

7. В.В. Аристов, Черемисин Ф.Г.. Прямое численное решение кинетического уравнения Больцмана. Изд.ВЦ РАН, М., 1992 г., 187 с.
8. Muntz E.P., Harnett L.N. Molecular Velocity Distribution Function Measurement in a Normal Shock Wave. The Physics of Fluids, V.12, No 10, 1969, pp.2027-2035
9. Генич А.П., Куликов С.В., Соловьев М.Е., Черешнев С.Л. Влияние поступательной неравновесности в ударной волне на скорость элементарных молекулярных процессов. Фундаментальные проблемы физики ударных волн. Тезисы докладов т.1., Часть 2, 1987 г., с. 240-242.
10. Козлов П.В., Лосев С.А., Романенко Ю.В. Поступательная неравновесность во фронте ударной волны в смеси аргона и гелия. Письма в ЖТФ, 2000, т.26, вып. 22, с.69-75
11. Великодный В.Ю., Емельянов А.В., Еремин А.В., Неадиабатическое возбуждение молекул йода в зоне поступательной неравновесности ударной волны
12. Диваков О.Г., Еремин А.В., Зиборов В.С., академик В.Е. Фортов. Неравновесное воспламенение кислородно-водородных смесей во фронте слабой ударной волны. Доклады РАН, т.373, №4, 2000, с. 487-490.
13. Физико-химические процессы в газовой динамике. – т.1. Динамика физико-химических процессов в газе и плазме / под ред. Г.Г. Черногo и С.А. Лосева. – М.: Изд. Моск. ун-та. 1995. – 350 с.

УДК 533.6.071.08.632.57

**И.А. Амелюшкин<sup>1</sup>, А.Л. Стасенко<sup>1,2</sup>**

*<sup>1</sup>Центральный аэрогидродинамический институт  
имени проф. Н.Е. Жуковского (ЦАГИ)*

*<sup>2</sup>Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет) (МФТИ);*

**СТОХАСТИКА И ДЕТЕРМИНИЗМ  
ДВИЖЕНИЙ КАПЕЛЬ ВОДЫ  
В ПЕРЕОХЛАЖДЕННОМ АЭРОЗОЛЬНОМ ПОТОКЕ,  
ОБТЕКАЮЩЕМ ТВЕРДОЕ ТЕЛО**

*Аннотация.* Исследовано влияние броуновского движения частиц и турбулентных пульсаций несущего газа на траектории малых частиц аэродисперсного потока и на коэффициент их захвата обтекаемым телом.

*Ключевые слова:* броуновское рассеяние частиц, турбулентные пульса.

I Amelysuhkin<sup>1</sup>, A. Stasenko<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Central Aerohydrodynamic Institute (TsAGI);

<sup>2</sup>Moscow Institute of Physics and Technology (State University) (MIPT);

**STOCHASTICS AND DETERMINISM  
OF WATER DROPLET MOTIONS  
IN A SUPERCOOLED AEROSOL FLOW  
WHICH CIRCUMFLUENTS A SOLID BODY**

*Abstract.* Influence of the Brownian particle motion and carrying gas turbulent pulsations on trajectories of small particles of the aerosol flow and on the circumfluent solid body capture ratio was investigated.

*Keywords:* Brownian scattering of particles, turbulent pulsation, capture ratio, streamlined body icing

Для понимания физики обледенения тела в переохлажденном воздушно-капельном потоке чрезвычайно важно адекватное моделирование взаимодействия отдельной капли с поверхностью обтекаемого объекта. Процессы, предшествующие попаданию микрокапель на поверхность тела и их взаимодействие с этой поверхностью, были исследованы теоретически и экспериментально в работах [1–5]. В этих процессах важную роль должны играть наночастицы воды, присутствующие в большом количестве во влажной переохлажденной атмосфере даже в предконденсационный период, когда еще не образовались облачные макрокапли. Очевидно, что если такие наночастицы покроют поверхность летательного аппарата пленкой воды даже в несколько молекулярных слоев, то физико-механические свойства поверхности уже не будут играть роль в дальнейшем процессе обледенения. Между тем ясно, что на поверхность обтекаемого тела могут попасть только достаточно крупные капли, траектории которых отличаются от линий тока газа. Вероятность попадания очень мелких капель на поверхность тела должна существенно зависеть от стохастики турбулентных пульсаций газа в пограничном слое и от броуновского блуждания самих наночастиц. Рассмотрению этих процессов и посвящена настоящая работа.

Для оценки скорости соударения с поверхностью рассмотрим модельную задачу о приближении наночастицы к твердому телу, начиная с некоторого конечного расстояния. Поскольку (в случае нормальных условий) средняя длина свободного пробега  $l_m$  молекулы воздуха много больше диаметра наночастицы ( $Kn = l_m / 2a_p$ ), то для оценки времени релаксации ее скорости можно использовать выражение для случая сво-

бодномолекулярного обтекания:  $\tau_V \sim \frac{\rho_p}{\rho} \frac{a_p}{\langle c \rangle}$ , где  $\rho$  и  $\rho_p$  – плотность газа и материала частицы соответственно;  $\langle c \rangle$  – средняя тепловая скорость молекул газа. Таким образом, торможение «осредненного» движе-

ния такой частицы по нормали к поверхности происходит по закону

$$V_n = V_n^0 \exp\left[-\frac{t}{\tau_V}\right].$$

Будем считать, что на это движение наложены пульсации частицы, связанные с турбулентностью газа  $V_p^{\text{Turb}}$  и броуновским движением. (Термодинамически равновесная скорость хаотических тепловых движений наночастицы равна  $V_p^{\text{Br}} = \frac{\langle c \rangle}{\sqrt{N_m}} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m_0 N_m}}$ ).

На основании работ [6–9] примем следующие выражения для масштабов этих скоростей:  $V_p^{\text{Turb}} = \frac{V'}{\sqrt{1 + \frac{\tau_V}{\tau_t}}}$ ,  $V_p^{\text{Br}} = \frac{\langle c \rangle}{\sqrt{N_m}} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m_0 N_m}}$ , где

характерное время турбулентных пульсаций равно  $\tau_t = 0.19 k/\varepsilon$ ;  $\langle c \rangle$  – средняя тепловая скорость молекул водяного пара,  $N_m$  – число молекул воды в капле,  $V' = \sqrt{2k}$  – средняя скорость турбулентных пульсаций,  $k$ ,  $\varepsilon$  – удельная кинетическая энергия турбулентных пульсаций и скорость ее диссипации соответственно,  $m_0$  – масса молекулы воды.

Таким образом, суммарную скорость наночастицы (рис. 1) можно моделировать выражением:

$$\mathbf{V}_p = \mathbf{V}_p^0 \exp\left[-\frac{t}{\tau_R}\right] + \frac{\mathbf{V}'}{\sqrt{1 + \frac{t}{\tau_R}}} \cdot \text{rand}\left[\frac{\mathbf{V}'}{|\mathbf{V}'|}\right] + \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m_0 N_m}} \cdot \text{rand}\left[\frac{\mathbf{V}_p^{\text{Br}}}{|\mathbf{V}_p^{\text{Br}}|}\right],$$

где  $\text{rand}$  – символ случайного единичного вектора. Длительность воздействия турбулентной пульсации на частицу имеет порядок  $\tau_t$ . Для броуновских пульсаций в работе [6] в предположении гармонических турбулентных пульсаций (частоты  $\omega_t$ ) приведено выражение [8] для степени увлечения частиц ( $\tau_V^{\text{St}}/\tau_t \ll 1$ )

$$\frac{V_p^{\text{Turb}}}{V'} = \frac{\sin(\omega_t t - \varphi)}{\sqrt{1 + (\omega_t \tau_V)^2}}.$$

Однако, для осредненной (по пульсациям газа) степени увлечения частиц имеет место зависимость [9]:

$$\frac{\langle (V_p^{\text{Turb}})^2 \rangle}{\langle V'^2 \rangle} = \frac{1}{1 + \tau_V^{\text{St}}/\omega_E},$$

где  $\omega_E \approx \omega_L = \text{const}$  – эйлерова и лагранжева частоты. Верхний индекс St означает стоксовский режим обтекания. В частности, коэффициент диффузии частиц связан с коэффициентом диффузии газа соотношением

$$D_p^{\text{Turb}} = \frac{D_{\text{Turb}}}{1 + \tau_V \omega_E}$$

Аналогичное выражение приведено в [7]

$$\frac{\langle (V_p^{\text{Turb}})^2 \rangle}{\langle V'^2 \rangle} = \frac{1}{1 + \tau_V / \tau_t},$$

где  $\tau_t$  – интегральное время турбулентных пульсаций несущей среде.

На рис. 2 представлен фрагмент характерных стохастических траекторий частиц различной массы на отрезке горизонтальной оси  $0 < x < 10$  мкм. Обратим внимание, что масштабы осей отличаются на три порядка. Видно легко объяснимое уменьшение поперечных отклонений с увеличением радиуса частицы  $a_p$ . Оно коррелирует с зависимостью прицельного параметра от  $a_p$ , представленной на рис. 3 слева: чем массивнее частицы, тем меньшее влияние оказывает на ее движение броуновское движение и турбулентные пульсации. Начиная с некоторого размера, частицы всё слабее увлекаются несущим газом, обтекающим тело, в результате чего растет орошаемая ими поверхность (рис. 3, центральная часть). Однако, с дальнейшим ростом размера капли возникает ее сплющивание, что приводит к росту коэффициента сопротивления (см. зависимость  $C_D$  и Stk от числа Вебера We [10]) и уменьшению площади орошения, и, следовательно, степени ее увлечения несущим газом. Этот эффект был получен в работе [1].

Определение коэффициента взаимодействия частиц с обтекаемым телом в дисперсном потоке может быть связано как с предельным углом орошения  $\theta$ , так и прицельным расстоянием  $b_{\text{max}}$ . В настоящей работе предложено выражение

$$\left( \frac{b_{\text{max}}}{R} \right)^2 = \left( \frac{\text{Stk}}{1 + \text{Stk}} \right)^2 + \frac{2D_t}{Ru_\infty} \frac{1}{\sqrt{1 + \text{Stk} \frac{\tau_R}{\tau_t}}} + \frac{2D_{\text{Br}}}{Ru_\infty}.$$

Здесь  $R$  – радиус цилиндра, моделирующего переднюю кромку элемента конструкции летательного аппарата;  $u_\infty$  – скорость набегающего потока;  $\tau_R = \frac{8 \rho a_p}{3 \rho_p u_\infty C_D}$  – время релаксации частицы;  $C_D$  – коэффициент

сопротивления частицы, который при малых числах Рейнольдса  $Re_p$  ее обтекания стремится к  $C_D^{St} = \frac{24}{Re_p}$ , где число Рейнольдса частицы в несущем

ее газе  $Re_p = \frac{\rho 2a_p u_\infty}{\mu_m}$ , (в общем случае коэффициент сопротивления

частицы рассчитывался по формуле Хендерсона [11]);  $\mu_m$  – молекулярная вязкость несущего газа;  $D_t$  – коэффициент турбулентной диффузии, который связан с энергией турбулентных пульсаций газа  $k$  и скоростью их диссипации  $\varepsilon$  соотношением  $D_t = \frac{0.19k^2}{\varepsilon}$ ; в расчетах этот коэффициент

был принят равным  $10^{-3} \text{ м}^2/\text{с}$ ;  $\tau_t$  – характерное время турбулентных пульсаций несущего газа, которое в расчетах было принято равным  $0.01 \text{ с}$ ;

$D_{Br} = \frac{k_B T}{\mu_m a_p}$  – коэффициент диффузии за счет броуновских блужданий;

$Stk$  – параметр, характеризующий скоростную неравновесность дисперсного потока.

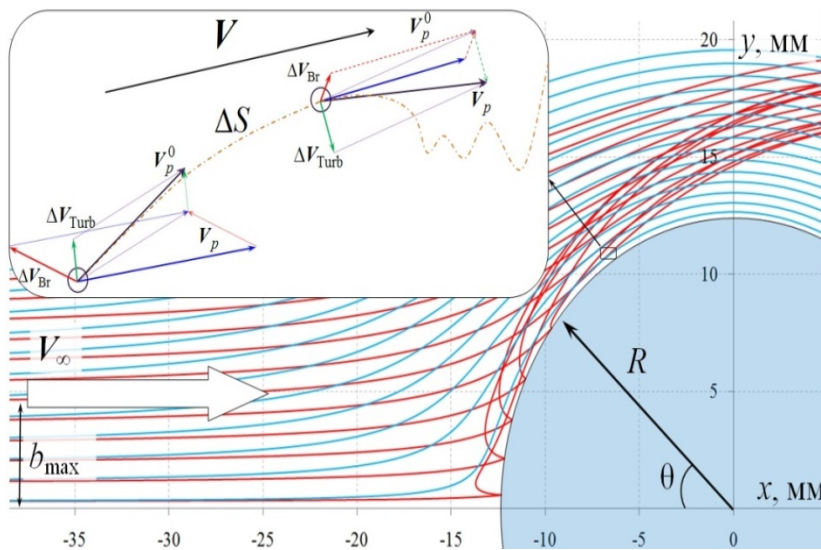


Рис. 1. Схема взаимодействия частицы с потоком воздуха и обтекаемым телом

В настоящей работе введено модифицированное число Стокса, которое зависит от режима обтекания частицы:

$$\text{Stk} = \text{Stk}_0 \frac{C_D}{C_D^{\text{Stk}}} \exp(-0.03 \cdot \text{We}),$$

где  $\text{We} = \frac{\rho_f 2a_p u_\infty^2}{\sigma_l}$  – число Вебера. Входящий в предпоследнюю форму-

лу экспоненциальный множитель приводит к немонотанности зависимости области поверхности, орошаемой частицами от радиуса частицы и числа Стокса (рис. 3, кривые 5–7);

$\text{Stk}_0 = \frac{2\rho_p u_\infty}{9\mu_m R} a_p^2$  – число Стокса при вязком обтекании частицы контину-

альной средой при малых значениях  $\text{Re}_p$ ;

$\sigma_l$  – поверхностное натяжение капли;

$\text{Re} = \frac{\rho_f u_\infty R}{\mu_m}$  – характерное число Рейнольдса набегающего потока.

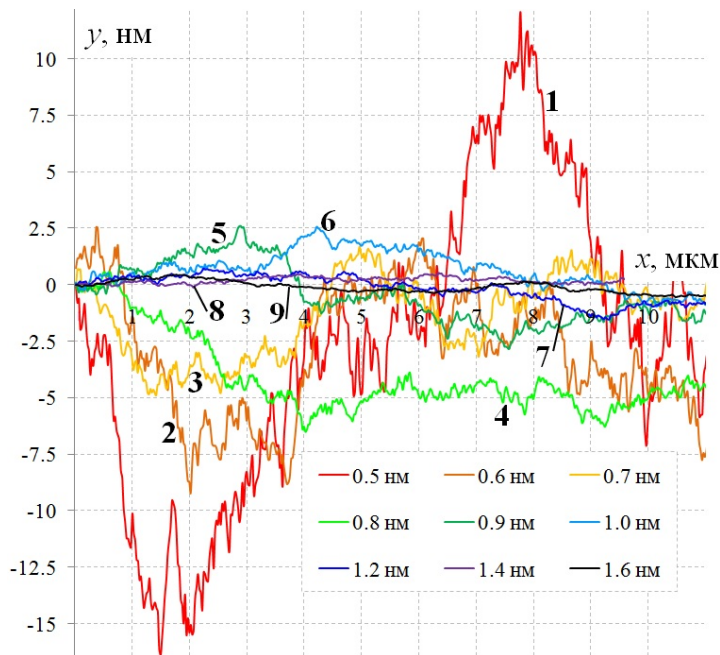


Рис. 2. Стохастика траекторий малых частиц различных радиусов с учетом броуновского движения и турбулентных пульсаций несущего газа;

кривые 1÷7 соответствуют радиусам частиц 1÷1.6 нм с шагом  $\Delta a_p = 1$  нм;  $u_\infty = 100$  м/с

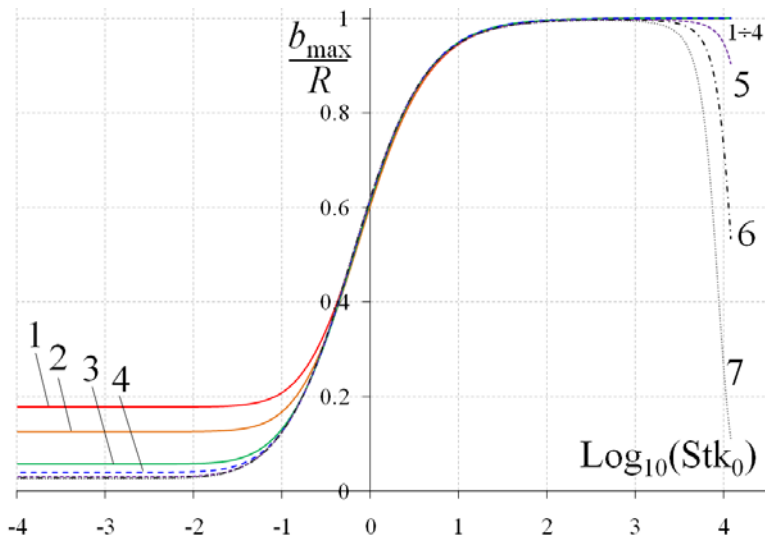


Рис. 3. Зависимость предельного прицельного параметра  $b_{\max}$  орошения (коэффициента захвата) поверхности цилиндра от числа Стокса: кривые 1÷7 соответствуют значениям скорости потока  $u_{\infty}$  5, 10, 50, 100, 175, 200, 225 м/с

Для набора параметров, характерных для модельных экспериментов в аэрохолодильной установке [5], имеем:

$$\text{Stk}_0 = \frac{2 \rho_p a_p^2}{9 \mu_f} \cdot \frac{u_{\infty}}{2R_w} \geq \text{Stk}^* \approx 0.0417 \cdot$$

Последнее критическое значение получено для потенциального обтекания шара. Например, для радиуса  $R = 10^{-2}$  м и скорости потока 100 м/с соответствующее критическое значение радиуса частицы равно  $a_{\min} \approx 750$  нм. Это значение на порядок превосходит длину свободного пробега молекулы в воздухе при нормальных условиях, что оправдывает использование характерного времени стоксовой релаксации для случая континуального обтекания частицы. Таким образом, в рассмотренном примере без учета стохастики траекторий на обтекаемый цилиндр могли бы попасть только частицы с радиусом более 0.75 мкм. Газодинамический «фон», на котором движутся частицы перед столкновением с обтекаемым телом, может быть численно исследован при помощи алгоритмов, приведенных в монографии [12].

**Заключение.**

Показано, что без учета турбулентных пульсаций и броуновского движения на поверхность обтекаемого тела могут попасть только достаточно крупные капли аэрозольного потока. Предложено выражение для прицельного расстояния, позволяющее оценить влияние стохастических движений наночастицы, приводящих ее к столкновению с обтекаемым цилиндром.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 13–01–00766.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Стасенко А.Л., Толстых А.И., Ширококов Д.А. К моделированию оледенения самолёта: Динамика капель и поверхность смачивания // Математическое моделирование, 2001. Т. 13, № 6, с. 81–86.
2. Амелюшкин И.А., Гринац Э.С., Стасенко А.Л. Кинетика молекулярных кластеров и гидротермодинамика капель при обледенении летательных аппаратов // Вестник МГОУ. Сер. «Физика - Математика». 2012. – № 2. – С. 153–161.
3. Гринац Э.С., Миллер А.Б., Потапов Ю.Ф., Стасенко А.Л. Экспериментальное и теоретическое исследование процессов обледенения наномодифицированных супергидрофобных и обычных поверхностей // Вестник МГОУ. «Физика-Математика». – 2013. № 3. С. 82–92.
4. Amelyushkin I.A., Stasenko A.L. Dynamics of molecules in a supercooled water nanoparticle during the ice accretion on the aircraft surface // EU-CASS-Paper. Flight Physics, 2014, V .7.
5. Miller A.B., Potapov Yu.F., Stasenko A.L. Experimental and theoretical investigation of aircraft icing in the case of crystal and mixed-phase flow // 29<sup>th</sup> Congress of the International Council of the aeronautical sciences. September 7–12, 2014. – St-Peterburg, Russia. – Paper No 0576.
6. Crowe C.T. On models of turbulence modulation in fluid–particle flows // Intern. J. Multiphase Flow. – 2000. – Vol. 26. – P. 719–727.
7. Sinonin O. Eulerian formulation fro particle dispersion in turbulent two-phase flows. In: Sommerfeld M., Wenerberg D. (Ed.) // Proc. 5 th Workshop on Two-Phase Flow Predictions. 1990. – Erlangen, Germany. P. 156 – 166.
8. Медников Е.Т. Турбулентный перенос и осаждение аэрозолей // М.: Наука. 1981. – 174 с.
9. Friedlander S.K. Behavior of suspended particles in a turbulent fluid // AIChE J. – 1957. – Vol. 3, No 3. – P. 381–385.
10. Раушенбах Б.В. и др. Физические основы рабочего процесса в камерах сгорания воздушно-реактивных двигателей / М.: Машиностроение. – 1964.
11. Henderson C. B. Drag coefficients of spheres in continuum and rarefied flows // AIAA J. 1976. V. 14, N 6. P. 707 –708.



12. Башкин В.А., Егоров И.В. Численное моделирование динамики вязкого совершенного газа / М.: Физматлит. – 2012. – 372 с.

УДК 539.2

**В.М. Кузнецов<sup>1</sup>, К. Б.Терешкина<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева (РХТУ им. Д.И. Менделеева)*

<sup>2</sup>*Институт химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН (ИХФ РАН)*

### **О ВЕЩЕСТВАХ С ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ РАЗМЕРНОСТЬЮ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ**

*Аннотация.* Обнаружено, что межмолекулярные колебательные спектры малых ван-дер-ваальсовых кластеров, рассчитанные методами *ab initio*, имеют степенную зависимость от частоты, подобно кристаллическим телам. Однако показатели  $d_f$  их пространственной размерности, в отличие, например, от трёхмерного волнового пространства  $d_f=3$  (закон Дебая), принимают значения  $d_f<1$ ,  $d_f=0$  и даже могут быть отрицательными. Спектров с размерностью  $d_f<0$  у веществ ранее обнаружено не было.

*Ключевые слова:* димеры, тримеры, межмолекулярные спектры, отрицатель

**V. Kuznetsov<sup>1</sup>, K. Tereshkina<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>*D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia*

<sup>2</sup>*Semenov Institute of Chemical Physics of Russian Academy of Sciences*

### **ABOUT MATERIALS WITH NEGATIVE DIMENSION OF VIBRATIONAL SPECTRA**

*Abstract.* It was found that intermolecular vibrational spectra of Van der Waals clusters, calculated by *ab initio* methods have power-law dependence on the frequency, like crystalline bodies. However, the argument  $d_f$  of their spatial dimension, in contrast, for example, from the three-dimensional wave space  $d_f = 3$  (the Debye law), take the values  $d_f<1$ ,  $d_f=0$ , and may even be negative. Substances with dimension of spectra  $d_f<0$ , previously were not found.

*Keywords:* dimers, trimers, intermolecular spectra, negative dimension

Введённая в [1,2] фрактальная модель континуальной среды, использовалась ранее для решения задач низкотемпературной решёточной теплоёмкости и устойчивости твёрдотельных структур по Линдеману в