

01;03

## Численное моделирование нуклеации и динамики пузырьков при быстром падении давления жидкости

© Е.Ю. Кумзерова, А.А. Шмидт

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
194021 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: alexander.schmidt@pop.ioffe.rssi.ru

(Поступило в Редакцию 17 сентября 2001 г.)

Выполнено численное исследование образования и динамики пузырьков при быстром падении давления жидкости. Математическая модель основана на лагранжево-эйлеровском подходе к описанию двухфазной смеси и включает в себя уравнения сохранения для несущей фазы, уравнение, описывающее процесс нуклеации, и уравнения динамики пробного пузыря. Для численного решения уравнений несущей фазы применяется схема высокого разрешения типа Годунова, а для жесткой системы обыкновенных дифференциальных уравнений динамики пузыря — неявный метод Адамса. Моделирование позволяет получить поля газодинамических функций для жидкости, размер и концентрацию пузырей, температуру и давление пара, определить диапазон параметров, в котором жидкость находится в метастабильном состоянии.

### Введение

Исследование процесса образования пузырьков и их развития при быстром изменении давления в жидкости представляет большой интерес как для широкого круга приложений [1–3], так и для теории неравновесных многофазных сред [4].

Удобным методом исследования таких задач является численное моделирование. Математическая модель должна включать уравнения сохранения массы, импульса и энергии для несущей фазы, а также уравнения, описывающие процесс образования зародышей паровой фазы и их развития в результате изменения параметров окружающей жидкости и межфазного переноса массы. Существенно различные пространственные и временные масштабы процессов в несущей и дисперсной фазах и большие градиенты газодинамических параметров, характерные для исследуемых процессов, обуславливают необходимость применения численных схем высокого разрешения для интегрирования уравнений жидкости и методов решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений, возникающих в моделях динамики пузырьков.

Целью предлагаемой работы является численное исследование вскипания воды, находящейся при высоких температуре и давлении, в процессе распространения волны разрежения. Для этого в рамках лагранжево-эйлеровского описания многофазной среды сформулирована математическая модель, позволяющая исследовать образование зародышей, межфазный массообмен и динамику пузырьков. Эта модель использована для исследования одномерного нестационарного течения вскипающей жидкости.

### Математическая модель

Для рассматриваемой задачи уравнения эйлеровского этапа, описывающие динамику несущей фазы в предположении скоростной равновесности фаз, могут быть представлены в следующем виде: уравнение сохранения массы

$$\frac{\partial(1-\alpha)\rho_l}{\partial t} + \frac{\partial u(1-\alpha)\rho_l}{\partial x} = -\Gamma, \quad (1)$$

уравнение сохранения импульса

$$\frac{\partial u(1-\alpha)\rho_l}{\partial t} + \frac{\partial u^2(1-\alpha)\rho_l}{\partial x} = -(1-\alpha)\frac{\partial p_l}{\partial x} - x\Gamma, \quad (2)$$

уравнение сохранения энергии

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_l(1-\alpha)E_l}{\partial t} + \frac{\partial \rho_l(1-\alpha)E_l u}{\partial x} \\ = -\frac{\partial(1-\alpha)p_l u}{\partial x} - U_{lv} - HW_{cl}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь  $u$  — скорость смеси;  $\rho_l$ ,  $p_l$  — плотность и давление жидкости соответственно;  $\alpha$  — объемная доля пара;  $E_l = c_l T_l + u^2/2$  — удельная полная энергия жидкости;  $\Gamma$  — интенсивность межфазного массообмена, которую можно записать в следующем виде [4]:

$$\Gamma = 4\pi R^2 N_b \frac{\eta_{ac}}{\sqrt{2\pi R_v}} \left( \frac{p^{\text{sat}}(T_l)}{\sqrt{T_l}} - \frac{p_v}{\sqrt{T_v}} \right), \quad (4)$$

где  $N_b$  — концентрация пузырей;  $T_l$ ,  $T_v$  — температуры несущей и паровой фаз;  $c_l$  — удельная теплоемкость жидкости;  $R_v$  — газовая постоянная для водяного пара;  $p^{\text{sat}}$  — давление насыщения;  $p_v$  — давление паровой

фазы;  $R$  — радиус пузырька;  $\eta_{ac}$  — коэффициент accommodations (в этой работе  $\eta_{ac} = 0.04$ );  $H$  — скорость нуклеации;  $W_{cl}$  — работа, требующаяся на образование критического зародыша паровой фазы;

$$U_{lv} = 4\pi R^2 N_b \frac{\eta_{ac}}{\gamma_v - 1} \sqrt{\frac{R_v}{2\pi}} (p^{\text{sat}}(T_l) \sqrt{T_l} - p_v \sqrt{T_v}) \quad (5)$$

— межфазный перенос энергии в результате фазового перехода;  $\gamma_v$  — коэффициент политропы.

Система уравнений эйлеровского этапа также включает уравнение образования и конвективного переноса пузырей

$$\frac{\partial N_b}{\partial t} + \frac{\partial u N_b}{\partial x} = H, \quad (6)$$

уравнение состояния воды в форме Тэйта

$$p_l = p_a K \left[ \left( \frac{\rho}{\rho_a} \right)^\beta - 1 \right] + p_a, \quad (7)$$

где  $p_a, \rho_a$  — давление и плотность воды при нормальных условиях;  $K = 3045$ ;  $\beta = 7.15$ .

Уравнения лагранжева этапа, описывающие законы сохранения массы, энергии и движение межфазной границы для осредненного пробного пузырька могут быть преобразованы к виду: уравнение сохранения массы пара внутри пузыря

$$\frac{dp_v}{dt} = p_v \left[ \frac{1}{T_v} \frac{dT_v}{dt} - \frac{3}{R} \left\{ \frac{dR}{dt} - \frac{\eta_{ac} T_v}{p_v} \sqrt{\frac{R_v}{2\pi}} \left( \frac{p^{\text{sat}}(T_l)}{\sqrt{T_l}} - \frac{p_v}{\sqrt{T_v}} \right) \right\} \right], \quad (8)$$

уравнение сохранения энергии пара внутри пузыря

$$\frac{dT_v}{dt} = -3 \frac{T_v}{R_v p_v} \left\{ (\gamma_v - 1) p_v \frac{dR}{dt} + \eta_{ac} p^{\text{sat}}(T_l) (T_v - T_l) \sqrt{\frac{R_v}{2\pi T_l}} \right\}, \quad (9)$$

уравнение Рэлея–Лэмба

$$R \frac{d^2 R}{dt^2} + \frac{3}{2} \left( \frac{dR}{dt} \right)^2 = \frac{1}{\rho_l} \left\{ p_v - p_l - \frac{2\sigma}{R} - \frac{4\mu}{R} \frac{dR}{dt} \right\}, \quad (10)$$

где  $\mu$  — вязкость жидкости.

Связь содержания паровой фазы  $\alpha$ , концентрации пузырьков  $N_b$  и их среднего радиуса  $R$  определяется очевидным соотношением

$$\alpha = (4/3)\pi R^3 N_b. \quad (11)$$

Одним из ключевых вопросов моделирования является определение механизма образования критических зародышей паровых пузырей. При предельных перегревах расчет плотности флуктуационных центров по известной теории гомогенного зародышеобразования [5]

хорошо согласуется с экспериментом [6]. В этом случае скорость нуклеации может быть вычислена следующим образом:

$$H = \rho_l \left( \frac{N_a}{m} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2\sigma}{\pi}} \exp \left\{ -\frac{W_{cl}}{k_b T_l} \right\}, \quad (12)$$

где  $m$  — масса молекулы воды,  $\sigma$  — коэффициент поверхностного натяжения,  $N_a$  — число Авогадро,  $k_b$  — постоянная Больцмана, работа по образованию пузырька критического радиуса  $R_{cr} = 2\sigma / (p^{\text{sat}} - p_l)$  определяется как

$$W_{cl} = \frac{16\pi\sigma^3}{3(p^{\text{sat}}(T_l) - p_l)^2}. \quad (13)$$

На практике образование и рост зародышей начинают при существенно меньших перегревах, чем предсказывает теория [5], что связано с преобладающей ролью гетерогенной нуклеации. Число центров гетерогенной нуклеации подсчитать теоретически не удается, поскольку в общем случае не существует априорных данных об их природе. Однако в случае малых центров гетерогенного зародышеобразования можно воспользоваться модифицированной теорией гомогенной нуклеации, вводя фактор гетерогенности  $G$  ( $G \in (0, 1]$ ), который характеризует уменьшение работы  $W_{cl}$  при нуклеации на существующих ядрах. Таким образом, учесть гетерогенный характер нуклеации можно, используя выражение (12) для скорости гомогенной нуклеации и заменив  $W_{cl}$  на  $W_{cl}G$ .

В работе [3] на основе экспериментальных данных получена зависимость гетерогенного фактора от начальной температуры жидкости и скорости падения давления

$$G = (1 + 1.4 \cdot 10^{-10} V_p^{0.8}) \left( \frac{T_{l0}}{T_{cr}} \right)^{28.46}, \quad (14)$$

где  $T_{cr}$  — критическая температура жидкости,  $V_p$  (Pa/s) — скорость падения давления.

## Начальные и граничные условия

Считается, что в начальный момент времени однородная жидкость, не содержащая паровых пузырьков, находится при заданных давлении и температуре

$$t = 0: \quad p_l = p_{l0}, \quad T_l = T_{l0}, \quad N_b = 0, \quad u = 0. \quad (15)$$

В сечении трубы  $x = 0$  задается скорость падения давления  $V_p$  и используется „мягкое“ граничное условие для скорости

$$x = 0: \quad p_l = p_{l0} - V_p \cdot t, \quad \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (16)$$

После возникновения пузырька принимаются следующие начальные условия для обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих его развитие:

$$R = R_{cr}, \quad p_v = p^{\text{sat}}, \quad T_v = T_l.$$

## Численный метод

Уравнения сохранения для жидкой фазы совместно с уравнением нуклеации решаются с помощью метода типа Годунова второго порядка точности по времени и пространству [7]. Потоки массы и момента импульса на гранях вычислительной ячейки находятся из решения задачи Римана для воды. Обыкновенные дифференциальные уравнения динамики пузырьков решаются одновременно с уравнениями для жидкости. Из-за существенно различных характерных времен процессов в жидкости и в пузырьках применялся неявный метод Адамса для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений [8].

Для расчетов использовалась равномерная сетка, размер которой выбирался из соображений обеспечения достаточного количества ячеек в областях больших градиентов. Следует заметить, что ограничения, накладываемые на шаг интегрирования по времени скоростью откачки  $V_p$ , жестче, чем условия Куранта-Фридрихса-Леви.

## 1. Обсуждение результатов

Далее представлены некоторые результаты численного моделирования распространения волны разрежения в трубе, заполненной водой при высоких давлениях и температуре. Схема истечения вскипающей жидкости из трубы приведена на рис. 1.

При указанных граничных и начальных условиях внутри трубы распространяется волна разрежения, за фронтом которой происходит интенсивная нуклеация с последующим ростом паровых пузырей. Считается, что второй конец трубы расположен так далеко, что не влияет на картину течения. Анализировалось влияние скорости падения давления  $V_p$ , а также начальной температуры  $T_{i0}$  и давления жидкости  $p_{i0}$  на процессы образования и развития пузырей.

С целью проверки разработанного алгоритма и сделанных предположений проведено сравнение результатов моделирования с известными экспериментальными данными [3,9], результаты которого можно видеть на рис. 2 и 3.

На рис. 2 показана типичная зависимость давления от времени в некотором сечении трубы (приведены данные для  $x = 0.43$  м) при заданных начальной температуре жидкости  $T_{i0} = 495$  К и скорости откачки

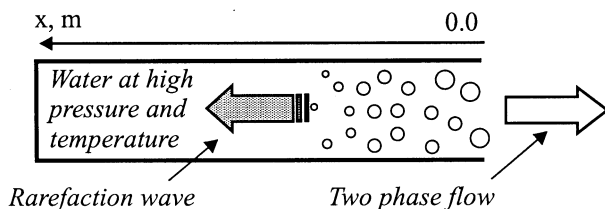


Рис. 1.

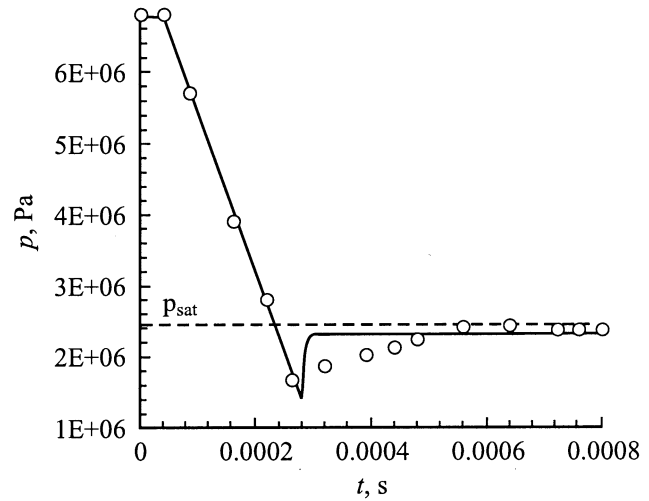


Рис. 2.

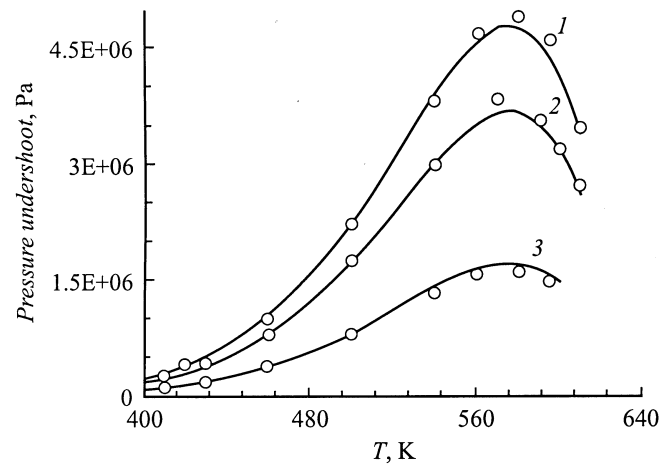


Рис. 3.

$V_p = 22$  GPa/s. Хорошо видно, что сначала давление в волне разрежения падает до значения, существенно меньшего, чем давление насыщения, и жидкость оказывается в метастабильном состоянии. Затем начинается интенсивная нуклеация и рост образовавшихся критических зародышей. Этот процесс в конечном счете и приводит к росту давления и стабилизации его вблизи линии насыщения. Разницу между давлением насыщения и минимальным давлением принято называть глубиной провала давления, определение которой представляет одну из важнейших задач для практических приложений. Расчетные зависимости глубины провала давления от температуры при разных скоростях снижения давления (кружочки) и корреляции экспериментальных данных для этой величины [3] (сплошные кривые) представлены на рис. 3. Здесь 1 —  $V_p = 200$ , 2 — 100, 3 —  $V_p = 10$  GPa/s.

Видно, что сформулированная модель течения вскипающей жидкости, использующая модифицированную

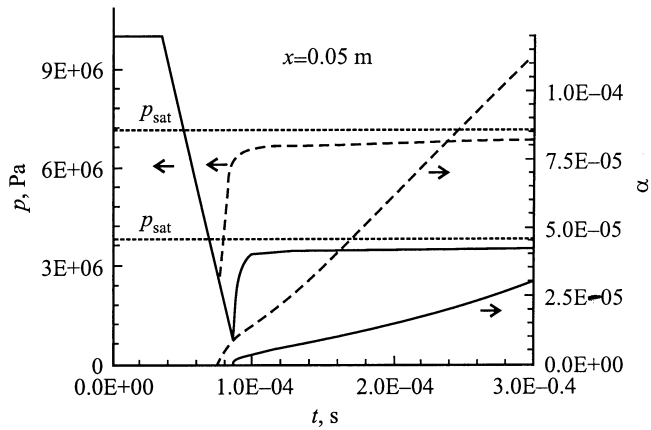


Рис. 4.

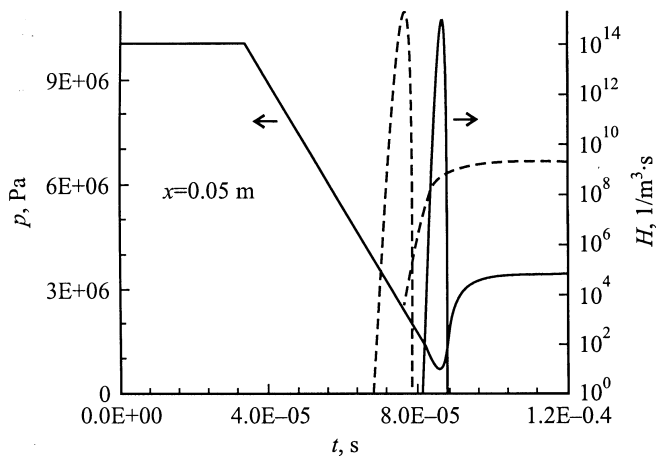


Рис. 5.

модель нуклеации, позволила получить хорошее согласование расчетных и экспериментальных данных, что демонстрирует применимость рассматриваемого подхода к задаче о быстром падении давления в горячей жидкости.

Рис. 4 и 5 иллюстрируют влияние начальной температуры жидкости на поведение во времени давления воды  $p_l$ , объемной доли паровой фазы  $\alpha$  и скорости нуклеации  $H$  (сплошные кривые — температура жидкости  $T_{l0} = 520$ , штриховые — 560 К; скорость падения давления  $V_p = 180$  GPa/s).

Как видно из рис. 4, начальная стадия снижения давления в волне разрежения не зависит от температуры, в то время как для рассматриваемых начальных температур жидкости разница в глубине провала давления составляет около  $10^6$  Pa. Таким образом, повышение начальной температуры приводит к увеличению области метастабильного состояния жидкости. Объемная доля возникающего пара также существенно возрастает с начальной температурой.

На основании рис. 5 можно сделать вывод, что по жидкости распространяется „волна кипения“, соответствующая максимальному значению скорости нуклеации

и минимуму давления жидкости. Время прохождения „волны кипения“ через заданное сечение существенно меньше характерного времени волны разрежения.

Осевые профили давления воды, объемной доли пара и осредненного радиуса для двух моментов времени при  $T_{l0} = 560$  К и  $V_p = 180$  GPa/s представлены на рис. 6, где  $t = 0.0002$  (сплошные кривые), 0.0005 s (штриховые). Начальный быстрый рост пузырей можно объяснить динамическими процессами, инициируемыми большим начальным давлением и температурой пара в возникающих пузырьках. Дальнейший рост пузырей и увеличение содержания паровой фазы определяются преобладающим влиянием межфазного переноса массы. Глубина провала давления и давление насыщения, как видно из рисунка, практически постоянны вдоль трубы, что указывает на относительно небольшие изменения температуры жидкости.

Для дальнейшего рассмотрения процессов, происходящих в паровой фазе, проанализирована эволюция пробного пузырька в рассматриваемом двухфазном потоке. На рис. 7 для  $T_{l0} = 560$  К и  $V_p = 180$  GPa/s представлены изменения во времени радиуса пузырька, скорости межфазной поверхности и температуры пара.

Немонотонность скорости межфазной поверхности пузырька на начальной стадии можно объяснить конку-

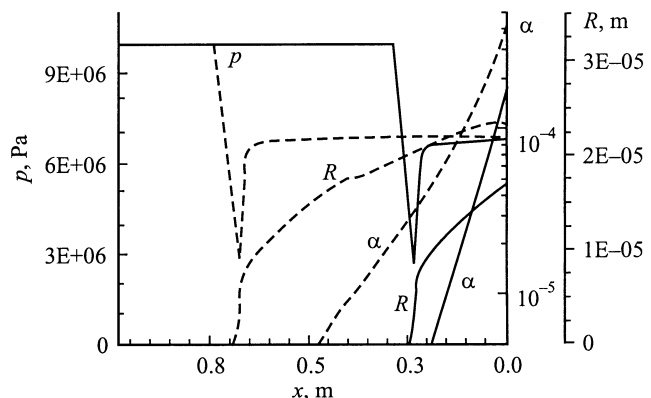


Рис. 6.

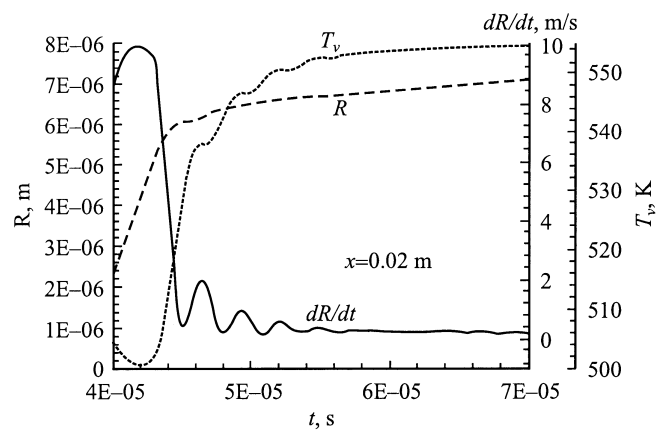


Рис. 7.

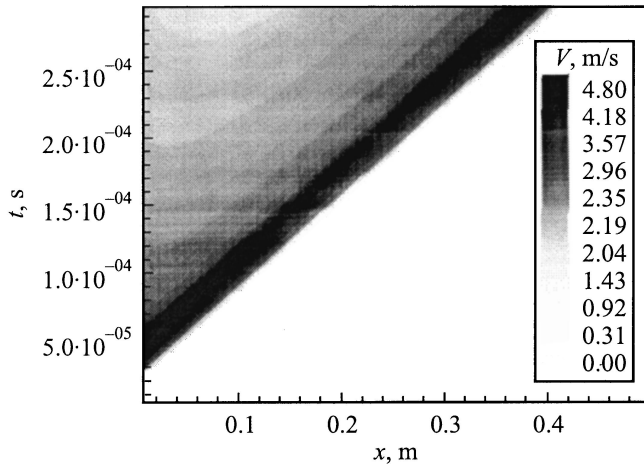


Рис. 8.

ренцией процессов межфазного массообмена и инерции жидкости.

На рис. 8 представлена  $x-t$ -диаграмма скорости смеси, соответствующая начальным условиям  $T_{l0} = 560$  К и  $V_p = 180$  GPa/s. Можно видеть, что жидкость ускоряется в волне разрежения и минимальному давлению жидкости соответствует максимальная скорость смеси. Затем смесь замедляется в поле растущего давления, немного ускоряясь к концу трубы, что связано с заданным постоянным падением давления на конце трубы.

## Заключение

Построена математическая модель, позволяющая исследовать нуклеацию, межфазный массообмен и динамику пузырьков при изменении давления жидкости. Численное моделирование распространения волны разрежения по трубе, заполненной водой, позволило определить зависимость от времени и пространственной координаты параметров несущей фазы, объемного содержания, температуры и давления паровой фазы, концентрации и размеров пузырей.

В исследуемой задаче имеет место следующая картина течения: давление жидкости падает в волне разрежения, распространяющейся от открытого конца трубы, до значения ниже давления насыщения (жидкость попадает в метастабильное состояние), в области минимального давления начинается интенсивная нуклеация, после чего благодаря межфазному массообмену пузыри быстро растут, вызывая рост давления, что в конечном счете стабилизирует давление на значении, близком к давлению насыщения.

Продемонстрировано, что в рассматриваемом случае введение фактора гетерогенности в выражение для работы по образованию критического зародыша позволяет получить правильные значения глубины провала давления и описать поведение жидкости в метастабильном состоянии.

## Список литературы

- [1] *Hahne E., Barthou G.* // Int. J. Multiphase Flow. 2000. N 26. P. 531–547.
- [2] *Bartak J.* // Int. J. Multiphase Flow. 1990. N 5. P. 789–798.
- [3] *Alamgir Md., Lienhard J.H.* // J. Heat Transfer. 1981. Vol. 103. N 1. P. 52–55.
- [4] *Нигматулин Р.И.* Динамика многофазных сред. М.: Наука, 1987. Т. 2. 359 с.
- [5] *Френкель Я.И.* Кинетическая теория жидкостей. Л.: Наука, 1975. 342 с.
- [6] *Скрипов В.П.* и др. Теплофизические свойства жидкостей в метастабильном состоянии. М.: Атомиздат, 1980. 207 с.
- [7] *Родионов А.В.* // ЖВМиМФ. 1987. Т. 27. № 3. С. 1853–1859.
- [8] *Oran E.S., Boris J.P.* Numerical Simulation of Reactive Flows. Elsevier Science Publ., 1987. 536 p.
- [9] *Alamgir Md., Kan C.Y., Lienhard J.H.* // J. Heat. Transfer. 1980. Vol. 102. N 3. P. 433–438.