

На правах рукописи

Шереметьева Ульяна Михайловна

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАСПРОСТРАНЕНИЯ  
ТОКСИЧНЫХ КОМПОНЕНТОВ ТОПЛИВА ПРИ ЭКСПЛУАТАЦИИ  
ЖИДКОСТНЫХ РАКЕТ**

01.02.05 – механика жидкости газа и плазмы

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Томск 2006

Работа выполнена в Томском государственном университете

Научный руководитель      доктор физико-математических наук,  
профессор Архипов Владимир  
Афанасьевич

Официальные оппоненты    доктор физико-математических наук,  
профессор Кузнецов Гений  
Владимирович

доктор технических наук,  
профессор Грушляков Валерий  
Иванович

Ведущая организация        Институт проблем химико-  
энергетических технологий СО РАН,  
г. Бийск.

Защита состоится "08" декабря 2006г. в 14 часов 30 минут на заседании  
Диссертационного совета Д 212.267.13 при Томском государственном  
университете по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке Томского  
государственного университета.

Автореферат разослан "08" ноября 2006 г.

Ученый секретарь  
Диссертационного Совета Д 212.267.13,  
доктор технических наук

Ю.Ф. Христенко

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** Разработка комплекса физико-математических моделей для прогнозирования степени загрязнения токсичными компонентами территорий в районе аварий, отделения и падения отработанных ступеней ракет-носителей является на сегодняшний день весьма своевременной и актуальной, особенно для районов Западной Сибири, Горного Алтая, где имеются зоны отчуждения, в которые падают отделенные фрагменты ракет. Экологическую проблему создает тот факт, что в баках отделенных отработанных двигательных установок остается большое (до 2,5 тонн) количество компонентов – так называемый «гарантийный запас топлива». Этот «гарантийный запас» несимметричного диметилгидразина (НДМГ) и азотного окислителя попадая в атмосферу и на поверхность Земли, обладая высокой токсичностью, может принести значительный вред всем видам живых организмов. НДМГ является токсичным веществом первого класса опасности, одновременно проявляет канцерогенные и мутагенные свойства и относится к суперэтоксикантам. Установлено, что НДМГ оказывает токсическое воздействие на печень, нервную систему, влияет на иммунный статус населения.

Оценить степень загрязнения окружающей среды возможно только с помощью глубоких физико-математических моделей, адекватно описывающих все физические факторы, процессы и явления, сопровождающие отделение и падение на Землю отработанных ступеней ракет-носителей. В мировой научной литературе нет методических проработок этого направления. Видимо, это связано с тем, что все зарубежные космические ракеты осуществляют старт в районах акваторий океанов, туда же падают отделенные ступени, и не возникало необходимости точного прогноза загрязнений. Только в России и Китае районы падения отделяющихся фрагментов ракет находятся внутри территорий, однако до недавнего времени вопросы экологии военно-промышленного комплекса не подлежали огласке и не ставились задачи методического обеспечения прогноза и оценок вредного воздействия.

Необходимо отметить, что в отечественной литературе недавно появились работы, помогающие понять некоторые аспекты данной проблемы. Вопросы распространения облака токсичных жидко-капельных компонентов и атмосферных осадков рассматривались в работах Садовского А.П., Рапуть

В.Ф., Олькина С.Е., Зыкова С.В., Резниковой И.К., Александрова Э.Л., Климовой Е.Г. и др. В большинстве известных работ при расчете скорости гравитационного осаждения капель использовалась, как правило, зависимость для стационарной (установившейся) скорости падения капли, полученная введением поправочного множителя в закон Стокса. Не были рассмотрены этапы формирования капель с учетом взаимодействия между ними. Недостаточно изучены вопросы, связанные с деформацией, разрушением капель аэродинамическими силами (критерий Вебера), а также с устойчивостью капли при больших ускорениях (критерий Бонда).

**Целью настоящей работы** является разработка научно-методических основ прогнозирования распространения в атмосфере токсичных загрязнений от выбросов компонентов ракетных топлив и их продуктов горения при эксплуатации ракет. Создание комплексной и адекватной модели прогнозирования распространения с максимальным комплексным учетом особенностей элементарных процессов, физических явлений и факторов. Проведение параметрических расчетов основных параметров облака капель в зависимости от их размера, химического состава, высоты разгерметизации.

**Научная новизна работы.** Предложена методология моделирования техногенных загрязнений при эксплуатации ракет-носителей. Получены новые экспериментальные результаты исследования режимов гравитационного осаждения капель, условий устойчивости и деформации капли в потоке, гравитационного осаждения высококонцентрированных аэрозольных систем. Разработана физико-математическая модель процесса распространения облака полидисперсных токсичных компонентов при гравитационном осаждении с учетом нестационарности движения, испарения, аэродинамического дробления капель с использованием критериев Вебера и Бонда, турбулентной диффузии и ветра.

**Практическая значимость работы.** Разработанные физико-математические модели являются научно-методической основой создания программных комплексов для прогнозирования загрязнения административных территорий. Эти программные комплексы найдут применение в административных службах, в экологических службах регионов Западной Сибири, санэпидемстанциях, МЧС.

Результаты исследований по теме диссертации использованы при проведении работ по госбюджетной теме НИИПММ ТГУ «Исследование и разработка теории и методов прогноза загрязнений атмосферы от вредного

воздействия эксплуатации объектов ракетно-космической техники» (2000-2005г). Единый заказ-наряд Агентства по образованию РФ для Томского государственного университета, регистрационный номер 3.9.01.

Исследования диссертационной работы проводились при частичной финансовой поддержке грантов РФФИ «Исследование процессов динамического взаимодействия капель» (проект 02-01-01246), «Физико-математическое моделирование распространения в атмосфере полидисперсных капель применительно к проблемам экологии и метеорологии» (проект А04-2.10-781, 2004 г) и Минобразования РФ «Разработка научных основ для расчета и прогнозирования распространения в атмосфере и выпадения на поверхность земли токсичных веществ при отделении отработанных ступеней ракет-носителей» (проект Е02-12.3-108).

**Достоверность** научных положений и выводов, полученных в работе, основывается на строгом физическом обосновании разработанных моделей, качественном и количественном соответствии с результатами, полученными другими авторами в пересекающихся областях исследований, согласовании расчетных и экспериментальных данных и проведением статистической обработки результатов экспериментов по стандартным методикам.

**Положения, выносимые на защиту:**

1. Методология моделирования техногенных загрязнений при эксплуатации ракет-носителей.
2. Результаты экспериментального исследования режимов гравитационного осаждения капель, условий устойчивости и деформации капли в потоке, гравитационного осаждения высококонцентрированных аэрозольных систем.
3. Численное исследование процессов нагрева и испарения капель токсичных компонентов при движении в разных слоях атмосферы.
4. Физико-математическая модель гравитационного осаждения моно- и полидисперсных капель в атмосфере.
5. Комплексная физико-математическая модель и результаты расчетов эволюции облака жидко-капельных токсичных компонентов с учетом нестационарности движения, испарения, аэродинамического дробления капель с использованием критериев Вебера и Бонда, турбулентной диффузии и ветра.

**Апробация работы.** Основные результаты работы докладывались на Международных и Всероссийских симпозиумах и конференциях: Международная конференция «Экология Сибири, Дальнего Востока и Арктики» (Томск: 2000, 2001); Рабочая группа «Аэрозоли Сибири» (Томск: 2002, 2003, 2004, 2005); Всероссийская научно-техническая конференция «Физика и химия высокоэнергетических систем» (Томск: 2003, 2004, 2005, 2006); III Российско-монгольская научная конференция молодых ученых и студентов «Алтай: экология и природопользование» (Бийск: 2004); X Юбилейная Международная научно-практическая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Современные техники и технологии СТТ–2004». (Томск: 2004); Региональная научно-практическая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых (Томск. ТГПУ: 2004, 2005, 2006); Всероссийская конференция «Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики» (Томск: 2002, 2004, 2005, 2006); V Международная конференция по неравновесным процессам в соплах и струях (Самара: 2004); XIII Симпозиум по горению и взрыву (Черноголовка: 2005); Молодежная конференция «Устойчивость и турбулентность течений гомогенных и гетерогенных жидкостей» (Новосибирск: 2005); АРМ–2005 (С.–Петербург: 2005); The Second International Symposium on Nonequilibrium Processes, Combustion, and Atmospheric Phenomena (Sochi: 2005); VIII Всероссийская конференция «Современные методы математического моделирования природных и антропогенных катастроф» (Кемерово: 2005); IX Международная научная конференция (Красноярск: 2005); XI Всероссийская научно-техническая конференция «Энергетика: экология, надежность, безопасность» (Томск: ТПУ: 2005); Международная школа-конференция молодых ученых «Физика и химия наноматериалов» (Томск: 2005).

**Публикации.** Результаты диссертационной работы опубликованы в 26 печатных работах, список которых представлен в конце автореферата.

**Структура и объем работы.** Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка используемых источников.

Диссертация изложена на 149 страницах машинописного текста, содержит 38 рисунков, 36 таблиц, библиография включает 105 источников.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обосновывается актуальность диссертационной работы, сформулированы цели и задачи исследования, перечислены полученные в диссертации новые результаты, отмечена их практическая ценность, представлены положения, выносимые на защиту.

**Первая глава** носит обзорный характер. Приведены характеристики: ракет-носителей, типичных компонентов ракетных топлив, атмосферы, указаны районы падения отделяющихся ступеней ракет-носителей на территории Томской области при пусках с космодрома «Байконур», приведена хроника аварий и катастроф за 1990-2005 г в России, представлен анализ исследований по моделированию осаждения капель атмосферных осадков, а также компонентов ракетного топлива в атмосфере.

**Во второй главе** предложена методология моделирования техногенных загрязнений при эксплуатации ракет-носителей. Основой выбранной концепции является моделирование нескольких возможных сценариев развития физических процессов и оценка максимальных загрязнений. Существенной трудностью при разработке физико-математических моделей процесса спуска отработавшей ступени ракеты-носителя является наличие нескольких неопределенностей в развитии событий (неопределенным является количество топливных компонентов, оставшихся на борту в момент отделения, что приводит к неопределенности в количественных оценках начального облака заражения при разгерметизации, неопределенной является одновременность (разновременность) разгерметизации баков горючего и окислителя и, как следствие, неопределенность химического взаимодействия горючего и окислителя, оказавшихся в атмосфере, неопределенными являются метеоусловия в районах падения отделенных фрагментов и, в связи с этим, неопределенность переноса токсичных аэрозвесей в атмосфере и т.д.). В силу наличия указанных неопределенностей предлагается реализовать такую методологию прогнозирования, которая позволяла бы построить несколько сценариев развития возможных событий и по построенным сценариям определять максимально возможный спектр вредных для окружающей среды факторов. В качестве примеров приведены несколько сценариев развития процесса спуска отделенных ступеней ракет-носителей, разгерметизации баков и распространения загрязнений.

Предложенная методология, реализованная в виде программных комплексов, может быть применена для прогнозирования как штатных, так и нештатных (аварийных) ситуаций.

**В третьей главе** проведены исследования режимов гравитационного осаждения капель, условий устойчивости и деформации капли в потоке.

При движении капли в потоке действующие на нее аэродинамические силы могут превышать силы поверхностного натяжения, в результате чего капля теряет устойчивость, деформируется и разрушается с образованием более мелких вторичных капель.

Основным параметром, от которого зависит деформация и дробление капли в потоке, считается число Вебера  $We = (\rho |u_r^{\Gamma}|^2 D) / \sigma_p$ , где  $u_r^{\Gamma} = u_p - v$  – относительная скорость движения капли диаметром  $D$ ,  $u_p$  – вектор скорости капли,  $v$  – вектор скорости газа,  $\sigma_p$  – коэффициент поверхностного натяжения капли,  $\rho$  – плотность среды (газ или жидкость), в которой движется капля. Значение числа Вебера  $We_{кр}$ , при котором происходит дробление капли, называется критическим. При определенных условиях капля может дробиться в ускоряющемся потоке при достижении критического значения числа Бонда  $Bo = (\rho_p \omega D^2) / \sigma_p$ , где  $\omega$  – ускорение капли,  $\rho_p$  – плотность капли. Для описания движения капли, обтекаемой жидкостью, к безразмерным критериям  $We$  и  $Re$ , записанным для этого случая, необходимо добавить число Рейнольдса, характеризующее внутреннее течение в капле; а также модифицированное число Бонда  $\tilde{Bo} = Bo(1 - \bar{\rho})$ ,  $\bar{\rho} = \rho / \rho_p$ .

Экспериментально изучена деформация одиночной первоначально сферической капли, движущейся под действием силы тяжести в другой жидкости при двух режимах обтекания – движение при умеренных числах Рейнольдса ( $Re = 10 \div 100$ ) и движение при малых числах Рейнольдса ( $Re \sim 1$ ).

В экспериментах с умеренными числами Рейнольдса исследовалось движение капли оливкового масла в растворе дистиллированной вода – этанол. Экспериментальное исследование проводилось на установке, блок-схема которой представлена на рис. 1.



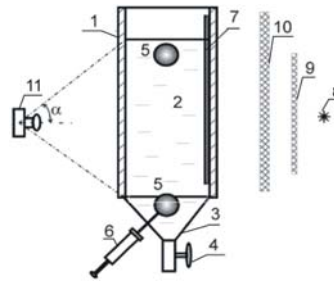


Рис. 1. Установка для исследования деформации капли:  
 1 – кювета; 2 – рабочий раствор; 3 – воронка; 4 – вентиль; 5 – капля;  
 6 – шприц; 7 – масштабная линейка; 8 – лампа подсветки;  
 9, 10 – рассеиватель света; 11 – кинокамера

Анализ кинограмм показал, что капля при своем движении принимает форму сплюснутого эллипсоида вращения (сфероида), малая ось которого, ориентирована по направлению движения капли (рис. 2). При обработке кинограмм измерялись размеры большой ( $2a$ ) и малой ( $2b$ ) осей сфероида и осевая координата его центра масс и определялась скорость движения капли. Диаметр эквивалентной сферической капли (объем которой равен объему деформированной капли) рассчитывался по формуле  $D_0 = 2\sqrt[3]{a^2b}$ .

По измеренным значениям  $|\frac{\Gamma}{u_p}|$ ,  $D_0$  рассчитывались критерии подобия – числа Рейнольдса, Вебера и Бонда.

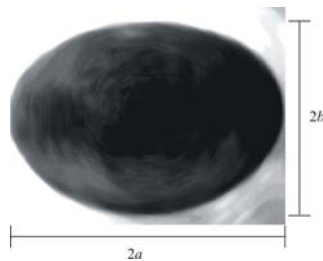


Рис. 2. Движение капли оливкового масла в водно-спиртовом растворе

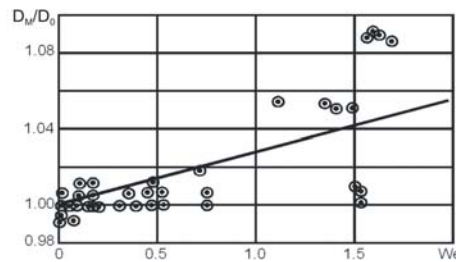


Рис. 3. Зависимость степени деформации капли от числа We

Экспериментальные данные о степени деформации капли от числа Вебера  $\varepsilon=f(We)$  в диапазоне  $Re \approx 10 \div 100$  представлены на рис. 3. Здесь же

приведена зависимость  $\varepsilon = D_M/D_0 = 1 + 0.027We$ , полученная аппроксимацией результатов численного решения задачи, где  $D_M/D_0$  – отношение миделева сечения сплюснутого сфероида к сечению эквивалентного шара.

Экспериментальное исследование движения каплей при малых числах Рейнольдса проводилось на рассмотренной выше установке для другой пары модельных жидкостей (падение капли ртути в глицерине). При проведении опытов серьезной проблемой оказалось получение крупных капель ртути. В связи с большой плотностью и малой вязкостью ртути использование обычного капилляра не позволяет получить капли диаметром более 1-2 мм. Для получения капель ртути диаметром 5-10 мм использовалось специальное устройство, схема которого представлена на рис. 4.

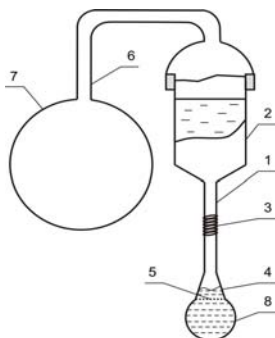


Рис. 4. Устройство для получения крупных капель ртути:  
1 – капилляр; 2 – приемная воронка; 3 – спиральный участок;  
4 – раструб; 5 – сетка; 6 – шланг; 7 – груша, 8 – капля

При исследовании движения капли при малых числах Рейнольдса (ртуть в глицерине) было установлено, что если диаметр капли меньше 8 мм, то капля устойчива и при падении сохраняет сферическую форму. Соответствующее значение числа составляет  $\tilde{Bo} = 6.4$ . При движении капли диаметром  $\sim 10$  мм капля неустойчива и распадается на фрагменты. Соответствующее значение числа Бонда составляет при этом  $\tilde{Bo} = 10$ .

Даны рекомендации по выбору адекватной зависимости для коэффициента аэродинамического сопротивления в диапазоне чисел

Рейнольдса до 5000 с учетом деформации капель. Приведены несколько эмпирических формул для аппроксимации стандартной кривой  $C_D (Re)$ .

Проанализированы процессы коагуляции и дробления капель. При описании эволюции фракционного состава капель в процессе гравитационной коагуляции наибольшее распространение получил кинетический подход.

Рассмотрен эффект влияния концентрации частиц на скорость осаждения. Экспериментально исследовались режимы гравитационного осаждения высококонцентрированной системы твердых сферических частиц в вязкой жидкости. Изучалось осаждение стеклянных и стальных шариков в водно-глицериновом растворе, коэффициент динамической вязкости которого варьировался в диапазоне  $\mu=0,003\div 0.387$  Па·с. Эксперименты проводились в плоско-параллельной кювете из полированного оргстекла высотой 0.3 м. Измерение скорости осаждения на квазистационарном участке траектории проводилось времяпролетным методом, для визуализации процесса использовалась видеосъемка (рис.5).

Для анализа влияния геометрических и режимных характеристик процесса на скорость осаждения варьировались диаметр частиц, вязкость раствора и объемная концентрация частиц. Предварительно измерялась скорость гравитационного осаждения одиночных частиц, с использованием которой подбиралась адекватная зависимость для коэффициента сопротивления в зависимости от режима обтекания.

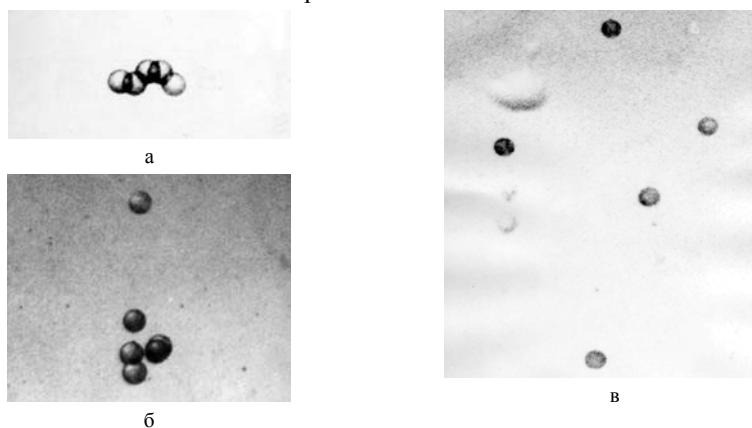


Рис.5. Осаждение сферических частиц в вязкой жидкости:  
а –  $\mu=0.387$  Па·с; б –  $\mu=0.267$  Па·с; в –  $\mu=0.003$  Па·с

Результаты экспериментов показали кратное увеличение скорости осаждения совокупности частиц по сравнению с одиночной частицей в идентичных условиях. Скорость осаждения группы частиц возрастает с увеличением размера частиц. Для растворов с большей вязкостью наблюдается большее увеличение скорости с увеличением концентрации частиц.

Представлена модель нагрева и испарения капли. Алгоритм расчета испарения свободно падающей капли следующий:

1. Уменьшение диаметра капли  $D$  за счет испарения описывается

уравнением:  $\frac{dD}{dt} = - \frac{W_A}{2\rho r_p D^2}$ , где  $W_A$  – скорость испарения.

2. Расчет скорости испарения проводится по формуле:  $W_A = K_x p D^2 \frac{X_{AO}}{1 - X_{AO}}$ ,

где  $K_x$  – коэффициент массоотдачи,  $X_{AO}$  – мольная доля пара вещества (жидкости) вблизи поверхности капли.

3. Коэффициент массоотдачи рассчитывается по критериальной

зависимости:  $K_x = \frac{\rho_f D_{ABf}}{D} \left[ 2 + 0.6 \left( \frac{Du_p \rho_f}{\mu_f} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{\mu_f}{\rho_f D_{ABf}} \right)^{\frac{1}{3}} \right]$ , где  $D_{ABf}$  –

коэффициент диффузии вещества в воздухе. Индекс "f" относится к "плочной" температуре  $T_f = 0.5 \cdot (T_k + T_g)$ .

4. Расчет коэффициента диффузии проводится по формуле:

$$D_{AB} = \frac{10^{-3} \nu^{1.75} (M_A + M_B) (M_A M_B)^{\frac{1}{2}}}{p \left[ \left( \frac{e}{V} \right)_A^{\frac{1}{3}} + \left( \frac{e}{V} \right)_B^{\frac{1}{3}} \right]}$$

где  $M_A, M_B$  – молекулярные

массы компонентов,  $\Sigma V$  – диффузионные объемы молекул (табл. 1).

Таблица 1 – Значения коэффициента диффузии  $D_{AB}$  при  $T=273K, p=0.1MPa$

Вещество	Вода	Азотная кислота	Керосин	НДМГ	Азотный тетраоксид
$D_{AB}$	0.22	0.14	0.12	0.09	0.11

Была получена зависимость для расчета коэффициентов диффузии  $D_{AB}$  в воздухе для произвольных условий ( $p, T$ ):

$$D_{AB} = \frac{D_{AB}^{\text{ж}} T^{\frac{1.75}{3}}}{p \cdot 273^{\frac{1}{3}}}$$

По разработанной модели были проведены расчеты испарения капель НДМГ, падающих в атмосфере с разной высоты.

Учет влияния вертикальной координаты на физические свойства воздуха проведен по параметрам стандартной атмосферы.

Поскольку при движении капель в разных слоях атмосферы происходит их теплообмен с окружающей средой, то для расчета температуры капли  $T_s$  использовалось уравнение теплового баланса в виде

$$\frac{dT_s}{dt} = \frac{6\lambda}{D^2 \rho_p c_p} Nu(T - T_s),$$

где  $c_p$  – удельная теплоемкость жидкости;  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности воздуха;  $T_s$  – температура поверхности капли;  $T$  – абсолютная температура окружающего воздуха. Для расчета числа Нуссельта использовали критериальную зависимость

$$Nu = 2.0 + 0.56 \sqrt{Re},$$

где  $m$  – динамическая вязкость газа. Скорость осаждения капель  $u_p$  находилась из численного решения уравнения движения, которое в

стационарном случае имеет вид:  $m_p g = C_D S \frac{\rho_p u_p^2}{2}$ , где  $C_D = \frac{24}{Re} + \frac{4}{\sqrt[3]{Re}}$ .

Плотность и поверхностное натяжение жидкого НДМГ на разных высотах находили по формуле  $r_p = 1086 - 1,01 T_s$ ,  $s_p = 5,88 \cdot 10^{-2} - 1,157 \cdot 10^{-4} T_s$ .

Расчеты показали, что капли НДМГ диаметром менее 4 мм полностью испаряются в тропосфере на высотах от 2 до 10 км практически независимо от высоты их выброса (рис. 6, 7).

Получено, что капли НДМГ, падающие с высоты 40 км с начальным диаметром 6 мм, достигают поверхности Земли за 32 мин. При падении диаметр капли уменьшается до 3.2 мм.

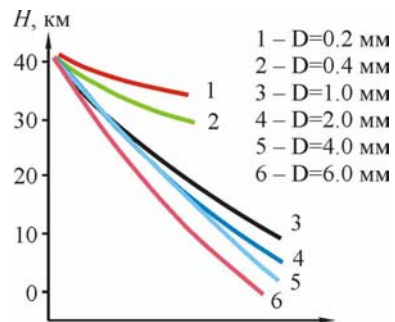


Рис. 6. Высота полного испарения капель НДМГ разных размеров

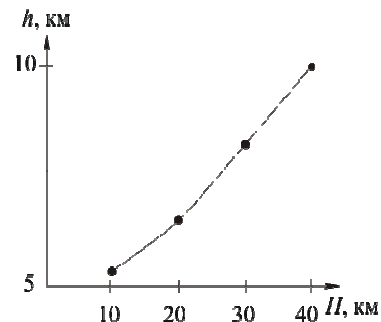


Рис. 7. Высота полного испарения капель НДМГ  $D=3$  мм в зависимости от высоты выброса

**В четвертой главе** приводятся физико-математическая постановка задачи определения параметров облака жидко-капельных токсичных компонентов, образующихся при разгерметизации в атмосфере топливных баков ракет-носителей.

Рассмотрены уравнения гравитационного осаждения капель. Проведен анализ режимов гравитационного осаждения капель токсичных компонентов в условиях переменности физических свойств атмосферы для высот разгерметизации до 40 км. Получено аналитическое решение данной задачи в рамках приближения стоксовского режима обтекания, позволяющее оценить предельные (приближенные) параметры облака капель. Для более сложного закона сопротивления (формула Клячко) составлен алгоритм компьютерной программы численного решения уравнения движения капель, на базе неявной разностной схемы. Проведены параметрические расчеты основных параметров облака капель в зависимости от их размера, химического состава, высоты разгерметизации. В табл. 2 приведены результаты расчета скорости стационарного осаждения капель воды (Стокс, Клячко) и соответствующие экспериментальные данные по скорости дождевых капель.

Таблица 2 – Параметры стационарного осаждения капель воды

$D$ , мм	0,1	0,4	1,0	2,0	3,0	4,0
$u_p$ , м/с (Стокс)	0,30	4,81	30,1	120,4	270,9	481,5
$u_p$ , м/с (Клячко)	0,25	1,59	3,8	7,1	9,9	12,5
$u_p$ , м/с (Экспер.)	0,27	1,64	4,03	6,49	8,06	8,83

Проведенные расчеты позволяют сделать вывод, что приближенная зависимость в рамках стоксовского режима обтекания дает завышенное значение скорости. Поэтому для более точных расчетов необходимо использовать более сложную формулу для коэффициента аэродинамического сопротивления  $C_D$ . Результаты расчетов для нестоксовского режима (Клячко) удовлетворительно согласуются с опытными данными по скорости дождевых капель, что свидетельствует об адекватности используемых в модели зависимостей.

Приведена физико-математическая постановка задачи движения полидисперсных капель с учетом ветра.

Рассмотрена идеализированная модель процесса образования облака капель. Предположено, что разгерметизация произошла на некоторой высоте  $H$  с температурой выше температуры замерзания компонента. При этом в атмосферу выбрасывается некоторая масса жидкости  $m$ . Под действием силы тяжести жидкость начнет ускоренно двигаться в сторону поверхности Земли. За счет процессов аэродинамического дробления первоначальный объем жидкости будет дробиться на фрагменты и в итоге образуется облако полидисперсных капель. В результате этих процессов формируется исходное облако с некоторой функцией  $g(r)$  массового распределения капель по размерам. В настоящей работе для описания спектра размеров капель в исходном облаке использовалось уравнение Розина-Раммлера:

$$g(r) = \frac{n}{r_0^n} r^{n-1} e^{-\frac{r}{r_0}}, \text{ где } n, r_0 \text{ – параметры распределения. Значения}$$

параметров  $n = 2$ ;  $r_0 = 2$  мм выбраны в соответствии с анализом экспериментальных данных по размерам дождевых капель (рис. 8).

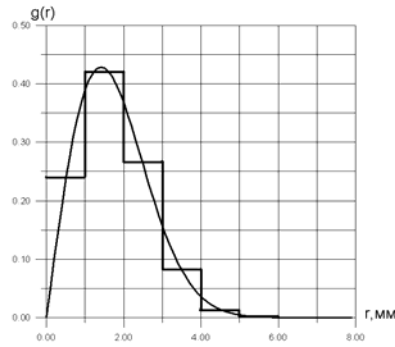


Рис. 8. Дифференциальная функция массового распределения капель

Минимальный объем образовавшегося облака капель  $V_{\min}$  можно оценить по формуле (для случая «плотной упаковки» сферических частиц):

$$V_{\min} = \frac{6m}{\rho r_p}$$

где  $\rho_p$  – плотность жидкости,  $m$  – масса облака. В действительности за счет рассеивания капель объем будет больше и определится формулой:

$$V = a^3 \Psi_{\min}$$

где  $a$  коэффициент, учитывающий рассеивание капель ( $a=1$  соответствует «плотной упаковке»;  $a=2$  – расстояние между каплями равно их диаметру;  $a=3$  – расстояние между каплями равно двум диаметрам и т.д.). Приняв  $a=10$  можно оценить начальный объем  $V_0$  или радиус  $R_0$  облака капель (в предположении его сферичности). Так, например, для капель НДМГ ( $\rho_p=790$  кг/м<sup>3</sup>) при  $m=100$  кг радиус первичного облака  $R_0=3.8$  м.

Частицы разбивались на 6 фракций, и прослеживалась история каждой фракции.

Уравнение движения капель  $i$ -й фракции записывается в виде:

$$m_{pi} \frac{d\vec{u}_{pi}}{dt} = \sum_i \vec{F}_i$$

где  $m_{pi} = (\rho D_i^3 / 6) r_p$  – масса капль  $i$ -й фракции;  $\vec{u}_{pi}$  – вектор скорости капль  $i$ -й фракции;  $\vec{F}_i$  – движущие силы ( $F_g = m_{pi} g$  – сила тяжести,



$$F_a = -rVg = -m_{pi} \frac{r}{r_p} g \quad - \quad \text{сила Архимеда}, \quad F_c = -C_D S \frac{r u_{pi}^2}{2} \quad - \quad \text{сила}$$

аэродинамического сопротивления, где  $V$  – объем капли,  $S = \frac{\pi D_i^2}{4}$  – площадь ее миделева сечения)

Без учета силы Архимеда уравнения движения в проекциях на оси декартовой системы координат  $x$ ,  $y$ ,  $z$  (ось  $z$  направлена по направлению вектора ускорения свободного падения  $\vec{g}$ ) имеют вид:

$$\frac{du_{pi}}{dt} = \frac{3r}{4r_p D_i} C_D |\vec{v} - \vec{v}_{pi}| (u - u_{pi}),$$

$$\frac{dv_{pi}}{dt} = \frac{3r}{4r_p D_i} C_D |\vec{v} - \vec{v}_{pi}| (v - v_{pi}),$$

$$\frac{dw_{pi}}{dt} = \frac{3r}{4r_p D_i} C_D |\vec{v} - \vec{v}_{pi}| (w - w_{pi}) + m_i g.$$

Здесь  $|\vec{u} - \vec{u}_{pi}| = \sqrt{(u - u_{pi})^2 + (v - v_{pi})^2 + (w - w_{pi})^2}$  – модуль разностного вектора;  $u, v, w$  – компоненты вектора скорости ветра  $\vec{u}$ ;  $u_{pi}, v_{pi}, w_{pi}$  – компоненты вектора скорости капель  $i$ -й фракции  $\vec{u}_{pi}$ .

Для учета аэродинамического разрушения капель предполагалось, что при достижении критического значения числа Вебера  $We = We_* = 17$ , а также при числах Бонда  $Bo > Bo_* = 10$  капля дробится на две сферические равной массы.

Проведены расчеты траекторий полидисперсных капель при значении высоты разгерметизации  $H = 18$  км для двух вариантов состояния атмосферы, полученных при зондовых измерениях для г. Новосибирска, и г. Колпашево на 1.07.2001г., проекции траекторий капель НДМГ приведены на рис. 9, 10. Как видно из приведенных графиков, капли могут рассеиваться на значительные расстояния (свыше 20 км) от координаты точки выброса топлива.

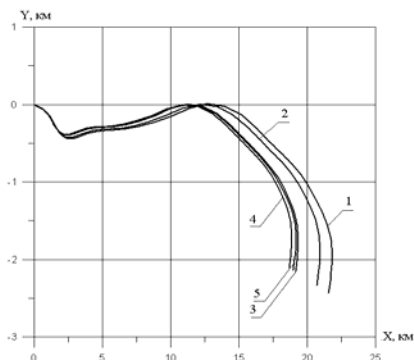


Рис. 9. Проекция траекторий частиц разных фракций на горизонтальную плоскость (H=18км, г. Новосибирск):  
1 – D=3 мм; 2 – D=5 мм; 3 – D=7 мм;  
4 – D=9 мм; 5 – D=11 мм

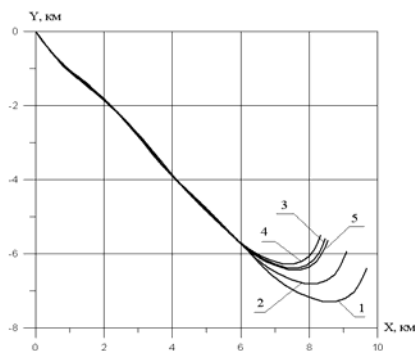


Рис. 10. Проекция траекторий частиц разных фракций на горизонтальную плоскость (H=18км, г. Колпашево):  
1 – D=3 мм; 2 – D=5 мм; 3 – D=7 мм;  
4 – D=9 мм; 5 – D=11 мм

В пятой главе представлена модель диффузии аэрозольного облака.

Концентрация облака для каждой фракции капель находили из уравнения диффузии:

$$\frac{\partial M_{p,i}}{\partial t} + u_{p,i} \frac{\partial M_{p,i}}{\partial x} + v_{p,i} \frac{\partial M_{p,i}}{\partial y} + w_{p,i} \frac{\partial M_{p,i}}{\partial z} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial x} \left( K_{x,i} \frac{\partial M_{p,i}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_{y,i} \frac{\partial M_{p,i}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{z,i} \frac{\partial M_{p,i}}{\partial z} \right)$$

где  $M_{p,i}$  – концентрация капель  $i$ -й фракции,  $K$  – коэффициент турбулентной диффузии (по направлению  $x$ ,  $y$ ,  $z$  соответственно),  $u_{p,i}, v_{p,i}, w_{p,i}$  – компоненты вектора скорости капель. С помощью аналитического преобразования удалось свести пространственную задачу к плоской и, тем самым, сократить объем вычислений.

Начальные условия:

$$\text{при } t=0: M_{p,i} = \begin{cases} M_{p,i0}(x, y, z), & \text{если } (x, y, z) \in \Omega, \\ 0, & \text{если } \notin \Omega, \end{cases}$$

где  $\Omega$  – область первоначального образования облака.

При постановке граничных условий для уравнения диффузии предполагалось, что  $M_{p,i} \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow \infty, y \rightarrow \infty, z \rightarrow \infty$ .

Граничные условия:

$$\text{при } z = 0 : w_g M_i + K_z \frac{\partial M_i}{\partial z} = u_{ps} M_i,$$

где  $u_{ps}$  – скорость осаждения на подстилающую поверхность,  $w_g$  – скорость осаждения облака.

$$\text{при } z = H : K_z \frac{\partial M_i}{\partial z} = u_H M_i.$$

Замыкание уравнения диффузии требует совместного решения уравнений, описывающих движение атмосферы. На практике обычно используют кинематические модели, в которых скорость ветра, а также другие метеорологические параметры полагаются известными.

Для расчета коэффициентов турбулентной диффузии использовали результаты работ Берлянда и Генриховича. Для решения уравнений диффузии использовался метод Рунге-Кутты-Мерсона четвертого порядка точности.

Разработана комплексная математическая модель распространения облака капель в атмосфере. Предполагалось:

1. Скорость ветра не изменяется по времени и подчиняется логарифмическому закону:  $u = u_1 \frac{\ln(z/z_0)}{\ln(z_1/z_0)}$ , где  $z_0$  – шероховатость подстилающей поверхности.
2. Начальное распределение дисперсных капель жидкого ракетного топлива соответствует уравнению Розина-Раммлера.
3. Критериями разрушения капель приняты критические значения чисел Вебера и Бонда.
4. В качестве исходных данных привлечены параметры стандартной атмосферы (плотность, температура, вязкость и т.д.) в зависимости от высоты над уровнем моря.

Комплексная математическая модель распространения аэрозольного облака капель в атмосфере включает:

- уравнение движения капель  $i$ -й фракции  $m_{p_i} \frac{d u_{p_i}^r}{dt} = e_i \frac{F_i^r}{F_i}$ ,

причем выбирался соответствующий  $C_D$  в зависимости от режима осаждения:  $Re=0 \div 1 - C_D=24/Re$  (Стоксовский режим);

$$Re=1\div 700 - C_D = \frac{24}{Re} + \frac{4}{\sqrt[3]{Re}} \text{ (промежуточный режим - формула Клячко);}$$

$$Re=700\div 3\cdot 10^5 - C_D=0.44 \text{ (автомодельный режим).}$$

- кинематические соотношения  $\frac{dx}{dt} = u_{pi}, \frac{dy}{dt} = v_{pi}, \frac{dz}{dt} = w_{pi};$
- уравнение теплового баланса  $\frac{dT_s}{dt} = \frac{6\lambda}{D_i^2 \rho_{pi} c_p} Nu(T - T_s);$
- уравнение для изменения диаметра капли  $D_i$  за счет испарения

$$\frac{dD_i}{dt} = - \frac{W_A}{2pr_{pi} D_i^2};$$

- уравнение диффузии аэрозольного облака

$$\begin{aligned} \frac{\partial M_{p,i}}{\partial t} + u_{p,i} \frac{\partial M_{p,i}}{\partial x} + v_{p,i} \frac{\partial M_{p,i}}{\partial y} + w_{p,i} \frac{\partial M_{p,i}}{\partial z} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left( K_{x,i} \frac{\partial M_{p,i}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_{y,i} \frac{\partial M_{p,i}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{z,i} \frac{\partial M_{p,i}}{\partial z} \right) \end{aligned}$$

На базе разработанной модели проведено расчетно-теоретическое исследование для типичных компонентов жидких ракетных топлив с учетом нестационарности движения, высоты разгерметизации.

На рис. 11, 12 представлена зависимость диаметра капли НДМГ от высоты, рассчитанная для различных высот разгерметизации. Как видно из рис. 11, 12 можно выделить три этапа жизни капель. На первом, начальном, происходит разгон капель до критической скорости. Затем следует серия дроблений капли при превышении критической скорости падения. Изменение диаметра капли вследствие испарения на высотах от 10 до 40км крайне незначительно. После торможения капли в верхней тропосфере процесс дробления капель прекращается, и решающую роль в изменении размера капли играет ее испарение. Таким образом, высоты 10км капли достигают примерно одного размера, не зависящего от их начального размера.

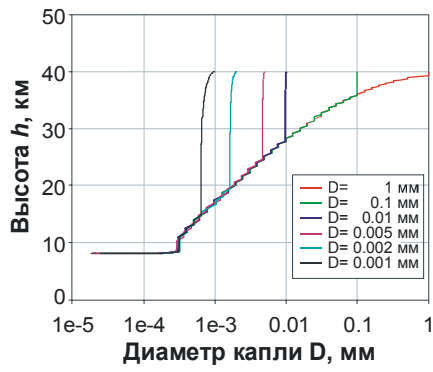


Рис. 11. Зависимость диаметра капли НДМГ от высоты (высота разгерметизации  $H=40$ км)

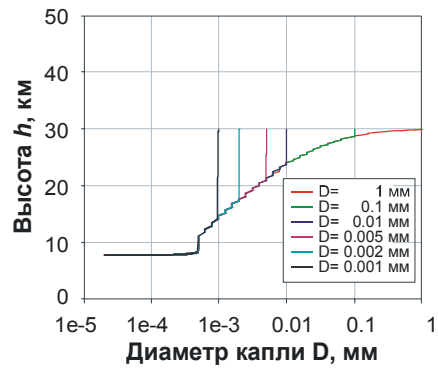


Рис. 12. Зависимость диаметра капли НДМГ от высоты (высота разгерметизации  $H=30$ км)

На рис. 13 показана суммарная концентрация капель НДМГ в полидисперсном облаке для различных моментов времени. Граница облака соответствует предельно допустимой концентрации НДМГ. Масштаб размера облака приведен на рис. 13а.

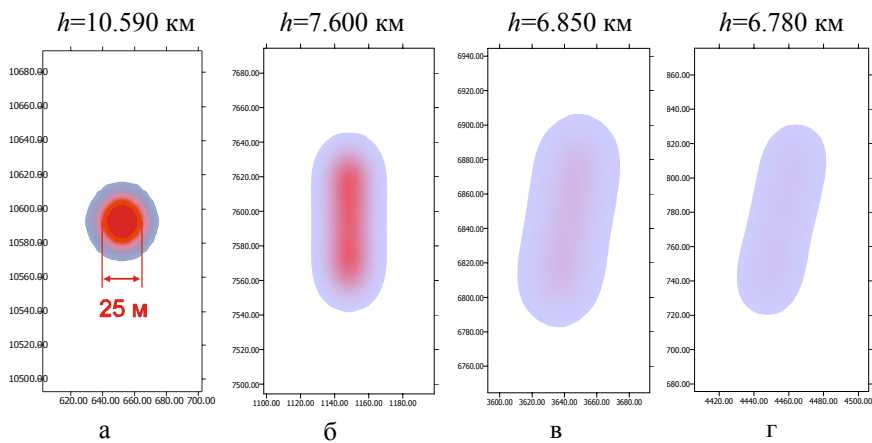


Рис. 13. Концентрация капель НДМГ в полидисперсном облаке в различные моменты времени:

а -  $t = 30$  с, б -  $t = 60$  с, в -  $t = 180$  с, г -  $t = 300$  с

$h$  – высота над уровнем Земли,  $t$  – время после разгерметизации

Из анализа полученных результатов можно оценить как происходит эволюция полидисперсного аэрозольного облака капель, сформировавшегося на высоте 12 км, с течением времени.

Под действием гравитационного осаждения и ветра происходит смещение облака капель в атмосфере. При этом вследствие быстрого осаждения первоначально сферическое облако становится вытянутым. Размеры облака вследствие процессов турбулентной диффузии первоначально увеличиваются с течением времени, однако это увеличение незначительно. Концентрация капель в облаке вследствие испарения уменьшается и через 5-7 минут после формирования облака весь жидкий НДМГ переходит в газовую фазу, что приводит к прекращению существования аэрозольного облака.

## **ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ**

1. На основе анализа литературы систематизирована база данных по характеристикам атмосферы, ветра, физико-химическим свойствам компонентов ракетного топлива, необходимая для моделирования процессов распространения токсичных компонентов в атмосфере.
2. Предложена методология физико-математического моделирования техногенных загрязнений при эксплуатации жидкостных ракет-носителей. Основой выбранной концепции является моделирование нескольких возможных сценариев развития физических процессов и оценка максимальных загрязнений.
3. Экспериментально исследовано влияние числа Бонда на устойчивость капли. При исследовании движения капли при малых числах Рейнольдса подтверждена неустойчивость капли в диапазоне значений числа Бонда больших 10.
4. Экспериментально исследованы режимы гравитационного осаждения высококонцентрированных аэрозольных частиц в вязкой жидкости. Получено, что степень увеличения скорости частиц зависит от их размера и количества, а также от вязкости раствора. Для растворов с большей вязкостью наблюдается большее увеличение скорости с ростом концентрации частиц.
5. Численно исследованы процессы нагрева и испарения свободно падающих одиночных капель в атмосфере для типичных компонентов ракетных топлив. Показано, что испарение капли происходит в основном

- в тропосфере, ниже 10 км, практически независимо от высоты выброса.
6. Разработана физико-математическая модель распространения облака жидко-капельных токсичных компонентов с учетом нестационарности движения, испарения, аэродинамического дробления с использованием критериев Вебера и Бонда, диффузии и ветра.
  7. С использованием данной модели проанализированы возможные режимы осаждения в зависимости от высоты разгерметизации. Проведены параметрические расчеты основных параметров облака капель в зависимости от их размера, химического состава, высоты разгерметизации.
  8. Данная модель может быть использована также для решения широкого класса других экологических задач, связанных с техногенными процессами и аварийными ситуациями (разрыв нефтепроводов, бензохранилищ, аварии самолетов).

**Основные результаты работы отражены в следующих публикациях:**

1. Рыжих Е.Н., Копцева Е.Ю., Шереметьева У.М. Моделирование параметров облака токсичных аэрозолей в районе аварий ракет-носителей. // Экология пойм сибирских рек и Арктики. Тезисы докладов. – Томск: Изд-во Института оптики атмосферы СО РАН, 2000. С. 58.
2. Копцева Е.Ю., Шереметьева У.М. Образование и эволюция жидко-капельных токсичных компонентов при авариях ракет-носителей. // Экология Сибири, Дальнего Востока и Арктики. Тезисы докладов. – Томск: Изд-во Института оптики атмосферы СО РАН, 2001. С. 66.
3. Архипов В. А., Копцева Е.Ю., Трофимов В.Ф., Шереметьева У.М. Параметры аэрозольного облака при выбросе жидких ракетных топлив в атмосферу // Аэрозоли Сибири. IX Рабочая группа: Тезисы докладов. – Томск: Изд-во Института оптики атмосферы СО РАН, 2002. С. 35.
4. Березиков А.П., Копцева Е.Ю., Шереметьева У.М. Образование и эволюция жидко-капельных токсичных компонентов при авариях ракет-носителей // Исследование по баллистике и смежным вопросам механики. Сборник статей. – Томск: Изд-во Томского университета, 2002. С.8-9.
5. Архипов В. А., Козлов Е.А., Ткаченко А.С., Трофимов В.Ф., Шереметьева У.М. Моделирование распространения аэрозольного

облака при выбросе жидких ракетных топлив в атмосферу // *Аэрозоли Сибири*. X Рабочая группа: Тезисы докладов. – Томск: Изд-во Института оптики атмосферы СО РАН, 2003. С. 58.

6. Ткаченко А.С., Шереметьева У.М. Моделирование процесса распространения облака полидисперсных токсичных компонентов // *Физика и химия высокоэнергетических систем. Доклады конференции*. – Томск: Изд-во Томского университета, 2003. С. 11-12.
7. Шереметьева У.М. Моделирование параметров облака токсичных компонентов в районе аварий ракет-носителей // X Международная научно-практическая конференция молодых ученых «Современные техники и технологии». Труды конференции. – Томск: Изд-во ТПУ, 2004. С. 349-352.
8. Шереметьева У.М. Моделирование параметров токсичных аэрозолей в районе аварий ракет-носителей // III Российско-монгольская научная конференция молодых ученых. Материалы конференции. – Бийск: Изд-во НИЦ БПГУ им. В.М. Шукшина, 2004. С. 45-51.
9. Архипов В. А., Березиков А.П., Шереметьева У.М. и др. Моделирование распространения аэрозольного облака при выбросе жидких ракетных топлив в атмосферу // *Оптика атмосферы и океана*, 2004. Т. 17, №5-6. С. 488-493.  
Arkhipov V.A., Berezikov A.P., Sheremeteyeva U.M. Modeling the spread of aerosol cloud accompanying liquid propellant emission into the atmosphere // *Atmospheric and Oceanic Optics*, 2004. Vol. 17. No. 5-6. pp. 433-438.
10. Шереметьева У.М. Распространение в атмосфере облака токсичных компонентов жидких ракетных топлив // Четвертая Международная школа-семинар «Внутрикамерные процессы, горение и газовая динамика дисперсных систем». Сборник материалов. В 2 томах. Т. II. – СПб.: БГТУ, 2004. С. 204.
11. Шереметьева У.М. Влияние процессов испарения на эволюцию облака токсичных композитов жидких ракетных топлив // *Физика и химия высокоэнергетических систем. Доклады конференции*. – Томск: Изд-во Томского университета, 2004. С. 59-60
12. Козлов Е.А., Шереметьева У.М. Анализ моделей испарения при гравитационном осаждении капель в атмосфере // *Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики. Доклады IV*



- Всероссийской научной конференции. – Томск: Изд-во Томского университета, 2004. С. 105-106.
13. Березиков А.П., Архипов В.А., Усанина А.С., Шереметьева У.М. Устойчивость капли при малых числах Рейнольдса // Устойчивость течений гомогенных и гетерогенных жидкостей. Доклады Всероссийской научной конференции. Вып X. –Новосибирск: ИТПМ, 2005. С. 7-10.
  14. Шереметьева У.М. Анализ критериев устойчивости капли в потоке газа // Физика и химия высокоэнергетических систем. Сборник материалов I Всероссийской конференции молодых ученых. – Томск: Изд-во Томского университета, 2005. С. 237-238.
  15. Шереметьева У.М., Литвинов В.Л, Влияние устойчивости капель на характеристики кислотных дождей // Материалы IX Всероссийской конференции студентов, аспирантов и молодых ученых “Наука и образование”. – Томск: ТГПУ, 2005. Т. 6. Часть 3. С. 318-322.
  16. Шереметьева У.М. Осаждение облака токсичных компонентов при авариях жидкостных ракет // XIII Симпозиум по горению и взрыву Тезисы докладов. – Черногоровка, 2005. С. 211.
  17. Arkhipov V.A., Kozlov E.A., Sheremetyeva U.M. Spreading of a Drop Cloud in the Atmosphere // Materials of the Second International Symposium on Nonequilibrium Processes, Combustion, and Atmospheric Phenomena. – Sochi, 2005. Volume 2. pp. 351-358.
  18. Архипов В.А., Матвиенко О.В., Шереметьева У.М. Оценка рисков загрязнения окружающей среды при эксплуатации ракетно-космической техники // Материалы IX Международной научной конференции. – Красноярск: Сиб. гос. аэрокосм. университет, 2005. С. 103.
  19. Шереметьева У.М. Устойчивость и режимы дробления облака капель при гравитационном осаждении // V Всероссийская конференция молодых ученых «Проблемы механики: теория, эксперимент и новые технологии». Тезисы докладов. – Новосибирск: Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, 2005. С.18-19.
  20. Архипов В.А., Васенин И.М., Шереметьева У.М. и др. Режимы деформации и дробления жидко-капельных аэрозолей // Аэрозоли Сибири. XII Рабочая группа: Тезисы докладов. – Томск: Изд-во Института оптики атмосферы СО РАН, 2005. С. 34.
  21. Шереметьева У.М. Разработка математической модели распространения загрязнений в атмосфере при выбросах компонентов

- жидких ракетных топлив // Материалы Одиннадцатой Всероссийской научно-технической конференции «Энергетика: экология, надежность, безопасность». – Томск: ТПУ, 2005. С. 327-329.
22. Козлов Е.А., Шереметьева У.М. Прогнозирование экологической обстановки в районе падения ракет-носителей // Материалы Международной школы-конференции молодых ученых «Физика и химия наноматериалов». – Томск: Изд-во Томского университета, 2005. С. 492-495.
23. Архипов В. А., Березиков А.П., Шереметьева У.М. и др. Моделирование техногенных загрязнений при отделении ступеней ракет-носителей // Изв. вузов. Физика, 2005. Т. 48, №11. С. 5-9.
24. Архипов В.А., Васенин И.М., Трофимов В.Ф., Шереметьева У.М. Режимы деформации и дробления жидко-капельных аэрозолей // Оптика атмосферы и океана, 2006. Т. 19, № 6. С. 1-4.  
Arkhipov V.A., Vasenin I.M., Sheremetyeva U.M. Conditions for deformation and crash of liquid-drop aerosols // Atmospheric and Oceanic Optics, 2006. Vol. 19. No. 6. pp. 473-476.
25. Шереметьева У.М. Анализ моделей испарения капель в атмосфере // Физика и химия высокоэнергетических систем: Сборник материалов II Всероссийской конференции молодых ученых. – Томск: Изд-во Томского университета, 2006. С. 342-345.
26. Arkhipov V.A., Sheremtyeva U.M. Modes of Drop Gravitational Sedimentation in Atmosphere // XIII International Symposium “Atmospheric and Ocean Optics“. Abstracts. – Tomsk: Institute of atmospheric Optics SB RAS, 2006. P. 138.