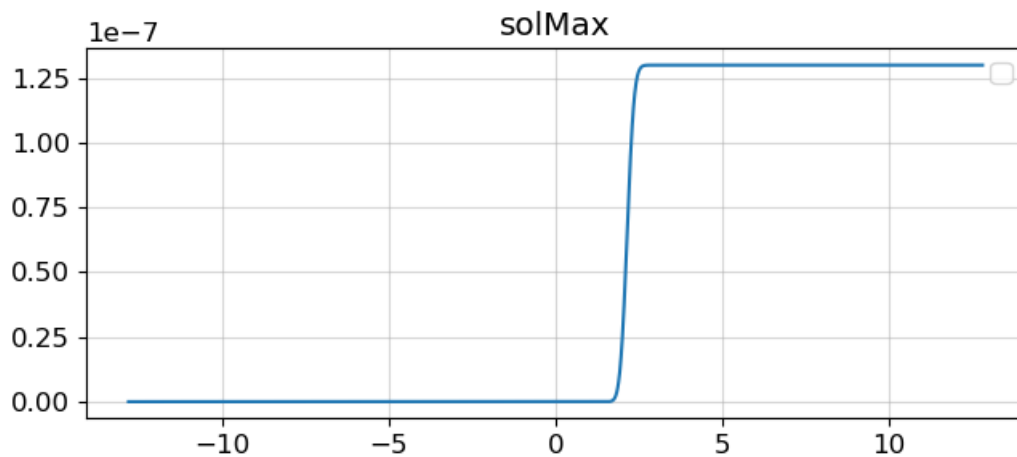


Рисунок 3.7. Распределение концентрации твердых частиц на 80 мкс эксперимента.

Дополнительно был проведен численный эксперимент, в котором мы положили массовую долю конденсирующейся фазы  $\alpha_{\max}$  равной 0 в КВД.

На рисунке 3.8 видно, что скачка конденсации не произошло в ВВР из-за низкой концентрации  $\alpha_{\max}$ .

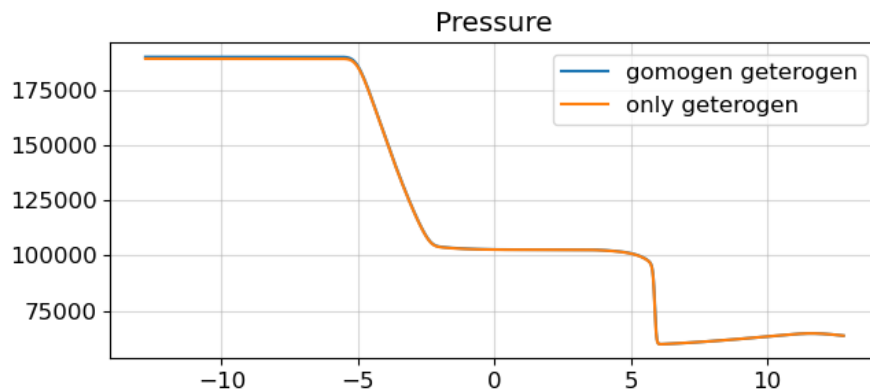


Рисунок 3.8. Распределение давления на 80 мкс эксперимента.

Насыщение едва превышает единицу (рисунок 3.9). Однако этого достаточно для возникновения небольшой конденсации (рисунок 3.10).

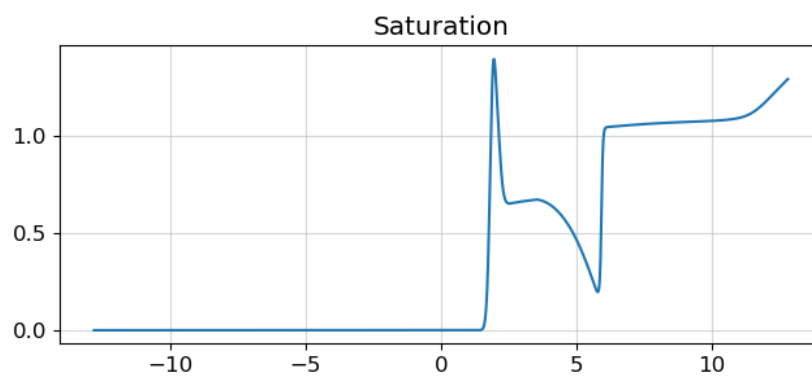


Рисунок 3.9. Распределение давления на 80 мкс эксперимента.

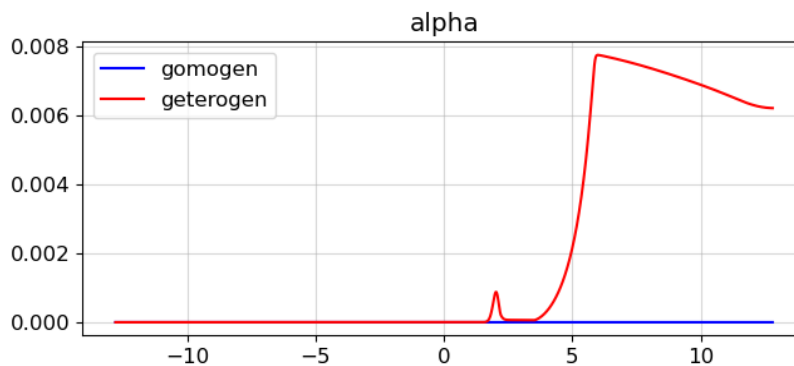


Рисунок 3.10. Распределение массовой доли конденсата на 80 мкс

Малая доля конденсации может быть объяснена малым количеством твердых частиц (рисунок 3.11) и малой массовой долей конденсирующейся фазы  $\alpha_{\max}$  (рисунок 3.12).

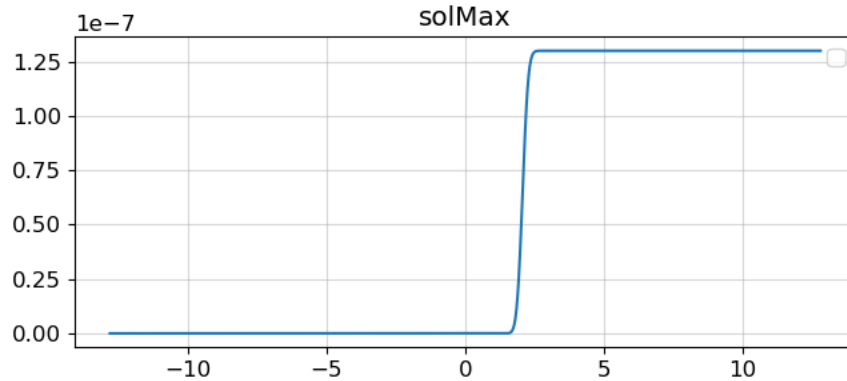


Рисунок 3.11. Распределение давления на 80 мкс эксперимента.

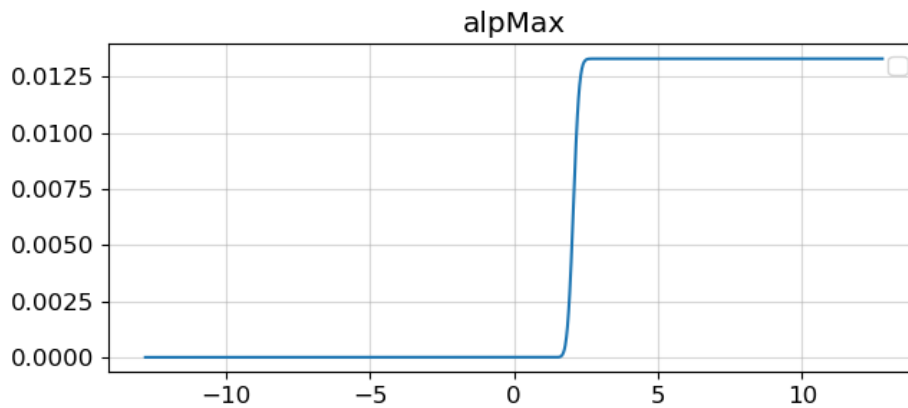


Рисунок 3.12. Распределение давления на 80 мкс эксперимента.

Если же предположить, что в КВД находится сухой воздух, результаты моделирования в точности совпадают с результатами для гетерогенной конденсации (рисунки 3.13-3.15)

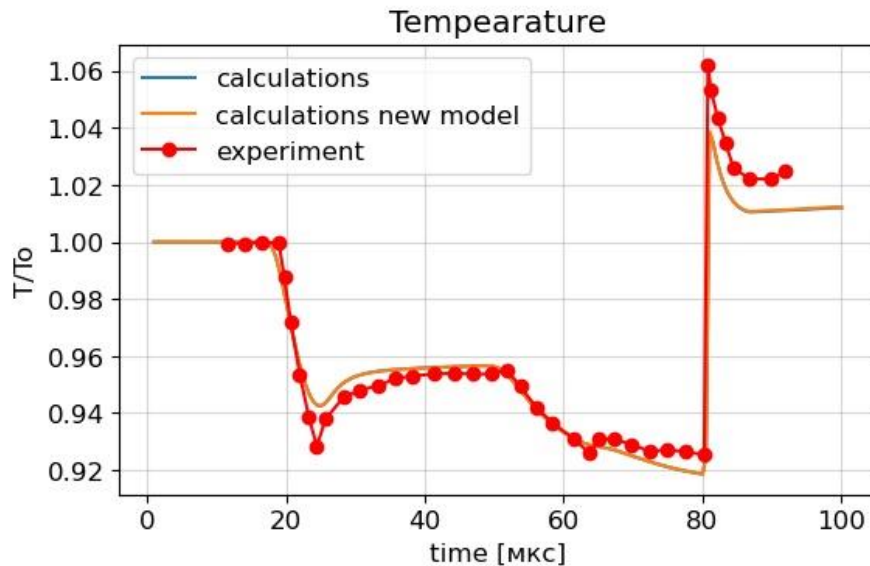


Рисунок 3.13. Распределение температуры в экспериментальной точке. Красным отмечены экспериментальные точки, синим - вычисления только в гетерогенной постановке, рыжим – результаты расчетов в гомогено-гетерогенной постановке.

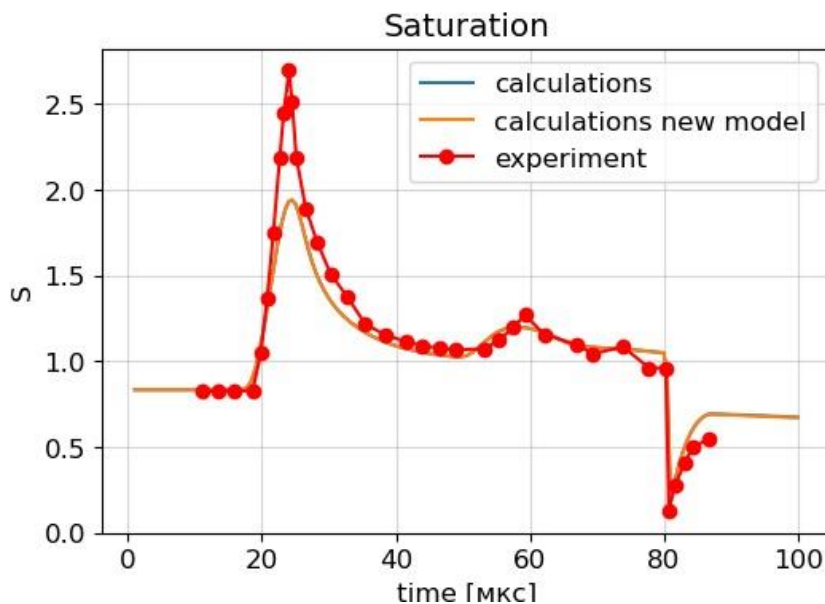


Рисунок 3.14. Распределение насыщения в экспериментальной точке. Красным отмечены экспериментальные точки, синим - вычисления только в гетерогенной постановке, рыжим – результаты расчетов в гомогено-гетерогенной постановке.

гетерогенной постановке, рыжим – результаты расчетов в гомогено-гетерогенной постановке.

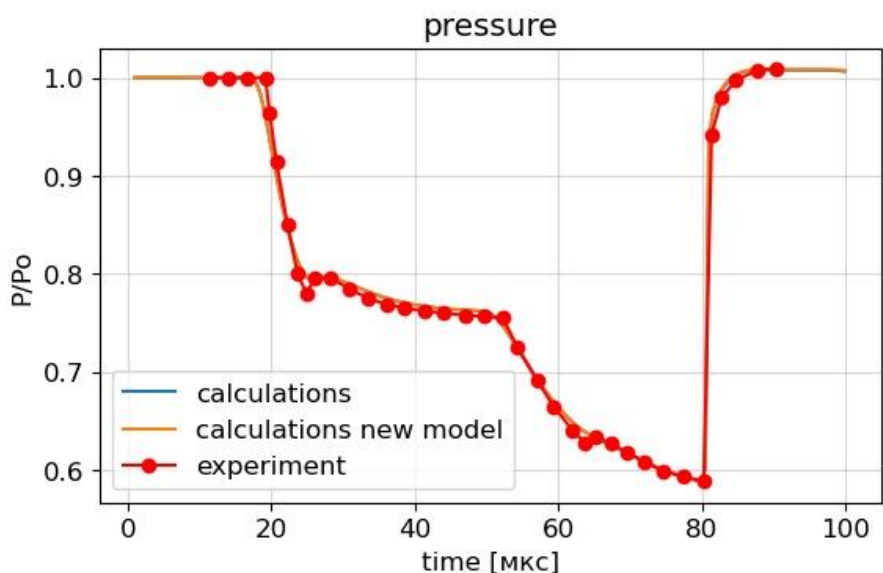


Рисунок 3.15. Распределение давления в экспериментальной точке. Красным отмечены экспериментальные точки, синим - вычисления только в гетерогенной постановке, рыжим – результаты расчетов в гомогено-гетерогенной постановке.

Таким образом показано, что в эксперименте Смолдерса преобладала гетерогенная конденсация.

#### 4.4 Параметрическое исследование гомогенной-гетерогенной конденсации на модернизированном тесте Сода.

Для более детального исследования модели были проведено многопараметрическое исследование модели в ударной трубе с различными концентрациями смеси.

За основу исследования был рассмотрен тест Сода для гомогенной конденсации [50]. Рассматривается начальная стадия течения, возникающего после разрыва мембраны в плоской ударной трубе. Труба имеет длину в 1



метр, заполнена влажным азотом с примесями твердых частиц, мембрана расположена точно посередине, давление в камере высокого давления  $p_4=1.0$  бар, влажность  $S=0.82$ . В камере низкого давления  $p_1=0.3$  бар, влажность  $S=0.246$ . Температура везде равна  $295\text{K}$ . Массовая доля воды  $\alpha_{\max}$  в обеих камерах трубы в начале процесса  $0.01375$ . Размер частиц варьируется от  $15\text{ нм}$  до  $25\text{ нм}$ . Для дальнейших экспериментов в модели Герца-Кнудса роста капли было взято значение  $\beta$  равное  $0.125$ .

В данном численном эксперименте сделано предположение количество частиц в килограмме смеси равно  $1.765 \cdot 10^{15} \text{ кг}^{-1}$ . Концентрация твердых частиц в данном случае составит  $3.0815 \cdot 10^{-4} \text{ кг}$ . Результаты первого эксперимента приведены на Рисунок 3.16

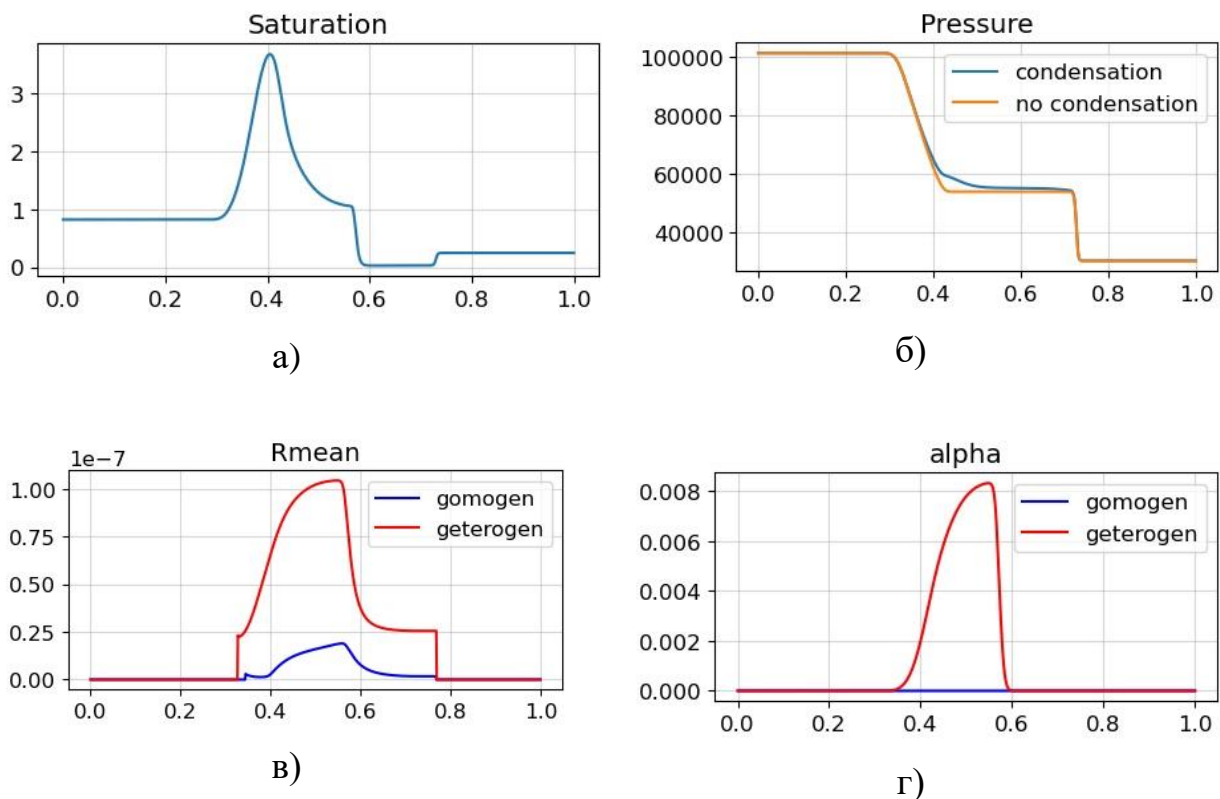


Рисунок 3.16. Результаты численного эксперимента в ударной трубе. а) – насыщение, б) – давление, в) – средний радиус капли, г) – массовая доля конденсата

Для данных параметров в рассматриваемой задаче преобладала Гетерогенная конденсация. Значение насыщения не превысило трех с половиной. Скачок давления произошел ближе к зоне веера волн разрежения в отличие от теста для гомогенной конденсации. Размер частиц вырос до 0.1 микрометра. Доля конденсата в газе составила чуть меньше одного процента.

В следующем численном эксперименте сделано предположение, что количество частиц в килограмме смеси равно  $1.765 \cdot 10^{14} \text{ кг}^{-1}$ . Концентрация твердых частиц в данном случае составит  $3.0815 \cdot 10^{-5} \text{ кг}$ . Результаты второго эксперимента приведены на рисунке 3.17

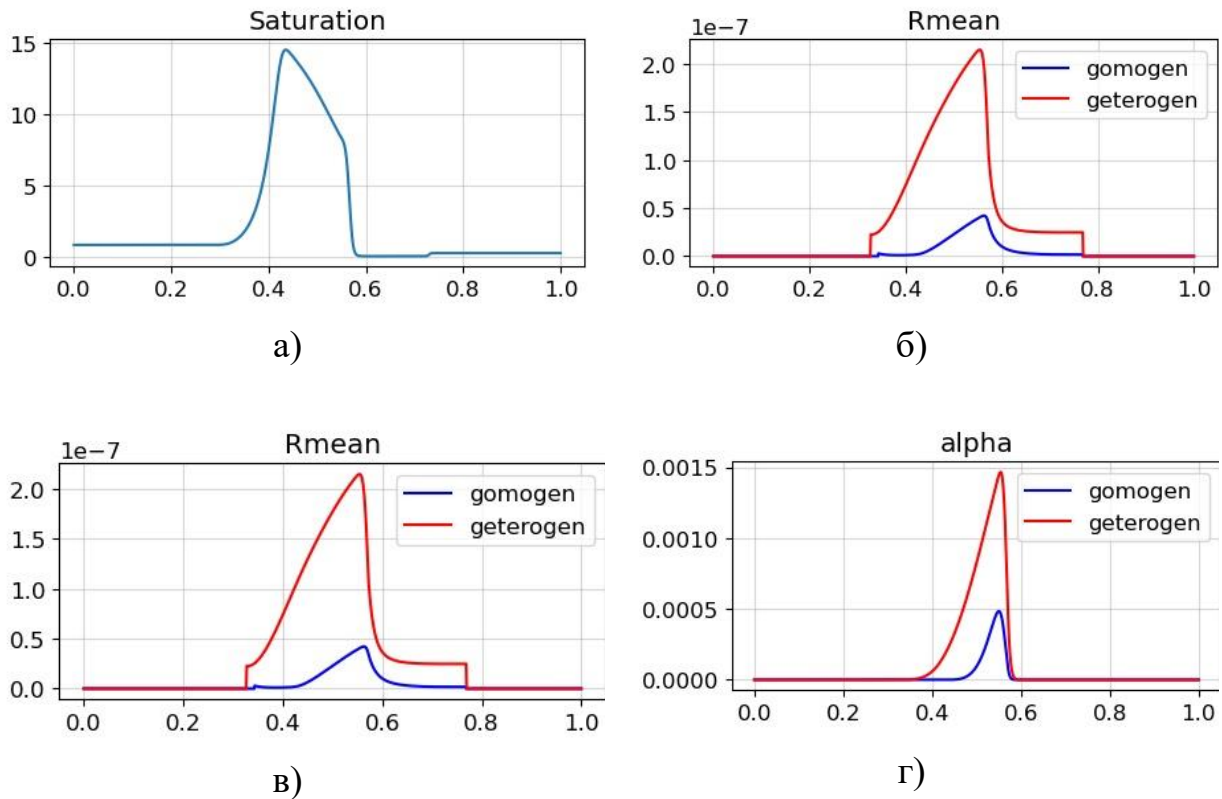


Рисунок 3.17. Результаты численного эксперимента в ударной трубе. а) – насыщение, б) – давление, в) – средний радиус капли, г) – массовая доля конденсата

При понижении числа частиц на порядок возросла степень насыщения скачок давления стал более плавным. Размер капель увеличился в полтора раза, а количество конденсата упало вдвое

В следующем численном эксперименте сделано предположение, что количество частиц в килограмме смеси равно  $3.53 \cdot 10^{12} \text{ кг}^{-1}$ . Концентрация твердых частиц в данном случае составит  $6.163 \cdot 10^{-7} \text{ кг}$ . Результаты третьего эксперимента приведены на рисунке 3.18

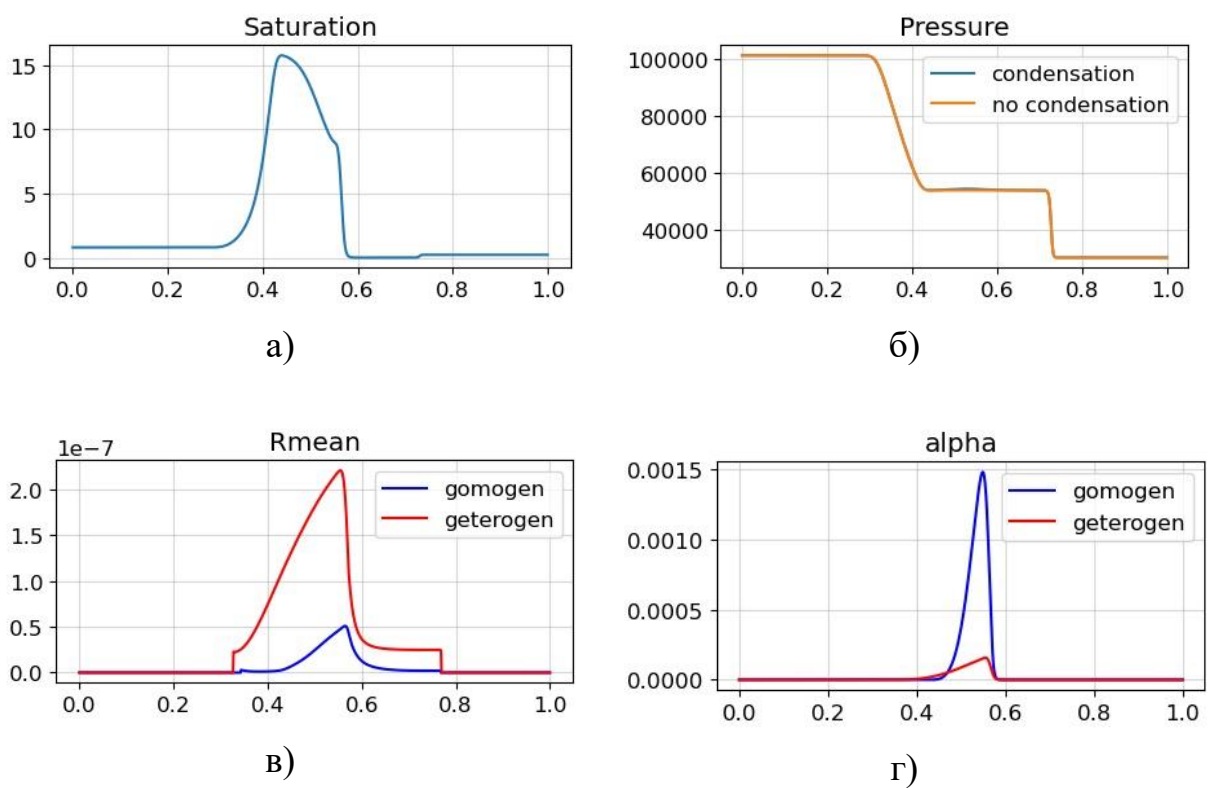


Рисунок 3.18. Результаты численного эксперимента в ударной трубе. а) – насыщение, б) – давление, в) – средний радиус капли, г) – массовая доля конденсата

Понижение числа частиц еще на два порядка привело к еще более высокому значению перенасыщения, еще большему уменьшению интенсивности скачка давления, большим значениям размеров гетерогенных капель. Однако количество конденсата значительно выросло, а гомогенная

конденсация стала преобладать. Хочется отметить, что отличие в концентрации воды в газе отличается в данном случае на четыре порядка.

В следующей серии экспериментов была повышена температура до 335 К, что привело к изменению концентрации массовой доли воды  $\alpha_{\max}$  до 0.1206. Варьировалось только количество частиц в килограмме смеси.

В следующем численном эксперименте сделано предположение, что количество частиц в килограмме смеси равно  $8.825 \cdot 10^{15} \text{ кг}^{-1}$ . Концентрация твердых частиц в данном случае составит  $1.5407 \cdot 10^{-3} \text{ кг}^{-1}$ . Результаты четвертого эксперимента приведены на рисунке 3.19

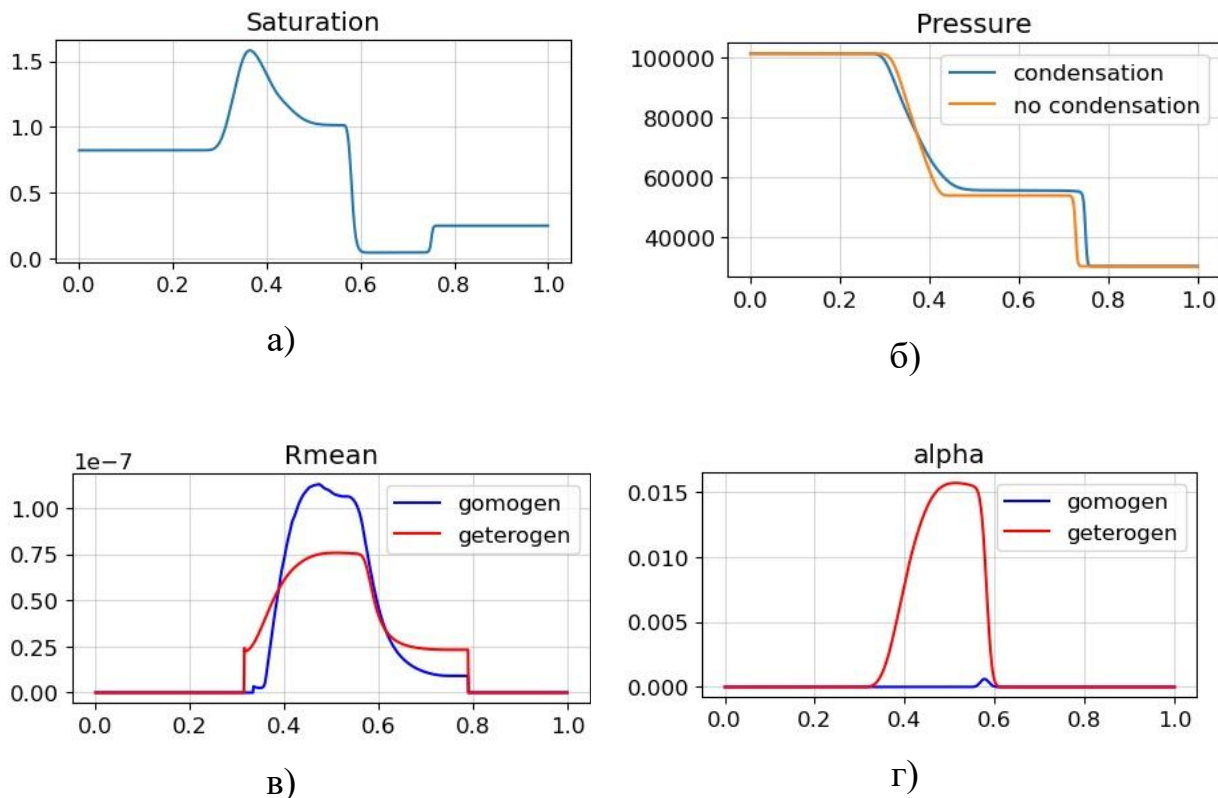


Рисунок 3.19. Результаты численного эксперимента в ударной трубе. а) – насыщение, б) – давление, в) – средний радиус капли, г) – массовая доля конденсата

Значения максимальное значение насыщения получилось равным 1.5. Конденсация на давлении сказалась более плавно. Однако размер гомогенных

кластеров оказался большим чем гетерогенных в данном случае. Не смотря на высокую концентрацию частиц произошла и гомогенная конденсация, но массовая доля воды содержащаяся в гомогенных кластерах очень мала.

В следующем численном эксперименте сделано предположение, что количество частиц в килограмме смеси равно  $1.765 \cdot 10^{15} \text{ кг}^{-1}$ . Концентрация твердых частиц в данном случае составит  $3.0815 \cdot 10^{-4} \text{ кг}$ . Результаты пятого эксперимента приведены на рисунке 3.20

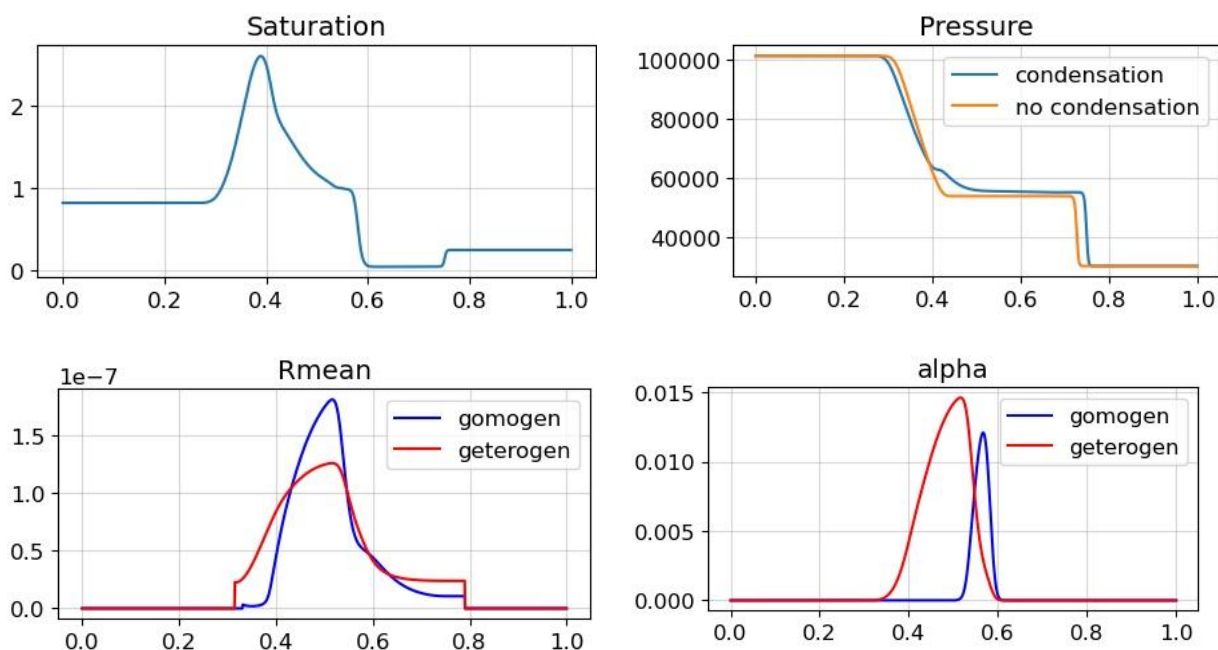


Рисунок 3.20. Результаты численного эксперимента в ударной трубе. а) – насыщение, б) – давление, в) – средний радиус капли, г) – массовая доля конденсата

На данном рисунке приведены результаты эксперимента при в пять раз меньшем числе частиц. Насыщение выросло. На графике давления появилась ступенька на правом фронте ВВР. Гомогенная конденсация произошла с запаздыванием.

В следующем численном эксперименте сделано предположение, что количество частиц в килограмме смеси равно  $3.53 \cdot 10^{14} \text{ кг}^{-1}$ . Концентрация

твердых частиц в данном случае составит  $6.163 \cdot 10^{-5} \text{ кг}$ . Результаты шестого эксперимента приведены на рисунке 3.21

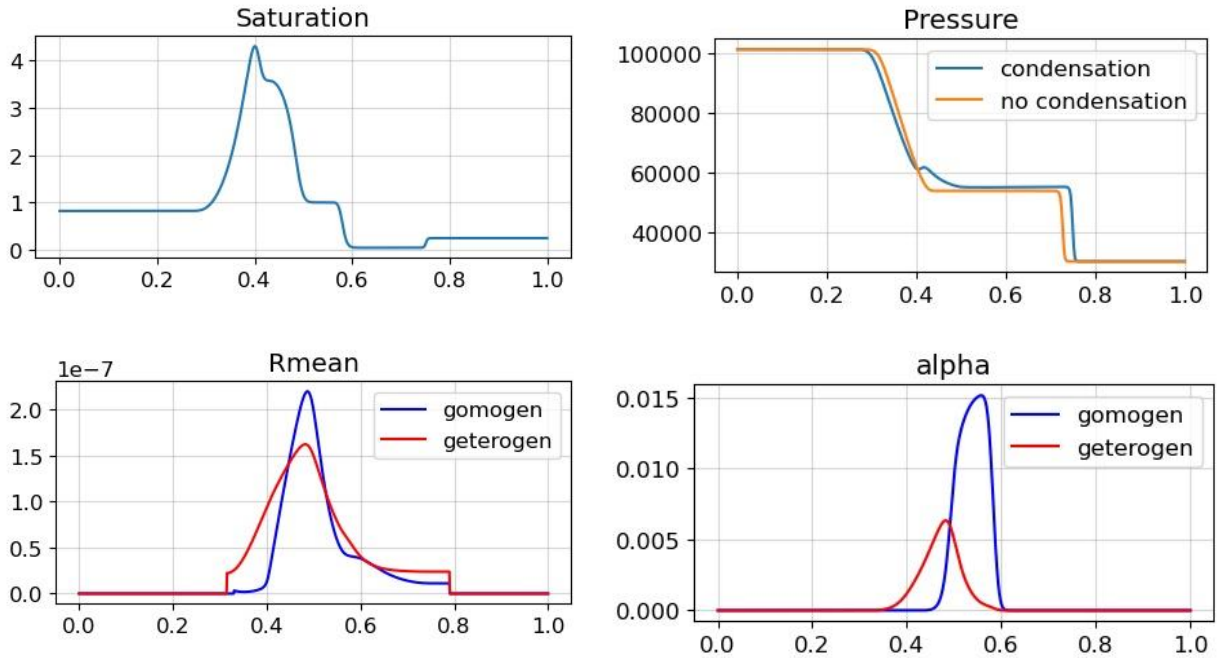


Рисунок 3.20. Результаты численного эксперимента в ударной трубе. а) – насыщение, б) – давление, в) – средний радиус капли, г) – массовая доля конденсата

Уменьшение концентрации инородных частиц привело к трехкратному преобладанию массовой доли жидкой фазы в гомогенной конденсации над массовой долей в гетерогенной в области за ударной волной.

В следующем численном эксперименте сделано предположение, что количество частиц в килограмме смеси равно  $8.825 \cdot 10^{14} \text{ кг}^{-1}$ . Концентрация твердых частиц в данном случае составит  $1.54074 \cdot 10^{-5} \text{ кг}$ . Результаты седьмого эксперимента приведены на рисунке 3.21

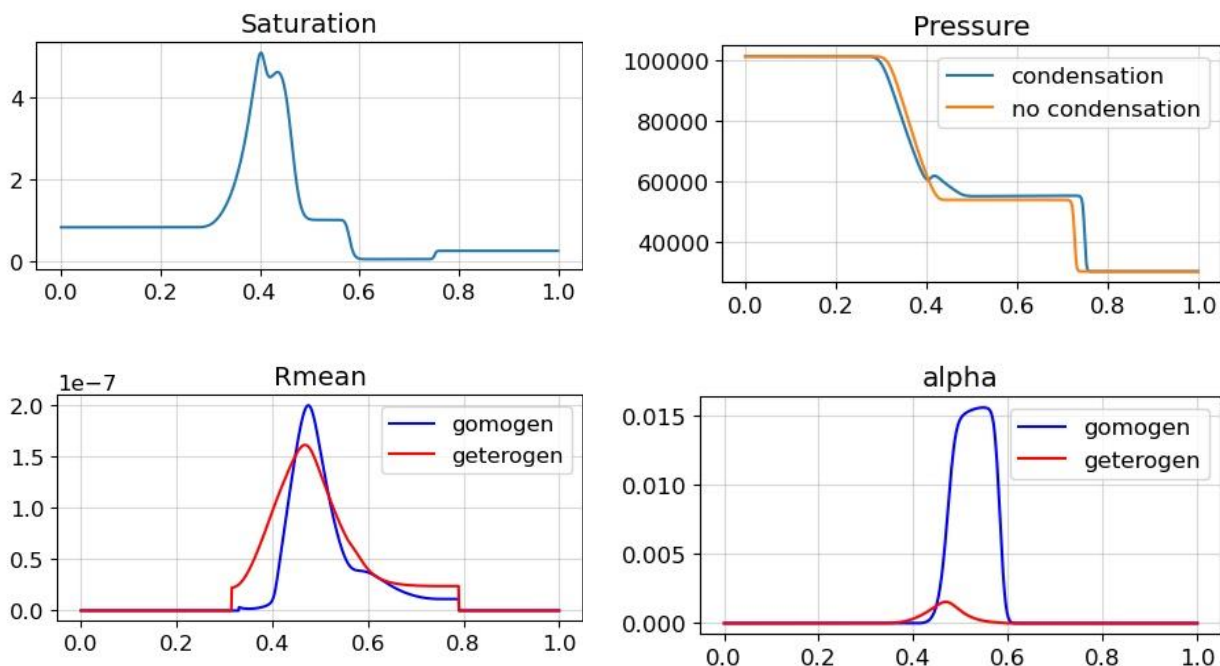


Рисунок 3.21. Результаты численного эксперимента в ударной трубе. а) – насыщение, б) – давление, в) – средний радиус капли, г) – массовая доля конденсата

Еще большее уменьшение концентрации частиц привело к преобладанию гомогенной конденсации над гетерогенной. Разница между массовыми долями воды в жидкой фазе в гомогенной и гетерогенной конденсации в данном случае составила 2 порядка.

Учет гомогенной конденсации необходим в случае если разница между концентрациями жидкости и твердых примесей меньше двух порядков. В этом случае возможно образование как гомогенных, так и гетерогенных кластеров. Преобладание гомогенной конденсации происходит при больших степенях насыщения и низкой концентрации твердых частиц. Их недостаточно для активации всех возможных кластеров, которые возникают при нуклеации. Гетерогенной конденсацией можно пренебречь, если концентрация твердых частиц меньше массовой концентрации воды более чем на 4 порядка.

## 5. ПОДХОД К ОСУЩЕСТВЛЕНИЮ ОЧИСТКИ ГАЗА ОТ МЕЛКОДИСПЕРСНЫХ ПРИМЕСЕЙ С ПОМОЩЬЮ УСТРОЙСТВА КОНДЕСАЦИОННО-ЭЖЕКЦИОННОГО ТИПА

На теплоэлектростанциях угольного типа существует проблема очистки воздуха от продуктов горения угля. На данный момент разработаны эффективные системы, которые позволяют очистить воздух от крупнодисперсных и среднедисперсных примесей. Тем не менее существует проблема очистки воздуха от мелкодисперсных примесей. Частицы размером в несколько микрон летучи и плохо коагулируют. Однако настолько мелкие частицы могут выступать в качестве ядер конденсации. Эта идея и лежит в основе предлагаемого очистного устройства.

Настоящая полезная модель относится к системам очистки воздуха и может быть использована для улавливания пыли, дымов и для очистки технологических газоздушных выбросов в атмосферу.

Существуют очистные сооружения скрубберы [99], которые предназначены для очистки газа с мелкодисперсной твердой фракцией (выбросы дыма, запыленность воздуха). В устройствах газовая или воздушная среда аэродинамически ускоряются в трубе Вентури, и газ сталкивается с разбрызгиваемой водой или другой жидкостью. Высокая скорость и турбулентность потока, возникающего в узкой части трубки Вентури, способствуют взаимодействию воды с твердыми примесями. Однако частицы размером менее 10 микрон плохо коагулируют и не могут быть эффективно отделены.

Эжекторы в основном используются в различных насосах [100] и системах охлаждения [106-110]. В эжекторе поток газа выходит из сопла и создает низкое давление среды в сужающейся секции, что вызывает



всасывание другой среды. Конденсат в струе может существенно влиять на параметры струи [111,112].

### 5.1 Описание составных частей полезной модели

В предлагаемом устройстве очистка газа происходит за счет увеличения размера твердых частиц, используемых в качестве ядер конденсации. В нашей системе мы хотим использовать это явление для очистки выхлопных газов с помощью водяного пара.

Полезная модель состоит из сопла 1, которое соединено с емкостью 3, из которой испаряется жидкость при помощи устройства нагрева 4 (Рисунок 5.1). Проходя через сопло 1, испарившаяся жидкость ускоряется за счет перепадов давления до сверхзвуковых скоростей и эжектирует за собой грязный поступающий в систему по воздухозаборнику 2 воздух в канал 9. Проходя по каналу 9, воздух замедляется, повышается давление в результате торможения воздуха, и он попадает в завихритель 5, где он раскручивается и поступает во второе сопло 7. Проходя по соплу 7 увлажненный воздух, смешанный с вредными примесями, расширяется за счет перепадов давления и геометрии сопла 7, охлаждается и происходит конденсация. Конденсация влаги происходит на ядрах конденсации, которыми в данном случае будут являться чужеродные частицы. Частицы тяжелеют из-за образовавшейся на них жидкой пленки. За счет центробежной силы конденсат, содержащий вредные примеси, оседает на стенках шламоборника 6. Более мелкие капли улавливаются в каплеуловителе 8, а очищенный газ поступает в выходное отверстие 10.

Основное внимание данной главы диссертации уделено рассмотрению потенциальной возможности увеличения инородных частиц до размеров, необходимых для их разделения в каплеуловителе. Таким образом, одним из важнейших элементов устройства для очистки газоздушных выбросов

является паровоздушный эжектор, схема которого представлена на рисунке 5.1. Рабочая среда (водяной пар) поступает на вход сопла Лавалья (сопла). № 1). Пар, протекающий в этом сопле, расширяется, ускоряется и охлаждается. Конденсация воды происходит внутри сверхзвуковой части сопла (зародышеобразование и рост кластера), при этом появляется конденсационное тепловыделение и изменяются газодинамические параметры потока. Двухфазная струя, состоящая из водяного пара и водяных капель, вытекающих из сопла, эжектирует загрязненную газовую смесь, впрыскиваемую в приемную камеру эжектора и поступает с ней в диффузор или смесительную камеру. Последний состоит из конической и цилиндрической частей. В диффузоре газы, вытекающие из первого и второго сопел, смешиваются, сверхзвуковой поток замедляется на скачке уплотнения, и скорости постепенно выравниваются по потоку.

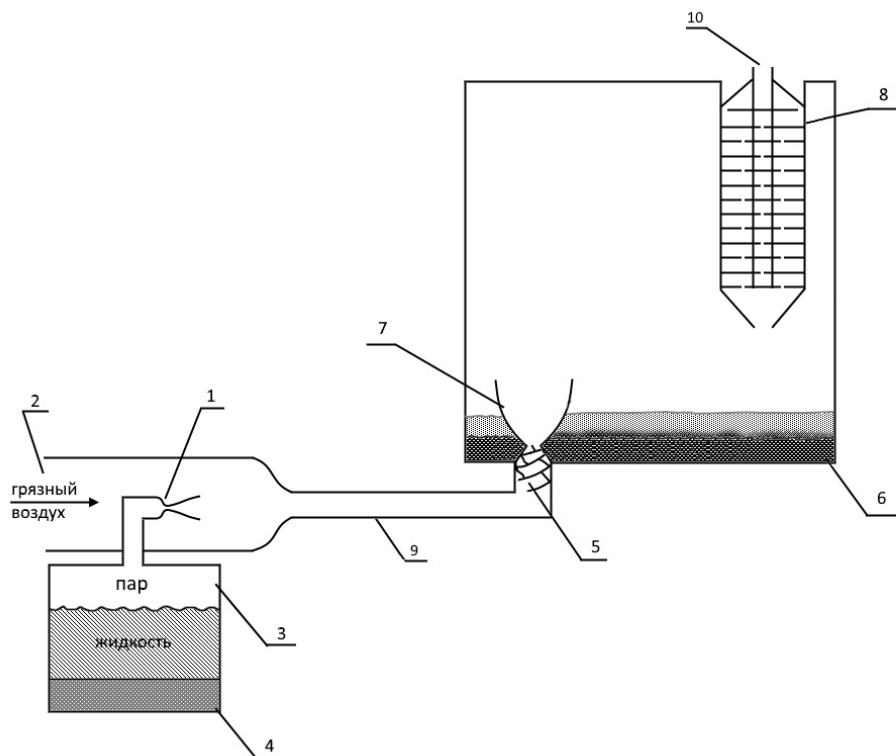


Рисунок 5.1. Схема полезной модели.

## 5.2 Система уравнений, описывающая гомогенную и гетерогенную конденсацию в эжекторе

Для численного моделирования газодинамических процессов и процессов фазовых переходов в эжекторе используется система уравнений Навье-Стокса для описания турбулентного течения вязкого теплопроводного газа в двумерной (осесимметричной) и нестационарной постановке и системы моментных уравнений для фазовых переходов гомогенного и гетерогенного типов. Необходимо учитывать переменность массовой доли твердых примесей и массовой доли воды в парообразной и жидкой фазе в разных областях эжектора.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = -\frac{\rho v}{y}, \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p - \tau_{yy})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv - \tau_{xy})}{\partial y} = -\frac{1}{y}(\rho v^2 - \tau_{yy}), \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uv - \tau_{yx})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v^2 + p - \tau_{xx})}{\partial y} = -\frac{1}{y}(\rho uv - \tau_{xx}), \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(u(\rho E + p) - (v\tau_{yy} + u\tau_{yx} - q_x))}{\partial x} + \frac{\partial(v(\rho E + p) - (v\tau_{yx} + u\tau_{xx} - q_y))}{\partial y} = -\frac{v(\rho E + p)}{y} \quad (5.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Q_0^{ho}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i Q_0^{ho}) = J^{ho} - \int_0^{\infty} J^{he} dr \quad (5.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Q_1^{ho}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i Q_1^{ho}) = r_* \left( J^{ho} - \int_0^{\infty} J^{he} dr \right) + Q_0^{ho} \dot{r} \quad (5.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Q_2^{ho}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i Q_2^{ho}) = (r_*)^2 \left( J^{ho} - \int_0^{\infty} J^{he} dr \right) + 2Q_1^{ho} \dot{r} \quad (5.7)$$

$$\frac{\partial(\rho\alpha^{ho})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i \alpha^{ho})}{\partial x_i} = \frac{4}{3} \pi \rho_l \left( r_*^3 \left( J^{ho} - \int_0^\infty J^{he} dr \right) + 3\dot{r} \rho Q_2 \right) \quad (5.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Q_0^{he}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i Q_0^{he}) = \varphi_0^{he} \quad (5.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Q_1^{he}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i Q_1^{he}) = r_* \varphi_1^{he} + Q_0^{he} \dot{r} \quad (5.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Q_2^{he}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i Q_2^{he}) = (r_*)^2 \varphi_2^{he} + 2Q_1^{he} \dot{r} \quad (5.11)$$

$$\frac{\partial(\rho\alpha^{he})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i \alpha^{he})}{\partial x_i} = \frac{4}{3} \pi \rho_l \rho Q_2^{he} \dot{r} \quad (5.12)$$

$$\frac{\partial(\rho\alpha_{\max})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u \alpha_{\max})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v \alpha_{\max})}{\partial y} = -\frac{\rho\alpha_{\max} v}{y} \quad (5.13)$$

$$\frac{\partial(\ell_{\max})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u \ell_{\max})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v \ell_{\max})}{\partial y} = -\frac{\rho \ell_{\max} v}{y} \quad (5.14)$$

$$\tau_{xx} = \frac{2}{3} \mu \left[ 2 \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{1}{y} u - \frac{\partial v}{\partial x} \right] \quad (5.15)$$

$$\tau_{yy} = \frac{2}{3} \mu \left[ -\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{1}{y} u + 2 \frac{\partial v}{\partial x} \right] \quad (5.16)$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left[ \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial x} \right] \quad (5.17)$$

$$q_x = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \quad (5.18)$$

$$q_y = -\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \quad (5.19)$$

Эффективная вязкость и теплопроводность определяется как сумма ламинарных  $\lambda_L$ ,  $\mu_L$  и турбулентных  $\lambda_t$ ,  $\mu_t$  составляющих:

$$\begin{aligned}\mu &= \mu_L + \mu_t \\ \lambda &= \lambda_L + \lambda_t\end{aligned}\tag{5.20}$$

В данной модели нет учета турбулентности в скорости роста капли, потому результаты данной модели будут показывать меньшее число конденсата на чужеродных частицах чем может быть на самом деле.

### 5.2.1 Модель турбулентности

В настоящей работе используется алгебраическая модель турбулентности. В качестве алгебраической модели турбулентности применяется модель Смагоринского. Она дает хорошие результаты в ядре потока. Модель может использоваться для отрывных течений с высокими числами Рейнольдса ( $Re = 10^5 - 10^7$ ).

В этой модели вихревая вязкость определяется из соотношения:

$$\mu_t = \rho(C_s h)^2 \sqrt{S_{ij} S_{ij}}\tag{5.21}$$

где  $S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$  - тензор скоростей деформации,  $h$  - характерный размер расчетной сетки (размер расчетной ячейки),  $C_s$  - коэффициент Смагоринского принимает значения в диапазоне  $0.1 \leq C_s \leq 0.24$ .

### 5.3 Численное моделирование функционирования эжектора в случае гомогенной конденсации

Для начала было сделано моделирование эжектора в гомогенной постановке, чтобы оценить возможное количество конденсата в системе. При этом предполагалось, что чужеродных частиц в системе не было.

### 5.3.1. Геометрические параметры эжектора

Геометрия рассчитываемого устройства представляет из себя два соосно расположенных конических сопла, изображенных на рисунке 8. Соответствующие размеры приведены в таблице 5.1. Пары воды поступают из области, обозначенной  $in\_1$  в первом сопле, и эжектируют воздух из области  $in\_2$  второго сопла (рисунок 5.2)

term	value, mm
$D_e$	4.0
$D_s$	4.3
$D_{cr}$	3.0
$D_n$	3.5
$D_{cil}$	5.5
$D_{out}$	7.0
$h$	0.5
$L_{s1}$	20
$L_{n1}$	60
$L_2$	80
$L_3$	350
$L_4$	80

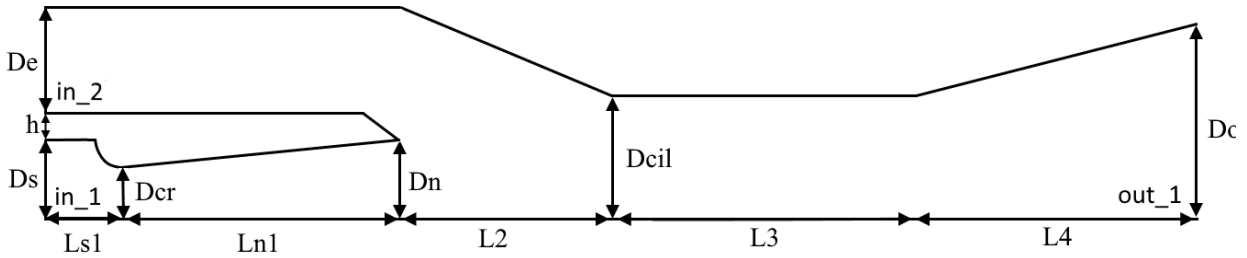


Рисунок 5.2. Геометрия системы эжекционной фильтрации.

### 5.3.2. Расчетная сетка

При численном моделировании используется блочно-структурированная расчетная сетка, изображенная на рисунке 5.3. Для лучшей “работы” граничных условий к соплам добавлена внешняя область. Сетка состоит исключительно из четырехугольных ячеек и имеет порядка 40 тысяч расчетных ячеек.

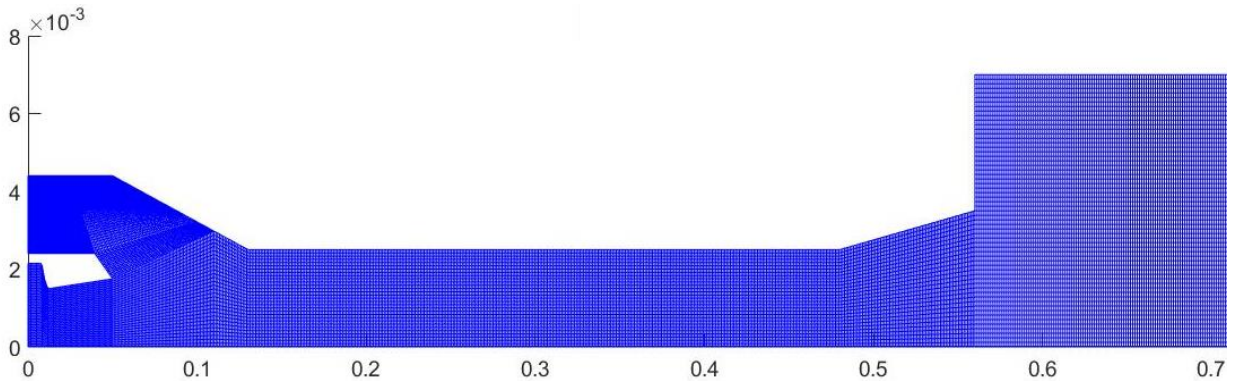


Рисунок 5.3. Расчетная сетка системы эжекционной фильтрации.

### 5.3.3. Граничные условия

На входе в сопла, в областях  $in\_1$  и  $in\_2$  задаются значения давления и температуры. Во внешней области за соплом  $out\_1$  задается постоянное давление. Значения температур и давлений приведены в таблице 5.2.

Таблица 5.2. Граничные условия

Область	Давление, Па	Температура, К
---------	--------------	----------------

<b>in_1</b>	$8.0 \times 10^5$	450
<b>in_2</b>	$1.5 \times 10^5$	500
<b>out_1</b>	$1.0 \times 10^5$	-

#### 5.3.4. Численное моделирование функционирования эжектора в случае гомогенной конденсации

Для оценки возможного количества конденсата в системе, было проведено моделирование работы эжектора в случае протекания только гомогенной конденсации. При этом предполагалось, что чужеродных частиц в системе не было.

Для эффективной работы устройства необходимо эффективное смешивание компонентов и образование как можно большего количества конденсата в смеси и как можно лучше осуществлялось перемешивание. Для эффективного перемешивания в данной системе выбрано очень длинная цилиндрическая часть второго сопла. Первое сопло имеет малую степень расширения для предотвращения образования большого количества конденсата внутри сопла.

На рисунке 5.4 и рисунке 5.5 видно, что существуют 3 области активного образования конденсата. Первая располагается внутри сопла, вторая – за первым соплом, третья в диффузоре второго сопла. В диффузоре второго сопла образуется более чем 11% конденсата воды. Ожидается, что в дальнейшем, газ, смешанный с парами и конденсатам будет попадать в шламоборник, где его скорость будет падать, что приведет к образованию еще большего количества конденсата на вредных примесях в газе.



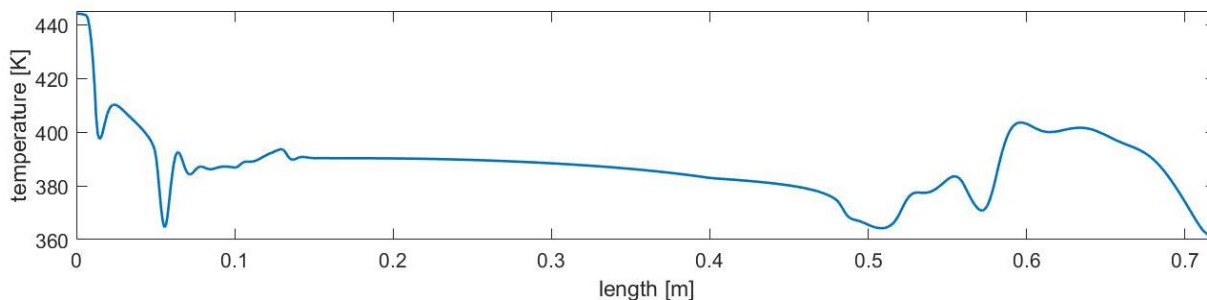


Рисунок 5.4. Распределение температуры вдоль оси.

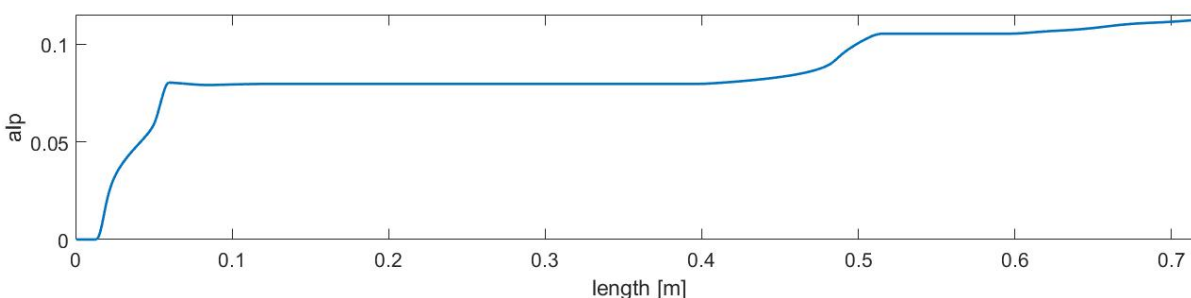


Рисунок 5.5. Распределение доли жидкой фракции вдоль оси

Дополнительно на конденсацию паров сильно влияет масса конденсируемого вещества в смеси рисунке 5.6. Учет распространения которой, введен в уравнении (5.14) системы уравнений (5.1)-(5.18)..

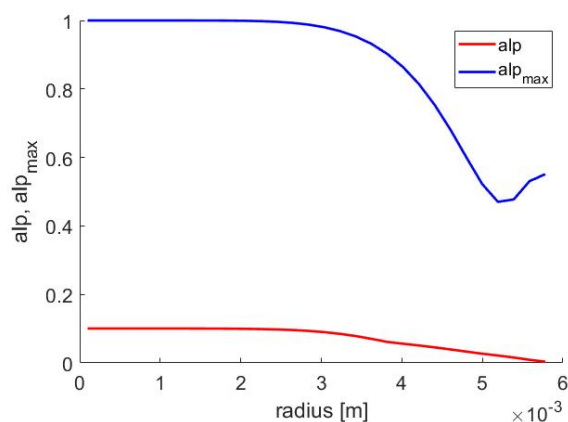


Рисунок 5.6. Распределение  $\alpha_{\max}$  вдоль радиуса сопла на расстоянии 0.5 м от входной секции первого сопла. Ось симметрии расположена в точке (0,0).

В численных экспериментах отношение инжестируемого газа к парам воды составило примерно 25%, при расходе воды примерно 120 литров в час.

## 5.4 Численное моделирование функционирования эжектора в случае гомогенно-гетерогенной конденсации

Для расчетов с присутствием чужеродных частиц для регуляризации модели были сделаны следующие допущения:

- 1) Считается, что гетерогенная конденсация может происходить только тогда, когда массовая доля конденсирующейся фазы  $\alpha_{\max}$  в пять раз больше чем массовая доля примесей. В противном случае смачивание частиц происходит неэффективно и использование гетерогенной модели конденсации может приводить к неадекватным результатам
- 2) При степени насыщения  $S > 1$  газ всегда конденсируется. Иногда резкое изменение физических параметров в сверхзвуковом потоке приводит к тому, что критический радиус зародыша  $r^*$  может сильно изменяться вдоль направления движения, что может приводить к появлению отрицательного роста капли при  $S > 1$ . Во избежание этого считается, что рост капли в таком случае идет по модели Герца-Кнута.

### 5.4.1. Геометрия расчетной области

Геометрия рассчитываемого устройства. Геометрия эжектора в данном случае была доработана с целью получить более интенсивную конденсацию. Соответствующие размеры приведены в таблице 5.3.

Таблица 5.3. Геометрия эжекторной системы

Параметр	Значение, мм
$D_e$	4.0
$D_s$	4.3

$D_{cr}$	3.0
$D_n$	3.5
$D_{cil}$	5.5
$D_{out}$	7.0
$h$	0.5
$L_{s1}$	20
$L_{n1}$	60
$L_2$	50
$L_3$	250
$L_4$	80

---

#### 5.4.2. Расчетная сетка

При численном моделировании используется блочно-структурированная расчетная сетка, изображенная на рисунок 5.7, 5.8. Сетка была сгущена к стенке диффузора и верхней стенке сопла. Сетка состоит исключительно из четырехугольных ячеек и имеет порядка 70 тысяч расчетных ячеек.

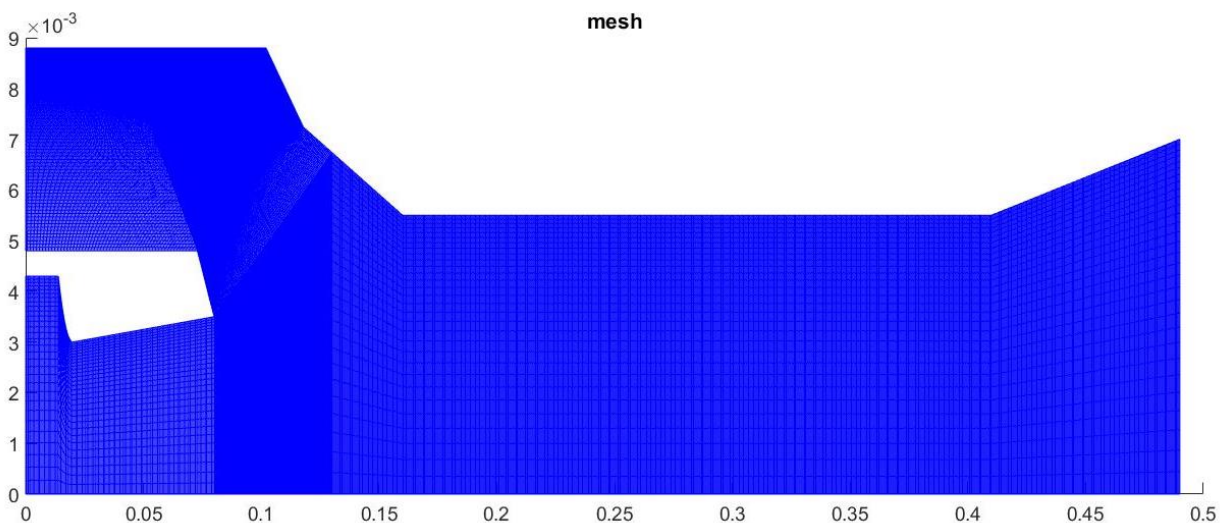


Рисунок 5.7. Расчетная сетка эжектора

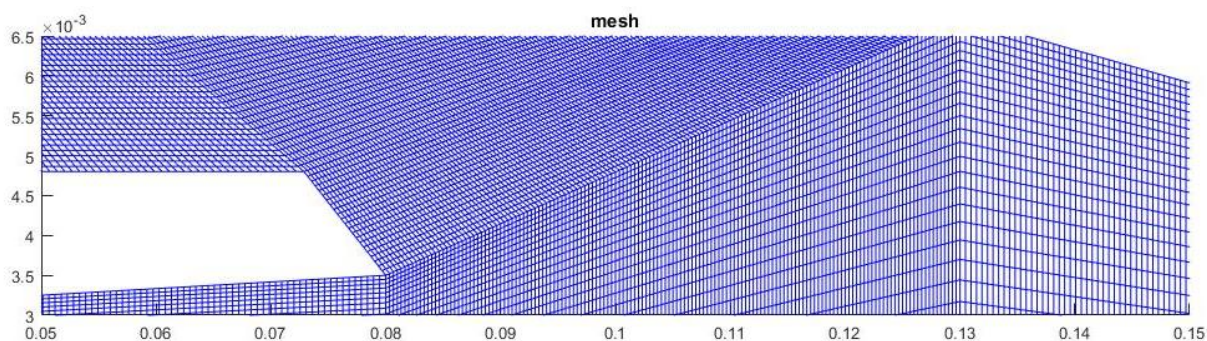


Рисунок 5.8. Расчетная сетка эжектора (крупный план).

#### 5.4.3. Граничные условия

На входе в сопла, в областях  $in\_1$  и  $in\_2$  задаются значения давления и температуры. Во внешней области за соплом  $out\_1$  задается постоянное давление. Значения температур и давлений приведены в таблице 5.4. Максимальная концентрация твердых частиц размером 50 нм составляла 0.005

Таблица 5.4. Граничные условия

Область	Давление, Па	Температура, К
$in\_1$	$8.0 \times 10^5$	437
$in\_2$	$1.75 \times 10^5$	350
$out\_1$	$1.0 \times 10^5$	-

#### 5.4.4. Результаты численного моделирования функционирования эжектора в случае гомогенно-гетерогенной конденсации

Результаты численных расчетов показали, что гетерогенная конденсация отсутствовала до критического сечения второго сопла. При этом произошедшее перемешивание в диффузоре привело к тому, что во втором сопле возникла гетерогенная конденсация. Однако из-за недостаточной степени перемешивания (рисунок 5.9, 5.10) и малой степени перенасыщения во втором сопле гетерогенная конденсация происходила гораздо менее интенсивно, чем гомогенная.

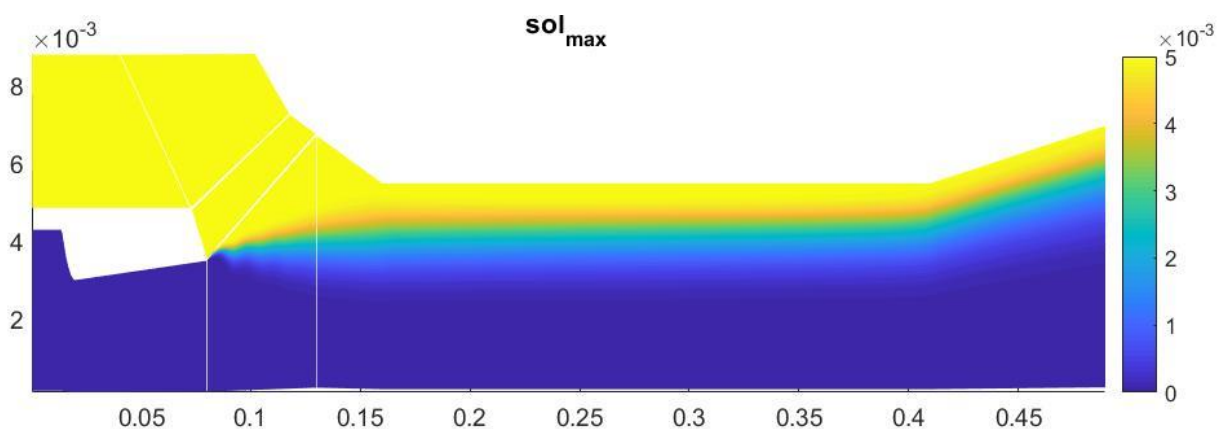


Рисунок 5.9. Распределение концентрации твердых частиц

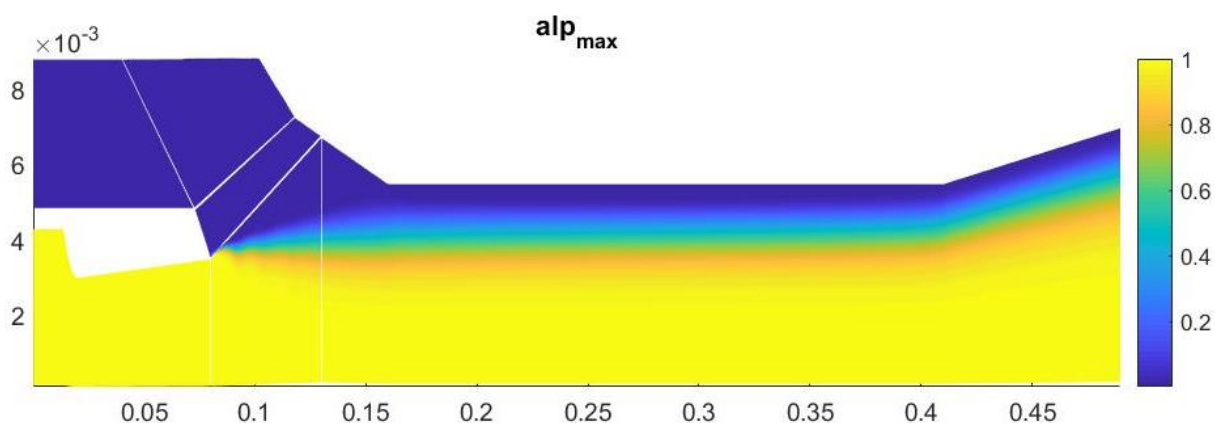


Рисунок 5.10. Распределение массовой доли конденсирующегося вещества

Количество конденсата на оси симметрии в данном случае составило около 13% (рисунок 5.12, 5.13). Большая часть гетерогенной конденсации произошла в области смешения около стенки сопла (рисунок 5.11). В приграничной области конденсация происходит слабо из-за повышения температуры в пограничном слое.

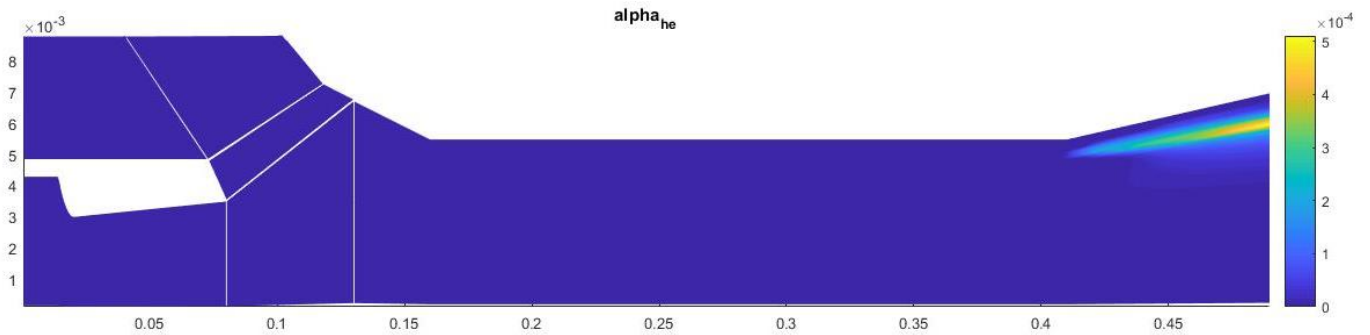


Рисунок 5.11. Изолинии гетерогенной конденсата

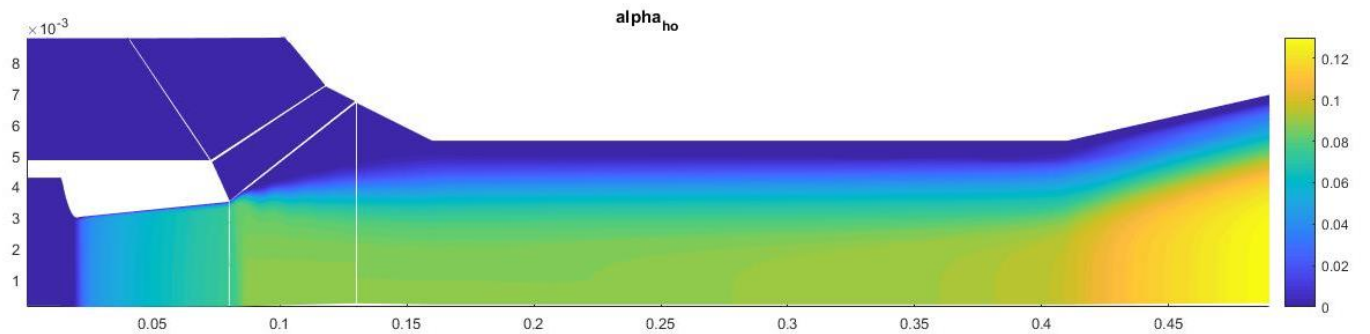


Рисунок. 5.12 Изолинии гомогенной конденсата

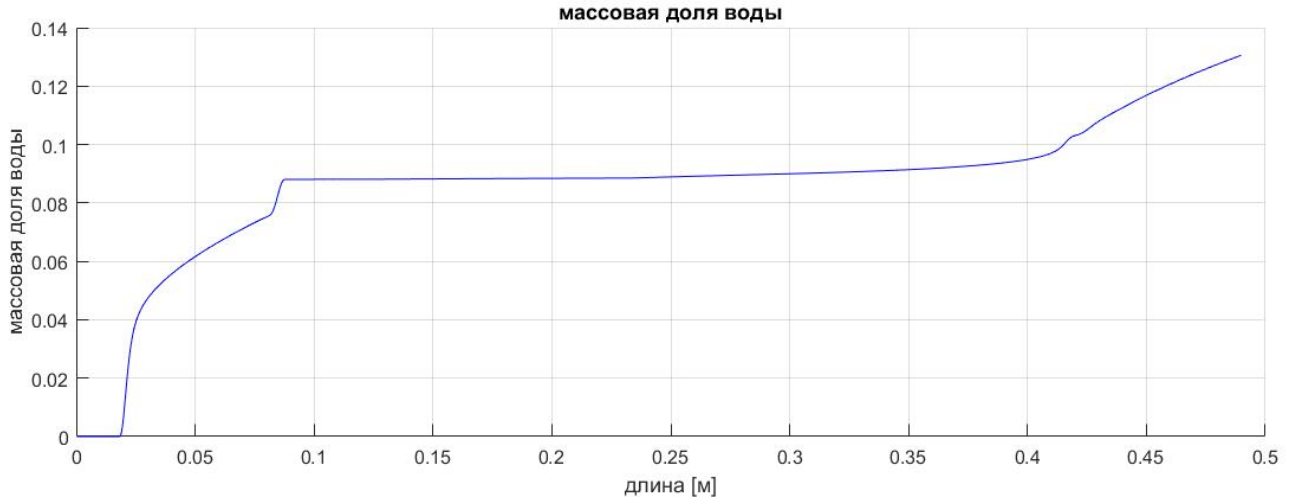


Рисунок 5.13. Доля воды вдоль оси симметрии

Исследование параметров на выходе из второго сопла показало, что в данном устройстве число гомогенных кластеров гораздо выше, чем гетерогенных, что препятствует большему росту гетерогенных капель. Это приводит к тому, что прирост общего объема гомогенных капель выше, чем гетерогенных, при меньшей скорости роста капли. При таких условиях гетерогенная конденсация проявляется слабо, что не позволяет каплям на твердых частицах существенно вырасти в размерах (рисунки 5.14 – 5.17).

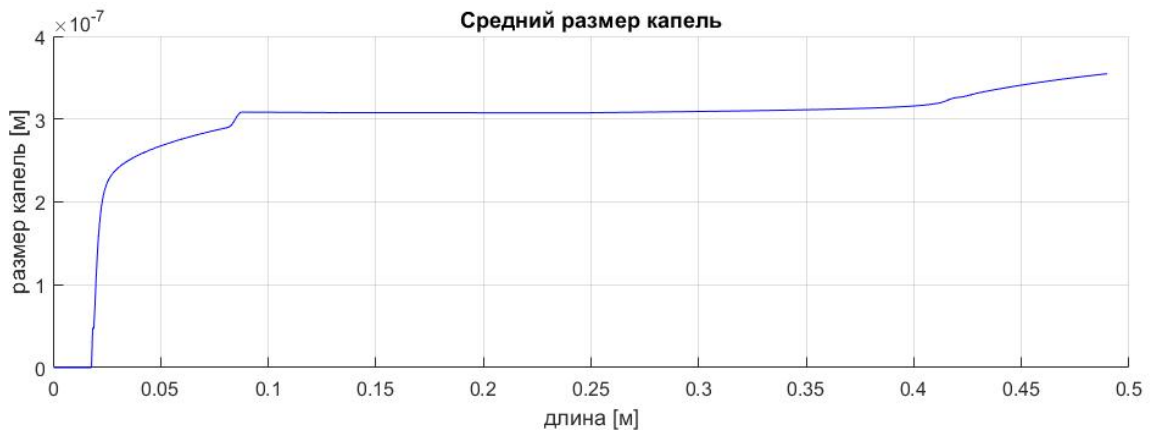


Рисунок 5.14. Средний размер гомогенных капель вдоль оси симметрии

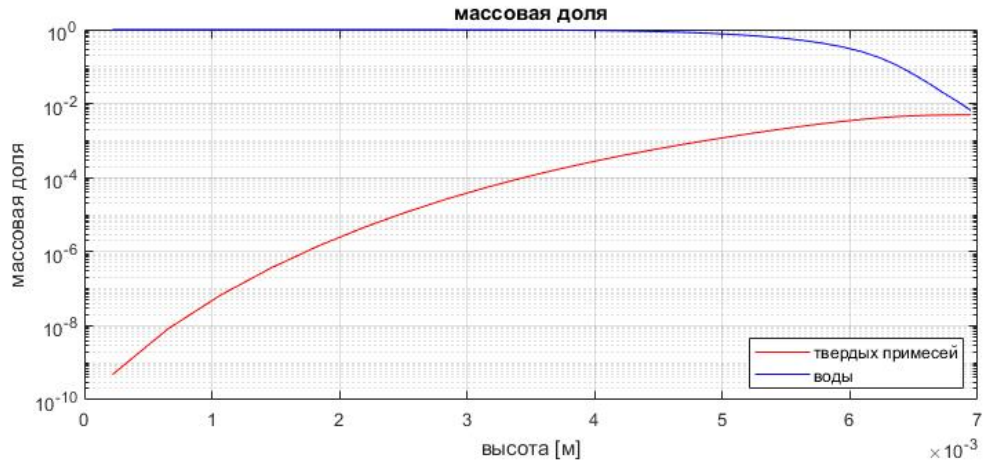


Рисунок 5.15. Массовая доля конденсирующейся фазы в логарифмическом масштабе.

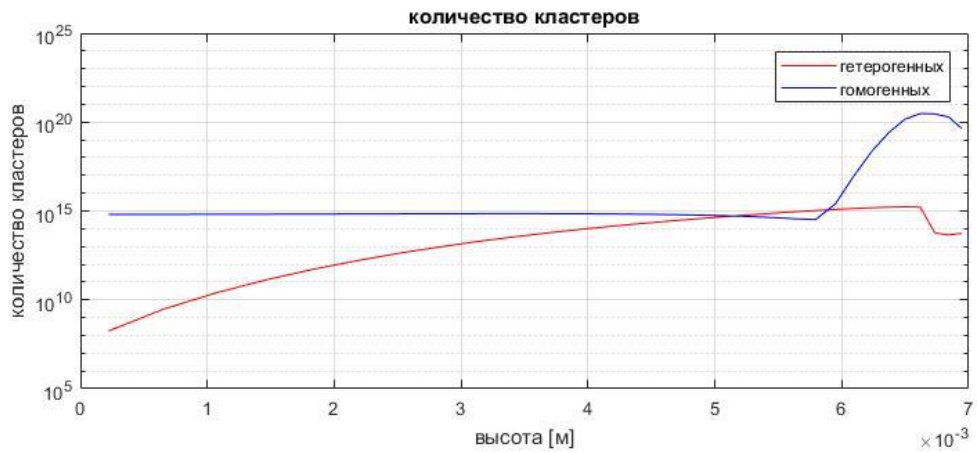


Рисунок 5.16. Количество образовавшихся кластеров в логарифмическом масштабе.

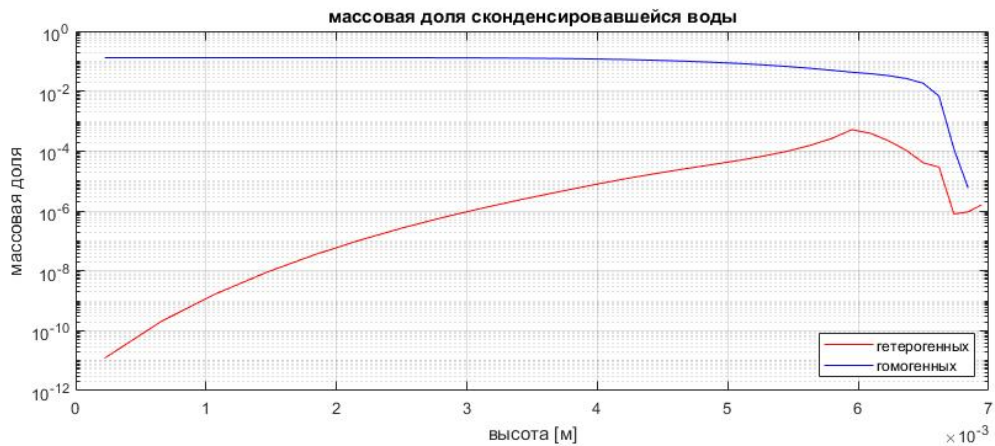




Рисунок 5.17. Массовая доля сконденсировавшегося вещества в логарифмическом масштабе.

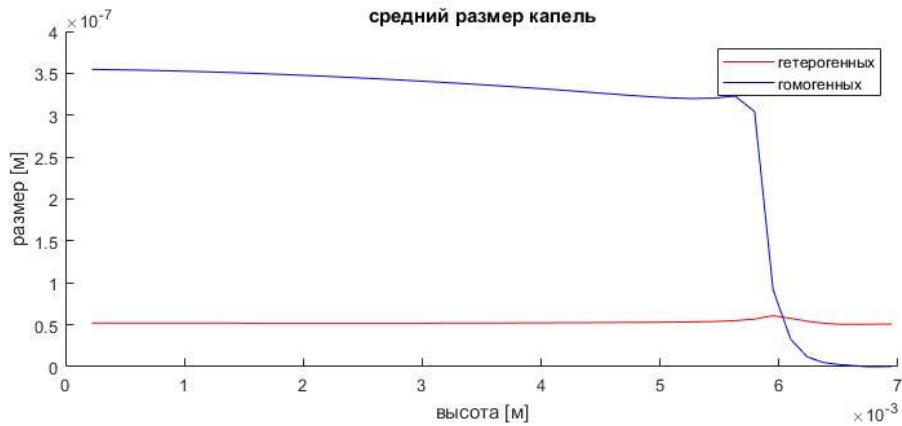


Рисунок 5.18. Средний размер капель

### 5.5 Исследование течения газок капельной смеси в сопле

Исследование закономерностей возникновения гетерогенных кластеров при гомогенно-гетерогенной конденсации было проведено для случая течения в сопле смеси твердых частиц и смеси водяного пара и воздуха. Исследовалось течение в экспериментальном сопле [51]. Однако, для более интенсивного протекания конденсации выходное сечение сопла было увеличено до значения 0.015м на выходе. На входе в сопло постоянными удерживаются давление и температура, концентрация твердых частиц и массовая доля конденсирующейся фазы (таблица 5.5). На выходе из сопла заданы свободные граничные условия. Было проведено 4 эксперимента с различным размером частиц. Размер частиц в экспериментах варьировался от 15 нм до 70 нм.

Таблица 5.5. Граничные условия

Физический параметр	Значение

Давление, Па	3.5e5
Температура, К	360
$l_{\max}$	0.005
$\alpha_{\max}$	0.2

Размер частиц значительно сказывается на преобладании одного вида конденсации над другим. Для крупных частиц гомогенная конденсация преобладает над гетерогенной (рисунок 5.19). Это связано с тем, что количества гетерогенных кластеров оказывается недостаточно для преобладания гетерогенной конденсации. Рост числа гомогенных кластеров настолько значителен (рисунок 5.21), что увеличение гетерогенных кластеров в размерах не может компенсировать в достаточной мере перенасыщение в воздухе. При этом рост размеров кластеров оказался незначительным. Увеличение размера гетерогенных капель составило 3 или менее раз (Рисунок 5.20).

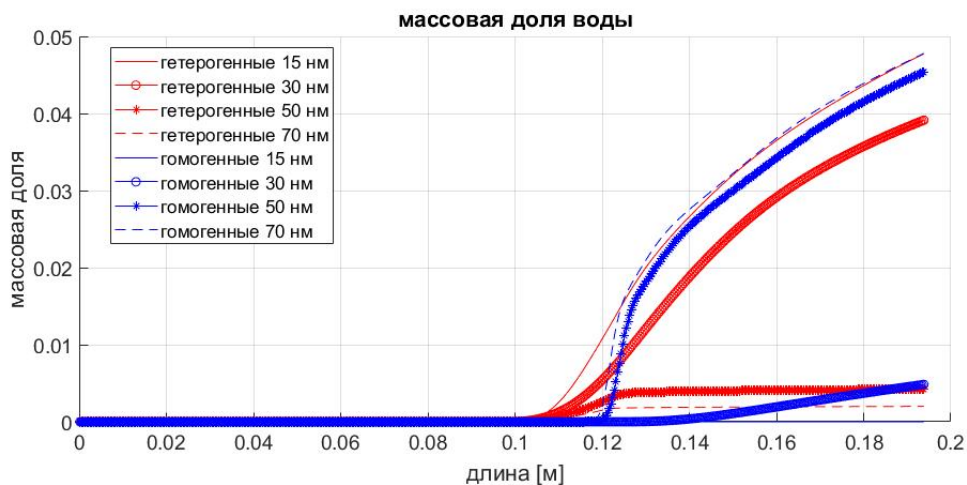


Рисунок 5.19. Массовая доля воды.

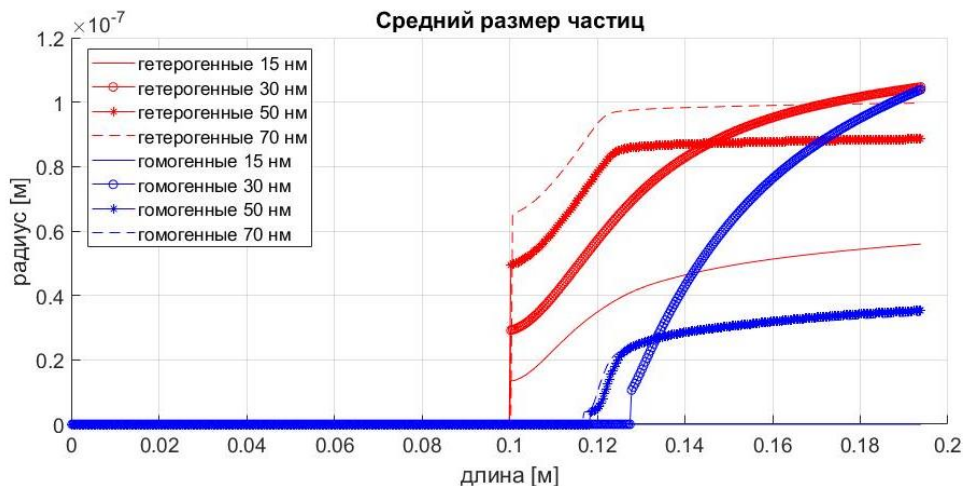


Рисунок 5.20. Размер частиц

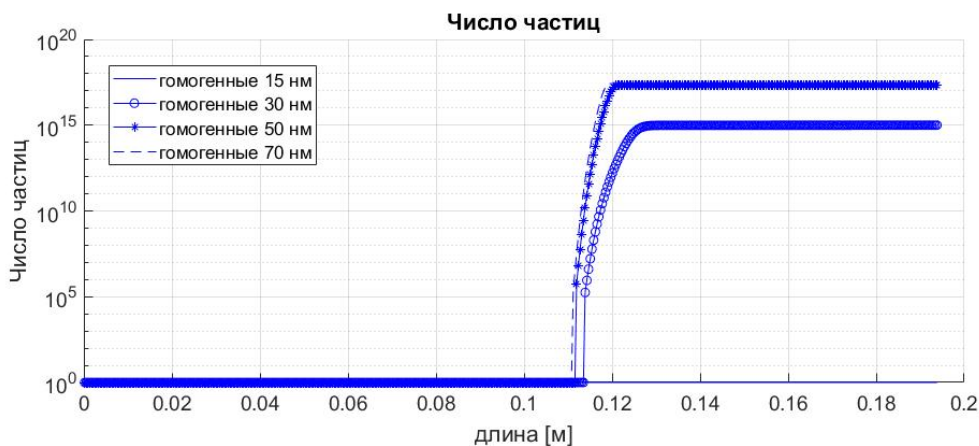


Рисунок 5.21. Концентрация частиц.

### 5.5.1 Оценка эффективности устройства и предложение по обеспечению работоспособности

Значительное влияние на конденсацию оказывает изменение доли концентрирующей фазы в результате смешивания водяного пара с закачиваемым газом. Для очистки необходимо обеспечить отвод тепла от стенок второго сопла. В этом случае массовая доля конденсата может достигать 11% или даже 13%. Начальная температура водяного пара в первом сопле также оказывает существенное влияние. Для системы очистки необходимо, чтобы скачок конденсации в первом сопле был как можно

меньше. Для этих целей насадка имеет низкую степень расширения. Это способствует достижению второго скачка конденсации за соплом в результате расширения водяного пара. Кроме того, газ, вытекающий из второго сопла, расширяется еще больше, что приводит к образованию дополнительного конденсата, но уже в смеси в диффузоре второго сопла.

Для осуществления гетерогенной конденсации перемешивания, возникающего в результате эжекции недостаточно. Для осуществления более эффективной гетерогенной конденсации необходимо поставить турбулезаторы для более эффективного смешивания двух потоков. Количество конденсата недостаточно для осуществления эффективной очистки газа с большим количеством примесей, однако, зародышами могут выступать очень мелкие частицы.

Возможно увеличить радиус частиц более чем в 3 раза в потоке, однако потенциально получаемый размер частиц недостаточен для осуществления эффективной очистки созданием центробежной силы в устройствах циклонного типа. Однако частицы, покрытые толстым слоем жидкой оболочки, уже могут быть сепарированы другими способами. Существуют способы осаждения тумана путем создания электрических полей [116, 117]. Покрытие частиц водой может увеличить эффективность электростатических фильтров. Электрический заряд может вызвать осаждение даже самых маленьких капель при использовании электрических полей.

## Заключение

В соответствии с поставленными в работе задачами, автором были получены следующие научные результаты, обладающие научной и технической новизной и выносимые на защиту:

1. Разработана математическая модель гомогенной конденсации в вязких двухфазных потоках многокомпонентных газовых смесей в одномерной и двухмерной постановках на базе моментного метода. Возможности разработанной модели существенно расширены за счет использования дополнительного уравнения для переноса массовой доли конденсирующейся фазы (т.е. суммы массовых долей жидкой и газообразной фракции конденсирующегося вещества).
2. На базе численного метода высокого порядка построен численный алгоритм, реализующий расчет вязких течений многофазных многокомпонентных смесей в одномерной и двумерной постановках.
3. В численном эксперименте установлены оптимальные значения коэффициентов аккомодации и нуклеации для конденсации воды, аргона и ксенона на основе экспериментов и в рамках полуэмперической теории Хагены.
4. Разработаны математическая модель и метод численного моделирования гетерогенной конденсации. В математическую модель введено новое уравнение распространения массовой доли конденсирующегося вещества. Учет неравномерности массовой доли позволяет рассмотреть задачи, в которых в начальном распределении параметров в разных зонах в расчетной области задано разное содержание конденсируемого вещества или течения в каналах с изменяющимся во времени значением массовой доли конденсирующегося вещества, во входном потоке которое

устанавливает связь между количеством образовавшихся гетерогенных кластеров и количеством кластеров в смеси.

5. Предложен новый подход, позволяющий вести учет наличия одновременно двух различных видов конденсации в среде гомогенной и гетерогенной при образовании кластеров в случае недостаточного количества активируемых частиц. Новый подход позволяет учесть неравномерное распространение массовой доли твердых частиц и массовой доли конденсирующегося вещества в среде.
6. В рамках диссертации предлагается один из новых способов использования конденсации. Предложен принцип осуществления очистки газов от мелкодисперсных примесей. В конструкции предлагается использовать чужеродные частицы в качестве ядер конденсации, для последующего их увеличения и осаждения укрупненных частиц.
7. Предложен новый подход к осуществлению деактивации частиц в гетерогенном случае, позволяющий вернуться к первоначальной функции распределения твердых, сухих частиц.

Разработанные автором диссертации математическая модель и численный алгоритм расчета параметров гомогенной конденсации в вязких потоках газовых смесей в одномерной и двухмерной постановках на базе моментного метода позволяет решать широкий класс задач актуальных для практики в настоящее время. Возможности разработанной модели существенно расширены по сравнению с существующими за счет использования дополнительного уравнения для переноса массовой доли конденсирующейся фазы (т.е. суммы массовых долей жидкой и газообразной фракции конденсирующегося вещества). Добавление этого уравнения к системе позволяет расширить класс решаемых задач для течений с

конденсацией. Например, это позволило решать задачи, в которых в начальном распределении параметров в разных зонах в расчетной области задано разное содержание конденсируемого вещества, а так же моделировать течения в каналах с изменяющимся во времени значением конденсирующегося вещества во входном потоке.

Разработанные оригинальные математическая модель и численный алгоритм для моделирования совместного протекания гетерогенной конденсации, гомогенной конденсации и испарения позволили провести исследования процессов, протекающих в эжекторном устройстве новой установки очистки дымовых газов от микропримесей. Разработанная модель позволила провести моделирование и разработать ряд рекомендаций к осуществлению эжекции газа, содержащего твердые примеси

На основе созданных моделей построен программный комплекс, с помощью которого выполнены исследования: влияния конденсации в соплах большой геометрической степени расширения применяемых в гиперзвуковых экспериментальных установках, исследования характеристик кластерного пучка в струях, истекающих из микросопел, а также в системе сопло-струя-скиммер в современных технологических установках планаризации поверхностей.

### Список использованной литературы

1. The influence of the gas cluster ion beam composition on defect formation in targets / A. E. Ieshkin, A. A. Shemukhin, Y. A. Ermakov, V. S. Chernysh // Moscow University Physics Bulletin. — 2016. — Vol. 71, no. 1. — P. 87–90.
2. I.I. Aksenov, V.A. Belous, V.E. Strel'nitskij, D.S. Aksyonov. Vacuum-arc equipment and coating technologies in kipt. // Physics of radiotechnology and ion-plasma technologies 2016. p. 58-71.
3. С. С. Кутателадзе Теплопередача при конденсации и кипении 1952 МашГиз. ISBN: 978-5-458-42352-6
4. Салтанов Г.А. Сверхзвуковые двухфазные течения 1972. 480 с.
5. Сенковенко С.А., Стасенко А.Л. Релаксационные процессы в сверхзвуковых струях газа 1985. 120 с.
6. Чирихин А.В. Течение конденсирующихся и запыленных сред в соплах аэродинамических труб. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2011. — 280 с. — ISBN 978-5-9221-1347-2
7. Muijtens, M. J. E. H. (1996). Homogeneous condensation in a vapour/gas mixture at high pressures in an expansion cloud chamber Eindhoven: Technische Universiteit Eindhoven DOI: 10.6100/IR471316
8. Luijten, C. C. M. (1998). Nucleation and droplet growth at high pressure Eindhoven: Technische Universiteit Eindhoven DOI: 10.6100/IR5161
9. Becker, R., Döring, W.: Kinetische behandlung der Keimbildung in übersättigten damfen. Ann. Phys. 24, 719–752 (1935)
10. Zeldovich, J.: Theory of the formation of a new phase. J. Expl. Theor. Phys. (USSR) 12, 525, (1942) (in Russian)
11. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. Изд-во АН СССР, Москва; Ленинград, 1945г.
12. Kalikmanov, V.I., Wolk, J., Kraska, T.: Argon nucleation: bringing together theory, simulation and experiment. J. Chem. Phys. 128, 124506.1–124506.8 (2008)



13. V. Kalikmanov, M. Betting , J. Bruining, D. Smeulders New developments in nucleation theory and their impact on natural gas Separation SPE-110736-PP 2007 SPE Annual Technical Conference and Exhibition held in Anaheim, California, U.S.A., 11–14 November 2007.
14. V.I. Kalikmanov, “Mean-field Kinetic Nucleation Theory”, J. Chem. Phys., 124, 124505 (2006).
15. Горбунов В.Н., Пирумов У.Г., Рыжов Ю.А. Неравновесная конденсация в высокоскоростных потоках газа, М.:Машиностроение, 1984, 200с.
16. Жуховицкий Д.И. Исследование микроструктуры межфазной поверхности жидкость-газ методом молекулярной динамики // ЖЭТФ, 2002, том 121, вып.2, С.396-405.
17. Жуховицкий Д.И. Термодинамика малых кластеров // Журнал физической химии., т.67, №10, 1993, С.1962-1965.
18. Von Dieter Barschdorff Verlauf der Zustandsgrößen und gasdynamische Zusammenhänge bei der spontanen Kondensation reinen Wasserdampfes Lavaldüsen Forsch. Ing. Wes.37 (1971) Nr.5, 146-154.
19. S. Dykas, M. Majkut, K. Smółka & M. Stozik (2015) Experimental Research on Wet Steam Flow With Shock Wave, Experimental Heat Transfer, 28:5, 417-429, DOI: 10.1080/08916152.2014.913090
20. S. Dykas, M Majkut, M Stozik and K Smółka Experimental research on coarse water formation in steam condensing flow on a transition through the shock wave 2014 J. Phys.: Conf. Ser. 530 012023
21. Márk Aladi, Róbert Bolla, Daniel E. Cardenas László Veisz, István B. Földes Cluster size distributions in gas jets for different nozzle geometries. Published 2017 Materials Science, Physics arXiv: Atomic and Molecular Clusters
22. C. A. Moses and G. D. Stein, On the Growth of Steam Droplets Formed in a Laval Nozzle Using Both Static Pressure and Light Scattering Measurements, Journal of Fluids Engineering. 1978, 100(3), 311. ISSN 0098-2202

23. Fransen, M. A. L. J. (2015). Experimental study of homogeneous water nucleation in a pulse-expansion wave tube. Eindhoven: Technische Universiteit Eindhoven. 2015
24. J.P. Sislian and I.I. Glass, "Condensation of Water Vapor in Rarefaction Waves: I. Homogeneous Nucleation," AIAA J. 14(12), 1731–1737 (1976).
25. S. Kotake, I. I. Glass Condensation of water vapor in rarefaction waves. II – Heterogeneous nucleation. AIAA Journal, 1977, Vol. 15, N0.2. pp 215-221
26. I.I. Glass, S.P. Kalra, and J.P. Sislian "Condensation of Water Vapor in Rarefaction Waves: III. Experimental Results," AIAA J., 15(5), 686–693 (1977).
27. David Scott, Zine Aidoun, Mohamed Ouzzane. An experimental investigation of an ejector for validating numerical simulations. International Journal of Refrigeration. 34. (2011) 1717-1723
28. Majkut M., Dykas S., Stozik M. , Smółka K. Experimental and numerical study on condensation in transonic steam flow 11th International symposium on compressor & turbine flow systems theory & application areas. SYMKOM 2014 IMP2, Lodz, 20 - 23 October, 2014
29. Heath, C.H.; Streletzky, K.A.; Wyslouzil, B.E.; Woelk, J.; and Strey, R., H<sub>2</sub>O–D<sub>2</sub>O Condensation in A Supersonic Nozzle (2002). Physics Faculty Publications. 254. [http://engagedscholarship.csuohio.edu/sciphysics\\_facpub/254](http://engagedscholarship.csuohio.edu/sciphysics_facpub/254)
30. N M Kortsenshteyn and A K Yastrebov Effect of interphase heat transfer on bulk condensation in dust-laden vapor-gas flow 2020 J. Phys.: Conf. Ser. 1683 022062
31. Ivanov I. E., Nazarov V. S., Kryukov I. A. The investigation of the evolution of cluster beam development in the nozzle-skimmer system // Smart Innovation, Systems and Technologies. — 2021. — Vol. 217. — P. 6.
32. Philip G. Hill. Condensation of water vapour during supersonic expansion in nozzles. J Fluid Mech 1966; 593-620.
33. V. N. Gorbunov, Yu. A. Ryzhov, U. G. Pirumov, Nonequilibrium Condensation in High-speed Gas Flows. Gordon and Breach Science Publishers. 1988.

34. Oswatitsch K. Kondensationserscheinungen in Überschallströmen. ZAMM. 1942. V. 22. S. 1–14.
35. Stiver, H., A condensation phenomenon in highvelocity flows. Chapter 3 in “Fundamentals of Gas Dynamics”, Edited by Emmons, W, Princeton University Press, New Jersey, U.S.A, (1958).
36. Saltanov G. A, Seleznev L. I. and Tsiklauri, G. V., Generation and growth of condensed phase in high – velocity flows. Int. J Heat Mass Transfer Vol. 16, Pp. 1577-1587 Pergamon press (1973).
37. Kotake S., Glass I.I. Flows with nucleation and condensation. Prog. Aerospace Sc. 1979. Vol.19, p.129-196.
38. F. Bakhtar, J. B. Young, A. J. White e D. A. Simpson, «Classical nucleation theory and its application to condensing steam flow calculations,» in Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineers Science, 2005
39. A. A. Gorbunov, S. I. Igolkin, “Statistic simulation of crystal grids growing at vapor condensation”, *Matem. Mod.*, **17**:3 (2005), 15–22
40. Bauer S.Y., Frurip D.J. Homogenous Nucleation in Metal Vapors. 5. A Self-Consistent Kinetic Model. *J.Chem.Phys.* 1977. Vol.81. N 10. Pp.1015-1024.
41. N.Y. Bykov, Yu.E. Gorbachev Cluster formation in copper vapor jet expanding into vacuum: the direct simulation Monte Carlo. Vacuum, Vol. 163, 2019, P. 119-127
42. N.Y. Bykov, Yu.E. Gorbachev Mathematical models of water nucleation process for the Direct Simulation Monte Carlo method. *Applied Mathematics and Computation* 296 (2017) 215–232.
43. N.Y. Bykov, A.I. Safonov, D.V. Leshchev, S.V. Starinskiy, A.V. Bulgakov Gas-jet method of metal film deposition: direct simulation Monte-Carlo of He-Ag mixture flow // *Materials Physics and Mechanics* 38 (2018) 119-130
44. V.A. Volkov, A.V. Muslaev, U.G. Pirumov, P.V. Rozovskij Nonequilibrium condensation of metal vapors/inert gas mixture during expansion through the Nozzles of cluster-beam generators. *Fluid. Dyn.* (1995) 30: 399. <https://doi.org/10.1007/BF02282452>
45. B. V. Egorov, Yu. E. Markachev and E. A. Plekhanov, *Khimicheskaya Fizika*, 25 (4), 61–70, (2006).

46. L. E. Sternin, Fundamentals of gasdynamics of two-phase nozzle flows, Moscow: Mashinostroenie, 1974.
47. N. M. Kortsenshteyn, E. V. Samuilov, A. K. Yastrebov, Study of the volume condensation process in supersaturated vapor by the direct numerical solution of the kinetic equation for the droplet size distribution function Colloid Journal, 2007, Vol. 69 b, No. 4, pp. 488–295.
48. S.K. Friedlander. Smoke, Dust and Haze. John Wiley & Sons, 1977.
49. Hulburt HM , Katz S . Some problems in particle technology. Chem Eng Sci 1964; 19:555–74 .
50. V.U.Gidaspov , I.E.Ivanov, I.A.Kryukov, V.S.Nazarov , F.A. Malashin Study of the condensation process in nozzles with a large degree of expansion. Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics 2018 V19 (2) <http://chemphys.edu.ru/issues/2018-19-2/articles/737/>
51. Wyslouzil B.E, Heath C.H., Cheung J.L., Wilemski G. Binary condensation in a supersonic nozzle // J. Chem. Phys., Vol. 113, No. 17, 2000, pp. 7317-7329.,
52. McGraw R . Description of aerosol dynamics by the quadrature method of moments. Aerosol Sci Technol 1997;27:255–65 .
53. Marchisio DL , Fox RO . Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments. Aerosol Sci 2005;36:43–73 .
54. X. Y. Liu Heterogeneous nucleation or homogeneous nucleation? //journal of chemical physics volume 112, number 22 8 june 2000
55. Cite as: J. Chem. Phys. 126, 174707 (2007); <https://doi.org/10.1063/1.2723073>
56. Marco Tammaro, Francesco Di Natale, Antonio Salluzzo, Amedeo Lancia, Heterogeneous condensation of submicron particles in a growth tube, Chemical Engineering Science, Volume 74, 2012, Pages 124-134,
57. X. Luo, Y.Cao, H. Xie, F. Qin Moment method for unsteady flows with heterogeneous condensation // Computers and Fluids, 146, (2017), pp. 51–58.
58. Fletcher NH . Size effect in heterogeneous nucleation. J Chem Phys 1958;29:572–6
59. Smolders HJ , Nissen EMJ , van Dongen MEH . The random choice method applied to nonlinear wave propagation in gas-vapour-droplets mixtures. Comput Fluids 1992;21(1):63–75
60. J.E. McDonald. Homogeneous nucleation of vapor condensation. I. Thermodynamics Aspects. American J. of Phys., 30:870-877, 1962.

61. A. Kantorowitz “Nucleation in Very Rapid Vapor Expansions”, *The Journal of Chemical Physics* 1951, 19(9), 1097-1100.
62. J.B. Young “The Spontaneous Condensation in Supersonic Nozzles”, *Physico-Chemical Hydrodynamics*, vol. 3, n.1, pp 57-82, 1982
63. G. Gyarmathy, *Grundlageiner Theorie der Nassdampfturbine*, Dissertation, Juris Verlad, Zurich, 1960
64. Y. Yang, S. Shen Numerical simulation on non-equilibrium spontaneous condensation in supersonic steam flow. *International Communications in Heat and Mass Transfer* 36. (2009) 902–907.
65. K.A. Streletzky, Y. Zvinevich, B.E. Wyslouzil, R. Strey Controlling nucleation and growth of nanodroplets in supersonic nozzles *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS VOLUME 116, NUMBER 10, 2002.*
66. Patel, Y., Patel G., and Turunen-Saaresti, T. (2015). Influence of turbulence modelling on non-equilibrium condensing flows in nozzle and turbine cascade. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. Vol. 88, pp. 165-180. Elsevier, 2015.
67. А.В. Чирихин. Газодинамические особенности спонтанной конденсации в нестационарной волне разрежения // *Изв. РАН. МЖГ*. 2007. № 1. С. 163-170.
68. M. Lobanova, Y. Tsirkunov. A study of flow and initial stage of water condensation in the exhaust jet of the aircraft turbofan engine. 2nd ECCOMAS Young Investigators Conference (YIC 2013), Sep 2013, Bordeaux, France.
69. J. Halama, J. Fort Numerical Simulation of steam condensation in a nozzle *EPJ Web of Conferences* 25, 01020 (2012) DOI: 10.1051/epjconf/20122501020
70. Giacomelli, F., Mazzelli, F., & Milazzo, A. (2017). CFD modelling of the condensation inside a cascade of steam turbine blades: Comparison with an experimental test case. In *Energy Procedia* (Vol. 126, pp. 730–737). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.08.306>
71. Federico Mazzelli, Dmitrii Brezgin, Ilia Murmanskii, Nikolay Zhelonkin, Adriano Milazzo Condensation in supersonic steam ejectors: comparison of theoretical and numerical models. *ICMF-2016 – 9th International Conference on Multiphase Flow* May 22nd – 27th 2016, Firenze, Italy
72. Sławomir Dykas, Mirosław Majkut, Krystian Smołka, Michał Stozik An attempt to make a reliable assessment of the wet steam flow field in the de Laval nozzle *Heat and Mass Transfer* (2018) 54:2675–2681 <https://doi.org/10.1007/s00231-018-2313-7>

73. Michele Giordano\_, Samuel J. Hercus, Paola Cinnella EFFECTS OF MODELING UNCERTAINTIES IN CONDENSING WET-STEAM FLOWS THROUGH SUPERSONIC NOZZLES V European Conference on Computational Fluid Dynamics ECCOMAS CFD 2010 J. C. F. Pereira and A. Sequeira (Eds) Lisbon, Portugal,14-17 June 2010
74. Rodrigo Dias Vilela, Cláudia Regina de Andrade, Edson Luiz Zaparoli CFD STUDY OF STEAM CONDENSING FLOW IN A LAVAL NOZZLE Proceedings of ENCIT 2010 13rd Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering December 05-10, 2010, Uberlandia, MG, Brazil
75. B. Choi, J. Shin, C. Kim, J. Park, D.You, J. Baek Numerical simulation of homogeneous condensing wet-steam flow using an Eulerian-Lagrangian method. GPPS-2017-91. Proceedings of Shanghai 2017 Global Power and Propulsion Forum 30th October – 1st November, 2017 . <http://www.gpps.global>
76. X. Zhu, Z. Lin, X. Yuan, T. Tejima, Y.i Niizeki, N.i Shibukawa Non-equilibrium Condensing Flow Modeling in Nozzle and Turbine Cascade. International Journal of Gas Turbine, Propulsion and Power Systems October 2012, Volume 4, Number 3
77. Аветисян А.Р., Алипченков В.М., Зайчик Л.И. Моделирование течения спонтанно конденсирующегося влажного пара в соплах Лавалья // ТВТ. 2002. Т. 40. № 6. С. 938.
78. Аветисян А.Р., Алипченков В.М., Зайчик Л.И. Влияние турбулентности на течение спонтанно конденсирующегося влажного пара в соплах Лавалья // ТВТ. 2003. Т. 41. № 1. С. 65.
79. Груздь С.А. Моделирование гомогенной конденсации в сопле с определением размера критического зародыша // Интеллектуальные системы в производстве. 2014. №1(23). С.5-9.
80. Корепанов М.А., Груздь С.А. Моделирование течения углекислого газа с конденсацией в сверхзвуковом коническом сопле // Химическая физика и мезоскопия. 2015. Т.17. №4. С.538-542.
81. Корепанов М.А. Груздь С.А. Гомогенная конденсация паров воды при течении в соплах. Сравнение с экспериментальными данными // Химическая физика и мезоскопия. 2016. Т.18. №2. С.215-224.
82. Корепанов М.А., Груздь С.А. Математическое моделирование течения с конденсацией в соплах // Труды ИМ УрО РАН "Проблемы механики и материаловедения". 2015. С.119-134.

83. Guha, A. and Young, J. B. (1991). Time marching prediction of unsteady condensation phenomena due to supercritical heat addition. In *Turbomachinery : Latest Developments in a Changing Scene*, London IMechE, C423/057, 167-173
84. Guha, A. (1995). Two-phase Flows with Phase Transition. In *VKI Lecture Series 1995-06*, von Karman Institute for Fluid Dynamics, Belgium, 1-110.
85. Gerber, A. (2002). Two-phase eulerian/lagrangian model for nucleating steam flow. *ASME J. Fluids Eng.*, Vol. 124:465–475
86. Корепанов М.А., Груздь С.А. Математическое моделирование турбулентных течений с гомогенной конденсацией в сверхзвуковых соплах // *Химическая физика и мезоскопия*. 2016. Т.18. №3. С.370-380.
87. Гидаспов В.Ю., Пирумов У.Г., Иванов И.Э., Северина Н.С. Модели образования наночастиц в потоках газа: Учебно-методический комплекс, Калуга, Москва: Изд-во «Эйдос», 2011, 214 с.
88. Волков В.А., Муслиев А.В., Пирумов У.Г., Розовский П.В. Неравновесная конденсация паров металла в смеси с инертным газом в соплах установок для генерации кластерных пучков // *Изв. РАН, МЖГ*, 1995, 3, 80-91.
89. Гидаспов В.Ю., Иванов И.Э., Крюков И.А., Пирумов У.Г. Численное моделирование неравновесной конденсации в высокоскоростных потоках вязкого газа // *Материалы XI Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ 2016)*, 25-31 мая 2016 г., Алушта, Т. 1, Москва: Издательство МАИ, 2016, 105–107.
90. Ding H., Wang C., Chen C. Non-equilibrium condensation process of water vapor in moist air expansion through a sonic nozzle. *Flow Measurement and Instrumentation* (2014). <http://dx.doi.org/10.1016/j.flowmeasinst.2014.08.002i>
91. L. Sova, G. Jun, M. Stastny Modifications of steam Condensation model implemented in commercial solver AIP Conference Proceedings 1889, 020039 (2017)
92. Gruber, A., Gspann, J. & Hoffmann, H. Nanostructures produced by cluster beam lithography . *Appl. Phys* 68, 197–201 (1999).
93. Kortsenshteyn N.M., Yastrebov A.K. Colloid. Droplet temperature distribution in the course of condensation relaxation of supersaturated vapor. *Colloid Journal* 77(1), 38-45 (2015)
94. Hagen, O.F.: Cluster beams from nozzle sources: molecular beams and low density gas dynamics. In: Wegener, P.P. (ed) *Molecular Beams and Low Density Gasdynamics*, pp.93–181. Dekker, New York (1974)

95. Hagen, O.F., Obert, W., Chem, J.: Cluster formation in expanding supersonic jets: Effect of pressure, temperature, nozzle size, and test gas. [J. Chem. Phys. 56, 1793–1802](#) (1972)
96. Gyarmathy, G. 1982 The spherical droplet in gaseous carrier streams: review and synthesis. In *Multiphase Science and Technology*, vol. 1. Springer.
97. Назаров В. С. Приложение моментного метода для моделирования гетерогенной конденсации и испарения //Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2021. Т.22, вып. 5.
98. Gyarmathy, G. 1963 Zur Wachstumsgeschwindigkeit kleiner Flüssigkeitstropfen in einer ub-ersättigten Atmosphäre. *Z. Angew. Math. Phys.* 14, 280–293.
99. Kousalya devi S, Mr.Venkatesh S., Mr.Chandrasekaran, Performance improvement of venturiwet scrubber // *IJRDO-Journal Of Mechanical And Civil Engineering*, April,2015
100. N. Deberne, J.F. Leone, A. Duque, A. Lallemand. A model for calculation of steam injector performance. *International Journal of Multiphase Flow* 25 (1999) 841-855
101. Численное решение многомерных задач газовой динамики / Под ред. С.К. Годунова. – М.: Наука, 1976. – 392 с.
102. M. S. Liou, A Seguel to AUSM: AUSM+, *J. Comput. Phys.*, 129, pp. 364-382 (1996).
103. M. S. Liou, A Seguel to AUSM, Part II: AUSM+-up for all speeds, *J. Comput. Phys.*, 214, pp. 137-170 (2006).
104. P.L. Roe, Approximate Riemann Solvers, Parametr Vectors, and Difference Schemes, *J. Comput. Phys.*, 43, pp. 357-372 (1981).
105. Toro E.F. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction*. Springer-Verlag. – Berlin, 2009. – 721 p.
106. Scott D., Aidoun Z., Bellache O. and Ouzzane M. CFD Simulations of a Supersonic Ejector for Use in Refrigeration Applications. *International Refrigeration and Air Conditioning Conference at Purdue*, July 14-17, 2008
107. Scott D.A., Aidoun Z. CFD analysis of an ejector for cooling applications. ID: 347



108. Yusuke SAITO, Tatsuya ITO, Akiko MATSUO, Haruki SATO. Ejector Configuration for Designing a Simple and High Performance Solar Cooling System. *Energy Procedia* 57 (2014) 2564 – 2571
109. Cizungu, K., A. Mani, and M. Groll, Performance comparison of vapour jet refrigeration system with environment friendly working fluids. *Applied Thermal Engineering*, 2001. 21(5): p. 585-598.
110. Sun, D.W. and I.W. Eames, Performance characteristics of HCFC-123 ejector refrigeration cycles. *International Journal of Energy Research*, 1996. 20(10): p. 871-885.
111. Ao Li, Anthony Chun Yin Yuen, Timothy Bo Yuan Chen, Cheng Wang, Hengrui Liu, Ruifeng Cao, Wei Yang, Guan Heng Yeoh and Victoria Timchenko. Computational Study of Wet Steam Flow to Optimize Steam Ejector Efficiency for Potential Fire Suppression Application. *Appl. Sci.* 2019, 9, 1486
112. Francesco Giacomellia, Giulio Biferia, Federico Mazzellia, Adriano Milazzoa. CFD modeling of the supersonic condensation inside a steam ejector. *Energy Procedia* 101 (2016) 1224 – 1231
113. H.R. Pruppacher and J.D. Klett. *Microphysics of Clouds and Precipitation*. Reidel, Dordrecht, Holland, 1978.
114. N.B. Vargaftik. *Tables on the thermophysical properties of liquids and gases*. Wiley, New York, 2nd edition, 1975.
115. G. Lamanna. *On Nucleation and Droplet Growth in Condensing Nozzle Flows*. PhD thesis, Eindhoven University of Technology, 2000.
116. Протопопов Вадим Анатольевич. Способ управления атмосферными процессами, техническая система для управления атмосферными процессами, способ создания конвекционного тока в атмосфере и генератор ионов: пат. [RU2090057C1](#) 1997.09.20
117. Алексей Алексеевич Палей. Способ рассеивания тумана: пат. [RU2611037C1](#) 2017.02.20
118. A. Fladerer, R. Strey. Homogeneous nucleation and droplet growth in supersaturated argon vapor: The cryogenic nucleation pulse chamber *J. Chem. Phys.* 124, 164710 (2006); <https://doi.org/10.1063/1.2186327>
119. K. Iland, J. Wölk, R. Strey, D. Kashchiev. Argon nucleation in a cryogenic nucleation pulse chamber *J. Chem. Phys.* 127, 154506 (2007); <https://doi.org/10.1063/1.2764486>

120. S. Sinha, A. Bhabhe, H. Laksmono, J. Wölk, R. Strey, B. Wyslouzil Argon nucleation in a cryogenic supersonic nozzle THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 132, 064304 \_2010\_ doi:10.1063/1.3299273
121. S. Sinha EXPERIMENTAL AND MODELING STUDY OF CONDENSATION IN SUPERSONIC NOZZLES DISSERTATION Presented in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree Doctor of Philosophy in the Graduate School of The Ohio State University The Ohio State University 2008
122. Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. М:ФИЗМАТЛИТ, 2012. 656 с.
123. Л.В.Гурвич, И.В.Вейц, В.А.Медведев и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание: в 4-х томах. – М.: Наука, 1978.

## Приложение 1. Физические свойства конденсирующихся веществ

Приложение содержит способы вычисления термодинамических величин, которые использовались в модели для моделирования поведения различных газов. Основное значение на конденсацию оказывает поверхностное натяжение  $\sigma$ , плотность жидкости  $\rho_l$  и давление насыщения  $P_s$ . Вычисление плотности для воды

### Вода

Плотность воды [113]

$$\rho_l(T) = \begin{cases} \frac{A_0 + A_1T + A_2T^2 + A_3T^3 + A_4T^4 + A_5T^5}{1 + B_0T}, & T \geq 0^\circ C \\ A_6 + A_7T + A_8T^2, & T < 0^\circ C \end{cases}$$

Плотность воды в  $\rho_l$  в  $кг/м^3$ , температура в  $^\circ C$

$$A_0 = 999.84$$

$$A_1 = 8.224944$$

$$A_2 = -7.92221 \cdot 10^{-3}$$

$$A_3 = -55.44846 \cdot 10^{-6}$$

$$A_4 = 149.7562 \cdot 10^{-9}$$

$$A_5 = -393.2952 \cdot 10^{-12}$$

$$A_6 = 999.84$$

$$A_7 = 0.086$$

$$A_8 = -0.0108$$

$$B_0 = 18.159725 \cdot 10^{-3}$$

Давление насыщения [114]

$$P_s = 610.8 \exp[-5.1421 \ln(T/273.15) - 6828.77(1/T - 1/273.15)]$$

Температура в К, давление в Па [115]

$$\sigma(T) = \begin{cases} 8.52 \cdot 10^{-2} - 3.54236 \cdot 10^{-4}T + 3.50835 \cdot 10^{-6}T^2 - 8.71691 \cdot 10^{-9}T^3, & T < 250K; \\ (76.1 + 0.155(273.15 - T)) \cdot 10^{-3}, & T \geq 250K, \end{cases}$$

Где  $\sigma$  в  $N/m$

### Аргон

В этом разделе даны формулы поверхностного натяжения, теплоты конденсации и других параметров, взятые из [118-121].

В вычислении параметров аргона использовались температуры  $T_1, T_2, T_3$  [К]:

$$\begin{aligned} T_1 &= 297.15 \\ T_2 &= 150.633 \\ T_3 &= 83.7 \end{aligned}$$

Плотность аргона  $\left[ \frac{кг}{м^3} \right]$ :

$$\rho_l(T) = \begin{cases} 39.948 \cdot \left( 13.29 + 24.449248 \left( 1 - \frac{T_3}{T_2} \right)^{0.35} + 9.155083 \left( 1 - \frac{T_3}{T_2} \right) \right), T < T_3 \\ 39.948 \cdot \left( 13.29 + 24.449248 \left( 1 - \frac{T}{T_2} \right)^{0.35} + 9.155083 \left( 1 - \frac{T}{T_2} \right) \right), T_3 \leq T < T_2 \\ 539.90892 + \frac{1392 - 530.90892}{T_1 - T_2} (T - T_2), T_2 \leq T < T_1 \\ 1392, T_1 \leq T \end{cases}$$

Давление насыщения аргона [Па]:

$$P_s(T) = \begin{cases} 10^{-20}, T < 0.01 \\ \max \left[ 10^{-20}, \exp \left( 2.3025857 \left( \frac{-404.84}{T} + 9.66944 \right) \right) \right], 0.01 \leq T < T_3 \\ 4.86 \cdot 10^6 \exp \left( \frac{T_2}{T} \left( -5.90418853k + 1.12549591k^{1.5} - 0.763257913k^3 - 1.69733438k^6 \right) \right), T_3 \leq T < T_2 \\ 4.86 \cdot 10^6 + \frac{9.99 \cdot 10^6 - 4.86 \cdot 10^6}{T_1 - T_2} (T - T_2), T_2 \leq T < T_1 \\ 9.99 \cdot 10^6, T_1 \leq T \end{cases}$$

где  $k = 1 - \frac{T}{T_2}$ .

Поверхностное натяжение  $\left[ \frac{H}{M} \right]$ :

$$\sigma(T) = \begin{cases} 0.03778 \left(1 - \frac{T_3}{T_2}\right)^{1.227}, & T_2 \leq T \leq T_3 \\ 0.03778 \left(1 - \frac{T}{T_2}\right)^{1.227}, & T < T_2 \\ 10^{-9}, & T_3 > T \end{cases}$$

### Ксенон

В этом разделе даны формулы поверхностного натяжения, теплоты конденсации и других параметров, взятые из [122], [123].

Поверхностное натяжение воды в зависимости от температур:

$$\sigma(T) = \begin{cases} 8.52 \cdot 10^{-2} - 3.54236 \cdot 10^{-4}T + 3.50835 \cdot 10^{-6}T^2 \\ -8.71691 \cdot 10^{-9}T^3, T < 250 \left[ \frac{H}{M} \right], \\ 76.1 + 0.155(273.15 - T) \cdot 10^{-3}, T \leq 250. \end{cases}$$

То же для ксенона:

$$\sigma(T) = 5.46 \left(1 - \frac{T}{289.74}\right)^{1.282} \left[ \frac{H}{M} \right].$$

Плотность жидкого ксенона от температуры:

$$\rho_{l,xe} = \rho_{l,c} + \sum_{i=1}^6 A_i \left(1 - \frac{T}{289.74}\right)^{\frac{i}{3}} \left[ \frac{КГ}{M^3} \right],$$

где  $\rho_{l,c} = 1099 \left[ \frac{КГ}{M^3} \right]$ , а коэффициенты  $A_i$  в  $\left[ \frac{КГ}{M^3} \right]$ :

$$\begin{aligned} A_1 &= -0.2184099 \cdot 10^6, A_2 = 0.1748818 \cdot 10^7, \\ A_3 &= -0.5528331 \cdot 10^7, A_4 = 0.8705383 \cdot 10^7, \\ A_5 &= -0.6824710 \cdot 10^7, A_6 = 0.2131116 \cdot 10^7. \end{aligned}$$

Плотность воды от температуры:

$$\rho_{l,w} = \begin{cases} \frac{1}{1 + B_0 T} \sum_{i=0}^5 A_i T^i, T \geq 273.15 \\ A_6 + A_7 T + A_8 T^2, T < 273.15 \end{cases}$$

Коэффициенты:

$$A_0 = 999.84, \quad A_1 = 18.224944,$$

$$\begin{aligned}
 A_2 &= -7.92221 \cdot 10^{-3}, & A_3 &= -55.44846 \cdot 10^{-6}, \\
 A_4 &= -149.7562 \cdot 10^{-9}, & A_5 &= -393.2952 \cdot 10^{-12}, \\
 & A_6 = 999.84, & A_7 &= -0.086, \\
 A_8 &= -0.0108, & B_0 &= 18.159725 \cdot 10^{-3}.
 \end{aligned}$$

Давление насыщенного пара ксенона:

$$\begin{aligned}
 p_{Xe,sat} &= \exp[A_9 + A_{10}T + A_{11}T^2 + B_1 \ln T + C_0T^{-1}], \\
 A_9 &= 21.125, & A_{10} &= -2.7246 \cdot 10^{-2}, \\
 A_{11} &= 1.6853 \cdot 10^{-5}, & B_1 &= 2.4576, \\
 C_0 &= -6094.4642.
 \end{aligned}$$

Давления насыщенного пара ксенона:

$$\begin{aligned}
 p_{Xe,sat} &= \exp[A_{12} + A_{13}T + B_2 \ln T + C_1T^{-1}], \\
 A_{12} &= 55.9772, & B_2 &= -6.58218, \\
 A_{13} &= 0.015775, & C_1 &= -2219.02.
 \end{aligned}$$

Скрытая теплота конденсации в линейном приближении для воды:

$$\begin{aligned}
 L(T) &= L_0 + L_1T, \\
 L_{w,0} &= 3105913.39 \frac{\text{Дж}}{\text{кг}}, L_{w,1} = -2212.97 \frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}.
 \end{aligned}$$

Для ксенона теплота конденсации практически не зависит от температуры, и для численных расчетов можно брать ее постоянной [10].

$$L_{Xe} = 100000 \frac{\text{Дж}}{\text{кг}}.$$