

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ НЕКОТОРЫХ ПАРАМЕТРОВ НА ДИФФУЗИОННУЮ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ В НЕКОТОРЫХ ТРЕХКОМПОНЕНТНЫХ ГАЗОВЫХ СМЕСЯХ В ЦИЛИНДРИЧЕСКОМ КАНАЛЕ

АННОТАЦИЯ

Получены выражения для распределения концентраций компонентов в цилиндрическом канале при граничных условиях, предполагающих исчезновение скорости и отсутствие переноса компонентов через стенки канала. Для конкретных изотермических трехкомпонентных газовых смесей проведен расчет по определению областей существования устойчивой и неустойчивой диффузии на плоскости чисел Рэлея при варьировании давления, температуры, длины и радиуса диффузионного канала, а также исходных составов смеси. Показано, что полученные теоретические результаты хорошо согласуются с экспериментом.

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение диффузии в многокомпонентных газовых смесях связано с необходимостью определения характера режима смешения, то есть будет ли он происходить на молекулярном уровне (устойчивая диффузия) или могут возникнуть конвективные потоки (неустойчивая диффузия).

Устойчивое протекание диффузии в многокомпонентных газовых смесях характеризуется тем, что на собственно диффузионные потоки компонентов накладывается гидродинамический поток, который образуется за счет бароэффекта [1, 2].

Впервые неустойчивый диффузионный процесс был описан [3,4]. Для характеристики процесса авторы указанных работ использовали специальный термин “double diffusion convection”. Иногда эту особенность называют также гравитационной неустойчивостью механического равновесия или аномальной гравитационной концентрационной конвекцией. На возникновение неустойчивого диффузионного процесса оказывают существенное влияние термодинамические параметры (давление, температура, вязкость) и геометрические характеристики канала (длина и радиус).

В данной работе представлена математическая модель диффузионной неустойчивости в трехкомпонентных газовых смесях для цилиндрического канала конечной длины при отсутствии скорости и переноса компонентов через стенки канала.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАССМАТРИВАЕМОЙ ЗАДАЧИ

Класс задач, связанный с концентрационной изотермической конвекцией, в частности с движением газовой трехкомпонентной смеси при наличии

пространственной неоднородности, вызванной неоднородностью состава в поле силы тяжести, описывается системой уравнений гидродинамики, которая включает в себя уравнение движения Навье-Стокса и уравнения сохранения числа частиц смеси и компонентов [5]:

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \nabla) \vec{u} \right] = -\nabla p + \eta \Delta \vec{u} + \left(\frac{\eta}{3} + \xi \right) \nabla \operatorname{div} \vec{u} + \rho \vec{g},$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\operatorname{div}(n \vec{v}), \quad (1)$$

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} + \vec{v} \nabla c_1 = \operatorname{div}[D_{11}^* \nabla c_1 + D_{12}^* \nabla c_2],$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} + \vec{v} \nabla c_2 = \operatorname{div}[D_{21}^* \nabla c_1 + D_{22}^* \nabla c_2].$$

Уравнения (1) дополняются уравнением состояния среды

$$\rho = \rho(c_1, c_2, p), T = \text{const}, \quad (2)$$

которое связывает термодинамические параметры.

При решении системы уравнений (1), (2) применялся метод малого параметра [6]. Учитывая, что $L \gg d/2$ (L — длина диффузионного канала, d — диаметр), различия между среднечисловой скоростью \vec{v} и среднемассовой \vec{u} в уравнении Навье-Стокса и непрерывности будут несущественны [5], окончательная система уравнений гравитационной концентрационной конвекции для возмущенных значений в безразмерных величинах имеет вид [7]:

$$P_{22} \frac{\partial c_1}{\partial t} - (\vec{u} \nabla) c_1 = \tau_{11} \nabla^2 c_1 + \frac{A_2}{A_1} \tau_{12} \nabla^2 c_2,$$

$$P_{22} \frac{\partial c_2}{\partial t} - (\vec{u} \nabla) c_2 = \frac{A_1}{A_2} \tau_{21} \nabla^2 c_1 + \nabla^2 c_2, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = -\nabla p + \nabla^2 \vec{u} + (R_1 \tau_{11} c_1 + R_2 c_2) \vec{\gamma},$$

$$\operatorname{div} \vec{u} = 0.$$

Экспериментальные исследования проводились с диффузионным каналом конечной длины, в котором существенны трехмерные движения. Поэтому при аппроксимации скорости следует считать все компоненты вектора \vec{u} отличными от нуля. Рассматривая в цилиндрической системе координат периодические по φ движения и удовлетворяя условиям на твердых границах $z = \pm h$, можно записать аппроксимацию скорости в виде [8]:

$$\begin{aligned}
u_z &= \frac{1}{4} (h^2 - z^2)^2 u(r) \cos n\varphi, \\
u_r &= z (h^2 - z^2) v(r) \cos n\varphi, \\
u_\varphi &= z (h^2 - z^2) \omega(r) \sin n\varphi \\
(n &= 0, 1, 2, \dots).
\end{aligned} \tag{4}$$

Радиальные функции u, v, ω должны обращаться в нуль на твердой боковой поверхности цилиндра (при $r=1$). Из уравнения непрерывности следует соотношение, которое связывает эти функции:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{r} \frac{d}{dr} (rv) + \frac{n}{r} \omega - u &= 0. \\
\text{Причем} \\
u &= \frac{J_n(kr)}{J_n(k)} - r^n, \\
v &= -\frac{1}{kJ_n(k)} [J_n'(kr) - J_n'(k)r^{n+1}], \\
\omega &= \frac{n}{k^2 J_n(k)} \left[\frac{1}{r} J_n(kr) - J_n(k)r^{n+1} \right],
\end{aligned} \tag{5}$$

где $J_n(kr)$ — функция Бесселя n -го порядка, а параметр k находится из уравнения

$$kJ_n''(k) = (n+1)J_n'(k). \tag{6}$$

Полагая для первых двух уравнений (3), что $\frac{\partial c_i}{\partial t} = 0$, найдем концентрации компонентов из уравнений:

$$\begin{aligned}
\nabla^2 c_1 &= -u_z K_i, \\
i &= 1, 2,
\end{aligned}$$

$$\text{где } K_1 = \frac{\left(1 - \frac{A_2}{A_1} \tau_{12}\right)}{(\tau_{11} - \tau_{12} \tau_{21})}, K_2 = \frac{\left(\tau_{11} - \frac{A_1}{A_2} \tau_{21}\right)}{(\tau_{11} - \tau_{12} \tau_{21})}.$$

Будем считать, что $c_i = f_i(r, z) \cos n\varphi$, тогда

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 f_i}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial f_i}{\partial r} - \frac{n^2}{r^2} f_i + \frac{\partial^2 f_i}{\partial z^2} &= \\
= -\frac{1}{4} \left[\frac{J_n(kr)}{J_n(k)} - r^n \right] (h^2 - z^2)^2 K_i.
\end{aligned} \tag{7}$$

Считая, что на торцевых поверхностях исчезают возмущения концентраций, из (7) вытекают дополнительные условия — обращение в нуль второй производной $\frac{\partial^2 f_i}{\partial z^2}$ на торцах диффузионного канала. Таким образом, имеем условия

$$\text{при } z = \pm h \quad f_i = 0, \frac{\partial^2 f_i}{\partial z^2} = 0. \tag{8}$$

Эти условия позволяют выбрать следующую аппроксимацию:

$$f_i(r, z) = (h^2 - z^2)(5h^2 - z^2)C_i(r), \tag{9}$$

где $C_i(r)$ — радиальная функция концентрации.

Для определения $C_i(r)$ применим метод Канторовича, подставляя (9) в (7), умножая на зависящую от z часть функции $f_i(r, z)$ и интегрируя в пределах от $-h$ до h , получим уравнения:

$$\begin{aligned}
C_i'' + \frac{1}{r} C_i' - \left(\frac{n^2}{r^2} + \alpha^2 \right) C_i &= \\
= -\frac{11}{248} \left[\frac{J_n(kr)}{J_n(k)} - r^n \right] K_i,
\end{aligned} \tag{10}$$

где $\alpha^2 = \frac{153}{62h^2}$, $i = 1, 2$.

При нахождении концентраций компонентов уравнения (10) решались с граничным условием

$$\left. \frac{\partial C_i}{\partial r} \right|_{r=1} = 0, \text{ тогда конечное в центре решение име-}$$

ет вид:

$$\begin{aligned}
c_i &= \frac{11K_i (h^2 - z^2)(5h^2 - z^2) \cos n\varphi}{248\alpha^2 (k^2 + \alpha^2)} \left[\alpha^2 \frac{J_n(kr)}{J_n(k)} + \right. \\
&+ \left. \frac{I_n(\alpha r)}{\alpha I_n(\alpha)} \left\{ n(\alpha^2 + k^2) - \alpha^2 k \frac{J_n'(k)}{J_n(k)} \right\} - (k^2 + \alpha^2) r^n \right]. \tag{11}
\end{aligned}$$

Решение системы уравнений (3) позволяет определить фазовую граничную линию в координатах (R_1, R_2) , разграничивающих области монотонных и колебательных возмущений.

Для определения границы монотонной устойчивости рассматриваемой задачи умножим скалярно третье уравнение системы (3) на вектор \vec{u} и проинтегрируем по всему объему V диффузионного канала при условиях, что $\nabla p = 0, \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = 0$:

$$\begin{aligned}
\int \vec{u} \nabla^2 \vec{u} dV + R_1 \tau_{11} \int u_z c_1 dV + \\
+ R_2 \int u_z c_2 dV = 0.
\end{aligned} \tag{12}$$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

3.1. Влияние давления и критические параметры перехода «диффузия — конвекция»

Давление является важной характеристикой массообмена в многокомпонентных системах. Увеличение давления может привести к нарушению устойчивого диффузионного процесса и к возникновению конвекции.

Для теоретического исследования влияния давления была выбрана хорошо изученная экспериментально система $0,3\text{He}+0,7\text{Ar}-\text{N}_2$. В расчетах давление варьировалось от 0,46 до 2,06 МПа. Эксперименты показали, что для данной системы переход от диффузионного смешения к конвективному происходит при давлении 1,07 МПа [9]. Для сравнения теоретических и опытных данных парциальные

числа Рэлея в применении к диффузионному каналу с диаметром d и длиной L вычислялись по следующим формулам [5]:

$$R_1 = \frac{gnd^4 \Delta m_1}{16\rho v D_{11}^*} \cdot \frac{\partial c_1}{\partial z}, R_2 = \frac{gnd^4 \Delta m_2}{16\rho v D_{22}^*} \cdot \frac{\partial c_2}{\partial z},$$

$$\Delta c_1 = c_{11} - c_{12}, \Delta c_2 = c_{21} - c_{22},$$

$$\Delta m_1 = m_1 - m_3, \Delta m_2 = m_2 - m_3.$$

На рис. 1 изображено взаимное расположение линий монотонной неустойчивости, полученных для вертикального цилиндра конечной высоты, линия 1, и для плоского вертикального слоя, линия 2. Согласно рис. 1 точка, соответствующая давлению 1,07 МПа, очень близко расположена относительно линии 1, а эта же точка, вычисленная в линейном приближении, лежит выше линии 1. То есть если рассматривать полученные результаты относительно линии 1, то данные этого расчета достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными, представленными в [9].

Согласно рис. 1 увеличение давления приводит к потере устойчивости диффузионного процесса и делает возможным переход системы в область неустойчивости, что очень хорошо согласуется с экспериментальными данными.

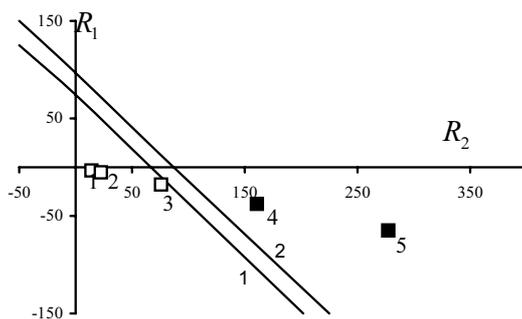


Рис. 1. Области устойчивой и неустойчивой диффузии для системы $0,3\text{He}+0,7\text{Ar}-\text{N}_2$: □, ■ — числа Рэлея с учетом градиента концентрации при $z = L$, темные точки — конвективное смещение, светлые — диффузионное. Вариации параметра осуществлялись изменением давления и составили: 1 — $p = 0,46$, 2 — $0,57$, 3 — $1,07$, 4 — $1,57$, 5 — $2,07$ МПа

3.2. Влияние диаметра диффузионного канала на процесс смешения

Диаметр диффузионного канала также оказывает влияние на диффузионную неустойчивость.

Нами было проведено расчетно-теоретическое исследование влияния диаметра канала на неустойчивый диффузионный процесс для системы $0,475\text{He}+0,525\text{Ar}-\text{N}_2$. Данное исследование показало, что уменьшение диаметра канала приводит к стабилизации неустойчивого процесса, а его увеличение способствует переходу системы в неустойчивое состояние, что хорошо согласуется с экспериментальными результатами, представленными в

[10]. Необходимо отметить, что данной системе при различных термодинамических параметрах, в частности давлении, соответствует своя интенсивность процесса для каждого диаметра канала. Если диаметр канала превышает критическое значение, то происходит наложение на молекулярный перенос конвективных течений, делающих диффузионный процесс неустойчивым.

На рис. 2 представлена зависимость диаметра диффузионного канала от давления. Эта зависимость была получена при совместном решении уравнения (12) и уравнения радиальной прямой заданного отношения R_1/R_2 при фиксированном диаметре (брались следующие значения диаметра: 2,7; 3,2; 4,1; 6; 6,3 мм) и варьировании давления от 1 до 5 МПа. Область, расположенная ниже полученной линии, соответствует устойчивой диффузии, а область выше данной линии — неустойчивой диффузии. Согласно рисунку, чем меньше диаметр канала, тем больше давление, при котором система переходит в область неустойчивой диффузии. На этом же рисунке изображены экспериментальные точки. Согласно экспериментальным данным, точка, соответствующая диаметру 2,7 мм, характеризует устойчивое состояние и на данном рисунке лежит ниже линии, определяющей зависимость диаметра канала от давления. Все остальные точки, определяющие неустойчивое состояние, лежат выше рассматриваемой линии. Таким образом, полученная нами зависимость достаточно хорошо согласуется с экспериментом.

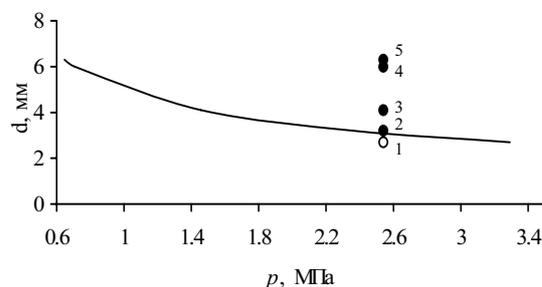


Рис. 2. Влияние диаметра канала на режим смешения для системы $0,475\text{He} + 0,525\text{Ar} - \text{N}_2$ при $p = 2,54$ МПа и $T = 298$ К: точки соответствуют диаметрам канала: 1 — $d = 2,7$; 2 — $3,2$; 3 — $4,1$; 4 — 6 ; 5 — $6,3$ мм; ○, ● — устойчивая и неустойчивая диффузия соответственно; сплошная линия — граница перехода от диффузионного смешения к конвекции

3.3. Влияние температуры

Как показали экспериментальные исследования, характер процесса смешения зависит от температуры [11]. Из экспериментальных данных следовало, что неустойчивый диффузионный процесс с повышением температуры стремится к устойчивому, а понижение температуры может вызвать у диффузионно-устойчивой системы переход в неустойчивое состояние.

Для теоретического исследования влияния температуры на устойчивость диффузионного переноса

нами были взяты системы $0,4688 \text{ He} + 0,5312 \text{ Ar-N}_2$, $0,6463 \text{ H}_2 + 0,3537 \text{ N}_2\text{-CH}_4$, рассмотренные в [11]. На рис. 3 на плоскости чисел Рэлея приведены теоретические точки, соответствующие эксперименту. Здесь же отображены линии монотонной неустойчивости для данных систем.

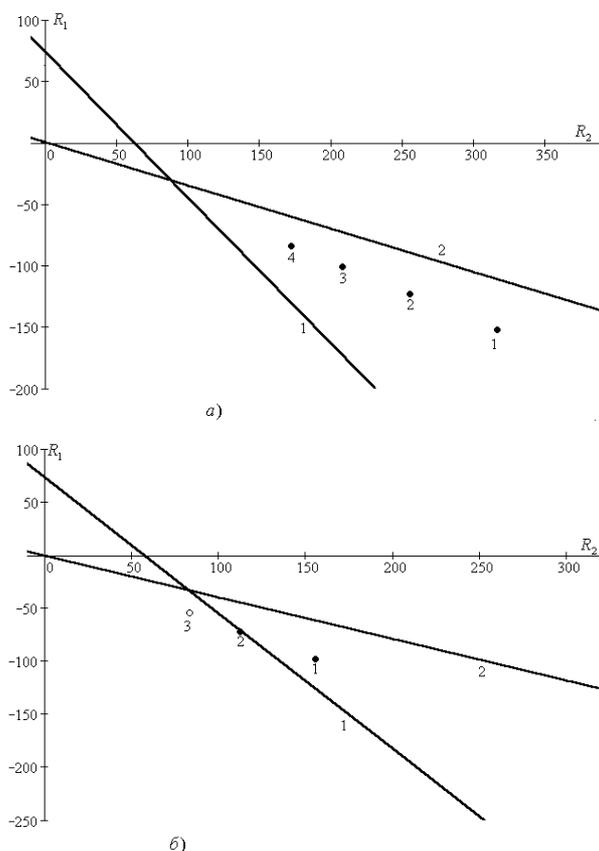


Рис. 3. Области устойчивой и неустойчивой диффузии для тройных смесей: ○, ● — данные, определяющие устойчивое и неустойчивое состояния; 1 — линия монотонных возмущений; 2 — линия нулевого градиента плотности. Системы: а — $0,4688 \text{ He} + 0,5312 \text{ Ar-N}_2$; б — $0,6463 \text{ H}_2 + 0,3537 \text{ N}_2\text{-CH}_4$. Изменение температуры: а) 1 — $T = 293$, 2 — 313, 3 — 333, 4 — 353 К; б — 1 — $T = 293$, 2 — 323, 3 — 353 К

Из рис. 3, а следует, что все теоретические точки находятся в области неустойчивости. Из рисунка видно, что с увеличением температуры значения чисел Рэлея уменьшаются, то есть система стабилизируется, что согласуется с экспериментом [11]. Данные на рис. 3, б свидетельствуют о том, что в этой системе наблюдается переход от устойчивого к неустойчивому режиму смешения при температуре 323 К. Таким образом, результаты расчета хорошо описывают экспериментальные данные [11].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенная математическая модель определения областей устойчивой и неустойчивой диффузии в трехкомпонентных газовых смесях, учитывающая отсутствие скорости и переноса компонентов через стенки цилиндрического канала находится в согласии с экспериментальными данными.

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

- A_i — безразмерный градиент концентрации;
- c_i — концентрация i -го компонента;
- D_{ij}^* — практические коэффициенты диффузии;
- d — диаметр канала;
- \bar{g} — ускорение силы тяжести;
- L — длина капилляра;
- m_i — масса молекулы i -го компонента;
- n — мода возмущений, числовая плотность;
- p — давление;
- P_{ii} — диффузионное число Прандтля;
- R_i — числа Рэлея;
- T — температура;
- \bar{u} — среднемассовая скорость;
- \bar{v} — единичный вектор;
- η — динамическая сдвиговая вязкость;
- ξ — объемная вязкость;
- ν — кинематическая вязкость;
- \bar{v} — среднечисловая скорость;
- τ_{ij} — параметр, определяющий соотношение между практическими коэффициентами диффузии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Суетин П.Е., Волобуев П.В. Бароэффект при взаимной диффузии газов // ЖТФ. 1964. Т. 34. № 6. С. 1107—1114.
2. Исследование диффузионного бароэффекта некоторых трехкомпонентных газовых смесей / Б.М. Адибаев, З.И. Новосад // Прикладная и теоретическая физика. Алма-Ата: Изд-во КазГУ, 1977. Вып. 9. С. 35—43.
3. О неустойчивости трехкомпонентной диффузии / Б.А. Ивакин, П.И. Суетин, Г.С. Харин // Труды УПИ. Свердловск, 1969. № 172. С. 154—156.
4. Miller L., Mason E.A. Oscillating instabilities in multi-component diffusion // Phys. Fluids. 1966. Vol. 9. № 4. P. 711—721.
5. Косов В.Н., Селезнев В.Д. Аномальное возникновение свободной гравитационной конвекции в изотермических тройных газовых смесях. Екатеринбург: УрО РАН, 2004. 149 с.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Том VI. Гидродинамика. М.: Наука, 1986. 733 с.
7. Жаврин Ю.И., Косов В.Н. Концентрационная конвекция и диффузионная устойчивость в изотермических трехкомпонентных газовых смесях // Доклады АН РК. 1996. № 3. С. 22—28.
8. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.
9. Жаврин Ю.И., Косов В.Н., Кульжанов Д.У., Каратаева К.К. Экспериментальное определение границы монотонных возмущений при неустойчивости механического равновесия в трехкомпонентных газовых смесях // ИФЖ. 2002. Т. 75. № 4. С. 80—83.
10. Косов В.Н., Жаврин Ю.И. Экспериментальное исследование на диффузионную устойчивость изотермических трехкомпонентных газовых систем // Изв. АН КазССР, сер. физ.-мат. 1990. № 2. С. 66—69.
11. Жаврин Ю.И., Косов В.Н. Влияние температуры на процесс диффузионной неустойчивости // ИФЖ. 1988. Т. 55. № 1. С. 92—97.