

УДК 535.536

С.М. Апасов, А.Е. Каплинский

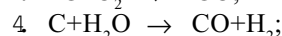
Математическая модель физико-химических процессов в окрестности частицы влажного углеродного аэрозоля в поле мощного лазерного излучения

Элементарный углерод является в настоящее время одним из основных компонентов атмосферного аэрозоля. Это связано как с деятельностью человека во всех областях, где используется органическое топливо, так и с некоторыми природными процессами (например, лесными пожарами после грозных разрядов). По данным, приведенным в обзоре К.Я. Кондратьева [1], даже над Атлантическим океаном общая масса аэрозоля в нижнем 3-километровом слое атмосферы примерно поровну делится между сульфатным и углеродным компонентами, а на верхней границе этого слоя около 90% полной массовой концентрации аэрозоля приходится именно на элементарный углерод, поскольку выпадающие осадки интенсивно вымывают из атмосферы сульфатные частицы и почти не влияют на концентрацию углеродных. Особенно велика роль углеродных частиц в ослаблении солнечной радиации в атмосфере. Так, в Мехико – одном из крупнейших городов мира – на их долю приходится до 50% полного ослабления света в приземном слое воздуха [2].

Низкопороговые нелинейные эффекты при распространении мощного лазерного излучения в твердом аэрозоле [3] дают возможность предложить отличающийся от уже известных методов лазерной дистанционной спектроскопии [4] косвенный метод обнаружения углерода по излучению свободного водорода, образующегося при реакции углерода с водяным паром, всегда присутствующим в атмосфере, в условиях интенсивного нагрева углеродной частицы мощным лазерным пучком [5]. В отличие от методов, использующих оптический разряд в аэрозоле, он требует на 3–4 порядка меньшей интенсивности лазерного пучка.

Физико-химические процессы на поверхности и вокруг углеродной частицы, нагреваемой мощным лазерным излучением, при наличии в воздухе, кроме кислорода, в качестве окислителя еще и водяного пара, были детально рассмотрены в исследовании [3]. В статье [6] рассмотрен один практически важный случай, когда концентрация кислорода на поверхности частицы становится столь малой, что зона горения водорода, выделяющегося при реакции углерода с водяным паром, отделяется от поверхности частицы. В этом случае принятая схема процесса из 6 химических реакций зна-

чительно упрощается: из нее исключаются 3 реакции с участием CO_2 , и, таким образом, эта схема становится следующей:



6. $2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$ (нумерация реакций совпадает с принятой в работах [3; 6]).

Полученные в статье [6] для этого случая результаты имеют очень наглядный физический смысл и подробно обсуждены в упомянутой работе. Однако выбранный для решения краевой задачи метод был слишком громоздким, что существенно усложнило процесс вычислений.

В настоящей работе приводятся результаты моделирования процесса горения частицы влажного углеродного аэрозоля в поле мощного лазерного излучения для этого же случая конечно-разностным методом [7].

Сохраняя те же обозначения, что и в предыдущих работах [3, 6], запишем в квазистационарном приближении систему уравнений, определяющих в окружающем частицу пространстве профили температуры $T(r)$ и парциальных давлений кислорода $P_1(r)$ и водорода $P_2(r)$, где r – расстояние от центра частицы:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \mu(T) \frac{dT(r)}{dr} \right) = - \frac{q_6 \alpha_6(T)}{kT(r)} \varphi(P_1, P_5);$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{D(T)}{kT(r)} \frac{dP_1(r)}{dr} \right) = \frac{\alpha_6(T)}{2kT(r)} \varphi(P_1, P_5);$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{D(T)}{kT(r)} \frac{dP_5(r)}{dr} \right) = \frac{\alpha_6(T)}{2kT(r)} \varphi(P_1, P_5) \quad (1)$$

с граничными условиями

$$r \rightarrow \infty : P_1(\infty) = P_{10}, P_5(\infty) = 0, T(\infty) = T_0.$$

$$r = a : T(a) = T_s, \quad \frac{dP_1(r)}{dr} = \frac{\alpha_1(T_s)}{D(T_s)} P_1(a),$$

$$\frac{dP_5(r)}{dr} = \frac{\alpha_4(T_s)}{D(T_s)} (2P_1(a) - P_{40}), \quad (2)$$

где α – радиус частицы; $P_1(r)$ и $P_5(r)$ – парциальные давления O_2 и H_2 ; $\mu(T)$ – коэффициент теплопроводности воздуха; $D(T)$ – коэффициент

диффузии воздуха; $\alpha_6(T)$ – константа скорости реакции 6; T_s – температура поверхности частицы; $\alpha_1(T)$ и $\alpha_4(T)$ – константы реакционного газообмена реакций 1 и 4 соответственно; q_6 – удельный тепловой эффект реакции 6; P_{10} и P_{40} – парциальные давления соответственно кислорода и паров воды в воздухе при $r \rightarrow \infty$,

$$\varphi(P_1, P_5) = \begin{cases} P_1, & P_1 < P_5, \\ P_5, & P_1 > P_5. \end{cases}$$

Функции $\mu(T)$, $D(T)$, $\alpha_1(T_s)$, $\alpha_4(T_s)$, $\alpha_6(T)$ известны [3].

Для удобства запишем систему уравнений (1) в безразмерных переменных:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left(\bar{\mu}(\theta) \frac{d\theta(x)}{dx} \right) &= - \frac{a^2 q_6 \bar{\alpha}_6(\theta) P_{10}}{k T_s^2 x^4 \theta(x)} \varphi(y_1, y_5) \\ \frac{d}{dx} \left(\frac{\bar{D}(\theta)}{\theta(x)} \frac{dy_1(x)}{dx} \right) &= \frac{a^2 \bar{\alpha}_6(\theta)}{2 x^4 \theta(x)} \varphi(y_1, y_5) \\ \frac{d}{dx} \left(\frac{\bar{D}(\theta)}{\theta(x)} \frac{dy_5(x)}{dx} \right) &= \frac{a^2 \bar{\alpha}_6(\theta)}{2 x^4 \theta(x)} \varphi(y_1, y_5) \quad (3) \end{aligned}$$

здесь

$$x = \frac{a}{r}, \quad \theta(x) = \frac{T(a/x)}{T_s}, \quad y_i(x) = \frac{P_i(a/x)}{P_{10}}, \quad h = \frac{P_{40}}{P_{10}}$$

Граничные условия (2) при этом примут следующий вид:

$$x = 0: y_1(0) = 1, y_5(0) = 0, \theta(0) = T_0/T_s;$$

$$x = 1: \theta(1) = 1 \frac{dy_1(1)}{dx} = - \frac{\alpha_1(T_s)}{D(T_s)} y_1(1);$$

$$\frac{dy_5(1)}{dx} = - \frac{2\alpha_4(T_s)}{D(T_s)} y_5(1) + \frac{h\alpha_4(T_s)}{D(T_s)}. \quad (4)$$

Для построения дискретного аналога задачи (3) – (4) введем сетку

$$\bar{\omega}_h = \{x_i = ih, i = 0, 1, \dots, N, h = 1/N\}.$$

Обозначая средние точки интервалов сетки полуцелыми индексами, выполним интегрирование первого из уравнений системы (3) по ячейке

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{d}{dx} \left(\bar{\mu}(\theta) \frac{d\theta(x)}{dx} \right) dx = -$$

$$- \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{a^2 q_6 \bar{\alpha}_6(\theta) P_{10}}{k T_s^2 x^4 \theta(x)} \varphi(y_1, y_5) dx.$$

Считая $\theta(x)$, $y_1(x)$, $y_5(x)$ постоянными на отрезке и совпадающими со своими значениями в точке вычислим интеграл, стоящий в правой части равенства

$$\begin{aligned} - \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{a^2 q_6 \bar{\alpha}_6(\theta) P_{10}}{k T_s^2 x^4 \theta(x)} \varphi(y_1, y_5) dx &\approx \\ \approx \frac{a^2 q_6 \bar{\alpha}_6(\theta) P_{10} \varphi(y_1, y_5)}{3 k T_s^2 \theta(x)} \left(\frac{1}{x_{i+1/2}^3} - \frac{1}{x_{i-1/2}^3} \right) \end{aligned}$$

интегрирование левой части проведем следующим образом:

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{d}{dx} \left(\bar{\mu}(\theta) \frac{d\theta(x)}{dx} \right) dx = \bar{\mu}(\theta) \frac{d\theta(x)}{dx} \Big|_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}},$$

заменяя производные разностями и полагая

$$\bar{\mu}_{i\pm 1/2} = \frac{2\bar{\mu}(\theta_{i\pm 1})\bar{\mu}(\theta_i)}{\bar{\mu}(\theta_{i+1}) + \bar{\mu}(\theta_i)}, \text{ получим}$$

$$\bar{\mu}(\theta) \frac{d\theta(x)}{dx} \Big|_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \approx \bar{\mu}_{i+1/2} \frac{\theta_{i+1} - \theta_i}{h_i} - \bar{\mu}_{i-1/2} \frac{\theta_i - \theta_{i-1}}{h_{i-1}},$$

где $h_i = x_{i+1} - x_i$. Таким образом, получим нелинейную разностную схему

$$\begin{aligned} \frac{\bar{\mu}_{i-1/2}}{h_{i-1}} \theta_{i-1} - \left(\frac{\bar{\mu}_{i-1/2}}{h_{i-1}} + \frac{\bar{\mu}_{i+1/2}}{h_i} \right) \theta_i + \frac{\bar{\mu}_{i+1/2}}{h_i} \theta_{i+1} &= \\ = \frac{a^2 q_6 \bar{\alpha}_6(\theta_i) P_{10} \varphi(y_{1i}, y_{5i})}{3 k T_s^2 \theta_i} \left(\frac{1}{x_{i+1/2}^3} - \frac{1}{x_{i-1/2}^3} \right) \end{aligned}$$

Для отыскания решения этого разностного уравнения используем итерационный метод:

$$\begin{aligned} \frac{\bar{\mu}_{i-1/2}}{h_{i-1}} \theta_{i-1}^{S+1} - \left(\frac{\bar{\mu}_{i-1/2}}{h_{i-1}} + \frac{\bar{\mu}_{i+1/2}}{h_i} \right) \theta_i^{S+1} + \frac{\bar{\mu}_{i+1/2}}{h_i} \theta_{i+1}^{S+1} &= \\ = \frac{a^2 q_6 \bar{\alpha}_6(\theta_i^S) P_{10} \varphi(y_{1i}^S, y_{5i}^S)}{3 k T_s^2 \theta_i^S} \left(\frac{1}{x_{i+1/2}^3} - \frac{1}{x_{i-1/2}^3} \right) \end{aligned}$$

Проводя аналогичные действия с остальными уравнениями (3), получим систему линейных разностных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\mu_{i-1/2}^{S+1}}{h_{i-1}} \theta_{i-1}^{S+1} - \left(\frac{\mu_{i-1/2}^{S+1}}{h_{i-1}} + \frac{\mu_{i+1/2}^{S+1}}{h_i} \right) \theta_i^{S+1} + \frac{\mu_{i+1/2}^{S+1}}{h_i} \theta_{i+1}^{S+1} = \\ = \frac{a^2 q_6 \bar{\alpha}_6(\theta_i^S) P_{10} \varphi(y_{1i}^S, y_{5i}^S)}{3kT_S^2 \theta_i^S} \left(\frac{1}{x_{i+1/2}^3} - \frac{1}{x_{i-1/2}^3} \right) \\ \frac{D_{i-1/2}^{S+1}}{h_{i-1}} y_{1i-1}^{S+1} - \left(\frac{D_{i-1/2}^{S+1}}{h_{i-1}} + \frac{D_{i+1/2}^{S+1}}{h_i} \right) y_{1i}^{S+1} + \frac{D_{i+1/2}^{S+1}}{h_i} y_{1i+1}^{S+1} = \\ = \frac{a^2 \bar{\alpha}_6(\theta_i^S) \varphi(y_{1i}^S, y_{5i}^S)}{6\theta_i^S} \left(\frac{1}{x_{i-1/2}^3} - \frac{1}{x_{i+1/2}^3} \right) \\ \frac{D_{i-1/2}^{S+1}}{h_{i-1}} y_{5i-1}^{S+1} - \left(\frac{D_{i-1/2}^{S+1}}{h_{i-1}} + \frac{D_{i+1/2}^{S+1}}{h_i} \right) y_{5i}^{S+1} + \frac{D_{i+1/2}^{S+1}}{h_i} y_{5i+1}^{S+1} = \\ = \frac{a^2 \bar{\alpha}_6(\theta_i^S) \varphi(y_{1i}^S, y_{5i}^S)}{6\theta_i^S} \left(\frac{1}{x_{i-1/2}^3} - \frac{1}{x_{i+1/2}^3} \right) \quad (5) \end{aligned}$$

Граничные условия (4) примут вид

$$\theta_0^{S+1} = T_0/T_S, y_{10}^{S+1} = 1, y_{50}^{S+1} = 0;$$

$$\theta_N^{S+1} = 1, y_{1N}^{S+1} \left(\frac{h_{N-1} \alpha_1(T_S)}{D(T_S)} + 1 \right) - y_{1N-1}^{S+1} = 0;$$

$$y_{5N}^{S+1} \left(\frac{2h_{N-1} \alpha_4(T_S)}{D(T_S)} + 1 \right) - y_{5N-1}^{S+1} = \frac{h \alpha_4(T_S)}{D(T_S)} \quad (6)$$

Здесь

$$\frac{D_{i+1/2}^{S+1}}{h_{i+1/2}} = \left(2 \frac{\bar{D}(\theta_{i+1/2}^S) \bar{D}(\theta_i^S)}{\theta_{i+1/2}^S \theta_i^S} \right) / \left(\frac{\bar{D}(\theta_{i+1/2}^S)}{\theta_{i+1/2}^S} + \frac{\bar{D}(\theta_i^S)}{\theta_i^S} \right),$$

$\theta_i^{S+1}, y_{1i}^{S+1}, y_{5i}^{S+1}$ – значения $(S+1)$ -й итерации функций θ_i, y_{1i}, y_{5i} . Значения $\theta_i^{S+1}, y_{1i}^{S+1}, y_{5i}^{S+1}$ находятся методом прогонки [7].

Результаты решения для $a = 1 \cdot 10^{-6} \text{ м}$, $T_S = 3000 \text{ К}$, $T_0 = 353 \text{ К}$ относительной влажности воздуха $f = 1$ приведены на рисунках 1, 2 (график а).

Для сравнения на этих же рисунках приведены графики, полученные ранее в работе [6]

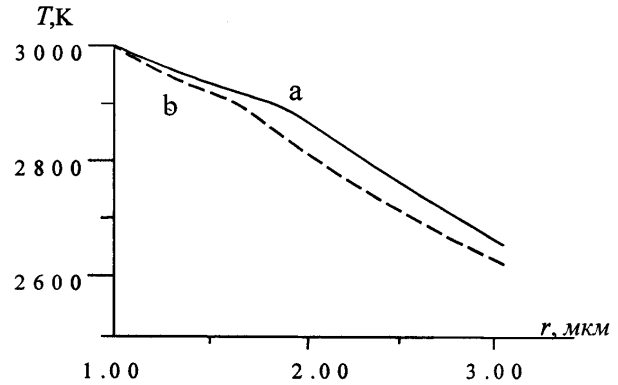


Рис. 1. Температурное поле вокруг горячей частицы

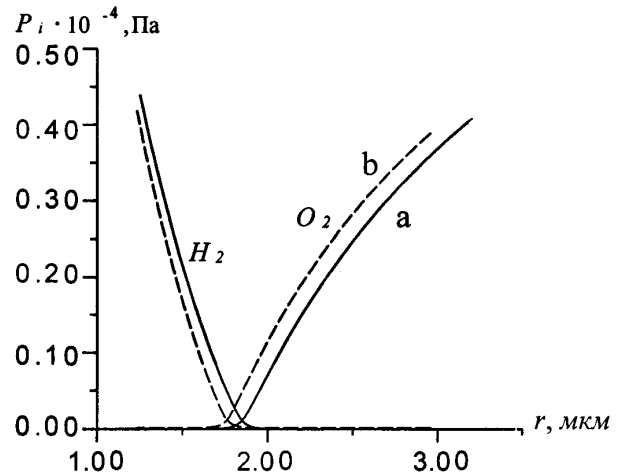


Рис. 2. Профили парциальных давлений реагентов

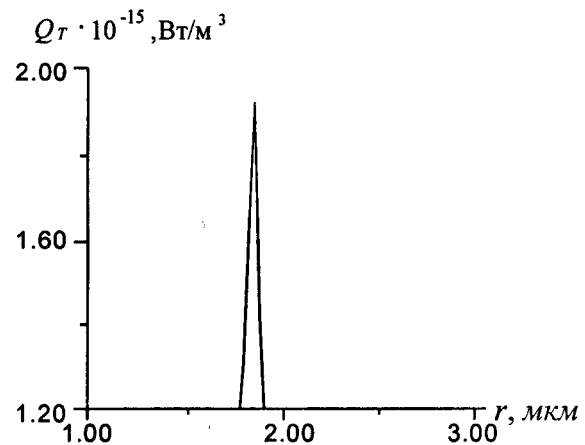


Рис. 3. Объемная плотность тепловых источников в пространстве

для тех же значений параметров процесса (график b).

Из рисунков видно, что наблюдается качествен-

ное согласие результатов расчета с полученными ранее. Имеющиеся количественные отличия можно объяснить тем, что в [6] применялся метод решения, не подходящий для такого класса задач.

Понижение порядка системы (3), как это было сделано в статье [6], приводит к системе «жестких» уравнений первого порядка, применение метода Рунге-Кутты к такой системе можно осуществить только при достаточно малом шаге h [8]. Кроме того, для удовлетворения краевых условий в [6] был построен довольно громоздкий алгоритм, что существенно усложняет счет.

Характерный «горб» на кривой (рис. 1) объясняется, как и в [6], наличием тепловых

источников, расположенных в тонком слое, отстоящем от поверхности частицы в данном случае на расстоянии около 0,8 мкм. Именно в этой области, как видно из рисунка 2, парциальные давления близки друг к другу, что с учетом стехиометрии реакции 6 и приводит к наиболее интенсивному тепловыделению в данной области. Это подтверждается тем, что объемная плотность тепловых источников, рассчитанная как правая часть первого уравнения системы (1), имеет вид резкого пика в области гомогенной реакции (рис. 3).

Авторы выражают благодарность доценту С.С. Кузикову за помощь в построении алгоритма численных расчетов.

Литература

1. Кондратьев К.Я. Некоторые результаты и перспективы дистанционного зондирования тропосферного аэрозоля // Исследование Земли из космоса. 1998. №5.
2. Bravo H., Saavedra R.M.I., Torres J.R., Lomas A.G. Particulate carbon, a significant contributor to the visibility reduction in Mexico City // Geophys. Int. 1988. V. 27. №2.
3. Букатый В.И., Суторихин И.А., Каплинский А.Е., Шайдук А.М. Нелинейное взаимодействие лазерного излучения с твердым антропогенным аэрозолем. Барнаул, 1996.
4. Зуев В.Е., Землянов А.А., Копытин Ю.Д. Нелинейная оптика атмосферы. Л., 1989.
5. Апасов С.М., Каплинский А.Е., Суторихин И.А. Селективное выделение углеродной компоненты антропогенного аэрозоля нелинейно-оптическими методами // IV Заседание Рабочей группы проекта «Аэрозоли Сибири»: Тезисы докладов. Томск, 1997.
6. Букатый В.И., Каплинский А.Е., Суторихин И.А. Об одном режиме горения частицы влажного углеродного аэрозоля в поле мощного лазерного излучения // Физика горения и взрыва. 1992. Т. 28. №1.
7. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. М., 1978.
8. Вычислительные процессы и системы / Под. ред. Г.И. Марчука. Вып. 8. М., 1991.