

6-а МІЖНАРОДНА МІЖДИСЦИПЛІНАРНА
НАУКОВО-ПРАКТИЧНА КОНФЕРЕНЦІЯ

**СУЧАСНІ ПРОБЛЕМИ
НАУКИ ТА ОСВІТИ**



*200-річчю Харківського національного університету
імені В.Н.Каразіна присвячується*

МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ

30 квітня – 9 травня 2005р., м. Алушта

Харків – 2005

УДК 001

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНОСТИ МЕТОДАМИ RANS/LES

Ершов Д. С.

Харьковский национальный университет, пл. Свободы 4, 61077, Харьков

Изучаются известные подходы к численному моделированию турбулентных течений жидкости и газа, а именно: RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes, уравнения Навье-Стокса осредненные по Рейнольдсу), LES (Large Eddy Simulation, расчет крупных вихрей) и гибридные методы RANS/LES.

Рассмотрен вывод уравнений RANS, а также сопутствующих им уравнений рейнольдсовых напряжений, переноса кинетической энергии турбулентности и переноса удельной скорости диссипации. Сопоставлены различные модели турбулентности RANS, в частности: дифференциальные модели турбулентности $k-\varepsilon$, $k-\omega$, BSL Ментера и SST Ментера.

Получены фильтрованные по пространству уравнения Навье-Стокса (уравнения LES) для сжимаемого газа. Приведены различные модели для замыкания уравнений LES, такие как: алгебраическая модель Смагоринского, дифференциальная модель Йошизавы и другие модели. Рассмотрены гибридные модели для прямого расчета крупномасштабной турбулентности, полученные объединением моделей RANS

и LES. Выполнено обобщение рассмотренных гибридных моделей, и предложена методология создания семейства различных моделей RANS/LES с использованием простой переключающей функции.

Для сравнения свойств гибридных моделей проведен численный эксперимент с помощью газодинамического солвера FlowER-U. Выполнено два расчета по трехмерному обтеканию обратного уступа и куба, установленного на поверхности. Условия эксперимента представлены в таблице 1. По результатам численного эксперимента проведены сопоставления отдельных гибридных моделей турбулентного течения между собой, а также выполнено сравнение с результатами, полученными по классическим моделям турбулентности RANS, и экспериментальными данными. Показано, что применение гибридных моделей турбулентного течения позволяет моделировать трехмерные нестационарные эффекты, которые невозможно получить при использовании статистического осреднения, в частности: квазипериодический сход вихрей с обтекаемых тел, трехмерная динамика свободных вихрей, переносимых основным потоком (Рис 1 и 2). Таблица 1

Параметры	Обратный уступ	Куб на пластине
Число Рейнольдса ($Re = \rho \cdot U \cdot h / \mu$)	5100	40000
Число Маха (M)	0.2	0.3
Высота (уступа, куба) (h)	0.02811	0.01
Скорость на входе (U)	100	127.2977
Статическая плотность (ρ)	0.0554645	0.7776
Статическое давление (P)	10^4	10^3



Рис 1. Обтекание обратного уступа, рассчитанного по модели SST.



Рис 2. Обтекание обратного уступа, рассчитанного по гибридной модели.

УДК 541.183

ТВЕРДОФАЗНІ ЕКСТРАГЕНТИ НА ОСНОВІ ВИСОКОДИСПЕРСНИХ ОКСИДІВ: СИНТЕЗ, ВЛАСТИВОСТІ ТА ЗАСТОСУВАННЯ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ЕКОТОКСИКАНТІВ

Зайцев В.М., *Зайцева Г.М., Коноплицька О.В., Халаф В. А., *Рева Т.Д.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, кафедра аналітичної хімії. Київ вул. Володимирська 62, тел. 239-33-45 E-mail: vzaitsev@univ.kiev.ua *Національний медичний університет імені О.О. Богомольця, кафедра загальної хімії. Київ, бул. Тараса Шевченка 13, тел. 454-49-11, E-mail: gzaitseva@univ.kiev.ua

Невпинно зростаючі екологічні проблеми спонукають потреби регулярного моніторингу біосфери і, як наслідок цього, розробку надійних високочутливих методів визначення мікрокількостей токсикантів у екологічних та біологічних об'єктах. Одним з напрямків вирішення цієї проблеми є застосування в аналізі сорбційних методів, які дозволяють здійснювати індивідуальне чи групове вилучення мікрокомпонентів, нівелюючи вплив макрокомпонентів матриці та забезпечуючи високі коефіцієнти концентрування. Підвищена увага до твердофазних екстрагентів зумовлена їх суттєвими перевагами таким як екологічність, доступність, простота у використанні, економічність, стабільність хімічної форми. Перспективними в цьому плані є модифіковані високодисперсні оксиди та композиційні матеріали на їх основі, завдяки поєднанню переваг самої матриці з чутливістю і вибірковістю іммобілізованих аналітичних реагентів.

У даній роботі запропоновано використання нових варіантів здійснення добре відомих аналітичних реакцій шляхом іммобілізації аналітичних реагентів на поверхні чи у об'ємі матриці. Аналітичні реагенти на поверхні оксидів закріплювали шляхом хімічного модифікування та за рахунок фізичної адсорбції. Синтез хімічно модифікованих високодисперсних оксидів проводили двома методами: одностадійною силанізацією носія чи складанням на поверхні. Фізико-хімічні характеристики отриманих матеріалів встановлено методами елементного аналізу, ІЧ та електронної

спектроскопії, ^{13}C та ^{31}P ЯМР, ТГА, рН потенціометричного аналізу тощо. Досліджено протолітичні властивості отриманих адсорбентів та розраховано константи протонування.

Встановлено залежність їх сорбційних властивостей у відношенні неорганічних та органічних токсикантів від кислотності середовища та концентрації у статичному та динамічному режимі. Простежено вплив методу синтезу сорбенту на хіміко-аналітичні характеристики сорбенту. Показано високу ефективність вивчених модифікованих кремнеземів як аналітичних реагентів для концентрування та розділення елементів, а також для цілей очистки вод від високотоксичних металів та органічних сполук.

Вивчена можливість визначення мікрокількостей еко-токсикантів у природних об'єктах через сорбційне концентрування. Показано, що використання твердофазних реагентів в практиці аналізу дозволяє знизити межу виявлення досліджуваних компонентів, підвищити вибірковість та експресність визначення за рахунок поєднання операцій розділення, концентрування та детектування аналітичного сигналу сучасними інструментальними методами в елюаті чи безпосередньо у фазі сорбенту.

Розроблено методики сорбційно-атомно-абсорбційного визначення іонів цинку, кадмію, свинцю, міді в питній воді; сорбційно-фотометричного визначення іонів плумбуму у сечі; сорбційно-хроматографічного та сорбційно-фотометричного визначення фенолу та його похідних у водах; тест-шкалу для визначення концентрації іонів отрути.