

Контрольный
экземпляр

На правах рукописи

ПРОКУДИНА Людмила Александровна

**НЕУСТОЙЧИВОСТЬ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ ПРИ
ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ И НАРУШЕНИИ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ
СИММЕТРИИ**

Специальность 02.00.04. - Физическая химия

**Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук**

Челябинск
1999

Научный
дипломный зал

Работа выполнена в Южно-Уральском государственном университете.

Научный консультант: — член-корреспондент РАН, доктор химических наук, профессор Вяткин Г.П.

Официальные оппоненты: доктор технических наук,
профессор Холпанов Л.П.;

доктор физико-математических наук,
профессор Першин В.К.;

доктор физико-математических наук,
профессор Бескачко В.П.

Ведущая организация: — Нижегородский государственный технический университет.

Защита состоится 30 июня 1999 г., в 10 ч., на заседании специализированного совета Д 053. 13. 03 по защите диссертаций на соискание ученой степени доктора наук при Южно-Уральском государственном университете.

Отзывы в двух экземплярах, заверенных гербовой печатью, просим присыпать по адресу: 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76, ЮУрГУ, совет ЮУрГУ.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке университета.

Автореферат разослан "_____" 1999 г.

Ученый секретарь
специализированного совета
д. ф.-м. н., профессор

Б.Р. Гельчинский

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Неустойчивость порождает многие сложные физические явления, эффекты в неравновесных физико-химических системах и гидродинамике. При достижении порога неустойчивости в системе нарушается исходная симметрия и она приобретает качественно новые свойства. К числу таких физических явлений, присущих неустойчивым физико-химическим системам, относятся фазовые переходы первого и второго рода. Фазовые переходы первого рода сопровождают работу многих тепломассообменных аппаратов например, в системах пар-жидкость. Эффективность работы тепломассообменных аппаратов определяют межфазные процессы, явления, среди которых сложнейшей является межфазная неустойчивость. В проблеме межфазной неустойчивости особо выделяется неустойчивость, связанная с эффектом Марангони. Неустойчивость Марангони в нелинейной постановке исследована недостаточно, существует много неизученных вопросов: критические режимы течения трехмерных жидких пленок, ведущие к реализации нелинейных явлений, разрушение жидких пленок при положительном параметре Марангони, и наоборот, стабилизация течений трехмерных пленок при отрицательном параметре Марангони; влияние различных физико-химических факторов на развитие неустойчивости Марангони; процесс образования конвективных структур, их временная эволюция, устойчивость. Проблема возникновения упорядоченных структур в различных открытых системах является фундаментальной. Становление теории формирования структур в молекулярных системах связано прежде всего с работами Шредингера Э., Тьюринга А., Пригожина И., Гленсдорфа Р., Белоусова Б., Жаботинского А. Математические модели химически реагирующих систем широко используются при исследовании экологических, биологических и биохимических систем - эти системы математически подобны, при моделировании реальных динамических

большое значение приобретает сопоставление межфазных эффектов с процессами иной физической природы, таких как автокаталитические реакции с диффузией, которым присущи сложные типы нелинейности. Существование упорядоченных структур в нелинейных реагирующих системах, содержащих компоненты с различной скоростью диффузии, было впервые доказано Тьюрингом в 1952 г. В настоящее время открытые остаются вопросы долговременной эволюции физико-химических систем после потери устойчивости. Диффузионная неустойчивость в химически реагирующих системах в нелинейной постановке исследована недостаточно. Актуальны задачи, связанные с воздействием на неустойчивые физико-химические системы внешним полем с целью управления, создания структур с заранее заданными свойствами.

Целью работы является изучение проблем межфазной неустойчивости гравитационно стекающей трехмерной жидкой пленки при фазовых переходах и неустойчивости в автокаталитических реакциях с диффузионным типом связи между компонентами. Разработка методов исследования долговременного нелинейного развития и взаимодействия возмущений в неустойчивых химически реагирующих системах с диффузией, а также в системах физико-химической гидродинамики.

Предмет исследования. Диссертационная работа связана с изучением проблем неустойчивости распределенных физико-химических систем. Представлена математическая модель гравитационно стекающей трехмерной жидкой пленки в тепломассообменных процессах конденсации и испарения. Нелинейный анализ неустойчивости Марангони при влиянии силы тяжести, нерастворимых поверхностно-активных веществ, обдува жидкой пленки произвольно направленным парогазовым потоком. Расчет переменной толщины трехмерной жидкой пленки в условиях массопереноса через поверхность раздела при ее течении под действием силы тяжести по твердой наклонной плоскости, а также результаты анализа влияния поверхностной

вязкости, неоднородности поверхностного натяжения, постоянного касательного напряжения на изменение толщины пленки и форму волн. Диффузионная неустойчивость, анализ нелинейного развития и взаимодействия возмущений в химически реагирующих системах при внешнем воздействии и управление режимом колебаний.

Научная новизна. Разработана математическая модель гравитационно стекающей трехмерной жидкой пленки в тепломассообменных процессах конденсации и испарения при неоднородности поверхностного натяжения, поверхностной вязкости, постоянного касательного напряжения на межфазной поверхности.

Исследована межфазная неустойчивость неизотермической трехмерной жидкой пленки, связанная с одновременным переносом тепла и массы через поверхность раздела, присутствием нерастворимых поверхностно активных веществ, обдувом поверхности пленки газовым потоком произвольного направления.

Найдено критическое значение параметра Марангони при разрушении трехмерных жидких пленок ($M>0$) и при стабилизации течения пленки ($M<0$). Исследовано влияние на нелинейную устойчивость трехмерной жидкой пленки при фазовых переходах в процессах конденсации и испарения силы тяжести, постоянного касательного напряжения, поверхностной вязкости.

Получена зависимость для переменной толщины трехмерной жидкой пленки в процессах конденсации и испарения. Найдены нелинейные характеристики волнового течения трехмерной жидкой пленки в тепломассообменных процессах.

Разработана математическая модель разрушающейся жидкой пленки при развитии на ее свободной поверхности локальных возмущений. Результаты анализа влияния нерастворимых поверхностно-активных веществ, градиентов температуры, движения потока газа над поверхностью жидкой пленки на развитие локальных возмущений поверхности пленки.

В явном виде получены коэффициенты нелинейного параболического уравнения для амплитуды огибающей спектрально узкого волнового пакета на поверхности трехмерной жидкой пленки в условиях тепло- и массопереноса.

Выведено нелинейное параболическое уравнение Гинзбурга-Ландау орегонатора с диффузионным типом связи, в рамках которого исследована эволюция волны огибающей, рассмотрено нелинейное взаимодействие мод.

При математическом моделировании неустойчивых режимов в химически активных системах с диффузией в коэффициенты уравнения Гинзбурга-Ландау брюсселятора введен параметр внешнего воздействия, определены зоны неустойчивости системы, осуществлено их деформирование при воздействии внешним полем.

Теоретическая и практическая ценности. Разработанные в диссертации методы развиваются теорию нелинейного волнового течения жидких пленок в условиях тепло- и массопереноса и нелинейных автоколебательных систем с диффузией. Получены зависимости для параметров волнового течения трехмерной жидкой пленки: частоты, инкремента, фазовой скорости, амплитуды при конденсации и испарении. Исследовано влияние силы тяжести, постоянного касательного напряжения на поверхности раздела, поверхностной вязкости, неоднородности поверхностного натяжения на нелинейную устойчивость трехмерной жидкой пленки в тепломассообменных процессах, что дает возможность более корректно описать процессы тепло- и массопереноса в жидких пленках, а также использовать полученные результаты при разработке тепломассообменной аппаратуры и проведении опытно-конструкторских работ.

Полученные зависимости для концентрации компонентов, наступления неустойчивости, уравнение Гинзбурга-Ландау для орегонатора с диффузионным типом связи между компонентами и брюсселятора при внешнем воздействии, коэффициенты которого найдены в явном виде, могут служить основой вычислительных алгоритмов при исследовании моделей

автокаталитических реакций с диффузией, а также могут быть использованы для совершенствования химико-технологических процессов.

Достоверность полученных результатов. Достоверность разработанных математических моделей и методов расчета представленных физико-химических систем обеспечивается корректной постановкой задач с использованием основных уравнений гидромеханики, тепломассообмена, химической кинетики, а также применением тензорного анализа, математических методов теории возмущений, разностных методов. Достоверность полученных новых результатов подтверждается их соответствием экспериментальным данным.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы докладывались на XXXVIII научно-технической конференции Челябинского политехнического института (Челябинск, 1986); на научно-технической конференции Челябинского государственного технического университета (Челябинск, 1996, 1997, 1998); на 3-м и 4-м Российском семинаре "Компьютерное моделирование физико-химических свойств стекол и расплавов" (Курган, 1996, 1998); на 8-й межвузовской научной конференции "Математическое моделирование и краевые задачи" (Самара, 1998); на XVI Российской школе по проблемам проектирования неоднородных конструкций (Миасс, 1998); на Уральском семинаре по неоднородным конструкциям (Екатеринбург, 1998); на 2-м международном симпозиуме по энергетике, окружающей среде и экономике (Казань, 1998); на XVI Международной школе-семинаре по численным методам механики вязкой жидкости (Новосибирск, 1998).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 28 работ.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, двух приложений и библиографического списка, включающего 251 наименование. Общий объем диссертации составляет 259 страниц машинописного текста, содержит 117 рисунков.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность исследования неустойчивых физико-химических систем. Сформулированы задачи исследования.

В первой главе представлена математическая модель трехмерного течения тонкого слоя вязкой жидкости (пленки) по твердой наклонной поверхности. Границные условия на поверхности трехмерной жидкой пленки выведены методами тензорного анализа из уравнения движения свободной поверхности и учитывают одновременный перенос тепла и массы через поверхность раздела фаз, что имеет место в процессах испарения и конденсации. Поверхностный тензор включает коэффициент поверхностного натяжения и коэффициенты поверхностной вязкости на растяжение и сдвиг. Математическая модель течения трехмерной жидкой пленки толщиной δ по твердой наклонной поверхности под действием силы тяжести, сопровождающееся обтеканием ее свободной поверхности парогазовым потоком произвольного направления, представляет собой систему уравнений Навье-Стокса и уравнения неразрывности с граничными условиями, учитывающими влияние процессов тепломассопереноса:

$$\begin{cases} \frac{\partial u_+}{\partial z_+} + u_+ \frac{\partial u_+}{\partial x_+} + v_+ \frac{\partial u_+}{\partial y_+} + w_+ \frac{\partial u_+}{\partial z_+} = - \frac{\partial p_+}{\partial x_+} + F_x + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u_+}{\partial x_+^2} + \frac{\partial^2 u_+}{\partial y_+^2} + \frac{\partial^2 u_+}{\partial z_+^2} \right), \\ \frac{\partial v_+}{\partial z_+} + u_+ \frac{\partial v_+}{\partial x_+} + v_+ \frac{\partial v_+}{\partial y_+} + w_+ \frac{\partial v_+}{\partial z_+} = - \frac{\partial p_+}{\partial y_+} + F_y + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v_+}{\partial x_+^2} + \frac{\partial^2 v_+}{\partial y_+^2} + \frac{\partial^2 v_+}{\partial z_+^2} \right), \\ \frac{\partial w_+}{\partial z_+} + u_+ \frac{\partial w_+}{\partial x_+} + v_+ \frac{\partial w_+}{\partial y_+} + w_+ \frac{\partial w_+}{\partial z_+} = - \frac{\partial p_+}{\partial z_+} + F_z + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 w_+}{\partial x_+^2} + \frac{\partial^2 w_+}{\partial y_+^2} + \frac{\partial^2 w_+}{\partial z_+^2} \right), \\ \frac{\partial u_+}{\partial x_+} + \frac{\partial v_+}{\partial y_+} + \frac{\partial w_+}{\partial z_+} = 0; \end{cases} \quad (1)$$

$$y=0: \quad u_+ = w_+ = 0, \quad v_+ = V_0; \quad (2)$$

$$y=\delta: \frac{1}{Re} \left[2 \frac{\partial u_+}{\partial x_+} \cdot \frac{\partial \delta_+}{\partial x_+} - 2 \frac{\partial v_+}{\partial y_+} \cdot \frac{\partial \delta_+}{\partial x_+} - \left(\frac{\partial v_+}{\partial x_+} + \frac{\partial u_+}{\partial y_+} \right) + \frac{\partial \delta_+}{\partial z_+} \left(\frac{\partial u_+}{\partial z_+} + \frac{\partial w_+}{\partial x_+} \right) \right] + M \frac{\partial \delta_+}{\partial x_+} + \\ + N \left(\frac{\partial^2 u_+}{\partial x_+^2} + \frac{\partial^2 w_+}{\partial x_+ \partial z_+} \right) + \tau_x = 0; \quad (3)$$

$$\frac{1}{Re} \left[2 \frac{\partial w_+}{\partial z_+} \cdot \frac{\partial \delta_+}{\partial z_+} - 2 \frac{\partial v_+}{\partial y_+} \cdot \frac{\partial \delta_+}{\partial z_+} - \left(\frac{\partial w_+}{\partial y_+} + \frac{\partial v_+}{\partial z_+} \right) + \frac{\partial \delta_+}{\partial x_+} \left(\frac{\partial u_+}{\partial z_+} + \frac{\partial w_+}{\partial x_+} \right) \right] + M \frac{\partial \delta_+}{\partial z_+} + \\ + N \left(\frac{\partial^2 w_+}{\partial z_+^2} + \frac{\partial^2 u_+}{\partial x_+ \partial z_+} \right) + \tau_z = 0; \quad (4)$$

$$P_+ = \frac{2}{Re} \left[\frac{\partial v_+}{\partial y_+} - \frac{\partial \delta_+}{\partial x_+^2} \frac{\partial u_+}{\partial y_+} - \frac{\partial \delta_+}{\partial z_+} \frac{\partial w_+}{\partial y_+} \right] - \tau_y \left(\frac{\partial^2 \delta_+}{\partial x_+^2} + \frac{\partial^2 \delta_+}{\partial z_+^2} \right) +$$

$$+ P_0 \cdot sign(T) \frac{\frac{P_1}{P_0} - 1}{(Re \cdot Pr \cdot Ku)^2 \delta^2}; \quad (5)$$

$$\frac{\partial \delta}{\partial x_+} = v_+ - u_+ \frac{\partial \delta}{\partial x_+} - w_+ \frac{\partial \delta}{\partial z_+} + \frac{1}{Re \cdot Pr \cdot Ku \delta} \frac{1}{\delta}, \quad (6)$$

где

$$u_+ = \frac{u}{u_0}, \quad v_+ = \frac{v}{u_0}, \quad w_+ = \frac{w}{u_0}, \quad t_+ = \frac{t \cdot u_0}{\delta_0}, \quad x_+ = \frac{x}{\delta_0}, \quad y_+ = \frac{y}{\delta_0}, \quad z_+ = \frac{z}{\delta_0},$$

$$Re = \frac{u_0 \cdot \delta_0 \cdot \rho}{\mu}, \quad P_+ = \frac{P}{\rho \cdot u_0^2}, \quad \delta_+ = \frac{\delta}{\delta_0}, \quad F_x = \frac{g_x \cdot \delta_0}{u_0^2}, \quad F_y = -\frac{g_y \cdot \delta_0}{u_0^2},$$

$$F_z = \frac{g_z \cdot \delta_0}{u_0^2}, \quad \sigma_+ = \frac{\sigma}{\rho \cdot u_0^2 \cdot \delta_0}, \quad N = \frac{\kappa + \epsilon}{\rho \cdot \delta_0^2 \cdot u_0}, \quad \tau_x = \frac{\tau_x}{\rho \cdot u_0^2}, \quad M = M_T + M_K,$$

$$M_T = \frac{\partial \sigma}{\partial T^0} \left(\frac{\partial T_0}{\partial y} \right)_{y=\delta} \cdot \frac{1}{\rho \cdot u_0^2}, \quad M_K = \frac{\partial \sigma}{\partial K} \cdot \frac{\partial K}{\partial \delta} \cdot \frac{1}{\rho \cdot u_0^2}, \quad \tau_z = \frac{\tau_z}{\rho \cdot u_0^2},$$

$$Pr = \frac{\rho \cdot c_p \cdot \nu}{\lambda}, \quad Ku = \frac{r}{c_p \cdot \Delta T},$$

σ – коэффициент поверхностного натяжения;

κ, ϵ – коэффициенты поверхностной вязкости на растяжение и на сдвиг соответственно; λ – коэффициент теплопроводности;

g_x, g_y, g_z - составляющие ускорения свободного падения; ρ - плотность;

μ - вязкость; ν - кинематическая вязкость, K - концентрация вещества на поверхности пленки, N - параметр поверхностной вязкости, M - параметр Марангони.

Представленная модель (1-6) позволила рассчитать для малых чисел Рейнольдса методом узких полос проекции скорости, давление, зависящие от силы тяжести, обдува пленки парогазовым потоком, влияния поверхностной вязкости, неоднородности поверхностного натяжения, фазовых переходов.

Во второй главе исследуется межфазная неустойчивость гравитационно стекающей трехмерной жидкой пленки в тепломассообменных процессах. Жидкая пленка является объектом исследований в связи с реализацией ее течения в многочисленных тепломассообменных аппаратах реальных химико-технологических процессов, протекающих в условиях межфазной неустойчивости поверхности раздела фаз, вызванной разнообразными физико-химическими факторами, эффектами и существенно влияющей на интенсивность переноса тепла и массы через поверхность раздела. Межфазная неустойчивость, связанная с эффектом Марангони, особенно привлекает внимание исследователей, так как играет значительную роль в таких химико-технологических процессах, как испарение, экстракция, абсорбция и других. Для исследования межфазной неустойчивости трехмерной жидкой пленки при малых числах Рейнольдса методом узких полос получено уравнение свободной поверхности гравитационно стекающей трехмерной жидкой пленки при фазовых переходах в процессах конденсации и испарения. Уравнение содержит пространственные производные от первого до четвертого порядка и производные по времени как в линейной, так и нелинейной части. Коэффициенты уравнения ($a_i, i = 1, \dots, 59$) включают физические параметры, качественно влияющие на течение трехмерной пленки и ее устойчивость:

параметр поверхности вязкости, параметр Марангони, постоянное касательное напряжение на поверхности раздела.

Из дисперсионного уравнения в явном виде получены волновые характеристики частота, инкремент, фазовая скорость:

$$\omega_r = \frac{Y - X \cdot Z}{1 + Z^2}, \quad (7)$$

$$\omega_i = X + \omega_r \cdot Z, \quad (8)$$

$$c_r = \frac{\omega_r}{k}, \quad (9)$$

где

$$X = a_1 k_x^4 + a_2 k_x^2 k_z^2 + a_3 k_z^4 - a_6 k_x^2 - a_8 k_x k_z - a_{10} k_z^2 - (\text{Re} \cdot \text{Pr} \cdot Ku)^{-1},$$

$$Y = a_4 k_x^3 + a_5 k_z^3 - a_{11} k_x - a_{12} k_z,$$

$$Z = a_7 k_x + a_9 k_z,$$

$$k_x = k \cdot \cos \alpha, k_z = k \cdot \sin \alpha,$$

$$a_1 = -\frac{\text{Re} \cdot \sigma}{3}, \quad a_2 = 2a_6, \quad a_3 = a_1, \quad a_4 = -\frac{\text{Re}^2 \cdot F_x \cdot N}{2}, \quad a_5 = -\frac{\text{Re}^2 F_z \cdot N}{2},$$

$$a_6 = -\frac{\text{Re} \cdot F_y}{3} - \frac{\text{Re} \cdot M}{2} + \frac{3}{40} \cdot \text{Re}^3 \cdot F_x \cdot (F_x + F_z) + \frac{2}{3} \cdot \text{Re} \cdot \text{sign} \Delta T \frac{C}{(\text{Re} \cdot \text{Pr} \cdot Ku)^2},$$

$$a_7 = \frac{5}{24} \cdot \text{Re}^2 \cdot F_x, a_8 = \frac{3}{20} \cdot \text{Re}^3 \cdot F_x \cdot F_z + \frac{3}{40} \cdot \text{Re}^3 \cdot (F_z \cdot F_x + F_x \cdot F_z),$$

$$a_9 = \frac{5}{24} \cdot \text{Re}^2 \cdot F_z,$$

$$a_{10} = -\frac{\text{Re} \cdot F_y}{3} - \frac{\text{Re} \cdot M}{2} + \frac{3}{40} \cdot \text{Re}^3 \cdot F_z \cdot (F_z + F_x) + \frac{2}{3} \cdot \text{Re} \cdot \text{sign} \Delta T \frac{C}{(\text{Re} \cdot \text{Pr} \cdot Ku)^2},$$

$$a_{11} = -\text{Re} \cdot F_x - \text{Re} \cdot \tau_x, a_{12} = -\text{Re} \cdot F_z - \text{Re} \cdot \tau_z,$$

где k – волновой вектор возмущений, направленный под углом α к оси X,

k_x, k_z – проекции волнового числа на оси X и Z соответственно.

Проанализировано влияние на волновые характеристики, положение нейтральной кривой устойчивости и кривой волновых чисел гармоник

максимальной скорости роста поверхностного натяжения, поверхностной вязкости, неоднородности поверхностного натяжения, постоянного касательного напряжения, угла наклона поверхности, по которой движется пленка, в процессах конденсации и испарения. Процесс испарения по сравнению с конденсацией более неустойчив (рис.1.). При испарении более высокие скорости роста возмущений (рис.2.), происходит расширение области неустойчивости. Оба процесса и испарение, и конденсация весьма чувствительны к любым изменениям на свободной поверхности пленки. В зависимости от направления и величины τ газовый поток может как стабилизировать, так и дестабилизировать течение пленки. Расчеты проведенные при $\tau = \tau_x = 0.1$ показали устойчивость пленочного течения для $Re \leq 10$. Газовый поток, направленный против течения пленки, дестабилизирует ее течение, при этом значительно расширяется зона неустойчивости, велика скорость роста возмущений.

Наличие в жидкой пленке нерастворимых поверхностно-активных веществ (масла, жиры), имеющих большую вязкость, при движении жидкого слоя приводит к возникновению сил поверхностной вязкости, качественно влияющих на волновые характеристики течения трехмерной жидкой пленки. С увеличением поверхностной вязкости понижается граница устойчивости, существенно снижается скорость роста возмущений, уменьшается фазовая скорость. Нерастворимые поверхностно-активные вещества, образуя на поверхности жидкости очень тонкие пленки, обладающие большим внутренним трением, при небольших числах Рейнольдса проявляют демпфирующий эффект. Происходит сокращение зоны неустойчивости по диапазону волновых чисел, уменьшается фазовая скорость. Пленки нерастворимых ПАВ, обладая большой вязкостью, являются барьером для испаряющихся молекул и затрудняют процесс испарения. При этом степень неустойчивости системы остается высокой. Для $Re > 6$ нерастворимые поверхностно-активные вещества обеспечивают снижение скорости роста

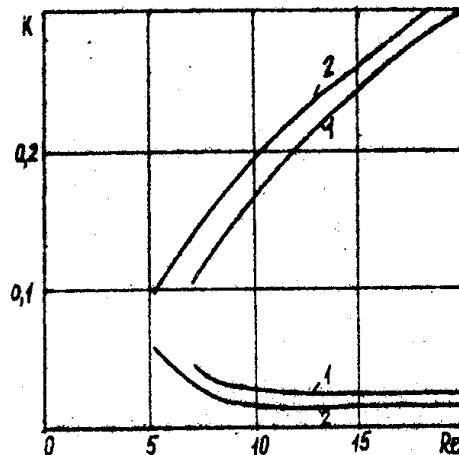


Рис. 1. Кривые нейтральной устойчивости для вертикальной пленки:

1-при конденсации, 2-при испарении

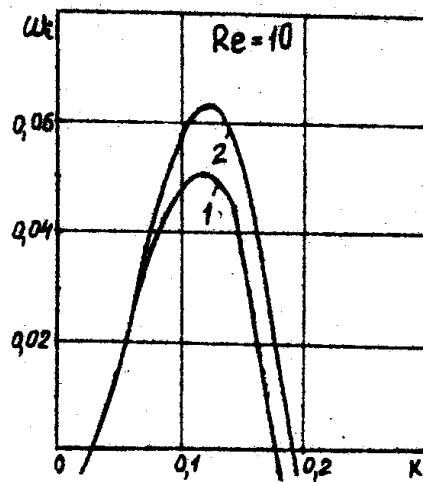


Рис. 2. Зависимость инкремента от волнового числа:

1- процесс конденсации, 2- процесс испарения

возмущений для вертикальной пленки на 10%, например, при отсутствии поверхностно-активных веществ ($N=0$). для $Re = 10: \omega_{i,\max} = 0,105, c_r = 2,4$, и $Re = 20: \omega_{i,\max} = 0,14, c_r = 1,3$, а при их присутствии — для $Re = 10: \omega_{i,\max} = 0,095, c_r = 2,3 (N = 1)$ и для $Re = 20: \omega_{i,\max} = 0,12, c_r = 1,1$.

Необходимо особо отметить неустойчивость, связанную с изменением от точки к точке поверхностного натяжения (параметр M). Основой для межфазной неустойчивости является зависимость поверхностного натяжения σ от температуры и концентрации вещества $\sigma = \sigma(T^*, C_s)$. Градиенты температуры и концентрации вызывают неоднородность поверхностного натяжения и появление градиентов $\frac{\partial \sigma}{\partial T}$ и $\frac{\partial \sigma}{\partial C_s}$, что приводит к возникновению на межфазной поверхности сил, природа которых определяется реальным физическим процессом, например, термокапиллярных сил при течении пленки по нагретой стенке, или концентрационнокапиллярных при обдуве поверхности пленки газом, содержащим поверхностно активные вещества. В процессах конденсации и испарения скорость тепломассопереноса в разных точках свободной поверхности жидкой пленки различна, что приводит к неоднородности ее поверхностного натяжения и появлению градиентов поверхностного натяжения. Согласно эффекту Марангони поверхностный слой приходит в движение и вовлекает в него близлежащие приповерхностные слои. Возникающая неустойчивость Марангони в зависимости от знака градиента межфазного натяжения, определяющего направленность эффекта Марангони на усиление ($M > 0$) или гашение возмущений ($M < 0$) проявляется в изменении волновых характеристик течения жидких пленок и формировании в приповерхностных слоях структур, таких, как циркуляционные ячейки, вихри. Расчеты, проведенные для диапазона $1 \leq Re \leq 20$, показали что при $M > 0$ в зоне гидродинамической неустойчивости течения пленки $Re \geq 7$ эффект Марангони усиливает неустойчивость. При этом увеличивается инкремент ω_i , падает

фазовая скорость c_r . В устойчивой области $Re < 7$ при $M > 0$ "включается" механизм межфазной неустойчивости, идет "смещение" ω_i из области декремента в область инкремента (рис.3.).

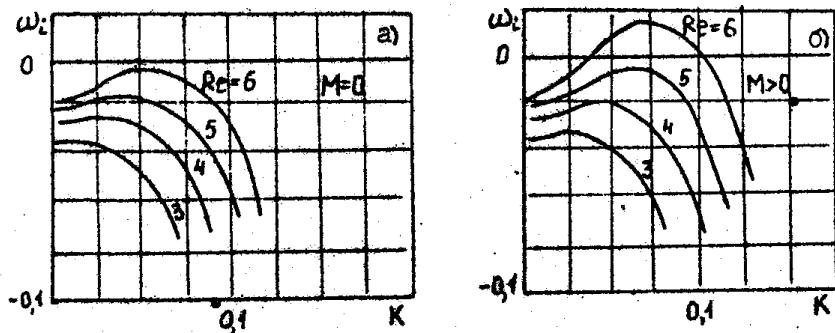


Рис. 3. Зависимость инкремента от волнового числа

При реализации в жидкой пленке положительных градиентов температуры ($M < 0$), например, при обдуве поверхности пленки высокотемпературным потоком газа, термокапиллярные силы стабилизируют ее течение. Кривая нейтральной устойчивости проходит ниже соответствующей кривой при $M = 0$, величина инкремента небольшая, например, при $Re = 10$ величина $\omega_{i\max}$, рассчитанная при $M = -0,5$ в два раза меньше, чем при $M = 0$ (рис.4.). При $M < 0$ увеличивается фазовая скорость.

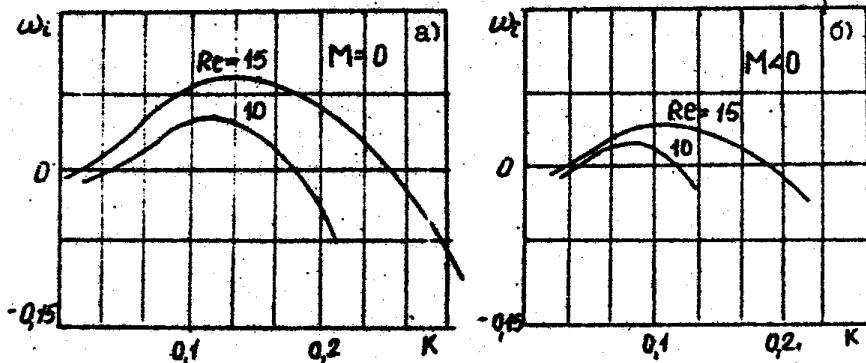


Рис. 4. Зависимость инкремента от волнового числа

Расчеты, проведенные при $M > 0, N \neq 0$ для диапазона $1 \leq Re \leq 20$ показали, что под влиянием поверхностно-активных веществ значительно уменьшается величина инкремента. Нерастворимые поверхностно-активные вещества понижают фазовую скорость. На основании расчетных данных по волновым характеристикам можно сделать вывод, что нерастворимые поверхностно-активные вещества снижают интенсивность неустойчивости Марангони и подавляют межфазную конвекцию. ПАВ, сдерживая неустойчивость Марангони, препятствуют разрыву пленок. В процессах конденсации и испарения нерастворимые ПАВ с одной стороны подавляют неустойчивость Марангони, а с другой, – пленки поверхностно-активных веществ оказывают дополнительное межфазное сопротивление, затрудняя процессы фазового перехода.

При работе пленочных аппаратов (дистилляторов, испарителей, конденсаторов, теплообменников) важнейшей задачей является обеспечение безаварийного режима работы. В области гидродинамической неустойчивости течения жидкой пленки при $M > 0$ в зависимости от величины градиентов температуры (или концентрации) возможны местные искривления свободной поверхности пленки, беспорядочные всплески различной интенсивности поверхности раздела, разрывы пленок, образование сухих пятен при испарении пленок. Разрушение жидких пленок наступает при достижении параметром M критического значения равного

$$M_c = -\frac{2}{3} F_y + \frac{4}{3} \operatorname{sign} \Delta T \frac{C}{(Re Pr Ku)^2} + \frac{3}{20} \frac{Re^2}{(k_x^2 + k_z^2)} \cdot (F_x(\tau_x + F_x)k_x^2 + F_z(\tau_z + F_z)k_z^2) - \frac{2}{Re(k_x^2 + k_z^2)} \cdot (b_0 - \frac{b_1}{b_2}), \quad (10)$$

где

$$b_0 = a_1 k_x^4 + a_2 k_x^2 k_z^2 + a_3 k_z^4 - a_4 k_x k_z - (\text{Re} \Pr Ku)^{-1},$$

$$b_1 = a_4 k_x^3 + a_5 k_z^3 - a_{11} k_x - a_{12} k_z, b_2 = a_7 k_x + a_9 k_z.$$

Критическое значение параметра Марангони в момент разрушения вертикальной испаряющейся пленки представлено на рис 5. Полученную зависимость для критического значения параметра Марангони (10) можно также использовать в качестве предварительной оценки режима неупорядоченной межфазной конвекции.

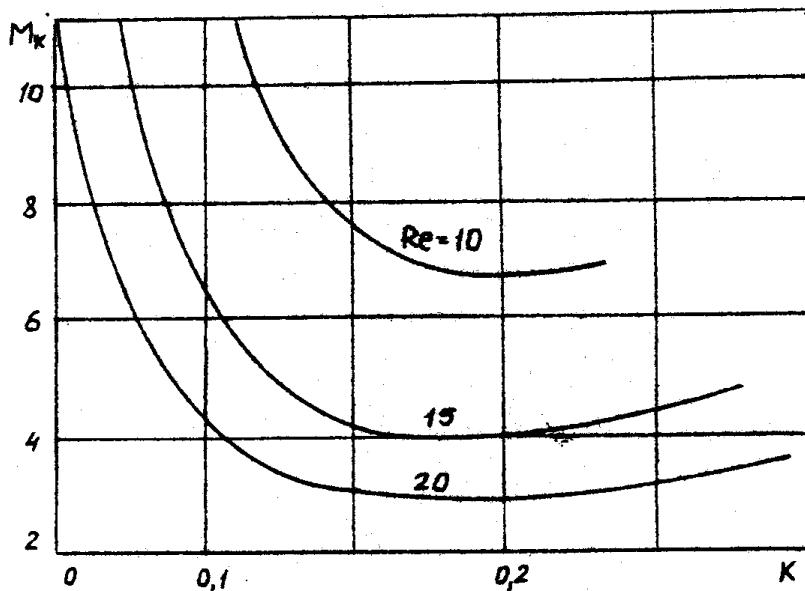


Рис.5. Зависимость критического значения параметра Марангони от волнового числа

В случае $M < 0$ проявляется эффект стабилизации. Формирующаяся структура течений в приповерхностных слоях более устойчива, что ведет к выравниванию профиля пленки, значительному уменьшению инкремента, увеличению фазовой скорости. Критическое значение параметра M , при

котором достигается устойчивость течения жидкой пленки в тепломассообменных процессах конденсации и испарения, имеет вид

$$M_k = \frac{2}{\operatorname{Re}(k_x^2 + k_z^2)} \cdot ((k_x^2 + k_z^2) \left(-\frac{1}{3} \operatorname{Re} F_y + \frac{2}{3} \operatorname{sign} \Delta T \cdot \frac{\operatorname{Re} \cdot C}{(\operatorname{Re} \operatorname{Pr} K u)^2} \right) + \frac{3}{40} \operatorname{Re}^3 (F_x (\tau_x + F_x) k_x^2 + F_z (\tau_z + F_z) k_z^2) - b_0 - b_1 \cdot b_2). \quad (11)$$

Для области гидродинамической устойчивости гравитационно стекающей пленки критическое значение параметра M , до которого пленка, учитывая ее конкретное физико-химическое состояние, способна сохранить устойчивость, вычисляется по формуле (11). Моделирование критических режимов течения жидких пленок позволяет предотвратить аварийные ситуации при работе тепломассообменных аппаратов.

В третьей главе исследуется нелинейное развитие неустойчивости Марангони на поверхности трехмерной жидкой пленки при ее испарении и при конденсации парогазового потока. Исследуя уравнение свободной поверхности трехмерной жидкой пленки при фазовых переходах методами возмущений, изучено влияние на нелинейную устойчивость жидких пленок угла наклона поверхности, по которой движется пленка, сил поверхностной вязкости, термокапиллярных сил и касательного напряжения. Для исследования нелинейных волновых режимов использован подход волновых пакетов. Рассмотрено развитие на поверхности пленки возмущений, принадлежащих непрерывной полосе волновых чисел:

$$\psi = \int_{k_{0x}-\Delta k_x}^{k_{0x}+\Delta k_x} \int_{k_{0z}-\Delta k_z}^{k_{0z}+\Delta k_z} F(k_\Sigma) \exp(i(k_x x + k_z z - w t)) dk_x dk_z = A \exp(i(k_{0x} x + k_{0z} z - w_{k_0} t)), \quad (12)$$

где $w = w_r + i w_i$;

$$A = \int_{-\Delta k_x}^{\Delta k_x} \int_{-\Delta k_z}^{\Delta k_z} F(k_{0\Sigma} + \Delta k_\Sigma) \exp(i(\Delta k_x x + \Delta k_z z - (\frac{\partial w_r}{\partial k_x})_{k_0} \Delta k_x t - (\frac{\partial w_r}{\partial k_z})_{k_0} \Delta k_z t - \frac{1}{2} (\frac{\partial^2 w_r}{\partial k_x^2})_{k_0} (\Delta k_x)^2 t -$$

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 w_r}{\partial k_z^2} \right)_{k_0} (\Delta k_z)^2 t - \left(\frac{\partial^2 w_r}{\partial k_x \partial k_z} \right)_{k_0} \partial k_x \partial k_z - \varepsilon^2 \tilde{w}_i(t) d\partial k_x d\partial k_z + O(\varepsilon^3),$$

где Δk_Σ - ширина полосы волновых чисел, $F(k_\Sigma)$ - Фурье-компоненты разложения, ε - малый параметр.

Уравнение для амплитуды A огибающей спектрально узкого волнового пакета, найденное из уравнения свободной поверхности трехмерной жидкой пленки в тепломассообменных процессах методом многомасштабных разложений, имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial A}{\partial z} + i \frac{\partial w_i}{\partial k_x} \frac{\partial A}{\partial k_1} + i \frac{\partial w_i}{\partial k_z} \frac{\partial A}{\partial k_1} - \frac{i}{2} \left(\frac{\partial^2 w_r}{\partial k_x^2} + i \frac{\partial^2 w_i}{\partial k_x^2} \right) \frac{\partial^2 A}{\partial k_1^2} - \frac{i}{2} \left(\frac{\partial^2 w_r}{\partial k_z^2} + i \frac{\partial^2 w_i}{\partial k_z^2} \right) \frac{\partial^2 A}{\partial k_1^2} - \\ - i \left(\frac{\partial^2 w_r}{\partial k_x \partial k_z} + i \frac{\partial^2 w_i}{\partial k_x \partial k_z} \right) \frac{\partial^2 A}{\partial k_1 \partial k_z} = w_i |A|^2 A + (\beta_1 + i\beta_2) |A|^2 A. \end{aligned} \quad (13)$$

В рамках нелинейного параболического уравнения (13) исследовано нелинейное взаимодействие и развитие возмущений на поверхности трехмерной жидкой пленки при неоднородности поверхностного натяжения, вызванного фазовыми переходами, выявлены области затухания волнового пакета (рис. 6, область A), возбужденного в окрестности нейтральной кривой, проанализирована вторичная неустойчивость периодического волнового течения к пространственным возмущениям, показаны зоны вторичной пространственной неустойчивости (рис. 6, область II) и устойчивости (рис. 6, область I) и их деформирование при воздействии различных физических факторов. С использованием одномерного уравнения Гинзбурга-Ландау проведено компьютерное моделирование режима неупорядоченной межфазной конвекции, называемого межфазной турбулентностью. Рассчитаны амплитуды и фазы мод волнового пакета, амплитуда огибающей волнового пакета (рис. 7).

При гравитационном стекании жидких пленок интенсивность процессов тепломассообмена зависит от толщины пленки и усиливается за счет развития волновых явлений. Форма волны

$$\psi = A \exp i(k_x x_0 + k_z z_0 - w_r t_0) + D A^2 \exp 2i(k_x x_0 + k_z z_0 - w_r t_0) + k.c. + \psi_0, \quad (14)$$

$$\psi_0 = \gamma_1 + \gamma_2 |A|^2.$$

ψ_0 учитывает изменение толщины пленки за счет массопереноса через поверхность раздела фаз в тепломассообменных процессах.

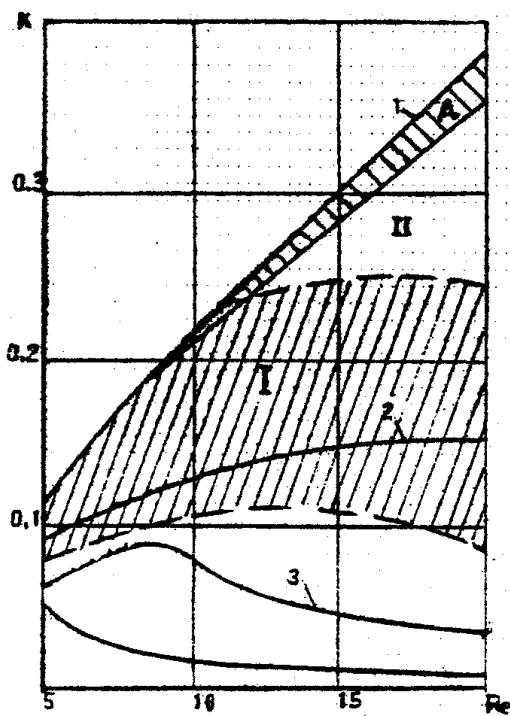


Рис. 6. 1 - кривая нейтральной устойчивости, 2 - кривая гармоник максимального инкремента, 3 - кривая точек перегиба инкремента

Коэффициенты β_1 , β_2 в (13) и D, γ_1, γ_2 в (14) являются функциями физико-химических параметров исходной системы. Качественное влияние на изменение толщины пленки за счет массопереноса оказывают различные физические факторы. Нерастворимые поверхностно-активные вещества, имеющие большую вязкость, в значительной степени затрудняют процесс испарения, при этом толщина пленки меняется незначительно. При движении потока газа над жидкой пленкой, наоборот, интенсивность процесса испарения возрастает. Величина изменения толщины пленки за счет массопереноса при $\tau_x = 0,1$ составила в среднем до 40% от ее величины при $\tau = 0$.

Случай $M > 0$. В области гидродинамической неустойчивости течения трехмерной вертикальной пленки в процессах конденсации и испарения ($5 \leq Re \leq 20$, рис.1) рассчитаны постоянные Ландау β_1 , β_2 . Показано, что нелинейное взаимодействие гармоник приводит к изменению инкремента, фазовой скорости, исследовано влияние различных физических факторов на данные характеристики, например, для вертикальной пленки $Re=7$:

$$\omega_{i,\max} = 0,055 \text{ при } M = 1, N = 0, \tau = 0, \quad \omega_{i,\max} = 0,045 \text{ при } M = 1, N = 1, \tau = 0,$$

$$\omega_{i,\max} = 0,08 \text{ при } M = 1, N = 0, \tau_x = 0,1.$$

В случае $M < 0$ проявляется эффект стабилизации. Например, течение вертикальной трехмерной пленки при испарении устойчиво для $Re < 10$ при $M = -1$. Для $Re \geq 10$ области вторичной неустойчивости чередуются с областями устойчивости.

С использованием кинематического граничного условия

$$\frac{\partial \delta}{\partial t} = (v_0 + v_1) - (u_0 + u_1) \frac{\partial \delta}{\partial x} - (w_0 + w_1) \frac{\partial \delta}{\partial z} \quad (15)$$

для отклонения свободной поверхности трехмерной жидкой пленки от стационарного состояния выведено уравнение для исследования развития во времени непериодических возмущений на ее поверхности. Разностными методами изучена динамика локальных возмущений различной физической

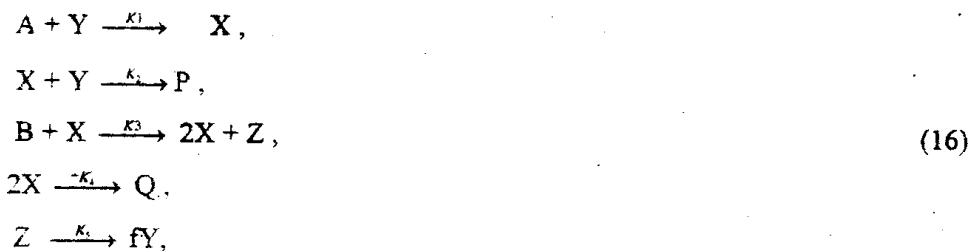
природы на поверхности пленки. Значительные отрицательные градиенты температуры при работе тепломассообменных аппаратов при развитии локального возмущения приводят к местным разрывам пленок и ведут к нарушению работы аппаратуры. Добавки поверхностно-активных веществ, положительные градиенты температуры при пленочном охлаждении приводят к гашению возмущения, оказывают влияние на стабилизацию толщины пленки.

В четвертой главе исследована неустойчивость химически реагирующих систем с диффузионным типом связи между компонентами, которые описываются системой уравнений вида:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = F_i(C) + D_i \Delta C_i,$$

где C_i – концентрации компонентов, D_i – коэффициенты диффузии.

Исследована колебательная химическая реакция Белоусова-Жаботинского, детальный механизм которой был разработан Филд, Керес, Нойес, и предложена пятистадийная модель, известная под названием орегонатор:



где X – бромистая кислота $HBrO_2$, Y – бромид Br^- , Z – церий IV, $A = B$ – бромат-ион BrO_3^- , $P = Q$ – концентрация продуктов, f – стехиометрический коэффициент.

Полагая в кинетических уравнениях модели (16) с учетом диффузии компонентов

$X = X_0 + x, Y = Y_0 + y, Z = Z_0 + z$, где X_0, Y_0, Z_0 – стационарное решение, перейдем к системе уравнений в возмущениях

$$\begin{aligned}\frac{\partial x}{\partial \alpha} &= a_1 x + a_2 y + a_3 x y + a_4 x^2 + D_x \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2}, \\ \frac{\partial y}{\partial \alpha} &= b_1 y + b_2 x + b_3 z + b_4 x y + D_y \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2}, \\ \frac{\partial z}{\partial \alpha} &= c_1 x + c_2 z + D_z \frac{\partial^2 z}{\partial \xi^2}.\end{aligned}\quad (17)$$

Коэффициенты системы уравнений (17) имеют вид

$$\begin{aligned}a_1 &= -k_2 Y_0 + k_3 B - 4k_4 X_0; \\ a_2 &= k_1 A - k_2 X_0; a_3 = -k_2; a_4 = -2k_4; \\ b_1 &= -k_1 A - k_2 X_0; b_2 = -k_2 Y_0; b_3 = fk_5; \\ b_4 &= -k_2; c_1 = k_3 B; c_2 = -k_5.\end{aligned}$$

Исследуемая модель орегонатора (16) с учетом диффузии компонентов неустойчива в диапазоне значений стехиометрического коэффициента равного $0,5 < f < 1,3$ при $k \geq 0$. На рис. 7 показаны области неустойчивости орегонатора, в которых диффузия оказывает как стабилизирующее (область I), так и дестабилизирующее влияние (область II), в диапазоне $0 < k \leq 100$. В области I в исследуемой системе отмечено снижение скорости роста возмущений при $k \neq 0$ по сравнению со случаем $k = 0$ (рис. 8, кривая 1). Для пар (D_x, D_y) из области II характерно нарастание возмущений в системе. Численное исследование модели с параметрами $D_x = 0,008; D_y = 0,016; D_z = 0,00001$ показало, что моды с $k \neq 0$ более неустойчивы (рис. 8, кривая 2), чем моды с $k = 0$, поэтому можно говорить о дополнительной диффузионной неустойчивости, согласно Тьюрингу [1], являющейся механизмом образования пространственных структур.

1. Turing A.M. The chemical basis for morphogenesis // Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. B 237, 37-72, 1952.

Области неустойчивости ортогона тора при $f=0,7$

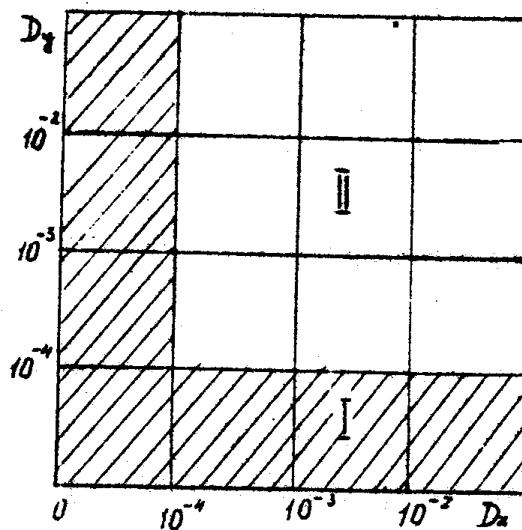


Рис. 7.

I - область стабилизирующего влияния диффузии,

II - область дестабилизирующего влияния диффузии

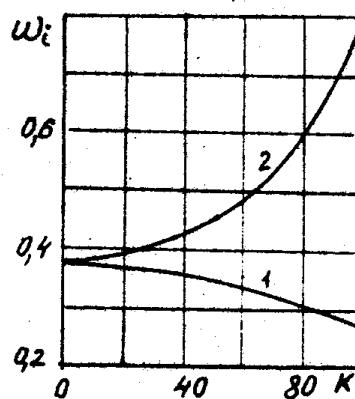


Рис. 8. Скорость роста возмущений:

Кривая 1 - расчет при $D_x = 0,0001, D_y = 0,002$;

Кривая 2 - расчет при $D_x = 0,008, D_y = 0,016$

Зависимости для концентрации компонентов системы, найденные методом многомасштабных разложений имеют вид

$$X = M^{(1)} A_1 \exp i(k\xi_0 - \omega_r t_0) + M^{(2)} A_1^2 \exp 2i(k\xi_0 - \omega_r t_0) + k.c.,$$

$$X = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, M^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}, M^{(2)} = \begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \end{pmatrix}, \quad (18)$$

где

$$\mu_1 = (k^2 D_x - a_1) / a_2 - i\omega_r / a_2,$$

$$\mu_2 = -c_1 / (c_2 - k^2 D_z + i\omega_r).$$

Изменение средних величин концентраций:

$$X_2^{(0)} = M^{(3)} |A_1|^2,$$

$$M^{(3)} = \begin{pmatrix} M_4 \\ M_5 \\ M_6 \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Нелинейное параболическое уравнение для комплексной амплитуды A_1 огибающей волнового пакета имеет вид

$$\frac{\partial A_1}{\partial z} + \frac{i}{\varepsilon} \frac{\partial \omega_i}{\partial k} \frac{\partial A_1}{\partial \eta_i} + \frac{i}{2} \left(\frac{\partial^2 \omega_r}{\partial k^2} + \frac{\partial^2 \omega_i}{\partial k^2} \right) \frac{\partial^2 A_1}{\partial \eta_i^2} = \frac{\omega_i}{\varepsilon^2} A_1 - (\beta_1 + i\beta_2) |A_1|^2 A_1, \quad (20)$$

где

$$\begin{aligned} \beta_1 + i\beta_2 = & ((a_3(M_1 \bar{\mu}_1 + M_4 \mu_1 + M_2 + M_5) + 2a_4(M_1 + M_4))(\omega_r^2 - \\ & i\omega_r k^2(D_y + D_z) + i\omega_r(c_2 + b_1) + k^4 D_y D_z - k^2(c_2 D_y + b_1 D_z) + b_1 c_2) + \\ & + a_2 b_4(M_1 \bar{\mu}_1 + M_4 \mu_1 + M_2 + M_5)(-\omega_r + k^2 D_z - c_2)) / (-\omega_r^2 - ik^2 \omega_r * \\ & * (D_z + D_y) + i\omega_r(c_2 + b_1) + k^4 D_y D_z - k^2(c_2 D_y + b_1 D_z) + b_1 c_2 + \\ & + (-i\omega_r + k^2 D_x - a_1)(-2i\omega_r + k^2(D_z + D_y) - c_2 - b_1) - b_2 a_2). \end{aligned}$$

Уравнение Гинзбурга-Ландау орегонатора (20) является моделью для компьютерного исследования эволюции возмущений в орегонаторе.

Коэффициенты уравнения (20) найдены в явном виде, что дало возможность сочетания аналитического и численного методов исследования, и более качественного исследования модели.

Для исследования неустойчивости в химически реагирующих системах с диффузией при внешнем воздействии рассмотрена модель Брюсселятор:



где A, B, D, E - начальные и конечные продукты реакции соответственно, U и V - переменные, k_i - кинетические коэффициенты.

Включая в рассмотрение диффузию компонентов и учитывая действие внешнего поля, запишем систему в волновом представлении

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial u}{\partial t} - D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u(k_4 - k_3 B - 2\alpha P) + v \left(-\frac{k_2}{\alpha^2} \right) = \\
 = (k_3 B \alpha + \alpha^2 P) u^2 + \frac{2k_2}{\alpha} uv + k_2 u v, \\
 \frac{\partial v}{\partial t} - D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + u(k_3 B + 2\alpha P) + v \left(\frac{k_2}{\alpha^2} \right) = \\
 = -(k_3 B \alpha + \alpha^2 P) u^2 - \frac{2k_2}{\alpha} uv - k_2 u v.
 \end{aligned} \tag{22}$$

Получено дисперсионное уравнение

$$\omega^2 - ip\omega + q = 0, \tag{23}$$

коэффициенты p, q которого имеют вид

$$p = \left[(D_u + D_v)k^2 + k_4 - k_3 B - 2\alpha P + \frac{k_2}{\alpha^2} \right],$$

$$q = -(k^2 D_v (k^2 D_u + k_4 - k_3 B - 2\alpha P) + \frac{k_2}{\alpha^2} (k^2 D_u + k_4)).$$

$$\text{где } \alpha = \frac{k_4}{k_3 A + P}.$$

Найдены критические условия для двух типов неустойчивости:

$$B_{c1} = \frac{(K^2 D_u + k_4 - 2\alpha P) k^2 D_v + \frac{k_2}{\alpha^2} (K^2 D_u + k_4)}{k_3 D_v k^2}, \quad (24)$$

$$B_{c2} = \frac{(D_u + D_v) k^2 + k_4 - 2\alpha P + k_2 \alpha^{-2}}{k_3}$$

Исследована устойчивость однородного стационарного состояния по отношению к возмущениям, построены кривые маргинальной устойчивости. Изменение коэффициентов диффузии компонентов при неизменных входных параметрах системы влияет на положение кривых маргинальной устойчивости. Внешнее воздействие на систему позволяет получить режимы колебаний в химически реагирующих средах, лежащие в очень узких интервалах изменений параметров, которые невозможно осуществить начальным подбором концентрации компонентов. Методом многомасштабных разложений

$$\bar{u} = \sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon^n \bar{u}_n, \quad \bar{v} = \sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon^n \bar{v}_n,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \alpha_0} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial \alpha_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial \alpha_2}, \quad \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \alpha_0} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial \alpha_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial \alpha_2},$$

получены зависимости для концентраций \bar{u} и \bar{v} .

Для областей неустойчивости рассматриваемой модели выведены нелинейные параболические уравнения для A_1 , волны огибающей волнового пакета.

Для первого типа неустойчивости:

$$\frac{\partial A_1}{\partial \alpha_2} + \frac{i}{\varepsilon} \frac{\partial \omega_i}{\partial \alpha_1} \frac{\partial A_1}{\partial \alpha_1} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \omega_i}{\partial \alpha^2} \frac{\partial^2 A_1}{\partial \alpha_1^2} \Rightarrow \omega_i A_1 - \beta |A_1|^2 A_1, \quad (25)$$

$$\beta = -\frac{(k_4 + K^2 D_u)}{(k_3 B + 2\alpha P)} \left\{ 2(k_3 B \alpha + \alpha^2 P + \frac{k_2}{\alpha} m) 4K^2 D_v (k_3 B \alpha + \alpha^2 P + \frac{2k_2 m}{\alpha}) [(4K^2 D_v + \right.$$

$$+ k_4 - k_3 B - 2\alpha P)(4k^2 D_v + \frac{k_2}{\alpha^2}) + (k_3 B + 2\alpha P) \frac{k_2}{\alpha^2} \Bigg]^{-1} + \frac{2k_2}{\alpha} (-2(k_3 B\alpha + \alpha^2 P + \\ + k_2 \alpha^{-1}(m + \bar{m}))k_2^{-1}\alpha^2 + (-4k^2 D_u - k_4 + 2\alpha P)(k_3 B\alpha + \alpha^2 P + 2k_2 \alpha^{-1}m)[(4k^2 D_u + \\ + k_4 - k_3 B - 2\alpha P)(4k^2 D_v + k_2 \alpha^{-2})(k_3 B + 2\alpha P)k_2 \alpha^{-2}]^{-1}) + k_2 \bar{m} \Big\}.$$

Для второго типа неустойчивости:

$$\frac{\partial A_1}{\partial t} + \frac{i}{\varepsilon} \frac{\partial \omega_i}{\partial k} \frac{\partial A_1}{\partial k_i} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \omega_i}{\partial k^2} \frac{\partial^2 A_1}{\partial k_i^2} = \omega_i A_1 - \beta |A_1|^2 A_1, \quad (26)$$

$$\beta_1 + i\beta_2 = - \frac{i\omega_r + k_4}{k_3 B + 2\alpha P} \left\{ 2(k_3 B\alpha + \alpha^2 P + \frac{k_2}{\alpha} \bar{m})(-2i\omega_r (k_3 B\alpha + \alpha^2 P + \right. \\ \left. - 2k_2 \alpha^{-1}m)[-2i\omega_r + k_4 - k_3 B - 2\alpha P](-2i\omega_r + k_2 \alpha^{-2}) + (k_3 B + 2\alpha P) \frac{k_2}{\alpha^2} \right]^{-1} + \\ + \frac{2k_2}{\alpha} (-2(k_3 B\alpha + \alpha^2 P + k_2 \alpha^{-1}(m + \bar{m}))k_2^{-1}\alpha^2 + (-2i\omega_r - k_4 + 2\alpha P)(k_3 B\alpha + \right. \\ \left. + \alpha^2 P + 2k_2 \alpha^{-1}m)[-2i\omega_r + k_4 - k_3 B - 2\alpha P](-2i\omega_r + k_2 \alpha^{-2}) + (k_3 B + \right. \\ \left. + 2\alpha P)k_2 \alpha^{-2}]^{-1} \Big) + k_2 m \right\}.$$

В рамках полученных моделей (25) и (26) проведено численное исследование процессов самоупорядочения в химически реагирующих системах с диффузией при внешнем воздействии.

В пятой главе диссертации в рамках модели Гинзбурга-Ландау проведено компьютерное моделирование неустойчивости в гидродинамических и химически реагирующих системах с диффузионным типом связи между компонентами. В диссертации частные случаи этой модели получены при исследовании конкретных систем: трехмерной жидкой пленки (глава 3), а также для автокаталитических реакций с диффузией моделей орегонатора и брюсселятора (глава 4). Для более качественного изучения поведения каждой конкретной модели использованы аналитические зависимости, в частности, критерий пространственной неустойчивости, критические условия наступления

неустойчивости в автокаталитических реакциях с диффузионным типом связи между компонентами, зависимости для концентрации компонентов и др.

Для неизотермической трехмерной жидкой пленки компьютерное моделирование неустойчивых режимов проведено в рамках модели Гинзбурга-Ландау (13). Рассмотрено нелинейное взаимодействие системы волн:

$$A = A_0 + A_{11} \exp ik_1 x + A_{12} \exp(-ik_1 x) + A_{21} \exp ik_2 z + A_{22} \exp(-ik_2 z),$$

где

несущая волна

$$A_0(t) = a_0(t) \exp i\theta_0(t),$$

боковые волны

$$A_{11}(t) = a_1(t) \exp i\theta_1(t), \quad A_{12}(t) = a_2(t) \exp i\theta_2(t),$$

наклонные волны

$$A_{21}(t) = a_3(t) \exp i\theta_3(t), \quad A_{22}(t) = a_4(t) \exp i\theta_4(t).$$

Выведена система уравнений для амплитуд и сдвигов фаз волн, с помощью которой проведено компьютерное моделирование неустойчивых режимов трехмерной жидкой пленки в условиях тепло- и массопереноса через поверхность раздела газ-жидкость в диапазоне чисел Рейнольдса $5 < Re \leq 20$. Показано, что вблизи кривой гармоник максимального инкремента (рис.6, кривая 2) в результате нелинейного взаимодействия выживает одна монохроматическая волна.

В рамках моделей Гинзбурга-Ландау (20,25,26) проведено компьютерное исследование неустойчивых режимов в автокаталитических реакциях с диффузией. Вычислительный эксперимент для режима диффузионной неустойчивости орегонатора (рис. 10) проведен в рамках уравнения (20) с периодическими граничными условиями. Периодическим граничным условиям соответствует дискретный спектр волнового пакета. Длина участка, занятого

Амплитуда огибающей волнового пакета

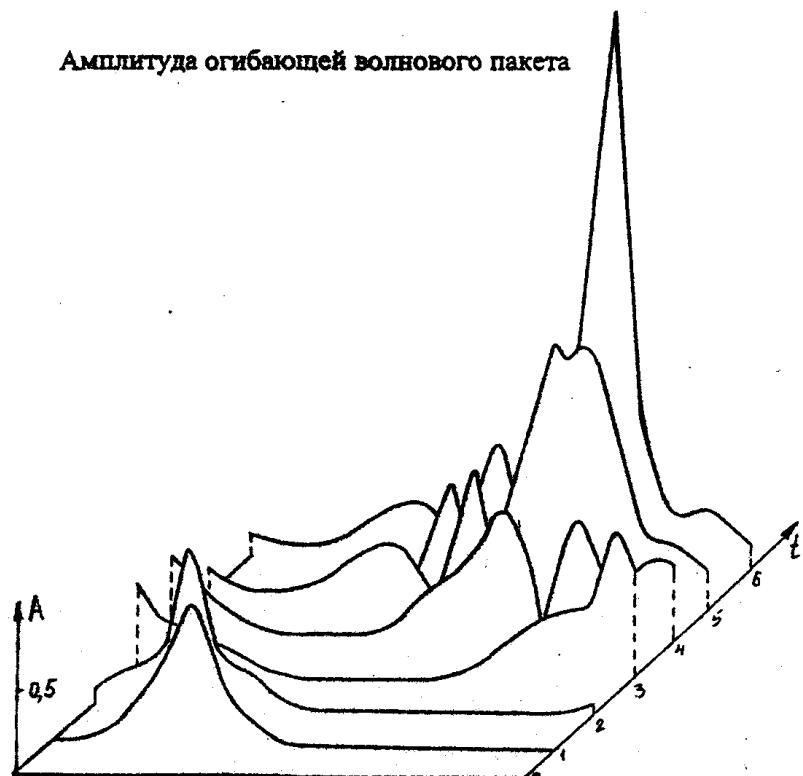


Рис. 9. Эволюция волны огибающей при неустойчивости Марангони ($M>0$)

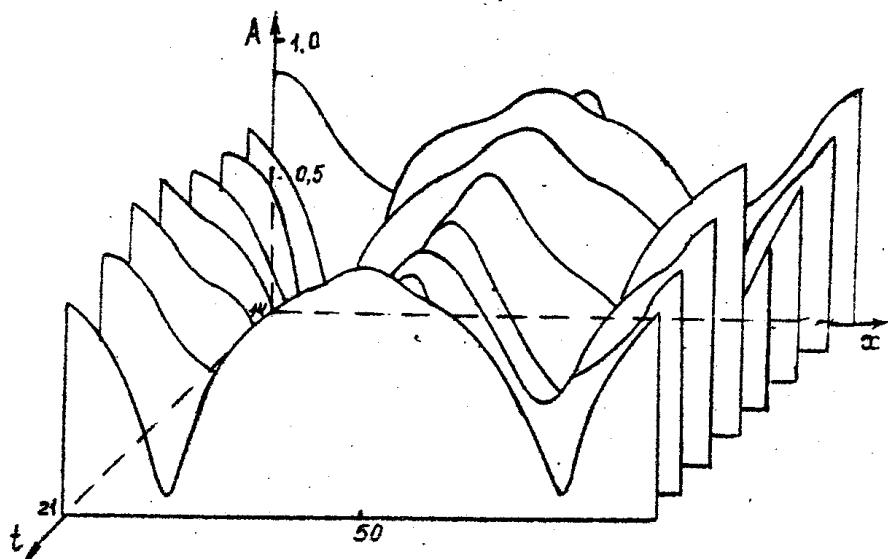


Рис.10. Эволюция волны огибающей при диффузационной неустойчивости в орегонаторе

возбужденным волновым пакетом, и интервал дискретности волнового пакета связаны соотношением $\Delta t = \frac{2\pi}{L}$. Численный расчет осуществлялся для длины участка $L=16$, занятого возбужденным волновым пакетом по 20 гармоник справа и слева от центральной. На временном интервале $0 < t < 13$ наблюдалось уменьшение количества мод, обладающих энергией, достаточной для дальнейшего конкурирования между собою, осталось по 5-6 мод, причем энергия затухающих гармоник диссилируется без передачи ее растущим. Амплитуды боковых мод, симметричных относительно центральной, соответственно равны. В дальнейшем при $t > 13$ в системе установился периодический режим с периодом равным семи временным единицам, на рис.10 представлена амплитуда огибающей волнового пакета.

ВЫВОДЫ

1. Построена математическая модель гравитационно стекающей трехмерной жидкой пленки при малых числах Рейнольдса в тепломассообменных процессах конденсации и испарения. В граничных условиях учтены силы поверхности вязкости, неоднородность поверхностного натяжения, постоянное касательное напряжение на поверхности раздела жидкость-газ. В рамках данной модели определены проекции скорости, давление трехмерной жидкой пленки.
2. Разработан метод расчета линейных волновых характеристик трехмерной жидкой пленки: частоты, инкремента, фазовой скорости. Проанализировано влияние силы тяжести, , поверхностного натяжения, поверхностной вязкости, постоянного касательного напряжения на волновые характеристики, положение кривых нейтральной устойчивости и максимальной скорости роста возмущений в условиях тепломассопереноса через поверхность раздела фаз.

3. Выведено нелинейное параболическое уравнение для амплитуды огибающей спектрально узкого волнового пакета при фазовых переходах на свободной поверхности трехмерной жидкой пленки. Коэффициенты уравнения получены в явном виде. Коэффициенты линейных членов уравнения выражены через волновые характеристики частоту, инкремент, а также их производные. В рамках полученного уравнения исследовано нелинейное взаимодействие мод волнового пакета и выявлены области устойчивости, в которой реализуются стационарные волновые течения.

4. Проанализировано влияние на неустойчивость Марангони нерастворимых поверхностно-активных веществ и постоянного касательного напряжения на поверхности трехмерной жидкой пленки. Получены зависимости для критических значений параметра Марангони при разрыве жидких пленок, а также при стабилизации их течений в области гидродинамической неустойчивости. Установлено, что реализация режима межфазной турбулентности связана с нелинейной зависимостью фазовой скорости от амплитуды.

5. Получена зависимость для переменной толщины неизотермической трехмерной жидкой пленки, учитывающая изменения, связанные с массопереходом через поверхность раздела. Исследовано влияние силы тяжести, постоянного касательного напряжения, поверхностной вязкости, неоднородности поверхностного натяжения, фазовых переходов на толщину жидкой пленки и форму волн.

6. Построена математическая модель нелинейного развития непериодических возмущений на поверхности трехмерной жидкой пленки. Исследовано влияние силы тяжести, постоянного касательного напряжения, поверхностной вязкости, термокапиллярных сил на развитие во времени локальных возмущений на свободной поверхности неизотермической жидкой пленки.

7. Разработан метод редукции систем уравнений в частных производных моделей автокатализитических реакций с диффузией к нелинейному

параболическому уравнению для амплитуды волны огибающей спектрально узкого волнового пакета. Выведено уравнение Гинзбурга-Ландау орегонатора с диффузионным типом связи между компонентами и брюсселятора при внешнем воздействии.

8. Определены области неустойчивости орегонатора, в которых проявляется дестабилизирующее влияние диффузии. В режиме диффузионной неустойчивости исследована временная эволюция волнового пакета, рассчитаны амплитуды гармоник, а также амплитуда огибающей волнового пакета. Показано формирование стационарной диссипативной структуры.

9. Найдены области существования колебательной неустойчивости и смены устойчивости для брюсселятора с диффузионным типом связи между компонентами и при внешнем воздействии. Разработана методика проведения численного эксперимента по моделированию неустойчивых режимов в брюсселяторе и изучена нелинейная эволюция возмущений при внешнем воздействии на систему.

ПУБЛИКАЦИИ ОСНОВНЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

1. Прокудина Л.А., Вяткин Г.П. Неустойчивость неизотермической жидкой пленки // Доклады РАН. - 1998. - Т. 362, - № 6. - С. 770-772.
2. Прокудина Л.А. Температурное поле тонкого слоя вязкой жидкости // Высокотемператур. расплавы. - 1996. - № 1.- С. 52-54.
3. Прокудина Л.А. Особенности течения жидких пленок в тепломассообменных аппаратах // Проблемы экологии Южного Урала. 1997.- № 4.- С. 8-10.
4. Прокудина Л.А., Вяткин Г.П. Волновое течение неизотермической жидкой пленки: Препр. - Челябинск: ЮУрГУ, 1998.- 42 с.

- 5.Прокудина Л.А. Неустойчивость жидких пленок при тепломассообмене // Материалы докладов 2-го международного симпозиума по энергетике, окружающей среде и экономике - Казань. 1998. Т. 1. С. 247-250.
- 6.Прокудина Л.А. Волновое течение жидкой пленки при тепломассопереносе // Труды Уральского семинара по неоднородным конструкциям. Изд-во УрО РАН Екатеринбург. 1998. С. 40-45.
- 7.Прокудина Л.А. Математическое моделирование неустойчивых режимов трехмерного течения жидких пленок // Известия Челябинского научного центра УрО РАН. - 1999. -№ 1. С. 1-5. www.sci.urg.ac.ru/news/
- 8.Прокудина Л.А. Диффузионная неустойчивость в системе бромат-церий-малоновая кислота // Известия Челябинского научного центра УрО РАН. - 1999. - № 2. www.sci.urg.ac.ru/news/
- 9.Прокудина Л.А., Вяткин Г.П. Гидродинамика и тепломассообмен нестационарных жидких пленок // В книге проблемы проектирования неоднородных конструкций. Труды ХУП Российской школы - Миасс: Миасский научно-учебный центр, 1998. С. 3-9.
- 10.Прокудина Л.А. Моделирование режима межфазной турбулентности на поверхности раздела газ- жидкость // В книге проблемы проектирования неоднородных конструкций. Труды ХУП Российской школы - Миасс: Миасский научно-учебный центр, 1998. С. 10-15.
- 11.Прокудина Л.А., Ковин С.Г. Математическая модель волнообразования на горячей поверхности // Динамика теплофиз. процессов: Сб.науч.тр. Челяб. политехн. ит-та. - Челябинск, 1991. - 8 с.
- 12.Прокудина Л.А. Граничные условия на поверхности тонкого слоя вязкой жидкости // Деп. в ВИНИТИ, № 3061-82. - Челябинск, 1982. - 13 с.
- 13.Елюхин В.А., Прокудина Л.А. Возникновение многомодовой турбулентности в гидродинамических системах с нелинейным перекрытием резонансов // Деп. в ВИНИТИ, № 561-84 Деп. - Челябинск, 1984. - 13 с.

- 14.Елюхин В.А. , Прокудина Л.А. Уравнение Гинзбурга-Ландау брюсселятора // Деп. в ВИНИТИ, № 6038 -В88. - Челябинск, 1988. - 18 с.
- 15.Елюхин В.А., Прокудина Л.А., Пушкарев А.А. Возникновение турбулентности в неустойчивых системах // Деп. в ВИНИТИ, № 8311-В88. - Челябинск, 1988. - 12 с.
- 16.Прокудина Л.А. Математическая модель течения жидкой пленки по нагретой поверхности // Деп. в ВИНИТИ, № 1675-В96. - Челябинск, 1996. - 10с.
- 17.Прокудина Л.А. Изменение режима колебаний в автокатализитических реакциях с диффузией // Деп. в ВИНИТИ, № 3501-В96. - Челябинск, 1996. - 10 с.
- 18.Прокудина Л.А., Вяткин Г.П. Влияние физико-химических факторов на устойчивость неизотермической жидкой пленки // III Российский сем. "Компьютерное моделирование физ.-хим. свойств стекол и расплавов". - Курган, 1996. - С. 77.
- 19.Прокудина Л.А. Численное исследование эволюции волнового пакета в неустойчивых системах // III Российский сем. "Компьютерное моделирование физ.-хим. свойств стекол и расплавов". - Курган, 1996. -С. 78.
- 20.Прокудина Л.А. Неустойчивость трехмерной жидкой пленки при фазовых превращениях // Деп. в ВИНИТИ, № 333-В97. - Челябинск, 1997. - 21 с.
- 21.Прокудина Л.А. Межфазная неустойчивость при гравитационном стекании жидких пленок в тепломассообменных процессах // Деп. в ВИНИТИ, № 1805-В97. - Челябинск, 1997. - 16 с.
- 22.Прокудина Л.А. Уравнение Гинзбурга-Ландау орегонатора // Деп. в ВИНИТИ, № 2784-В97. - Челябинск, 1997. - 12 с.
- 23.Прокудина Л.А. Нелинейное развитие возмущений на поверхности испаряющейся жидкой пленки // 4-ый Российский семинар по компьютерному моделированию физ.- хим. св-в стекол и расплавов. - Курган, 1998. С. 97.

- 24.Прокудина Л.А., Вяткин Г.П. Гидродинамика и тепломассообмен нестационарных жидких пленок // XVII Российская школа по проблемам проектирования неоднородных конструкций. - Миасс, 1998. С. 46.
- 25.Прокудина Л.А. Моделирование режима межфазной турбулентности на поверхности раздела газ-жидкость // XVII Российская школа по проблемам проектирования неоднородных конструкций. - Миасс, 1998. С. 47.
- 26.Прокудина Л.А. Моделирование неустойчивых течений жидких пленок в процессах тепломассообмена // 8-ая межвузовская научн. конф. "Математическое моделирование и краевые задачи" - Самара. 1998. С. 63-65.
- 27.Прокудина Л.А., Вяткин Г.П. Моделирование критических режимов течения жидких пленок // 4-ый Российский семинар по компьютерному моделированию физ.- хим. св-в стекол и расплавов. - Курган, 1998. С. 97-98.
- 28.Прокудина Л.А. Математическое моделирование неустойчивых режимов жидких пленок при тепло- массопереносе // XVI Международная школа-семинар по численным методам механики вязкой жидкости. - Новосибирск, 1998. <http://www.ict.nsc.ru/comp-tech/tesises/>

