

ДИНАМИКА ВОЗМУЩЕНИЙ КОНЕЧНОЙ АМПЛИТУДЫ В ДВУХФАЗНОЙ РЕАГИРУЮЩЕЙ СИСТЕМЕ

И.С.Ануфриев¹, О.В.Шарыпов^{1,2}

¹Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

²Новосибирский государственный университет, Новосибирск

DYNAMICS OF FINITE-AMPLITUDE PERTURBATIONS IN TWO-PHASE REACTING SYSTEM

I.S.Anufriev¹, O.V.Sharypov^{1,2}

¹Kutateladze Institute of Thermophysics, SB RAS, Novosibirsk

²Novosibirsk State University, Novosibirsk

Dynamics of weak finite-amplitude perturbations in two-phase homogeneous medium (gas + solid particles) with non-equilibrium chemical reaction in gas is studied theoretically. The model takes into account wave-kinetic interaction and dissipation effects, including inter-phase heat and momentum transfer. Non-linear equation describing evolution of plane perturbation is derived under weak dispersion and dissipation effects. Numerical simulation of evolution of gas-dynamic perturbations is carried out under different kinetic and dissipation parameters.

Введение

Известный эффект усиления возмущений в зоне реакции [1] может приводить к нежелательным последствиям вплоть до возникновения взрывных режимов. Настоящая работа посвящена описанию динамики слабых плоских волновых возмущений в газозвеси (газ + твердые частицы) с неравновесной химической реакцией в газовой фазе. Ставится задача разработки нелинейной математической модели с учетом кинетико-волнового взаимодействия, диссипативных эффектов в газе и межфазного обмена теплом и импульсом.

В работе [2] получено нелинейное эволюционное уравнение, описывающее распространение волн малой, но конечной амплитуды в однофазной газовой среде с неравновесным процессом, получено решение в форме самоподдерживающейся уединенной волны. В соответствии с [3] в пределе длинных волн модель приводила к эволюционному уравнению типа уравнения Бюргерса с «отрицательной вязкостью».

По сравнению с [2] в настоящей работе дополнительно учтен межфазный обмен в системе при наличии химически инертных твердых частиц. В отсутствие химической реакции данный механизм рассматривался в работе [4] на основе аналитического подхода, предложенного в [5]. Излагаемый далее материал опирается на результаты предыдущих работ [2, 4] и обобщает их.

Исходная система уравнений

Рассмотрим распространение плоских возмущений в неограниченном объеме газозвеси, содержащей в единице объема m химически инертных твердых частиц с одинаковым радиусом $r_1 = \text{const}$ и плотностью $\rho_1 = \text{const}$. В отсутствие возмущений скорость каждой из фаз равна нулю. Относительный объем конденсированной фазы мал ($\bar{V}_1 = 4\pi r_1^3 m/3 = O(\varepsilon)$), что позволяет пренебрегать взаимодействием частиц, считать давление в газовой фазе равным давлению в двухфазной среде и пренебрегать вязкостью облака частиц (ε – малый параметр). Предполагается, что длина волны возмущения намного превосходит среднее расстояние между частицами, используется однородная модель двухкомпонентной неравновесной смеси (учитывающая различия скоростей и температур фаз). При этом массовая скорость u , плотность ρ , давление p , температура T и удельная энтропия S газа являются величинами, осредненными по объему, содержащему достаточно большое количество частиц. Возмущения имеют малую, но конечную амплитуду: $|\delta u|, |\delta \rho|, |\delta p|, |\delta T| = O(\varepsilon)$, где $\delta u = u/C_{f0}$, $\delta \rho = \rho/\rho_0 - 1$, $\delta p = p/p_0 - 1$, $\delta T = T/T_0 - 1$. Индекс 0 обозначает невозмущенное состояние, C_f – адиабатическая скорость звука в газе,

индекс f указывает, что значение переменной вычисляется при условии $Y = \text{const}$ (то есть для высокочастотных возмущений, относительно которых реакция «заморожена»), Y – массовая доля продуктов реакции. Все воздействия на динамику возмущений в газе являются слабыми и могут быть представлены в уравнениях членами второго (и выше) порядка малости.

Уравнения неразрывности и уравнения сохранения импульса (без учета гравитации) для каждой из компонент:

$$\rho_t + u\rho_x + \rho u_x = 0, \quad (1)$$

$$m_t + u_1 m_x + m u_{1x} = 0, \quad (2)$$

$$\rho(1 - \bar{V}_1)(u_t + u u_x) + p_x - \nu \rho u_{xx} + f = 0, \quad (3)$$

$$\rho_1 \bar{V}_1 (u_{1t} + u_1 u_{1x}) - f = 0, \quad (4)$$

где u_1 – возмущение скорости облака частиц, ν – кинематическая вязкость газа,

$$f = 6\pi\mu r_1^3 \left(\frac{\nu w}{r_1^2} + \frac{w_t}{9} + \sqrt{\frac{\nu}{r_1^2 \pi}} \int_{t_0}^t \frac{w_\zeta d\zeta}{\sqrt{t-\zeta}} \right) - \text{сила сопротивления облака частиц в единице объема.}$$

При достаточно малом r_1 характерное время изменения относительной скорости фаз $w = u - u_1$ существенно превосходит величину r_1^2/ν . Это означает, что первое слагаемое (сила Стокса) является определяющим в выражении для f , эффектами нестационарности (вторым слагаемым) и силой Бассэ (третьим слагаемым) пренебрегаем [6]. Действие силы сопротивления, определяемой законом Стокса, приводит к изменению скорости частицы с характерным временем $\tau_v = 2\rho_1 r_1^2 / 9\rho\nu \gg r_1^2 \nu^{-1}$. Ограничивая рассмотрение случаем низкочастотных возмущений скорости газа, используем в уравнениях (3) и (4)

$f = 9\bar{V}_1 \rho \nu (u - u_1) (2r_1^2)^{-1} = O(\varepsilon^2)$. Тогда из (4) следует:

$$u - u_1 = \tau_v u_{1t} + o(\varepsilon). \quad (5)$$

Неравновесная химическая реакция в газовой фазе (реагенты предварительно перемешаны) характеризуется объемной скоростью образования продуктов реакции ω и удельным тепловыделением Q . Представим реакцию в виде одноступенчатого превращения «реагенты \rightarrow продукты реакции» с кинетической зависимостью общего вида:

$$\omega(p, S, Y) = \rho(p, S, Y) dY/dt. \quad (6)$$

Закон сохранения энергии с учетом термодинамических соотношений позволяет записать уравнение для производства энтропии:

$$\rho T \frac{dS}{dt} = Q\omega - q + \rho c_p \chi T_{xx} + (u - u_1) f + \sigma, \quad (7)$$

где σ учитывает производство энтропии за счет вязкости, оно пропорционально величине $\nu(u_x)^2$, c_p – удельная теплоемкость газа при постоянном давлении,

χ – температуропроводность газа, $q = 4\pi r_1^2 m q_1$ – тепловая мощность, отводимая от газа к облаку частиц в единице объема, при этом поток тепла на поверхности отдельной частицы

$q_1 = \rho_1 c_1 \chi_1 \left. \frac{\partial T_1}{\partial r} \right|_{r=r_1}$ определяется из решения задачи о центральносимметричном

распределении температуры $T_1(t, r)$ в шаре с радиусом r_1 , плотностью ρ_1 , температуропроводностью χ_1 и удельной теплоемкостью c_1 при температуре поверхности $T_1(t, r_1)$ и начальном условии $T_1(0, r) = T_0$. Согласно [7]:

$$T_1 = \frac{2}{r r_1} \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-a_n t) \sin \frac{n\pi r}{r_1} \times \left\{ \int_0^{r_1} T_0 r' \sin \frac{n\pi r'}{r_1} dr' - n\pi \chi_1 (-1)^n \int_0^t T_1(\zeta, r_1) \exp(a_n \zeta) d\zeta \right\},$$

где $a_n = n^2 \pi^2 \chi_1 / r_1^2$. Считаем, что характерное время изменения температуры газа намного превосходит величину r_1^2 / χ_1 (характерное время температурной релаксации частицы) и $a_n t \gg 1$. Тогда, раскладывая слабоменяющуюся (по сравнению с экспонентой) функцию $T_1(\zeta, r_1)$ в ряд по малому запаздыванию $(\zeta - t)$ в окрестности $\zeta = t$ и полагая, что изменение температуры поверхности частицы соответствует изменению температуры окружающего газа, получим выражение для q в условиях слабой неравновесности фаз по температуре [4]: $q = \bar{V}_1 \rho_1 c_1 (T_t - r_1^2 T_{tt} / 15 \chi_1) = O(\varepsilon^2)$.

Поскольку диссипативные эффекты являются слабыми, то теплопроводность и кинематическую вязкость газа будем считать постоянными величинами первого порядка малости: $\bar{\nu} = (\nu / \tau C_f^2)_0 = O(\varepsilon)$, $\bar{\chi} = (\chi / \tau C_f^2)_0 = O(\varepsilon)$. Это позволяет заметить, что в уравнении (7) слагаемые, связанные с теплопроводностью газа и межфазным теплообменом, имеют второй порядок малости, а последними двумя слагаемыми, которые пропорциональны квадрату амплитуды возмущений скорости и имеют третий порядок малости, следует пренебречь.

Уравнение состояния газовой фазы при наличии химической реакции задается в общей форме $\rho = \rho(p, S, Y)$ или: $\frac{d\rho}{dt} = (\rho_p)_{S,Y} \frac{dp}{dt} + (\rho_S)_{p,Y} \frac{dS}{dt} + (\rho_Y)_{p,S} \frac{dY}{dt}$. Используя уравнения (6) и (7), преобразуем уравнение состояния, аналогично [8, 2], отбрасывая члены $\sim O(\varepsilon^2)$:

$$C_f^{-2} \frac{dp}{dt} - \frac{d\rho}{dt} + B = A, \quad (8)$$

где $B = \beta(q / c_p - \rho \chi T_{xx}) = O(\varepsilon^2)$, $\beta = V^{-1} (V_T)_{p,Y}$, $V = 1/\rho$, $A = \omega(\beta Q / c_p - \rho^{-1} (\rho_Y)_{p,S})$. При слабом отклонении от химического равновесия $A = O(\varepsilon)$. Используя уравнения (6)–(8),

можно преобразовать тождество $\frac{dA}{dt} = (A_p)_{S,Y} \frac{dp}{dt} + (A_S)_{p,Y} \frac{dS}{dt} + (A_Y)_{p,S} \frac{dY}{dt}$ к виду

$$\frac{\tau}{(1+L)} \frac{d}{dt} \left[C_f^{-2} \frac{dp}{dt} - \frac{d\rho}{dt} + B \right] = -C^{-2} \frac{dp}{dt} + \frac{d\rho}{dt} - B + o(\varepsilon^2), \quad (9)$$

где $N = (1+L)(1-D)$, $L = Q(A_S)_{p,Y} [T(A_Y)_{p,S}]^{-1}$, $D = \tau C_f^2 (A_p)_{S,Y} (L+1)^{-1}$, $\tau = (A_Y)_{p,S}^{-1} ((\rho_Y)_{p,S} - \beta_{pf} \rho Q / c_p)$ – характерное время реакции, $C = C_f (1-D)^{-1/2}$ – скорость распространения низкочастотных возмущений в реагирующем газе.

Эволюционное уравнение для слабых конечных возмущений

Все величины в уравнениях (1), (3), (5) и (9) представим в безразмерной форме с помощью параметров τ_0 , C_{f0} , ρ_0 , T_0 . Рассмотрим возмущения, распространяющиеся в одну сторону. Введем координату и время $y = x - t$, $z = t$ в системе координат, движущейся со скоростью C_{f0} . В силу сделанных предположений профиль возмущений в этой системе координат должен изменяться во времени очень медленно $\frac{\partial}{\partial z} = O(\varepsilon)$. Из уравнения (5) при $\kappa_j^2 \bar{\tau}_v^2 \ll 1$ получим: $u' - u_1' = -\bar{\tau}_v (u'_y + \bar{\tau}_v u'_{yy}) + o(\varepsilon)$. Тогда с принятой точностью можем записать эволюционное уравнение для $h = \gamma_0^{-1} \delta p = \delta \rho = \delta u = \delta T$:

$$\left[1 - \frac{\partial}{\partial y} \right] (h_z - M_1 h_y - M_2 h_{yy} - M_3 h h_y) + M_4 h_y = o(\varepsilon^2), \quad (10)$$

где $M_1 = \frac{\bar{V}_{10}\rho_1}{2\rho_0} \left(1 + (\gamma_0 - 1) \frac{c_1}{c_{p0}} - \frac{\rho_0}{\rho_1} \right)$, $M_2 = \left(\frac{\gamma - 1}{30} \left(15\bar{\chi} + \bar{V}_1 \frac{c_1\rho_1}{c_p\rho} \frac{r_1^2}{\chi_1\tau} \right) + \frac{\bar{v} + K}{2} \right)_0$, $M_3 = -\frac{3 + \gamma_0}{4}$,
 $M_4 = \frac{D_0}{2}$, $K = 6\pi r_1 m \bar{v} \tau_v^2 C_{f0}^2 = O(\varepsilon)$, γ – показатель адиабаты газа.

Решение уравнения (10) для случая бесконечно малых возмущений можно представить в виде суперпозиции гармоник $h_j(z, y) = \sum_{j=0}^{\infty} \tilde{h}_j \exp(\Omega_j z + i\kappa_j y)$ и получить дисперсионное соотношение:

$$\Omega = \kappa^2 \left(\frac{M_4}{1 + \kappa^2} - M_2 \right) + i\kappa \left(M_1 - \frac{M_4}{1 + \kappa^2} \right). \quad (11)$$

Для высокочастотных возмущений $\Omega = -M_2\kappa^2 + i\kappa M_1$. В этом пределе дисперсионное соотношение описывает затухание возмущений благодаря потерям энергии за счет диссипативных свойств двухфазной среды, реакция не оказывает влияния на динамику возмущений. Скорость распространения возмущений в двухфазной среде отличается от значения адиабатической скорости звука в газе $C_e = C_{f0}(1 - M_1)$. При $\rho/\rho_1 \ll 1$ получим

$$\frac{C_e^2}{C_{f0}^2} = 1 - \frac{\bar{V}_{10}\rho_1}{\rho_0} \left(1 + (\gamma_0 - 1) \frac{c_1}{c_{p0}} \right) + o(\varepsilon),$$

что с принятой точностью совпадает с известным результатом для адиабатической скорости звука в равновесной (по температуре и скорости фаз) смеси идеального газа и несжимаемых частиц при малой объемной концентрации [6].

В случае низкочастотных возмущений дисперсионное соотношение учитывает эффекты, связанные с химической реакцией:

$$\Omega = (M_4 - M_2)\kappa^2 + i\kappa(M_1 - M_4). \quad (12)$$

В выражении (12) коэффициенты при степенях волнового числа могут изменять знаки в зависимости от соотношения различных механизмов. При выполнении критерия $M_4 - M_2 > 0$ бесконечно малые возмущения будут нарастать за счет тепловыделения реакции, превышающего диссипативные потери энергии. Скорость распространения низкочастотных возмущений отличается от скорости звука в высокочастотном пределе на величину M_4 , которая определяется кинетикой реакции.

На основании соотношения (11) можно определить волновое число κ_* наиболее быстро нарастающего возмущения, а также критическое волновое число κ_c , разделяющее устойчивые и неустойчивые гармоники: $\kappa_*^2 = \sqrt{M_4/M_2} - 1$, $\kappa_c^2 = M_4/M_2 - 1$.

По мере повышения амплитуды неустойчивых возмущений возрастает роль нелинейных слагаемых в эволюционном уравнении (10). Нелинейность способствует росту амплитуды высокочастотных гармоник, линейная часть уравнения напротив – обеспечивает затухание возмущений из коротковолновой части спектра. Баланс этих механизмов достигается при установлении решения, т.е. при определенном значении амплитуды и формы волны. Установившийся спектр сигнала означает наличие своеобразного «динамического равновесия» в системе: накачка энергии длинноволновых возмущений (за счет тепловыделения реакции) компенсируется нелинейным механизмом передачи этой энергии в высокочастотную часть спектра и ее диссипацией (благодаря вязкости и теплопроводности газа, а также межфазному обмену энергией и импульсом). Наряду с этим, нелинейность приводит к увеличению скорости распространения возмущений, пропорциональному их амплитуде. Как следствие, возникает характерная асимметрия формы волны: передний фронт становится более крутым. Более подробное изучение нелинейной стадии эволюции возмущений возможно на основе численного моделирования.

Численное моделирование

Уравнение (10) аппроксимировано центральными конечными разностями по неявной двухслойной схеме при периодических граничных условиях решалось с помощью алгоритма трехточечной циклической прогонки. Использовалось начальное условие, соответствующее суперпозиции слабых гармонических возмущений с одинаковой амплитудой $a = 10^{-5}$ и случайными фазами. Шаг сетки по пространству $\xi = 0,05$, $M = 2^{11}$ – количество узлов сетки, шаг по времени $\hat{\tau} = \xi^2$. Точность расчетов контролировалась путем варьирования значений ξ и $\hat{\tau}$ и была удовлетворительной.

Анализ устойчивости линеаризованной разностной схемы показал, что в высокочастотном пределе схема устойчива при $\hat{\tau} \leq \xi^2 / 2M_2$, а при $\kappa_j^2 \ll 1$ условием устойчивости при $\hat{\tau} \ll 1$ служит неравенство $M_4 \leq M_2$. Тем самым, свойства разностной схемы в длинноволновом пределе в точности соответствуют свойствам аппроксимируемого линеаризованного уравнения.

Расчеты соответствовали следующим значениям физических параметров двухфазной среды: $p_0 = 10^5$ Па, $\rho_0 = 1,3$ кг/м³, $T_0 = 300$ К, $C_{f0} = 330$ м/с, $\gamma_0 = 1,4$, $c_{p0} = 10^3$ Дж/кг К, $\chi_0 = 2 \cdot 10^{-5}$ м²/с, $\nu_0 = 1,3 \cdot 10^{-5}$ м²/с, $\beta_0 = 1/T_0$, $\rho_1 = 2,7 \cdot 10^3$ кг/м³, $\chi_1 = 0,9 \cdot 10^{-5}$ м²/с, $c_1 = 880$ Дж/кг К, $r_1 = 10^{-6}$ м, $m_0 = 10^{12}$ м⁻³. Использовались модельные значения параметров, связанных с кинетикой реакции: $\tau_0 = 10^{-5}$ с, $D_0 = 0,1$. При заданных значениях параметров получим: $M_1 = 0,006$, $M_2 = 0,016$, $M_3 = -1,1$, $M_4 = 0,05$. Максимальный инкремент соответствует возмущению с длиной волны 2,4 см. При данных значениях удовлетворяются все предположения о соотношениях между параметрами, сделанные при аналитических преобразованиях.

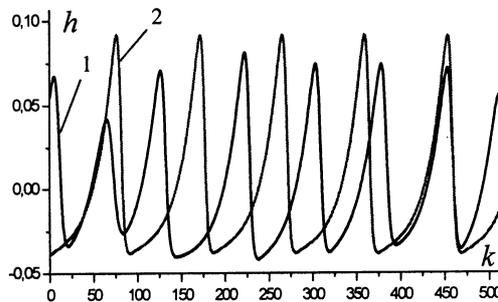


Рис. 1. Решение уравнения (10) в разные моменты времени, $M_1 = 0,006$, $M_2 = 0,016$, $M_3 = -1,1$, $M_4 = 0,05$

На рис. 1 представлено решение уравнения (10) в последовательные моменты времени: линия 1 соответствует времени $z_1 = 10^3$ (10 мс), линия 2 – установившемуся решению при времени $z_2 = 10^4$ (0,1 с) (приведена часть расчетной области). В момент z_1 характерный период решения соответствует длине волны возмущения с максимальным $\text{Re}(\Omega)$. Дальнейшее повышение амплитуды волн приводит к проявлению нелинейных эффектов, характерный период решения увеличивается (на 40% в установившемся режиме). Решение изменяется в пределах $-0,03 < h < 0,09$, то есть в системе возникают довольно сильные колебания параметров: по скорости – до 40 м/с, по температуре – до 36 К, по давлению и плотности – также до 17% и 12%, соответственно (от уровня невозмущенных параметров). В установившемся режиме волны распространяются со сверхзвуковой скоростью, превышающей «замороженную» скорость звука в газе на величину $0,045 \cdot C_{f0}$.

Выводы

На основе асимптотического подхода [2-5] построена модель, описывающая динамику и структуру волн малой, но конечной амплитуды в гомогенной реагирующей двухфазной среде (газовзвеси). В отличие от работ [2, 3], модель учитывает диссипативные процессы в газе и межфазный обмен теплом и импульсом в отсутствие теплового и динамического равновесия фаз. Выведено нелинейное эволюционное уравнение для возмущений, учитывающее конечное время неравновесной химической реакции в газовой фазе и обобщенные диссипативные потери энергии в двухфазной среде. Аналитически исследованы высокочастотный и низкочастотный предельные случаи общего дисперсионного соотношения. Получена зависимость скорости распространения линейных возмущений от длины волны.

Обоснован критерий усиления низкочастотных возмущений однородного состояния среды. В зависимости от соотношения кинетических параметров реакции и диссипативных свойств двухфазной среды звуковые возмущения из длинноволновой части спектра могут усиливаться. Показано, что эффект неустойчивости носит пороговый характер: исходная волна усиливается, если тепловыделение реакции преобладает над обобщенными диссипативными потерями энергии. Как следствие, однородный режим протекания реакции спонтанно изменяется. Проанализирована роль нелинейности в установлении спектра возмущений. В результате действия неустойчивости и нелинейности в системе могут формироваться самоподдерживающиеся слабые ударные волны.

Полученные результаты численного моделирования эволюции возмущений в гомогенной слабонеравновесной двухфазной среде (газ + твердые частицы) с распределенной химической реакцией в газовой фазе демонстрируют эффект самоорганизации в системе – формирование стабильной периодической структуры, период, амплитуда и скорость которой зависят от свойств среды. Проанализировано изменение этих параметров в зависимости от соотношения между диссипативными свойствами среды и кинетическими параметрами неравновесной химической реакции.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы», проекты № 2.2.1.1/9877, № 2.1.2/12311), РФФИ (проекты № 10-08-90032-Бел_а, № 10-08-01093-а), ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры Инновационной России» на 2009-2013 годы.

Список литературы

1. Борисов А.А., Гельфанд Б.Е., Губин С.А. и др. Усиление слабых ударных волн в горячей двухфазной системе жидкость-газ. ПМТФ. 1970. № 1. С.168–173.
2. Borissov A.A., Sharypov O.V. Self-sustained solitary waves in non-equilibrium media. J. Fluid Mech. Vol.257. 1993. P.451–461.
3. Накоряков В.Е., Борисов А.А. Распространение возмущений в среде с релаксацией или химической реакцией. ФГВ. Т.12. 1976. С.414–422.
4. Борисов А.А., Вахгельт А.Ф. Волновые процессы в двухфазных средах с твердыми частицами. Волновые процессы в двухфазных средах: Сб. науч. тр. под ред. В.Е. Накорякова. – Новосибирск: Институт теплофизики СО АН СССР, 1980. – С.114–124.
5. Солуян С.И., Хохлов Р.В. Распространение акустических волн конечной амплитуды в диссипативной среде. Вестн. Моск. ун-та. 1961. № 3. С.52–61.
6. Нигматулин Р.И. Основы механики гетерогенных сред. – М.: Наука, Гл. ред. физ-мат. лит., 1978. – 336 с.
7. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. – М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит., 1964. – 487 с.
8. Kirkwood J.G., Wood W.W. Structure of a steady-state plane detonation wave with finite reaction rate. J. Chem. Phys. Vol.22. 1954. P.1915–1919.