

УДК 534.222, 541.124

ДИНАМИКА ОДИНОЧНОГО ПУЗЫРЬКА В ЖИДКОСТИ ПРИ НАЛИЧИИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ И МЕЖФАЗНОГО ТЕПЛО- И МАССООБМЕНА

В. К. Кедринский, П. А. Фомин, С. П. Таратута

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск

Рассматривается задача о влиянии на динамику одиночного пузырька, наполненного активной газовой смесью и схлопывающегося под действием ударной волны, инертных и химически реагирующих добавок в виде микрокапель. Анализируется развитие реакции в процессе формирования смеси при мгновенном и динамическом испарении капель с учетом различных фаз их инъекции t_{inj} . Показано, что при мгновенном испарении увеличение доли газообразного азота в криогенной системе $N_2 + O_2$ приводит к повышению конечной температуры, в обычной системе — к ее понижению, а также к существенным колебаниям величины γ , тепловыделения и молекулярной массы. Отмечается, что существуют такие значения t_{inj} и D_0 , при которых конечная температура смеси уменьшается практически до начальной.

Как известно [1, 2], детонация пузырьков сред может быть связана с процессами тепломассообмена, интенсивность которых заметно возрастает с развитием неустойчивости поверхности пузырьков, приводящей к образованию в них микрокапель [3]. Испарение микрокапель существенно влияет на ход химической реакции в газовой фазе в пузырьке. Более того, в системе, где горючее и окислитель находятся в разных фазах [1], формирование детонационной волны невозможно без межфазного тепло- и массообмена, приводящего к образованию химически реагирующей смеси. Вопрос о детонационном режиме протекания реакций в пузырьке обсуждался в [4].

В настоящей работе в качестве первого этапа создания адекватной модели пузырьковой детонации в таких средах рассматривается задача о влиянии на динамику пузырька и взрывной процесс инертных и химически реагирующих добавок в активную газовую смесь, а также о развитии реакции в процессе формирования смеси. Проводится анализ зависимости параметров одиночного пузырька от времени инъекции t_{inj} , начальных размеров микрокапель D_0 и массы испаренной жидкости M_L как в случае мгновенного испарения микрокапель, так и с учетом динамики испарения.

Динамика пузырька описывалась уравнением Рэлея, при этом полагалось, что пузырек не теряет своей сферичности, а газ является идеальным:

$$\beta\beta'' + \frac{3}{2}\beta' = P - P_\infty.$$

Здесь $\beta = R/R_0$ — безразмерный радиус пузырька; β' и β'' — производные β по безразмерному времени $\tau = (\sqrt{P_0/\rho_L}/R_0)t$ (ρ_L — плотность жидкости, t — время); R и R_0 — текущий и начальный радиусы пузырька; P_∞ — внешнее давление, отнесенное к начальному давлению P_0 ; P определяется известным соотношением, учитывающим потери на акустическое излучение пузырька:

$$P = \frac{1}{P_0} \left(\rho_g \frac{RT}{\mu} - \frac{2\sigma}{R} \right) - \frac{4\beta'}{\beta Re} + \frac{1}{c_0} \sqrt{\frac{P_0}{\rho_L}} \left(1 + \frac{P_g - P_\infty}{B_1 - P_\infty} \right)^{-1/n} \beta \frac{dP_g}{d\tau};$$

ρ_g — плотность газа; $B_1 = B/P_0$ и n — константы уравнения Тэта; c_0 — скорость звука в жидкости; \mathcal{R} — универсальная газовая постоянная; $Re = (R_0/\nu_L)\sqrt{P_0\rho_L}$ — число Рейнольдса, ν_L — динамическая вязкость жидкости; μ — молярная масса газа; σ — коэффициент поверхностного натяжения жидкости; $P_g = (\rho_g/P_0)(\mathcal{R}T/\mu)$ — давление газа.

Предполагается, что состояние парогазовой смеси соответствует химически не реагирующему газу до истечения времени индукции и химически равновесному —

после. Период индукции t_{sr} определялся общепринятым условием $\int_0^{t_{sr}} \frac{dt}{\tau_i} = 1$, где

$\tau_i = (A_i/\eta) \exp(E_a/(\mathcal{R}T))$ — период индукции при постоянных параметрах [5] ($\eta = (\rho/\mu)(\nu_{H_2}\nu_{O_2})^{-1/2}$, ν_{H_2} и ν_{O_2} — молярные доли H_2 и O_2 соответственно), A_i и E_a — константы.

Термодинамические параметры смеси рассчитываются по приближенной модели кинетики [6], обладающей высокой точностью, без традиционного в таких задачах использования адиабаты инертного газа. Модель кинетики включает уравнение изоэнтропы

$$\frac{dT}{d\tau} = \frac{dT}{d\rho} \frac{d\rho}{d\tau} = \left(-\frac{U_\mu\mu_\rho - \mathcal{R}T/(\rho\mu)}{U_T + U_\mu\mu_T} \right) \left(-3\rho_0 \frac{\beta'}{\beta^4} \right)$$

и уравнение химического равновесия [6]

$$\frac{\rho_g}{\mu} \frac{(1 - \mu/\mu_{\max})^2}{\mu/\mu_{\min} - 1} \exp(E_D/(\mathcal{R}T)) = \frac{AT^{3/4}}{4K_+} (1 - \exp(-\theta/T))^{3/2}. \quad (1)$$

Здесь T и U — температура и внутренняя энергия газа; $dT/d\rho = -(U_\mu\mu_\rho - \mathcal{R}T/(\rho\mu))/(U_T + U_\mu\mu_T)$ [7]; $d\rho/d\tau = -3\rho_0(\beta'/\beta^4)$; U_μ , U_T , μ_T , μ_ρ — производные по указанным в индексе параметрам; ρ_0 — начальная плотность газа; μ_{\min} и μ_{\max} — молярные массы в полностью диссоциированном и полностью рекомбинированном состояниях; E_D — средняя энергия диссоциации продуктов реакции. При этом внутренняя энергия газа вычисляется по формуле [6, 8]

$$U = \left[\frac{3}{4} \left(\frac{\mu}{\mu_a} + 1 \right) + \frac{3}{2} \left(\frac{\mu}{\mu_n} - 1 \right) \frac{\theta/T}{\exp(\theta/T) - 1} \right] \frac{\mathcal{R}T}{\mu} + E_D \left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{\min}} \right),$$

где μ_a — молярная масса в атомарном состоянии; θ — эффективная температура возбуждения колебательных степеней свободы молекул; A и K_+ — константы скоростей диссоциации и рекомбинации обобщенных продуктов реакции. Величины μ_a , μ_{\min} , μ_{\max} определяются составом газа и поэтому остаются постоянными до момента $t = t_{inj}$, когда они испытывают скачок, после чего вновь не меняются. Величина скачка зависит от химического состава и массы испаренной жидкости [8].

Указанная модель применима для водородно-кислородных систем произвольного химического состава (в том числе в присутствии инертных компонентов). Она позволяет впервые учесть сильные изменения молекулярной массы, показателя изоэнтропы, теплоемкостей и теплового эффекта химической реакции вследствие процессов рекомбинации и диссоциации и изменения соотношения горючее — окислитель в газовой фазе. Например, для смеси I [H_2 (газ) — O_2 (жидкость) при криогенных начальных условиях] молекулярная масса газа может меняться на порядок.

По истечении времени индукции ($t = t_{sr}$) газ мгновенно приходит в состояние химического равновесия, которое непрерывно сдвигается вследствие динамики пузырька. Мгновенное изменение параметров газа при скачке рассчитывалось по уравнению химического равновесия (1) и условию $U_1 = U_2$, где U_1 и U_2 — внутренние энергии газа до и после скачка. Радиус пузырька, плотность газа и параметры μ_a , μ_{\min} и μ_{\max} в момент скачка не меняются.

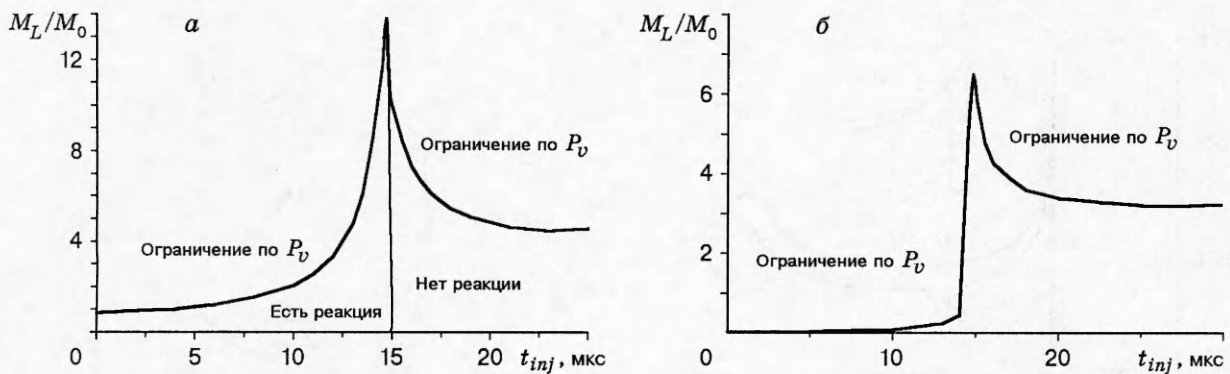


Рис. 1

Мгновенное испарение. Газовый пузырек пульсирует в жидкости в поле мгновенно приложенного постоянного внешнего давления. Реальные процессы тепломассообмена заменялись мгновенным однократным испарением жидкости массы M_L в момент времени t_{inj} от начала сжатия. В момент испарения массы жидкости M_L термодинамические параметры и состав газа меняются скачком, величина которого при постоянных времени и радиусе пузырька рассчитывается в три этапа.

1. На основании закона сохранения массы $M_0 + M_L = M_2$, где M_0 — начальная масса газа в пузырьке, вычисляются масса M_2 газа в пузырьке и его плотность после испарения жидкости.

2. С использованием алгоритма [8] по величине M_2 и известному начальному составу газа и жидкости рассчитываются параметры μ_a , μ_{\min} и μ_{\max} после испарения.

3. Давление и температура газа после испарения определяются из уравнения состояния и закона сохранения энергии $U_1 + U_L = U_2$, где U_1 и U_2 — внутренние энергии газа перед и после момента испарения; U_L — внутренняя энергия жидкости. Если испарение происходит до завершения периода индукции, молекулярная масса газа μ рассчитывается по [8], в противном случае μ вычисляется по (1).

По предложенной модели рассчитана динамика пузырька в зависимости от τ_{inj} и M_L в смесях I и II [$2\text{H}_2 + \text{O}_2$ (газ) — H_2O (жидкость)] без и в присутствии инертного разбавителя. Расчеты производились при следующих начальных параметрах: $T_0 = 87$ К (в смеси I), $T_0 = 293$ К (в смеси II), начальное давление газа в пузырьке $P_0 = 1,011 \cdot 10^5$ Па, внешнее давление $P_\infty = 100 P_0$, $R_0 = 1,6$ мм. Остальные константы брались из [7, 9].

В расчетах проверялось выполнение условия на парциальное давление испаренного компонента, которое не может превышать давление соответствующего насыщенного пара P_v . Результат в виде области, где решения имеют физический смысл, представлен на рис. 1 (*a* — смесь I, *b* — смесь II).

Расчет показал, что зависимости параметров газа от M_L для смесей I (рис. 2, *a*) и II (рис. 2, *b*) существенно различны. Например, в смеси I ($t_{inj} = 14,7$ мкс) при увеличении M_L средняя температура газа в пузырьке проходит через максимум, а в смеси II ($t_{inj} = 14,5$ мкс) увеличение M_L приводит к монотонному уменьшению температуры газа в пузырьке.

Как показано в [10], использование только «чистой» кинетики химических реакций для описания явлений пузырьковой детонации не приводит к формированию уединенной волны. Распределение температуры после выхода процесса на стационарный режим с соответствующими эксперименту амплитудой и скоростью указывает на существование нереально длинного «хвоста» у детонационной волны, амплитуда которого близка к амплитуде

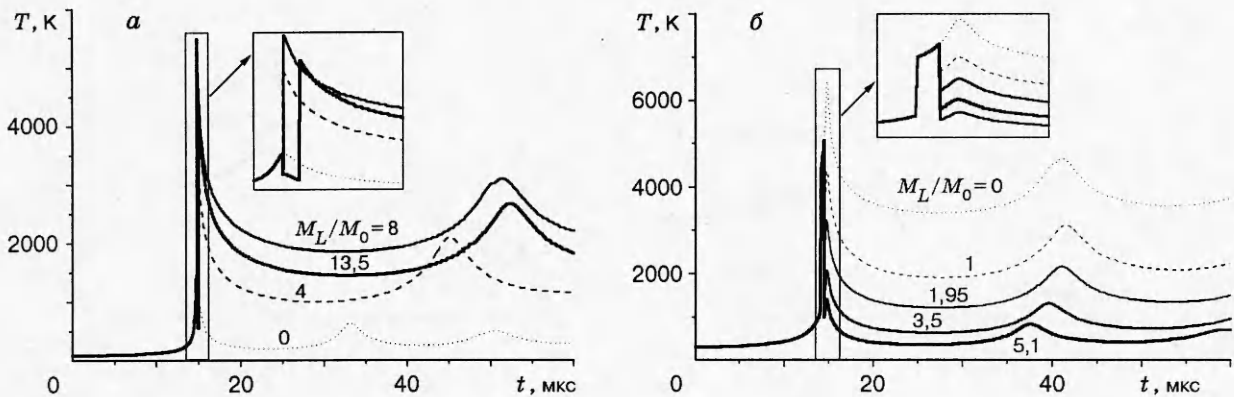


Рис. 2

иницирующей волны. Очевидно, один из вероятных механизмов формирования уединенной волны может определяться интенсивным испарением жидкости, которое приводит к уменьшению температуры и давления газа в «хвосте» волны пузырьковой детонации. Так, из рис. 2, б следует, что испарение небольшого (сравнимого по порядку величины с массой газового пузырька) количества жидкости снижает конечную температуру газа практически до начальной.

На рис. 3 представлена динамика температуры газа при различных t_{inj} (а — для смеси I ($M_L/M_0 = 0,4$); б — для смеси II ($M_L/M_0 = 5,1$)). Согласно расчетам динамика параметров газа и их значения после затухания колебаний могут существенно зависеть от t_{inj} , если оно близко к моменту максимального сжатия пузырька. В противном случае параметры газа слабо зависят от времени инъекции, что показано на рис. 4 (а — для смеси I при $M_L/M_0 = 4$, б — для смеси II при $M_L/M_0 = 0,23$). Отметим, что низкое значение T_f при $t_{inj} \geq 15$ мкс в смеси I связано с тем, что вызванное испарением понижение температуры газа в пузырьке значительно увеличивает период индукции, что в сумме с акустическими потерями пузырька приводит к «срыву» реакции.

На рис. 5 показано влияние инертного разбавителя (аргона) на температуру газа в смеси I. Кривая 1 иллюстрирует процесс с испарением жидкого кислорода при $M_{L(I)} = 0,43 M_0$ без присутствия аргона в газе. Введение в газовую фазу равной молярной доли аргона при том же соотношении M_L/M_0 приводит к резкому увеличению температуры газа (кри-

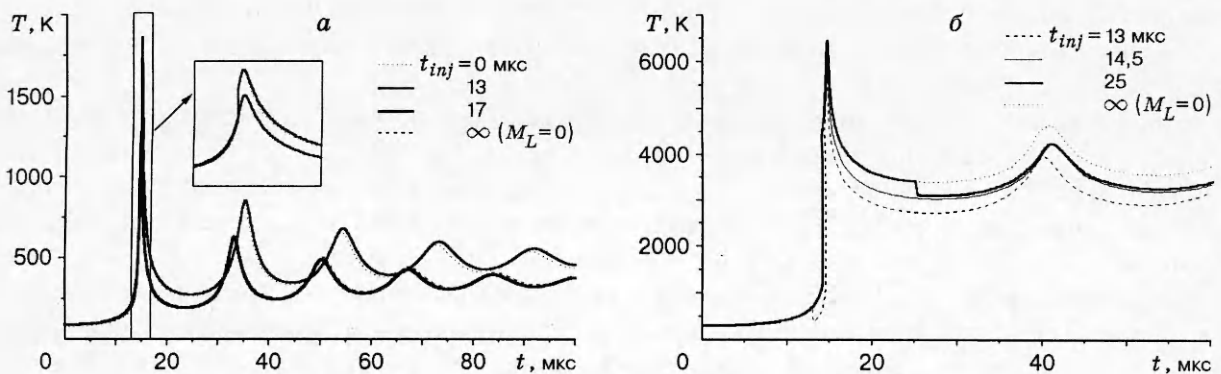


Рис. 3

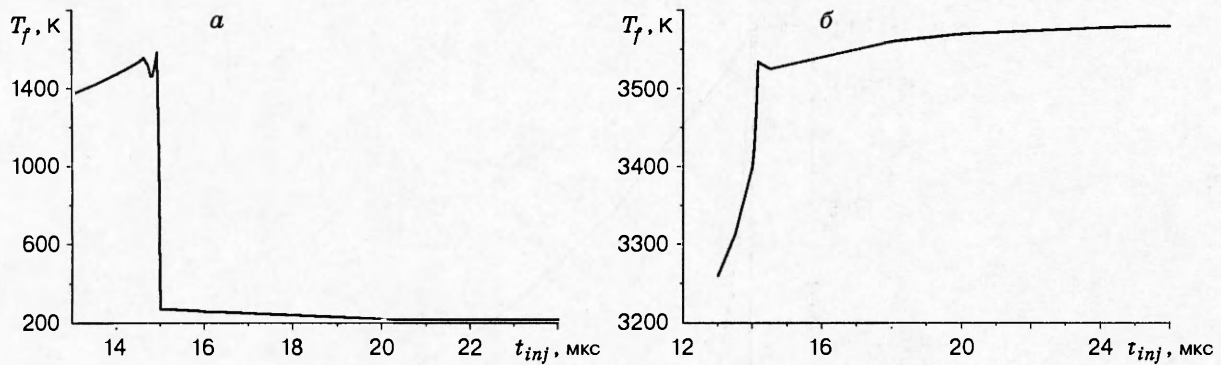


Рис. 4

вая 2). Отметим, что при этом масса испаренной жидкости M_L больше, так как M_0 увеличивается с добавлением аргона, а соотношение водорода и испаренного кислорода приближается к стехиометрическому, что приводит к большему энерговыделению. Тем не менее при соотношении водорода и кислорода, аналогичном первому случаю, присутствие аргона повышает температуру газа (кривая 3). Если испарить $M_L = M_{L(I)}$, температура газа также увеличится (кривая 4). Кроме того, в расчетах получено, что увеличение доли газообразного аргона в пузырьке всегда приводит к повышению конечной температуры в смеси I и ее уменьшению в смеси II. Давление и степень сжатия в обоих случаях уменьшаются, а температура на первой пульсации увеличивается.

На рис. 6 представлена динамика показателя изэнтропы γ в зависимости от M_L для смеси II при $t_{inj} = 14,5$ мкс, из которой следует, что испарение приводит к существенным колебаниям значения γ . Учет этого фактора носит принципиальный характер и является одним из достоинств предлагаемого подхода.

Непрерывное испарение. В реальных условиях микрокапли испаряются не мгновенно. В связи с этим в качестве следующего этапа моделирования процессов в газовой фазе полагалось, что в момент времени t_{inj} в пузырьке мгновенно возникает система микрокапель жидкости диаметром D_0 и суммарной массой M_L . На каждом шаге интегрирования непрерывное испарение микрокапель моделировалось мгновенным испарением массы Δm , величина которой определялась по текущему диаметру микрокапли D из известного урав-

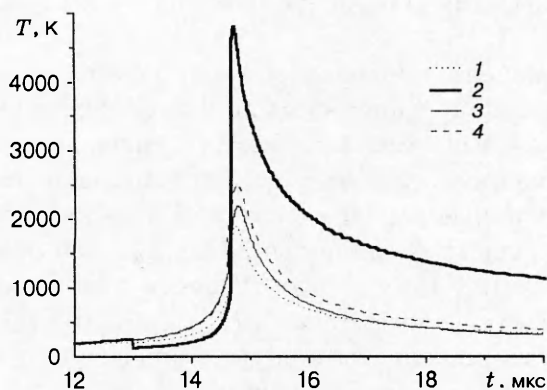


Рис. 5

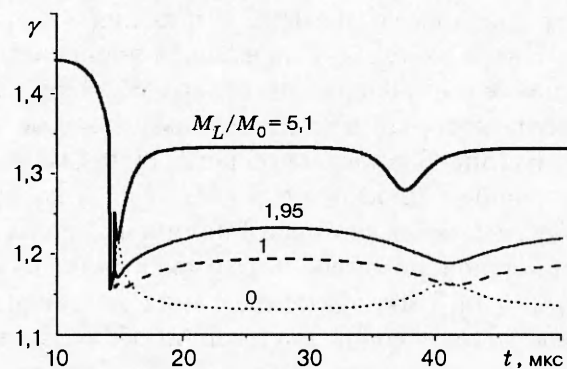


Рис. 6

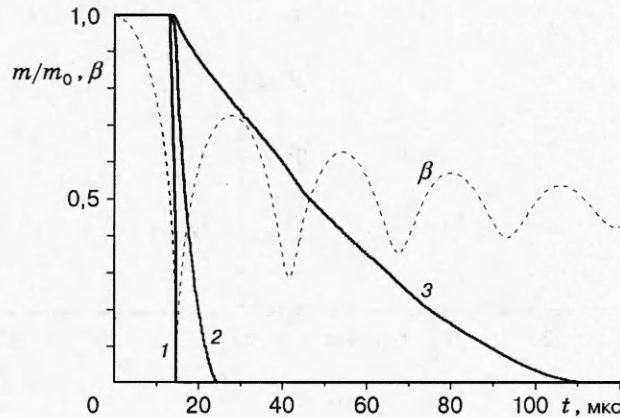


Рис. 7

нения горения жидкой капли в газе [11]

$$\frac{dD}{dt} = -k' \frac{\text{Nu}}{4D},$$

где коэффициент испарения k' вычисляется по формуле

$$k' = \frac{8k_g}{\rho_L c_p} \ln \left(\frac{L + c_p \Delta T}{L} \right).$$

Здесь k_g — теплопроводность продуктов горения; c_p — теплоемкость при постоянном давлении; L — теплота парообразования; ρ_L — плотность жидкости; $\text{Nu} = hD/k_g$ — число Нуссельта, h — коэффициент теплопередачи. Если текущая температура газа в пузырьке становится меньше начальной, то принимается, что микрокапли не испаряются ($dD/dt = 0$).

Скачок параметров и их последующие изменения рассчитывались по тому же алгоритму и в тех же предположениях, что и в случае мгновенного испарения микрокапель.

На рис. 7 для смеси II показано изменение во времени относительной массы микрокапель m/m_0 при $t_{inj} = 13$ мкс и $M_L/M_0 = 0,45$. Кривые 1–3 соответствуют начальным диаметрам, равным 1, 5 и 15 мкм. Для сопоставления процессов испарения капли и динамики пузырька штриховой линией показано изменение радиуса пузырька β при $D_0 = 5$ мкм. Видно, что микрокапли размером порядка 1 мкм испаряются практически мгновенно (за время много меньше периода пульсации пузырька). Для микрокапель более 5 мкм важен учет конечности времени испарения.

Как и в случае мгновенного испарения микрокапель, проверялось выполнение условия на давление насыщенного пара P_v . При этом контролировался суммарный объем микрокапель, который в каждый момент времени должен быть меньше объема пузырька.

На рис. 8 показана область существования решений в случае непрерывного испарения, рассеченная плоскостями (M_L, D_0) , в которой указанные условия в смеси II выполняются. Отметим, что для смеси I получена аналогичная область физичности решения с той принципиальной разницей, что максимальное значение $M_L/M_0 = 12$ достигается при $D_0 = 0$ и $t_{inj} = 14,5$ мкс. Сечение таких трехмерных областей плоскостью (M_L, t_{inj}) при $D_0 = 0$ представляет собой двумерную область физичности решений для случая мгновенного испарения жидкости (см. рис. 1, б). Резкое увеличение максимально возможного значения M_L/M_0 для сечений $t_{inj} \geq 16$ мкс вызвано увеличением давления насыщенных паров вследствие повышения температуры газа в результате химической реакции и адиабатического сжатия пузырька. Зависимость M_L/M_0 от D_0 для любого t_{inj} имеет максимум.

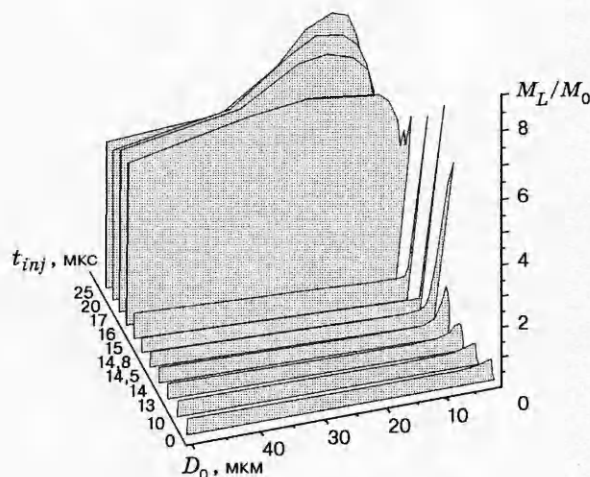


Рис. 8

Начальный диаметр микрокапель D_0 , соответствующий максимуму, составляет 1–1,5 мкм при $t_{inj} < t_{sr}$, 0 мкм при $t_{sr} < t_{inj} < t_{max}$ и около 10 мкм при $t_{max} < t_{inj}$, где t_{max} — момент максимального сжатия пузырька.

Проиллюстрируем влияние количества инжектируемой жидкости на динамику рассматриваемого процесса и параметры газа в пузырьке. На рис. 9 приведена зависимость конечной (после затухания колебаний пузырька) температуры T_f газа от величины M_L/M_0 для смеси I при $t_{inj} = 14$ мкс и $D_0 = 0,75$ мкм (рис. 9,а) и смеси II при $t_{inj} = 14$ мкс и $D_0 = 1$ мкм (рис. 9,б). Видно, что увеличение массы инжектируемой жидкости в смеси II ведет к монотонному уменьшению конечной температуры, причем, как показывают расчеты, отношение T_f к максимальной температуре, достигаемой на первой пульсации, также уменьшается от $\sim 0,6$ до $\sim 0,3$. Уменьшение T_f приводит к небольшому монотонному увеличению конечных величин μ и γ , при этом μ достигает своей максимальной величины μ_{max} уже при $M_L/M_0 = 1$, после чего остается постоянной. В рассматриваемом случае $T_f > T_0$. Однако существуют такие значения параметров t_{inj} и D_0 (например, $t_{inj} \sim 15$ мкс и $D_0 \sim 1$ мкм), при которых конечная температура газа уменьшается практически до начальной.

В смеси I зависимости T_f , μ и γ от M_L/M_0 принципиально другие. При увеличении M_L/M_0 величина T_f проходит через максимум (рис. 9,а), который соответствует стехио-

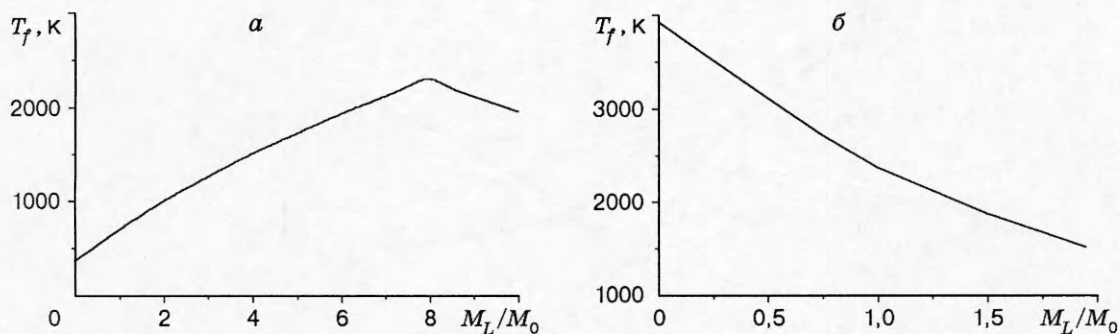


Рис. 9

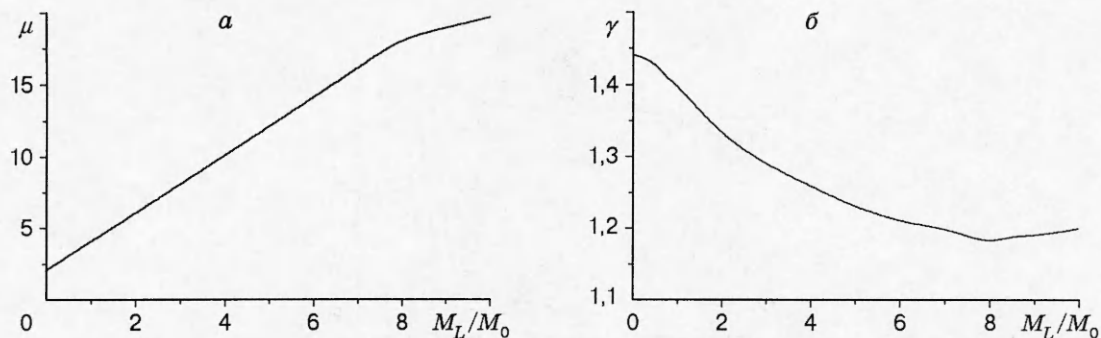


Рис. 10

метрическому соотношению между горючим и окислителем. При этом γ проходит через минимум (рис. 10, б), а μ увеличивается на порядок (рис. 10, а) ($t_{inj} = 14$ мкс, $D_0 = 1$ мкм).

На рис. 11 представлена динамика температуры газа и радиуса пузырька на первой пульсации в смеси II. Расчеты проведены для различных M_L/M_0 при $t_{inj} = 14,5$ мкс и $D_0 = 1$ мкм. Кривые 1–5 соответствуют температурам при значениях M_L/M_0 , равных 0; 0,5; 1; 1,5 и 1,95. Цифрой 6 обозначен набор слаборазличимых в масштабах рис. 11 кривых β , рассчитанных при указанных значениях M_L/M_0 . Скачок температуры при $t = 14,2$ мкс связан с началом химической реакции. Уменьшение температуры газа T вследствие увеличения M_L/M_0 предсказуемо, однако интересно, что ее максимум достигается в момент максимального схлопывания пузырька лишь для величин M_L/M_0 меньше 0,5. Для остальных M_L/M_0 уменьшение температуры вследствие интенсивного испарения значительного количества жидкости оказывается существеннее, чем ее рост вследствие уменьшения радиуса пузырька. Максимум температуры при таких M_L/M_0 достигается к моменту начала испарения микрокапель t_{inj} . При увеличении D_0 интенсивность испарения жидкости уменьшается, поэтому предельная величина M_L/M_0 , при которой максимум температуры соответствует максимальному схлопыванию пузырька, будет расти. В смеси I независимо от величины M_L/M_0 максимум температуры приходится на максимальное сжатие.

Зависимости T_f от диаметра микрокапель при фиксированных значениях M_L/M_0 и t_{inj} в смесях I и II качественно одинаковы. Величина T_f монотонно растет с увеличением D_0 , стремясь к постоянным значениям 800 и 3200 К соответственно.

В случае непрерывного испарения микрокапель введение дополнительного параметра

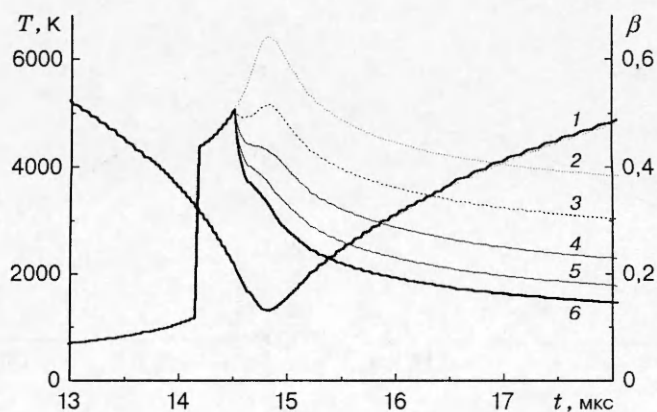


Рис. 11

D_0 может существенно изменять параметры рассматриваемого процесса. Так, в смеси I зависимость T_f от t_{inj} качественно соответствует рис. 4,а. В смеси II при $D_0 \leq 3$ мкм эта зависимость аналогична представленной на рис. 4,б, а при больших D_0 величина T_f не зависит от t_{inj} .

ЛИТЕРАТУРА

1. Пинаев А. В., Сычев А. И. Обнаружение и исследование самоподдерживающихся режимов детонации в системах жидкое горючее — пузырьки окислителя // Докл. АН СССР. 1986. Т. 290, № 3. С. 611–615.
2. Пинаев А. В., Сычев А. И. Структура и свойства детонации в системах жидкость — пузырьки газа // Физика горения и взрыва. 1986. Т. 22, № 3. С. 109–118.
3. Дубовик А. В., Бобылев В. К. Чувствительность жидких взрывчатых систем к удару. М.: Наука, 1978.
4. Васильев А. А., Кедринский В. К., Таратута С. П. Динамика одиночного пузырька с химически активным газом // Физика горения и взрыва. 1998. Т. 34, № 2. С. 121–124.
5. White D. R. Density induction times in very lean mixtures of D_2 , H_2 , C_2 , C_2H_2 and C_2H_4 with O_2 // XI Intern. Symp. on Combustion. Pittsburgh: Acad. Press, 1967. P. 147–154.
6. Николаев Ю. А., Зак Д. В. Согласование моделей химических реакций в газах со вторым началом термодинамики // Физика горения и взрыва. 1988. Т. 24, № 4. С. 87–90.
7. Фомин П. А., Троцюк А. В. Приближенный расчет изоэнтропы химически равновесного газа // Физика горения и взрыва. 1995. Т. 31, № 4. С. 59–62.
8. Николаев Ю. А., Фомин П. А. Приближенное уравнение кинетики в гетерогенных системах типа газ — конденсированная фаза // Физика горения и взрыва. 1983. Т. 19, № 6. С. 49–58.
9. Физические величины: Справ. / Под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991.
10. Кедринский В. К., Замараев Ф. Н., Мейдер Ч. Волны в химически активной пузырьковой среде // ПМТФ. 1990. № 2. С. 20–26.
11. Ламбарайс С., Комбс Л. Детонация и двухфазное течение. М.: Мир, 1966.

Поступила в редакцию 17/VII 1998 г.