

01

# Неустойчивость механического равновесия при диффузии в трехкомпонентной газовой смеси в вертикальном цилиндре кругового сечения

© В.Н. Косов, О.В. Федоренко, Ю.И. Жаврин, В. Мукамеденкызы

Научно-исследовательский институт экспериментальной и теоретической физики при Казахском национальном университете им. аль-Фараби, 050038, Алматы, Казахстан  
e-mail: kosov\_vlad\_nik@list.ru

(Поступило в Редакцию 17 декабря 2012 г. В окончательной редакции 23 августа 2013 г.)

Рассмотрена задача о возникновении неустойчивости механического равновесия трехкомпонентной газовой смеси при диффузии в вертикальном канале с массонепроницаемыми для потока вещества стенками в случае, когда канал имеет форму кругового сечения. Найдены критические числа Рэлея, в аналитическом виде определены нейтральные линии устойчивости. Проведено сравнение с экспериментальными данными.

## Введение

Опытные исследования диффузионного смешения многокомпонентных газовых систем показали, что в них при определенных условиях может иметь место неустойчивость механического равновесия смеси с последующим возникновением гравитационной концентрационной конвекции [1–6]. Описание такого типа задач, связанных с возникновением конвективных течений, возможно в рамках теории устойчивости [7,8]. Основные закономерности такого подхода были получены для случаев, описывающих тепловую конвекцию несжимаемых однокомпонентных [7,9] или двухкомпонентных жидкостей [10]. В настоящей работе формализм [7–11] распространен на диффузионное смешение изотермических тройных газовых смесей в канале, имеющем форму цилиндра кругового сечения с непроницаемыми для потока вещества стенками.

## 1. Основные уравнения

Макроскопическое движение изотермической тройной газовой смеси описывается общей системой уравнений гидродинамики, которая включает в себя уравнения Навье–Стокса, сохранения числа частиц смеси и компонентов. Принимая во внимание условие независимой диффузии, при которой для изотермической газовой смеси  $\sum_{i=1}^3 \mathbf{j}_i = 0$ ,  $\sum_{i=1}^3 c_i = 1$ , эта система уравнений имеет следующий вид [7,12]:

$$\rho \left[ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \nabla \mathbf{u}) \right] = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \left( \frac{\eta}{3} + \xi \right) \nabla \operatorname{div} \mathbf{u} + \rho \mathbf{g},$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \operatorname{div}(n\mathbf{v}) = 0, \quad \frac{\partial c_i}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla c_i = -\operatorname{div} \mathbf{j}_i,$$

$$\mathbf{j}_1 = -(D_{11}^* \nabla c_1 + D_{12}^* \nabla c_2),$$

$$\mathbf{j}_2 = -(D_{21}^* \nabla c_1 + D_{22}^* \nabla c_2). \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{u}$  — вектор среднemasсовой скорости,  $\mathbf{v}$  — вектор среднечисловой скорости,  $\rho$  — плотность,  $p$  — давление,  $\eta$  и  $\xi$  — коэффициенты сдвиговой и объемной вязкостей,  $\mathbf{g}$  — вектор ускорения свободного падения,  $n$  — числовая плотность,  $t$  — время,  $c_i$  — концентрация  $i$ -го компонента,  $\mathbf{j}_i$  — вектор плотности диффузионного потока  $i$ -го компонента,  $D_{ij}^*$  — практические коэффициенты диффузии, которые определяются через коэффициенты взаимной диффузии (КВД) [13].

Уравнения (1) дополняются уравнением состояния среды

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

При решении системы уравнений (1) применялся метод малых возмущений [7], который предполагал концентрацию  $i$ -го компонента  $c_i$  и давление  $p$  представить следующим образом:

$$c_i = \langle c_i \rangle + c_i', \quad p = \langle p \rangle + p',$$

где  $\langle c_i \rangle$ ,  $\langle p \rangle$  — постоянные средние значения, принимаемые в качестве начала отсчета.

Учитывая, что при  $L \gg r$  ( $L$  и  $r$  — длина и радиус диффузионного канала соответственно) различия между возмущениями среднечисловой  $\mathbf{v}$  и среднemasсовой  $\mathbf{u}$  скоростей в уравнении Навье–Стокса будут несущественны [12], а также предполагая, что нестационарные возмущения механического равновесия малы, пренебрегая квадратичными по возмущениям членами, и выбирая соответствующие масштабы единиц измерения (расстояния —  $d$ , времени —  $d^2/\nu$ , скорости —  $D_{22}^*/d$ , концентрации  $i$ -го компонента —  $A_i d$ , давления —  $\rho_0 \nu D_{22}^*/d^2$ ), получим систему уравнений гравитационной концентрационной конвекции для возмущенных значений в безразмерных величинах (штрихи опущены)

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

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

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla p + \nabla^2 \mathbf{u} + (R_1 \tau_{11} c_1 + R_2 c_2) \mathbf{e}_z, \quad \text{div } \mathbf{u} = 0. \quad (2)$$

где  $\mathbf{e}_z$  — единичный вектор в направлении оси  $z$ ,  $P_{ii} = \nu/D_{ii}^*$  — диффузионное число Прандтля,  $R_i = g\beta_i A_i d^4 / \nu D_{ii}^*$  — парциальное число Рэлея,  $\tau_{ij} = D_{ij}^*/D_{22}^*$  — параметры, определяющие соотношение между практическими коэффициентами диффузии,  $\beta_i = -\frac{1}{\rho_0} \left( \frac{\partial \rho}{\partial c_i} \right)_{p,T}$ ,  $A_i \mathbf{e}_z = -\nabla c_{i0}$  (индекс 0 относится к средним значениям).

## 2. Нейтральная линия монотонной неустойчивости для вертикального цилиндра кругового сечения

Рассмотрим трехкомпонентную газовую смесь, заполняющую бесконечный вертикальный цилиндрический канал кругового сечения, форма которого приведена на рис. 1. Будем рассматривать критические движения, параллельные оси канала, и считать, что возмущения концентрации не зависят от  $z$ :  $u_x = u_y = 0$ ,  $u_z = u(x, y)$ ,  $c_i = c_i(x, y)$ , тогда перепишем систему уравнений (2) в виде

$$\begin{aligned} \nabla^2 u + R_1 \tau_{11} c_1 + R_2 c_2 &= 0, \\ \tau_{11} \nabla^2 c_1 + \frac{A_2}{A_1} \tau_{12} \nabla^2 c_2 + u &= 0, \\ \frac{A_1}{A_2} \tau_{21} \nabla^2 c_1 + \nabla^2 c_2 + u &= 0, \\ \text{div } \mathbf{u} &= 0. \end{aligned} \quad (3)$$

При переходе к системе уравнений (3) пренебрегаем возможными возмущениями давления, так как время релаксации давления много меньше времени релаксации концентрации.

Введем цилиндрические координаты  $(r, \varphi, z)$ , направив ось  $z$  по оси цилиндра вверх. Рассматриваемая

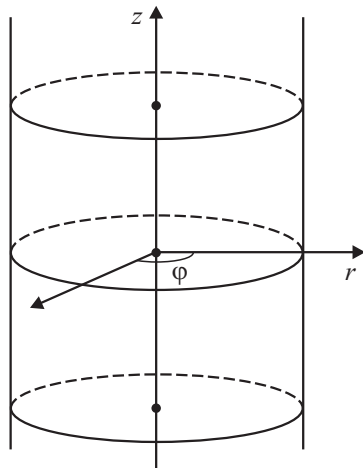


Рис. 1. Бесконечный вертикальный цилиндр. Система координат.

задача имеет частные решения, при которых скорость  $u$  и концентрации компонентов  $c_i$  зависят от угла  $\varphi$  по гармоническому закону:

$$u(r, \varphi) = u^0(r) \cos n\varphi, \quad c_i(r, \varphi) = C_i^0(r) \cos n\varphi, \quad (4)$$

где  $n$  принимает целочисленные значения  $n = 0, 1, 2, \dots$ .

Подставляя (4) в (3), получим уравнения для радиальных функций  $u^0$  и  $C_i^0$

$$\begin{aligned} u^0 + \tau_{11} \left( C_1^{0''} + \frac{1}{r} C_1^{0'} - \frac{n^2}{r^2} C_1^0 \right) &+ \frac{A_2}{A_1} \tau_{12} \left( C_2^{0''} + \frac{1}{r} C_2^{0'} - \frac{n^2}{r^2} C_2^0 \right) = 0, \\ u^0 + \frac{A_1}{A_2} \tau_{21} \left( C_1^{0''} + \frac{1}{r} C_1^{0'} - \frac{n^2}{r^2} C_1^0 \right) &+ C_2^{0''} + \frac{1}{r} C_2^{0'} - \frac{n^2}{r^2} C_2^0 = 0, \\ u^{0''} + \frac{1}{r} u^{0'} - \frac{n^2}{r^2} u^0 + R_1 \tau_{11} C_1^0 + R_2 C_2^0 &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Исключая из (5) радиальные функции концентраций компонентов, получим уравнение, содержащее только скорость:

$$(D^2 - R)u^0 = 0, \quad (6)$$

где

$$D = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{n^2}{r^2}, \quad R = R_1 \tau_{11} K_1 + R_2 K_2,$$

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

Общее решение (6) имеет вид

$$u^0 = a_1 J_n(\gamma r) + a_2 I_n(\gamma r). \quad (7)$$

Здесь  $J_n$  и  $I_n$  — функции Бесселя 1-го рода,  $a_1$  и  $a_2$  — произвольные постоянные, а

$$\gamma = R^{1/4}, \quad \text{т.е.} \quad \gamma = (R_1 \tau_{11} K_1 + R_2 K_2)^{1/4},$$

причем безразмерный параметр  $\gamma$  можно рассматривать как аналог обобщенного числа Рэлея.

Концентрации компонентов найдем из уравнений

$$\nabla^2 C_i^0 = -u^0 K_i, \quad i = 1, 2. \quad (8)$$

При вычислении концентраций следует учитывать решение лишь неоднородного уравнения, получающегося при подстановке выражения (7) в (8). В результате получаем

$$C_i^0 = \frac{K_i}{\gamma^2} (a_1 J_n(\gamma r) - a_2 I_n(\gamma r)). \quad (9)$$

На границе горизонтального сечения канала возмущения скорости и нормальный к границе поток вещества обращаются в нуль

$$u = 0, \quad \frac{\partial c_i}{\partial r} = 0, \quad i = 1, 2 \quad \text{при} \quad r = \pm 1. \quad (10)$$

Граничные условия (10) приводят к однородной системе для определения двух постоянных интегрирования

$$\begin{aligned} a_1 J_n(\gamma) + a_2 I_n(\gamma) &= 0, \\ a_1 J'_n(\gamma) - a_2 I'_n(\gamma) &= 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Условие существования нетривиального решения этой системы состоит в обращении в нуль ее определителя. Раскрывая определитель, получим характеристическое соотношение, определяющее спектр критических значений числа Рэлея:

$$\frac{J'_n(\gamma)}{J_n(\gamma)} + \frac{I'_n(\gamma)}{I_n(\gamma)} = 0. \quad (12)$$

Определяя постоянные  $a_1$  и  $a_2$  из системы (11), найдем профили скорости и концентраций, соответствующие критическим движениям:

$$u = \left[ \frac{J_n(\gamma r)}{J_n(\gamma)} - \frac{I_n(\gamma r)}{I_n(\gamma)} \right] \cos n\varphi, \quad (13)$$

$$c_i = \frac{K_i}{\gamma^2} \left[ \frac{J_n(\gamma r)}{J_n(\gamma)} + \frac{I_n(\gamma r)}{I_n(\gamma)} \right] \cos n\varphi, \quad (14)$$

Критические числа Рэлея  $R = \gamma^4$  определяются как корни трансцендентного уравнения (12). При фиксированном номере  $n$  (азимутальная составляющая структуры движения) в уравнении (12) имеем бесконечную последовательность корней  $\gamma_n^{(1)}, \gamma_n^{(2)}, \gamma_n^{(3)}, \dots$ , занумерованных в порядке возрастания. Соответствующие движения отличаются радиальной структурой: более высокому значению верхнего индекса отвечает большее число узлов скорости и концентрации [7]. Любое критическое число Рэлея для движений рассматриваемого вида имеет два индекса:  $R_n^{(l)} = [\gamma_n^{(l)}]^4$ . Численное решение уравнения (12) для  $l = 1$  дает следующие корни:

$$\gamma_1 = 2.871, \quad \gamma_2 = 4.259, \quad \gamma_3 = 5.541, \quad \gamma_4 = 6.6771, \dots$$

и соответственно критические числа Рэлея:

$$R_1 = 67.95, \quad R_2 = 329.1, \quad R_3 = 942.5, \quad R_4 = 2102. \quad (15)$$

Для нахождения линии монотонных возмущений умножим первое уравнение системы (3) скалярно на  $\mathbf{u}$  и проинтегрируем по сечению цилиндра

$$\int \mathbf{u} \nabla^2 \mathbf{u} \, dS + R_1 \tau_{11} \int u c_1 \, dS + R_2 \int u c_2 \, dS = 0. \quad (16)$$

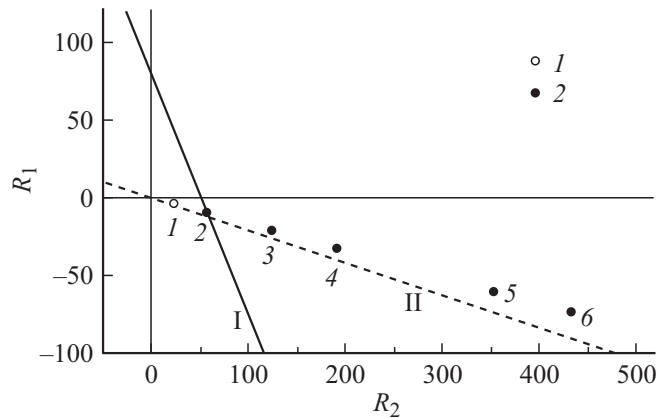


Рис. 2. Граничные линии монотонной неустойчивости I и нулевого градиента плотности II для тройной системы 0.7796 He + 0.2204 R12 – Ar при  $T = 298.0$  К. 1, 2 — экспериментальные данные.

Подставив в (16) выражения для распределения скорости и концентраций и проведя операцию интегрирования, получим

$$\tau_{11} \left( 1 - \frac{A_2}{A_1} \tau_{12} \right) R_1 + \left( \tau_{11} - \frac{A_1}{A_2} \tau_{21} \right) R_2 = \gamma^4 (\tau_{11} - \tau_{12} \tau_{21}). \quad (17)$$

На рис. 2 приведена нейтральная линия (17) на плоскости  $(R_1, R_2)$  для системы 0.7796 He (1) + 0.2204 R12(2) – Ar (3) (здесь и далее перед химическим элементом указана концентрация в мольных долях, цифры в скобках после химических элементов определяют нумерацию газов). Выше прямой I располагается область неустойчивости, а ниже — область, соответствующая диффузии. Для наиболее опасной с точки зрения устойчивости моды ( $l = 1, n = 1$ ) критические концентрационные числа Рэлея имеют следующие значения:  $R_1 = 77.7936, R_2 = 50.2471$  при  $\gamma = 2.8712$ . На рис. 2 также приведена линия II, отвечающая нулевому градиенту плотности, которая определяется следующим выражением [12]:

$$\tau_{11} R_1 = -R_2. \quad (18)$$

Можно заметить, что на плоскости  $(R_1, R_2)$  существуют области, где нейтральная линия I расположена ниже прямой II. В этой области состояние смеси неустойчивое, хотя в нижней части канала плотность смеси больше, чем в верхней. Этой области соответствуют противоположные по знаку парциальные диффузионные числа Рэлея  $R_1 < 0, R_2 > 0$ . Подобная ситуация характерна для неизотермического случая в бинарной жидкой смеси [7,8].

### 3. Сравнение с экспериментом

Сравнение теоретических результатов с опытными данными проведем на примере изучения барической

зависимости диффузионного смешения бинарной смеси гелия и фреона-12 в аргон. В работах [12,14] было показано, что в подобных смесях, например, в системе  $0.7796 \text{ He} (1) + 0.2204 \text{ R12} (2) - \text{Ar} (3)$  при  $T = 298.0 \text{ K}$  с увеличением давления возможен переход из диффузионного состояния в конвективное. Анализ на устойчивость этой системы, проведенный в предположении линейного распределения концентрации компонентов по длине диффузионного канала (плоский вертикальный слой, возмущения концентрации компонентов на границах обращаются в нуль), приведенный в работе [12], показал существенное расхождение в расположении границ устойчивости, полученных опытным путем и теоретически. Причина такого несоответствия заключается в том, что существенное различие КВД компонентов приводит к ситуации, когда парциальный поток самого тяжелого компонента практически равен нулю, т. е. имеет место диффузионный „затвор“ [15]. По-видимому, для этого случая распределение концентраций компонентов по длине канала будет более сложным, чем линейное приближение. Теоретические расчеты, приведенные на рис. 2, свидетельствуют о том, что учет распределения концентраций компонентов в виде (14), рассмотрение диффузионного канала в форме вертикального цилиндра кругового сечения и выполнение условия отсутствия потока вещества на границах канала устраняют отмеченные противоречия и приводят к количественному совпадению с экспериментом.

Для сравнения результатов по определению областей устойчивости и неустойчивости представим опытные данные на плоскости  $(R_1, R_2)$  в виде парциальных чисел Рэлея. Парциальные числа Рэлея в соответствии с (2) в применении к диффузионному каналу с радиусом  $r$  и длиной  $L$  можно записать следующим образом:

$$R_1 = \frac{gnr^4 \Delta m_1}{\rho v D_{11}^*} \frac{\partial c_1}{\partial z}, \quad R_2 = \frac{gnr^4 \Delta m_2}{\rho v D_{22}^*} \frac{\partial c_2}{\partial z}, \quad (19)$$

где  $\Delta m_1 = m_1 - m_2$ ,  $\Delta m_2 = m_2 - m_3$ ,  $m_i$  — масса молекулы  $i$ -го сорта. Если известны условия проведения опыта (давление, температура, состав смесей в каждой из колб, размеры диффузионного канала), то по формулам (19) можно найти  $R_1$ ,  $R_2$  и тем самым определить изображающую данный опыт точку на плоскости  $(R_1, R_2)$ . Из опыта известно, какой режим (диффузия или конвекция) имеет место при заданных условиях. Точки, соответствующие неустойчивому режиму, будем обозначать в виде знаков 2, а диффузии будут соответствовать значки 1. Совокупность таких точек на плоскости чисел Рэлея определяет переход из диффузионной области в конвективную через нейтральную линию устойчивости. На рис. 2 представлены опытные данные в терминах чисел Рэлея для системы  $0.7796 \text{ He} + 0.2204 \text{ R12} - \text{Ar}$  при  $T = 298.0 \text{ K}$ , полученные варьированием давления. Точки 1–5 соответствуют следующим значениям давления: 1 — 0.12, 2 — 0.19, 3 — 0.29, 4 — 0.36, 5 — 0.49, 6 — 0.54 МПа. Точка 1 соответствует диффузии. Точки 2–5 характеризуют неустойчивый режим. Нетрудно видеть,

что имеет место удовлетворительное согласие теории и эксперимента по расположению областей диффузии и концентрационной конвекции.

## Заключение

Таким образом, на основе теории устойчивости показана возможность возникновения неустойчивости механического равновесия при диффузии в изотермических трехкомпонентных газовых смесях в бесконечном цилиндрическом канале кругового сечения при граничных условиях, соответствующих отсутствию потока вещества через стенки канала. Сравнение с опытом показало удовлетворительное согласие в определении границ смены режимов „диффузия–концентрационная гравитационная конвекция“.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Комитета науки МОН РК № 1134/ГФ.

## Список литературы

- [1] Жаврин Ю.И., Косов Н.Д., Белов С.М., Тарасов С.Б. // ЖТФ. 1984. Т. 54. Вып. 5. С. 943–947.
- [2] Косов В.Н., Селезнев В.Д., Жаврин Ю.И. // ЖТФ. 1997. Т. 67. Вып. 10. С. 139–140.
- [3] Жаврин Ю.И., Косов В.Н., Кульжанов Д.У., Каратаева К.К. // Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26. Вып. 24. С. 76–79.
- [4] Жаврин Ю.И., Косов В.Н., Кульжанов Д.У., Поляков И.В., Анкушева Н.Б. // Письма в ЖТФ. 2003. Т. 29. Вып. 3. С. 53–57.
- [5] Жаврин Ю.И., Молдабекова М.С., Поляков И.В., Мукамеденкызы В. // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37. Вып. 15. С. 62–68.
- [6] Анкушева Н.Б., Косов В.Н., Селезнев В.Д. // ПМТФ. 2010. Т. 51. Вып. 1. С. 75–78.
- [7] Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.
- [8] Джозеф Д. Устойчивость движений жидкости. М.: Мир, 1981. 638 с.
- [9] Камжан В.А. // ЖТФ. 1998. Т. 68. Вып. 8. С. 44–47.
- [10] Ингель Л.Х. // ЖТФ. 2009. Т. 79. Вып. 2. С. 43–47.
- [11] Гладков С.О. // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31. Вып. 12. С. 71–78.
- [12] Косов В.Н., Селезнев В.Д. Аномальное возникновение свободной гравитационной конвекции в изотермических тройных газовых смесях. Екатеринбург: УрО РАН, 2004. 151 с.
- [13] Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса. М.: Наука, 1979. 556 с.
- [14] Косов В.Н., Жаврин Ю.И. // Теплофизические свойства веществ и материалов. М.: Изд-во стандартов. 1989. Вып. 28. С. 112–122.
- [15] Селезнев В.Д., Смирнов В.Г. // ЖТФ. 1981. Т. 51. Вып. 4. С. 975–980.