

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНО-ФИЗИКОХИМИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ В ПРОЦЕССЕ СХЛОПЫВАНИЯ КАВИТАЦИОННЫХ ПОЛОСТЕЙ

О.В. Лавриненко, Е.И. Савина, Г.В. Леонов

Предложена математическая модель процесса схлопывания кавитационных полостей. Разработана информационная система, моделирующая механо-физикохимические эффекты в этом процессе. Представлены результаты экспериментов по воздействию ультразвуковой кавитации на углеродсодержащие среды.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время все более широкое распространение получают технологические процессы, использующие ультразвуковые колебания. Воздействие колебаний высокой интенсивности вызывает необратимые физико-химические процессы в обрабатываемой среде. Это обусловлено тем, что при излучении в жидкость интенсивной ультразвуковой волны в жидкой среде возникает явление кавитации – образование в жидкости полостей, заполненных газом, паром или их смесью.

Кавитация возникает в результате местного понижения давления в жидкости, которое может происходить либо при увеличении ее скорости, либо при прохождении акустической волны большой интенсивности во время полупериода разрежения [1]. Когда местное давление жидкости в некоторой точке падает ниже величины, соответствующей давлению насыщенного пара при данной окружающей температуре, тогда жидкость переходит в другое состояние, образуя, в основном, фазовые пустоты, которые называются кавитационными пузырьками. Перемещаясь с потоком в область с более высоким давлением или во время полупериода сжатия, пузырек захлопывается, излучая при этом ударную волну.

Акустическая кавитация представляет собой эффективный механизм концентрации энергии. Во время кавитации относительно низкая средняя плотность энергии звукового поля трансформируется в высокую плотность энергии внутри и вблизи захлопывающегося пузырька. Акустическая кавитация расходуется на излучение ударных волн, на локальную электризацию пузырьков, на возбуждение сонолюминесценции, образование свободных радикалов, т.е. она является основным инициатором физико-химических процессов, возникающих в жидкости под действием ультразвука [2].

В статье описывается математическая модель процесса схлопывания кавитационных полостей, а также разработана информационная система, моделирующая механо-физикохимические эффекты в этом процессе. В статье также приведены результаты экспериментов с использованием различных углеродсодержащих сред для подтверждения получения нанодисперсной углеродной фазы.

ПРОЦЕСС СХЛОПЫВАНИЯ КАВИТАЦИОННОГО ПУЗЫРЬКА

После образования пузырька начинается его рост под действием растягивающих напряжений в жидкости и одновременное заполнение растворенным в ней газом и насыщенным паром. Давление в жидкости складывается со статической и динамической (звуковое давление) частей. Когда скорость движения оболочки пузырька станет равной нулю, закончится подготовительный полупериод формирования и пузырек будет готов для работы в основном полупериоде в полупериоде коллапса. Именно этот момент изображен на рисунке 1.

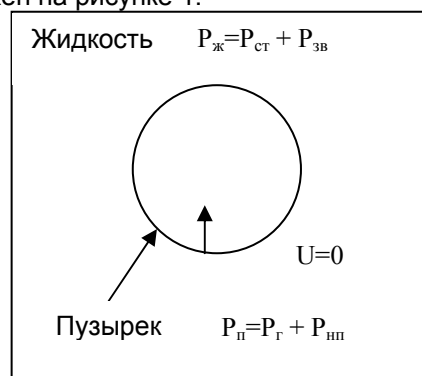


Рис. 1. 1 стадия схлопывания кавитационного пузырька: $P_{ж}$ – давление в жидкости; $P_{ст}$ – статическое давление; $P_{зв}$ – звуковое давление; $P_{н}$ – внутреннее давление в кавитационном пузырьке; $P_{г}$ – давление газов; $P_{нп}$ – давление насыщенных паров в жидкости; U – скорость движения оболочки пузырька к центру. В начальной стадии $U = 0$

Под воздействием давления в жидкости оболочка пузырька начинает движение по направлению к центру с повышающимся ускорением (рисунок 2). За счет термодинамических газовых процессов в кавитационном пузырьке повышаются давление и температура.

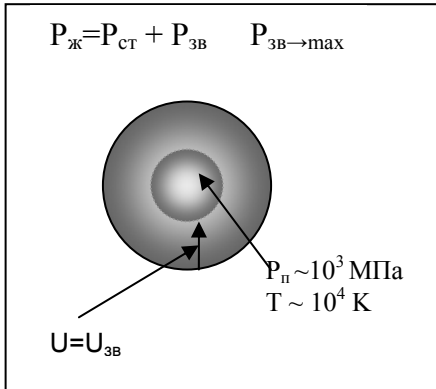


Рис. 2. 2 стадия схлопывания кавитационного пузырька

Под воздействием ультразвука сверхвысокой интенсивности кавитационный пузырек запасает кинетическую энергию, достаточную для преодоления давления, возникшего в конце второй стадии. Оболочка пузырька за счет повышающегося ускорения достигает скорость, выше скорости звука, и в этот момент изменяются условия внутри пузырька (рисунок 3).

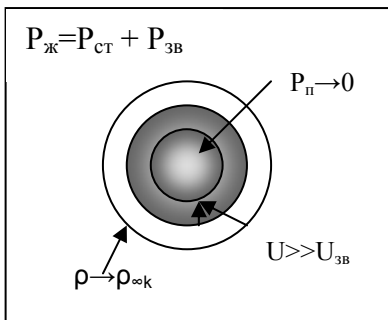


Рис. 3. 3 стадия схлопывания кавитационного пузырька

Содержание пузырька начинает конденсироваться на внутренней стороне оболочки пузырька, а поэтому снижается давление в пузырьке; оболочка пузырька может уменьшаться далее. Движению стенки (сферы) пузырька по направлению к центру уже ничто не препятствует, а ускорение стенки постоянно повышается. Скорость движения оболочки пузырька к центру равна скорости звука. Известно, что обозначенные условия в кавита-

ционном пузырьке ($P_b \sim 10^3$ МПа, $T \sim 10^4$ °К) являются конечными для процесса коллапса [3].

В последней стадии движение пузырька к центру заканчивается и пузырек схлопывается (рисунок 4).

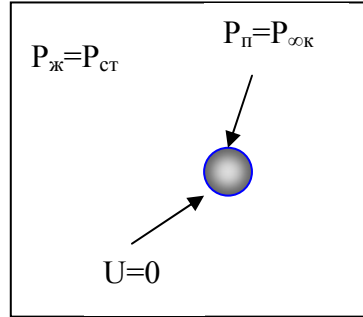


Рис. 4. 4 стадия схлопывания кавитационного пузырька

ЭНЕРГИЯ ПРИ СХЛОПЫВАНИИ КАВИТАЦИОННОГО ПУЗЫРЬКА

При схлопывании кавитационного пузырька выделяется кинетическая энергия, которая превращается в энергию активации различных реакций:

$$W_{кин} = 2\pi\rho U^2 R^4 \int_R^\infty \frac{dr}{r^2} = 2\pi\rho U^2 R^3, \quad (1)$$

где U - скорость сферической стенки;

R - мгновенный радиус захлопывающейся сферы.

Скорость определяется по следующей формуле:

$$U = \sqrt{\left(\frac{2}{3}\right)\left(\frac{P}{\rho}\right)\left(\frac{R_0^3}{R^3} - 1\right)}, \quad (2)$$

где R_0 - первоначальный радиус сферы (рисунок 5).

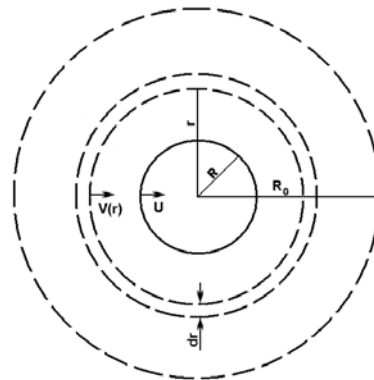


Рис. 5. Модель кавитационного пузырька

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНО-ФИЗИКОХИМИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ В ПРОЦЕССЕ СХЛОПЫВАНИЯ КАВИТАЦИОННЫХ ПОЛОСТЕЙ

В связи с тем, что в момент захлопывания полости скорость движения сферической стенки становится соизмеримой со скоростью звука в жидкой среде необходимо выбрать аппроксимацию движения границы раздела, учитывающую эффекты сжимаемости жидкости. Такой аппроксимацией является аппроксимация Кирквуда-Бете (формула 3), которая наилучшим образом описывает стадию захлопывания кавитационного пузырька [4]:

$$R \left(1 - \frac{U}{A} \right) \frac{d^2 R}{dt^2} + \frac{3}{2} \left(1 - \frac{U}{3A} \right) \left(\frac{dR}{dt} \right)^2 - \left(1 + \frac{U}{A} \right) H - \frac{U}{A} \left(1 - \frac{U}{A} \right) R \frac{dH}{dR} = 0, \quad (3)$$

где $A = \sqrt{\frac{1}{\beta \rho_{L0} (\beta (P - P_{L0}) + 1)}}$ – локальная скорость звука в жидкости, $H = \frac{1}{\beta \rho_{L0}} \ln \frac{\beta \left(P_v - \frac{2\sigma}{R} - P_{L0} \right) + 1}{1 - \beta P_A \sin \omega t}$ – свободная энтальпия на поверхности сферы [5]

Дифференциальное уравнение второго порядка не может быть решено аналитически в общем виде. Для поиска численного решения применяется метод конечных разностей. Суть данного метода заключается в том, что область непрерывного изменения аргумента заменяется сеткой – конечным дискретным множеством точек, называемых узлами. Дискретизируем временной параметр и каждому значению времени t_i сопоставим значение радиуса. Аналогично непрерывные функции скорости звука в жидкости и удельной энтальпии заменим значениями на i -м шаге: A_i и H_i соответственно. Производные заменим их аппроксимациями.

В результате применения метода сеток система уравнений заменяется конечно-разностной схемой:

$$R_i \left(1 - \frac{R_i - R_{i-1}}{A_{i-1} \Delta t} \right) \frac{R_i - 2R_{i-1} + R_{i-2}}{(\Delta t)^2} + \frac{3}{2} \left(1 - \frac{R_i - R_{i-1}}{3A_{i-1} \Delta t} \right) \left(\frac{R_i - R_{i-1}}{\Delta t} \right)^2 - \left(1 + \frac{R_i - R_{i-1}}{A_{i-1} \Delta t} \right) H_{i-1} -$$

$$- \frac{R_i - R_{i-1}}{A_{i-1} \Delta t} \left(1 - \frac{R_i - R_{i-1}}{A_{i-1} \Delta t} \right) R_i \frac{H_{i-1} - H_{i-2}}{R_i - R_{i-1}} = 0, \quad (4)$$

$$A_{i-1} = \sqrt{\frac{1}{\beta \rho_{L0} (\beta (P_i - P_{L0}) + 1)}}, \quad (5)$$

$$H_{i-1} = \frac{1}{\beta \rho_{L0}} \ln \frac{\beta \left(P_v - \frac{2\sigma}{R_{i-1}} - P_{L0} \right) + 1}{1 - \beta P_A \sin \omega i \Delta t}. \quad (6)$$

Решение данной системы уравнений может быть найдено средствами вычислительной техники. В ходе выполнения работы была разработана информационная система, моделирующая процесс схлопывания кавитационного пузырька, внешний вид основного окна которой представлен на рисунке 6. Программа реализована средствами среды визуального проектирования Borland Delphi 7.

Программа позволяет:

- рассчитать значения энергии выделяющейся в процессе схлопывания кавитационного пузырька;
- построить график зависимости энергии от радиуса;
- автоматически сохранить параметры расчета и результаты моделирования в отдельном файле.

Программа имеет простой графический интерфейс пользователя.

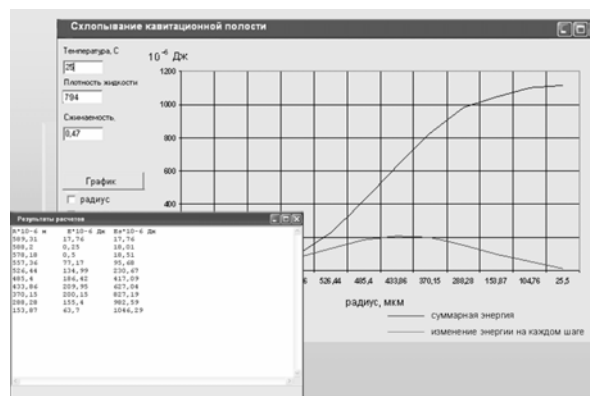


Рис. 6. Вид основного окна программы

Полученные расчетные значения энергий, выделяющихся в процессе схлопывания кавитационного пузырька, представлены в таблице 1. Табличные значения энергии разрыва связей гексана, этанола представлены в таблице 2 [6].

Таблица 1
Полученные значения энергии

Радиус пузырька 10^{-6} м	Энергия выделяющаяся при схлопывании кавитационного пузырька	
	Изменение энергии E 10^{-6} Дж	Суммарная энергия E_s 10^{-6} Дж
588,2	0,25	18,01
578,18	0,5	18,51
557,36	77,17	95,68
526,44	134,99	230,67
485,4	186,42	417,09
433,86	209,95	627,04
370,15	200,15	827,19
288,28	155,4	982,59
153,87	63,7	1046,29

Таблица 2
Табличные значения энергии разрыва связей

Виды связей	Энергия разрыва связей, Дж
с-н	$56,2 \cdot 10^{-20}$
с-с	$101,3 \cdot 10^{-20}$
C_2H_5OH	$65,3 \cdot 10^{-20}$
н-сн(CH_3)он	$66,68 \cdot 10^{-20}$
о-н	$71,63 \cdot 10^{-20}$
с-о	$178,8 \cdot 10^{-20}$
с-н-он	$346,4 \cdot 10^{-20}$

Из таблиц 1 и 2 видно, что расчетная энергия выше на 8 порядков энергий разрыва связей.

Расчетных значениях энергии, выделяющейся при схлопывании кавитационной полости, вполне достаточно, чтобы разорвать химические связи для получения углеродной фазы вещества.

Для подтверждения разрыва связей, а именно получения нанодисперсной углеродной фазы в акустических кавитационных полях, была проведена поисковая серия экспериментов с использованием различных углеродсодержащих сред (гексан, этанол). Опыты проводились на ультразвуковом технологическом аппарате «Надежда» конструкции Бийского технологического института.

На рисунке 7 приведены фотографии углеродных частиц полученных из гексана и этанола. Для сравнения представлены фотографии частиц, полученных Галимовым Э.М. [7].

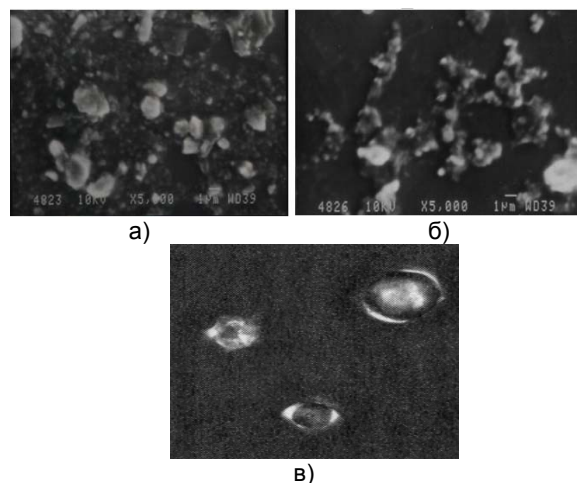


Рис. 7. а) кавитационные наночастицы из гексана; б) кавитационные наночастицы из этанола; в) алмазы, полученные Э.М. Галимовым

В центральной части частиц, изображенных на фотографиях, видны бурые включения, которые следует рассматривать как аморфную углеродную массу. Данные частицы с большой долей вероятности можно идентифицировать как алмазные образования нанометрового диапазона размеров.

Объектом исследования также являлись детонационные наноалмазы (ДНА), полученные в ФГУП «Алтай» из сплава ТГ 60/40. Ультразвуковая обработка проводилась в воде и 96% этиловом спирте под воздействием ультразвуковых волн разной интенсивностью (рисунок 8).

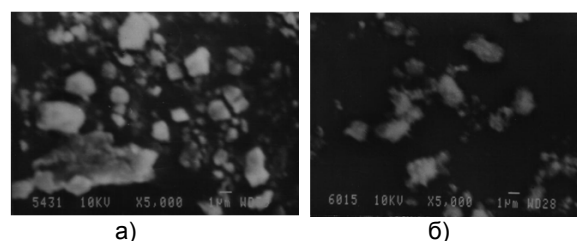


Рис. 8. а) ДНА; б) ДНА после обработки в спирту

УЗ обработка в этаноле приводит к осаждению наноуглерода на поверхность и к повышению однородности поверхности, что можно связать с избирательной адсорбцией наноуглерода на поверхности ДНА.

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНО-ФИЗИКОХИМИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ В ПРОЦЕССЕ СХЛОПЫВАНИЯ КАВИТАЦИОННЫХ ПОЛОСТЕЙ

ВЫВОДЫ

В результате выполненных работ была построена математическая модель процесса схлопывания кавитационных полостей и разработана информационная система для определения выделяющейся в этом процессе энергии. Также была проведена поисковая серия экспериментов с использованием различных углеродсодержащих сред для подтверждения получения нанодисперсной углеродной фазы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Рождественский, В.В. Кавитация / В.В. Рождественский. – Л.: Изд-во «Судостроение», 1977. – 247 с.
2. Маргулис, М.А. Звукохимические реакции и сонолюминесценция / М.А. Маргулис. - М.: Химия,

1986. - 288 с.

3. Флинн, Г. Физика акустической кавитации в жидкостях / Физическая акустика, под. ред. У. Мэзона. – 1967. - Т. 1. - С. 7-138.

4. Розенберг Л.Д. Кавитационная область / В кн. Физика и техника мощного ультразвука, книга II, Мощные ультразвуковые поля. – М.: Изд-во «Наука», 1968 – 267 с.

5. Кикоин, И.К. Таблицы физических величин: справочник / И. К. Кикоина. - М.: Атомиздат, 1976. -1008 с.

6. Волков, А.И. Большой химический справочник / А.И. Волков, И.М. Жарский. – Минск: Современная школа, 2005. – 608 с.

7. Галимов, Э.М. Экспериментальное подтверждение синтеза алмаза в процессе кавитации / Э.М. Галимов, А.М. Кудин, В.Н. Скоробогатский и др. // Доклады Академии наук. - 2004. – Т. 395. - № 2. - С. 187-191.