

01;03

Моделирование работы ламинарной диффузионной камеры для исследования гомогенной нуклеации. II

© А.А. Бринь, С.П. Фисенко

Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Белоруссии,
220728 Минск, Белоруссия
e-mail: fsp@hmti.ac.by

(Поступило в Редакцию 20 апреля 2005 г.)

Проведено численное исследование новой математической модели работы ламинарной диффузионной камеры (ЛДК). Подтверждены сделанные ранее качественные оценки о границах применимости стандартной математической модели. Обнаружено, что природа газа-носителя существенно влияет на объем зоны нуклеации в ЛДК. В частности, при прочих равных условиях для газа-носителя аргона объем зоны нуклеации на порядок выше, чем для газа-носителя гелия. Анализ экспериментов Vohra&Heist, основанный на использовании нашей математической модели, показал, что при относительно больших пересыщениях пара в ламинарной диффузионной камере важную роль играют нелинейные эффекты взаимодействия между растущими каплями. Отмечена роль образования локально-неоднородной структуры поля пересыщения вблизи капель в зоне нуклеации.

PACS: 02.70.-с, 45.15.-х

Введение

Новая математическая модель работы ламинарной диффузионной камеры (ЛДК) представлена в [1]. В этой статье мы излагаем результаты численного моделирования, полученные с использованием нашей модели, и сравниваем их с экспериментальными данными. На полуколичественном уровне обсуждаются эффекты, связанные с образованием локально-неоднородного поля пересыщения пара вблизи капель в зоне нуклеации.

1. Метод и результаты численного моделирования

Прежде чем перейти к изложению численных результатов, опишем приближенный расчет скорости парогазовой смеси, которая меняется при ее охлаждении в конденсоре ЛДК. Для расчета мы используем уравнение неразрывности для парогазовой смеси в интегральной форме

$$\rho(T_c)u_0 = \rho(T_w)u_f, \quad (1)$$

где T_w — температура конденсатора, T_c — температура смеси на входе в камеру, $\rho(T_w)$ и $\rho(T_c)$ — плотности смеси при температурах T_w и T_c и атмосферном давлении соответственно, u_f — конечная скорость смеси. Мы используем также уравнение состояния идеального газа. Выражение для конечной скорости потока u_f в камере после охлаждения имеет вид

$$u_f = u_0 \frac{T_w}{T_c}. \quad (2)$$

На переходном участке, когда идет охлаждение смеси, мы используем простейшую линейную аппроксимацию среднего значения скорости. Действительно, перепады

температур в ЛДК относительно невелики. Тогда, пренебрегая относительно небольшим изменением профиля скорости [2] и, учитывая только изменение средней скорости потока имеем

$$u(z) = \begin{cases} u_0 + \frac{(u_f - u_0)z}{L}, & z < L, \\ u_f, & z \geq L \end{cases}, \quad (3)$$

где z — координата; L — подгоночный параметр, значение которого находится в результате нескольких итерационных расчетов. Критерием сходимости итераций является условие, что длина перепада температуры парогазовой смеси на оси камеры на величину T_w равна L . При этом мы сохраняем предположение о параболическом профиле, в котором изменяется только средняя скорость потока [3].

Для решения системы дифференциальных уравнений в частных и обыкновенных производных мы используем „метод прямых“ [2,4]. В рамках этого метода по радиальной переменной мы используем разложение в конечные разности с учетом переменных коэффициентов переноса; независимая переменная z считается непрерывной. В результате этого перехода система уравнений в частных производных приближенно представляется системой обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Так как эта процедура проводится для каждого из двух взаимосвязанных уравнений, описывающих поля температур и плотности пара, количество ОДУ равно удвоенному количеству узлов в радиальном направлении плюс дополнительные уравнения для описания роста кластеров. Из кинетической теории газов хорошо известно, что коэффициенты переноса нелинейно зависят от состава и температуры смеси [5]. Таким образом, мы имеем нелинейную систему ОДУ.

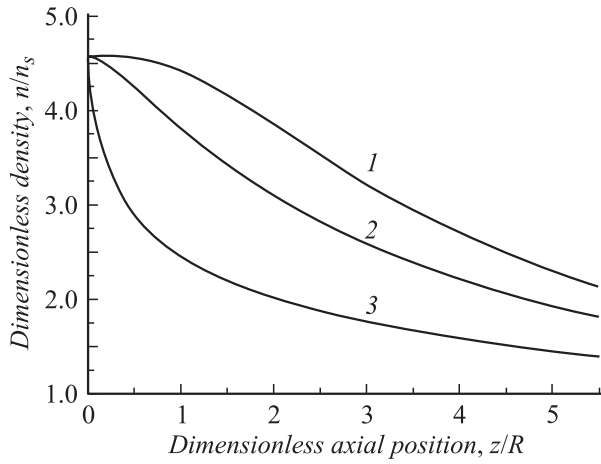


Рис. 1. Профили безразмерной плотности пропанола. Кривая 1 — на оси камеры; 2 — для $r/R = 0.286$; 3 — для 0.714.

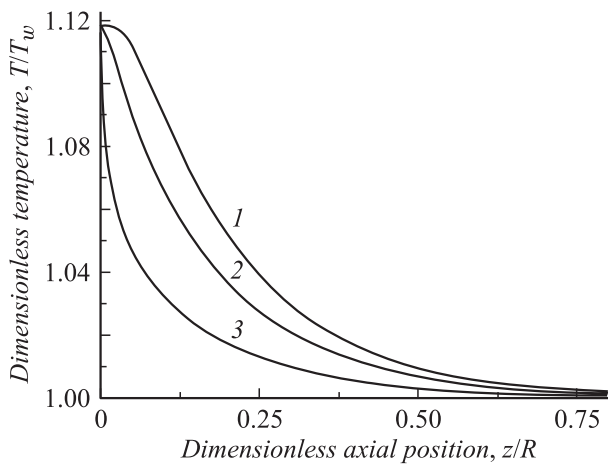


Рис. 2. Профили безразмерной температуры для смеси пропанол–гелий. Кривая 1 — на оси камеры; 2 — для $r/R = 0.286$; 3 — для 0.714.

Полученная система ОДУ решалась численно в среде MathCAD 2000 Professional адаптивным методом Рунге–Кутты четвертого порядка. В частности, на рис. 1–4 представлены данные, полученные в результате использования системы 14 ОДУ для описания процессов переноса в газовой фазе.

Теплофизические свойства пропанола и газов-носителей, а также коэффициенты теплопроводности и диффузии пропанола в гелии и других газах взяты из [6,7]. Для расчета теплопроводности бинарной смеси использованы методы, изложенные в [8].

На рис. 1 представлены профили плотности пара пропанола (газ-носитель гелий). Эти профили рассчитаны в рамках стандартной математической модели, которая не учитывает влияние роста кластеров на состояние парогазовой смеси. Для обезразмеривания плотности пара в качестве масштаба использовалась плотность насыщенных паров пропанола при температуре T_w ; в

качестве масштаба пространственных размеров выбран радиус трубы конденсора. Обратим внимание, что на оси камеры существует начальный участок, где плотность пара не изменяется. На рис. 1 также виден экспоненциальный характер падения плотности пара, хорошо согласующийся с качественными оценками, сделанными выше.

На рис. 2 показаны профили безразмерной температуры парогазовой смеси вдоль камеры на различных расстояниях от оси (газ-носитель гелий). В качестве масштаба поля температуры использовалась температура T_w . Экспоненциальный характер убывания температуры имеет место уже при $z > 0.12R$.

Из поведения кривых 3 на рис. 1 и 2 следует, что локальные зоны небольшого пересыщения возникают вблизи входа в конденсатор вдали от центральной части потока. Причина лежит в быстром падении температуры смеси вдали от центра канала. Вследствие экспоненциальной зависимости плотности насыщенного пара от

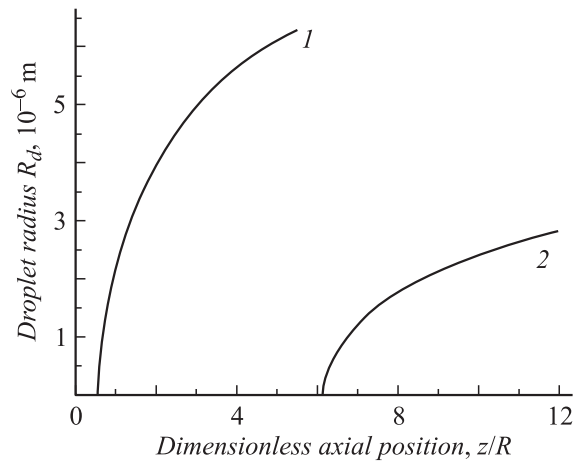


Рис. 3. Рост капель в ЛДК. Кривая 1 — смесь гелий–пропанол; 2 — смесь аргон–пропанол.

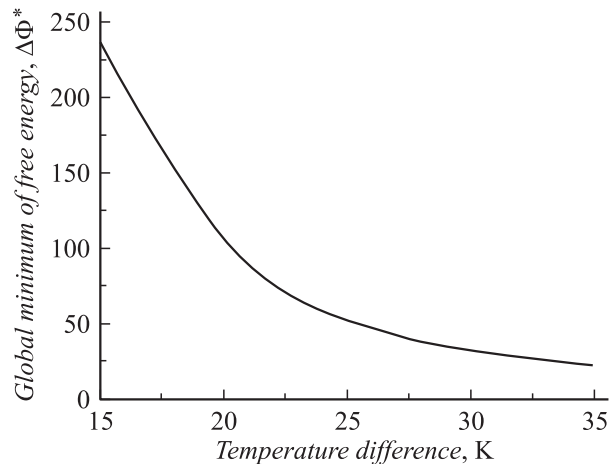


Рис. 4. Глобальный минимум свободной энергии образования критического кластера $\Delta\Phi^*$ в зависимости от разности температур $T_s - T_w$.

температуры в этих зонах появляются локальные максимумы пересыщения. Впервые этот факт был установлен в работе [6].

На рис. 3 показан рост кластеров, образовавшихся вблизи оси камеры, для различных смесей с одинаковыми температурами и одной и той же средней скоростью течения. Для гелиевой смеси радиус капли $5\ \mu\text{m}$ достигается на расстоянии около $4R$ от входа в конденсатор. Для смеси аргон–пропанол на расстоянии $6R$ имеет место только максимальная скорость нуклеации, а радиус капли, равный $2\ \mu\text{m}$, достигается на расстоянии $10R$. Отметим, что рост кластера в свободномолекулярном режиме ($\text{Kn} \gg 1$) идет настолько быстро, что частицы практически не изменяют своего положения. Рост относительно больших капель в диффузионном режиме идет по всей длине камеры существенно медленнее. При этом результаты численного моделирования качественно хорошо согласуются с аналитическими оценками, сделанными в [1].

На рис. 4 показана зависимость глобального минимума безразмерной свободной энергии критических кластеров пропаноло, $\Delta\Phi^*$, от перепада температур ($T_s - T_w$). В расчетах изменялось только значение T_w . При этом другие температуры имели постоянное значение ($T_c = 330$, $T_s = 322.5\ \text{K}$). Под глобальным минимумом, $\Delta\Phi^*$, мы понимаем наименьшее значение свободной энергии образования критических кластеров, рассчитанное в рамках капиллярного приближения [9] в зоне нуклеации. Из данных, представленных на рис. 4, видно, что при разности температур менее $25\ \text{K}$ скорость нуклеации J_c пренебрежимо мала, так как $J_c \sim \exp[-\Delta\Phi^*]$. При увеличении разности температур величина свободной энергии образования критических кластеров существенно уменьшается. В первую очередь это связано с увеличением пересыщения пара при увеличении перепада температуры. Используя классическую теорию кинетики нуклеации, можно сделать вывод, что в диапазоне перепада температур, показанном на рис. 4 скорость нуклеации должна возрасть примерно на 20 порядков. Отметим, что в расчетах, отраженных на рис. 4, использованы условия первого эксперимента (температуры и расход смеси) из работы [6].

Для условий этого же эксперимента на рис. 5 показаны профили безразмерной свободной энергии критических кластеров пропаноло $\Delta\Phi(r, z)$ в зоне нуклеации. Видно, что величина $\Delta\Phi^*$ немного отличается от качественных оценок, приведенных в [1, рис. 3]. На рис. 5 видно, что в радиальном направлении зона нуклеации не превышает $0.2R$.

Численные результаты, отраженные на рис. 1–5 и в табл. 1, 2, получены без учета истощения и нагрева парогазовой смеси растущими каплями. Ясно, что при достаточно большой концентрации капель эти явления оказывают существенное влияние на поля плотности и температуры.

Таблица 1. Смесь гелий–пропанол для экспериментов из [2]

N	$\Delta\Phi_{\min}$	Z	D	S	T_{\min}
1 (1)	21.8	0.9	1	4.4	295.4
2 (5)	23.6	0.8	1	4.3	292.9
3 (17)	21.2	1.1	1	4.1	301.7
4 (22)	16.4	1.3	1.1	5.0	302.4
5 (27)	15.0	2.1	1.5	4.9	307.4

Таблица 2. Смесь аргон–пропанол для экспериментов из [2]

N	$\Delta\Phi_{\min}$	Z	D	S	T_{\min}
1 (28)	48.4	7.4	2.5	2.4	309.5
2 (32)	43.8	8.0	2.7	2.5	31.8
3 (37)	49.6	8.3	2.7	2.4	308.9
4 (40)	55.2	7.6	2.4	2.3	306.9
5 (44)	48.3	8.0	2.7	2.4	308.7

Для совместного моделирования нуклеации и процессов тепломассообмена в ЛДК в сечении конденсора с фиксированным значением z мы вводим капли с малым радиусом ($R_d \sim 2 \cdot 10^{-9}\ \text{m}$), которые способны к дальнейшему росту. Число этих капель, в нашей постановке задачи, является свободным параметром, что позволяет использовать нашу модель и для расчета течений с гетерогенной нуклеацией. В принципе, число капель может быть рассчитано с помощью известных теорий нуклеации. В первой итерации мы вводим первую группу капель и проводим расчет как роста капель, так и их влияния на параметры газовой фазы. По результатам расчета определяем новое положение $\Delta\Phi^*$. Во второй итерации мы вводим первую группу капель в той же самой позиции, затем ниже по потоку, но перед новым глобальным минимумом свободной энергии, вводим вторую группу капель. Затем проводится расчет как

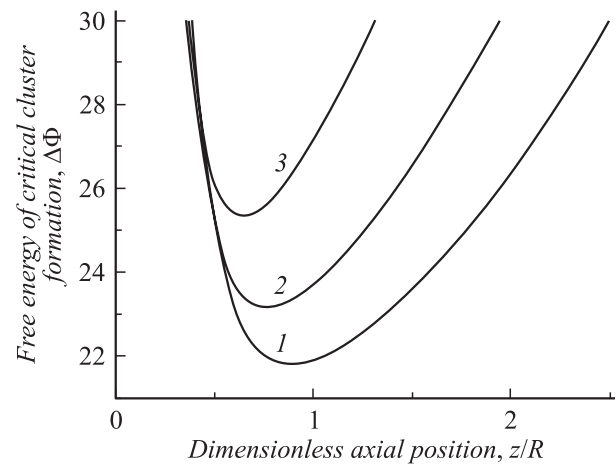


Рис. 5. Профили безразмерной свободной энергии образования критического кластера в зоне нуклеации. Кривая 1 — на оси камеры; 2 — для $r/R = 0.286$; 3 — для 0.429 .

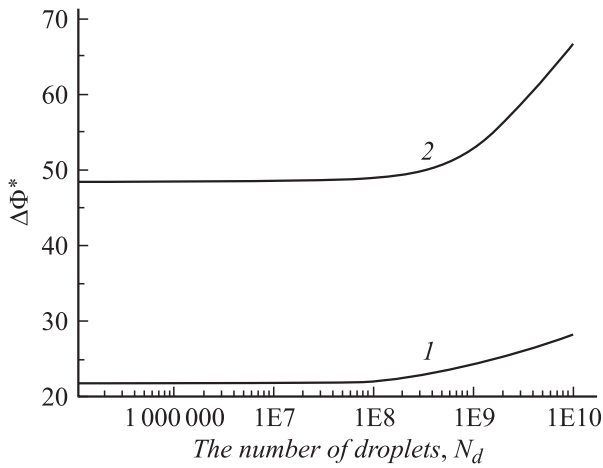


Рис. 6. Глобальный минимум $\Delta\Phi^*$ в зависимости от числа кластеров в начале зоны нуклеации. Кривая 1 — смесь гелий–пропанол; 2 — смесь аргон–пропанол.

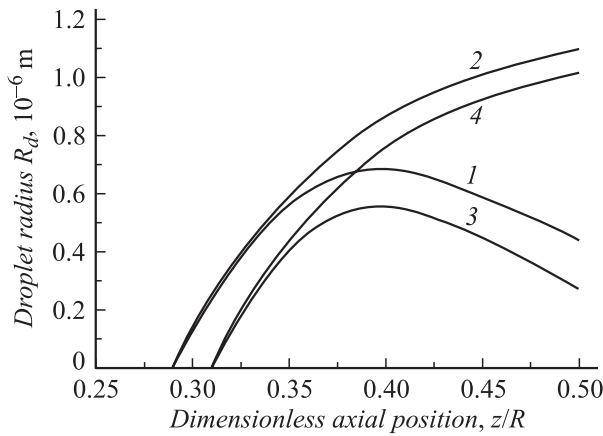


Рис. 7. Рост кластеров в ЛДК. Кривые 1 и 3 — первая группа капель ($N_d = 10^8 \text{ cluster/m}^3 \cdot \text{s}$) для двух радиальных позиций (для отношений $r/R = 0.143$ и 0.284). Кривые 2 и 4 — вторая группа капель ($N_d = 10^{10} \text{ cluster/m}^3 \cdot \text{s}$) для двух радиальных позиций.

роста капель, так и газовой фазы. Таким образом, мы моделируем влияние интегрального источника в нашей математической модели [1].

На рис. 6 показана зависимость $\Delta\Phi^*$ от полного числа образовавшихся капель в камере. В месте ввода капель свободная энергия отличается на две единицы от глобального минимума $\Delta\Phi^*$, полученного в предыдущей итерации (в данном случае в рамках стандартной модели). Видно, что при больших плотностях числа кластеров, сформировавшихся перед глобальным минимумом, состояние парогазовой смеси возмущается растущими кластерами. В результате значение $\Delta\Phi^*$ увеличивается. Это приводит к уменьшению скорости нуклеации для одних и тех же условий входа парогазовой смеси в конденсатора. Для условий первого эксперимента в [6], при плотностях капель N_d менее $10^{18} \text{ draps/m}^3$, как

показали наши расчеты, стандартные математические модели ЛДК работают хорошо. Это согласуется с нашей оценкой числа N_d , полученной в выражении (13). Интересно отметить, что для достижения плотности числа кластеров 10^8 cluster/m^3 на участке от входа до $0.1R$ необходимо средняя скорость нуклеации порядка всего лишь $10^{10} \text{ cluster/m}^3 \cdot \text{s}$. Для смеси аргон–пропанол (кривая 2) этот эффект выражен сильнее вследствие меньшей теплопроводности смеси.

В частности, ниже мы покажем результаты расчетов при дискретизации интегральных членов в уравнениях конвективной диффузии и теплопроводности на две группы образовавшихся капель, чем более мелкая дискретизация выбрана, тем выше точность моделирования гомогенной нуклеации в ЛДК. На рис. 7 в качестве иллюстрации такого расчета представлена зависимость радиусов каждой из двух групп от их положения в камере. Видно, что выделение теплоты фазового перехода уменьшает пересыщение и замедляет рост капель. Важно отметить, что температура в местах ввода капель в систему существенно выше, чем T_w . Из графика следует, что после некоторого роста капли,двигающиеся вблизи оси камеры, начинают испаряться. При этом капли, находящиеся вдали от оси канала, где лучше условия теплообмена со стенкой, продолжают расти. При этом существенно увеличивается значение $\Delta\Phi^*$. Таким образом, можно сделать вывод, что применение стандартной математической модели к сильно неравновесным системам в ЛДК ведет к существенным ошибкам. Тем не менее в следующем параграфе мы проанализируем эксперименты, представленные в [6], в рамках стандартной математической модели ЛДК. Основанием служит тот факт, что наблюдаемые скорости нуклеации были малы.

2. Сравнение расчетов и экспериментальных данных

В табл. 1 представлены результаты численного моделирования параметров зоны нуклеации для экспериментов со смесью гелий–пропанол из работы [6]. В первой колонке в скобках указан номер соответствующего эксперимента из табл. 1 работы [6]. Видно, что для заданных температур и расходов достигаются огромные пересыщения пропанола. Напомним, что при этом для всех экспериментальных значений пересыщения скорость нуклеации была порядка $10^6 \text{ particle/m}^3 \cdot \text{s}$. Обнаружено противоречие между расчетными и экспериментальными данными. Обратим внимание, что для смеси гелий–пропанол ширина зоны нуклеации, рассчитанная в рамках стандартной математической модели составляет примерно R . Во второй колонке дается величина глобального минимума $\Delta\Phi^*$; в третьей — безразмерное положение $\Delta\Phi^*$ в конденсоре; в четвертой — безразмерная ширина зоны нуклеации; в пятой показано максимальное значение пересыщения, шестая колонка

дает температуру смеси в позиции глобального минимума $\Delta\Phi^*$. Обезразмеривание положения Z и ширины D глобального минимума $\Delta\Phi^*$ проводилось на величину радиуса камеры R .

В табл. 2 для системы аргон–пропанол представлены расчеты параметров зоны нуклеации для экспериментов [6, табл. 2]. Специфика колонок таблицы такая же, как и для табл. 1. Расчеты сделаны с помощью разработанной нами программы в рамках стандартной математической модели ЛДК. Видно, что свойства газа-носителя через значение числа Льюиса Le , существенно влияют на поля температуры и плотности пара и тем самым на величину $\Delta\Phi^*$. При этом размер зоны нуклеации существенно больше, если в качестве газа-носителя используется аргон. Сравнение результатов наших расчетов с данными расчетов и визуализации [6] показало, что поле температур в конденсаторе ЛДК определено в работе [6] неверно. Значение температуры завышено в этих расчетах, при этом ошибка составляет порядка 5 градусов на оси канала. По-видимому, причина этого заключается в том, что при проведении численных расчетов не учитывался переменный характер коэффициентов переноса и не была выбрана соответствующая численная схема. При этом радиус частиц для постоянного расхода смеси (опыты 1, 5, 17) зависит от температуры сатуратора ЛДК: при увеличении температуры радиус растет, что согласуется с нашими выводами [1].

В результате численного моделирования было получено, что радиус зоны нуклеации для аргона составляет $0.4R$ конденсатора ЛДК. Если в качестве газа-носителя используется гелий, радиус зоны нуклеации $\sim 0.25R$. Таким образом, для экспериментов с аргоном объем зоны нуклеации примерно в четыре раза больше, чем для экспериментов с гелием. Учет обратной связи между растущими каплями, движущимися через зону нуклеации, и глобальным минимумом свободной энергии существенно уменьшает объем зоны нуклеации. Однако это уменьшение намного больше для экспериментов с гелием.

Из сравнения данных табл. 1 и 2 видно, что расчетные скорости нуклеации в гелии и в аргоне должны отличаться более чем на десять порядков. Напомним, что при эксперименте наблюдались примерно одинаковые скорости нуклеации! Нам представляется, что на сравнение расчетных данных с экспериментальными по гомогенной нуклеации в ЛДК большое влияние оказывают эффекты локальной структуры поля пересыщения, которые рассматриваются в следующем разделе.

3. Локальная структура поля пересыщения

При исследовании гомогенной нуклеации в ЛДК кроме эффектов, включенных в нашу математическую модель (уменьшение содержания пара вследствие конденсации на образовавшихся каплях, выделение теплоты

фазового перехода и конечного размера зоны нуклеации) существуют и другие кинетические эффекты.

Первый эффект связан с микроструктурой поля пересыщения вблизи растущей капли. Впервые его значимость для анализа экспериментов с высокими скоростями нуклеации была продемонстрирована в работе [11]. Действительно, на поверхности капли, растущей в парогазовой смеси, пересыщение S практически равно единице. Легко показать, что в диффузионном режиме роста капли пересыщение выходит на среднее значение, рассчитываемое с помощью нашей модели ЛДК, только на расстоянии, примерно равном десяти радиусами капли. Обозначим это расстояние как $R_{\text{эф}}$. Таким образом, вблизи растущей капли, на расстоянии меньше чем $R_{\text{эф}}$, значение пересыщения пара существенно меньше, чем рассчитанное с помощью модели. Другими словами, имеет место локальная структура поля пересыщения. К сожалению, учет этого эффекта в рамках нашей математической модели делает ее практически неразрешимой. Поэтому ограничимся только полуколичественными оценками. Ясно, что образовавшаяся в начале зоны нуклеации относительно крупная капля движется через зону нуклеации ЛДК со скоростью газового потока. Тогда за единицу времени в цилиндре объемом $v_f \pi R_{\text{эф}}^2$ находится и растет одна капля (для простоты качественных оценок мы не учитываем изменения $R_{\text{эф}}$). В то же время, согласно классическим представлениям кинетики нуклеации [11], за это время должно образоваться $J_c v_f \pi R_{\text{эф}}^2$ частиц, где J_c — скорость нуклеации. Для малых скоростей нуклеации описанный выше эффект локального поля пересыщения мал. Действительно, если

$$J_c \pi R_{\text{эф}}^2 v_f \ll 1, \quad (4)$$

то этим эффектом можно пренебречь. Для больших скоростей нуклеации этот эффект весьма существен. Используя данные, представленные на рис. 3, можно считать, что для смеси гелий–пропанол $R_{\text{эф}} \sim 20 \mu\text{m}$, при этом $v_f \sim 5 \cdot 10^{-2} \text{ m/s}$. Тогда для вполне умеренной для ЛДК скорости нуклеации $J_c \sim 10^{12} \text{ cluster/m}^3 \cdot \text{s}$, в области с характерным размером $R_{\text{эф}}$ вместо 60 кластеров регистрируется только один кластер. Таким образом, для этого примера из-за локальной структуры поля пересыщения расхождение классической кинетики нуклеации и эксперимента составляет почти два порядка величины скорости нуклеации. Ясно, что в экспериментах с гелием эффект локального поля выражен сильнее. Из-за большего коэффициента диффузии капли растут быстрее в смесях с гелием, чем в смесях с аргоном. Таким образом, при прочих равных условиях наблюдаемая скорость нуклеации в гелии меньше, чем в аргоне. Экспериментально это было обнаружено в работах [2–5] из [1]. Этот эффект ведет и к появлению нелинейной зависимости числа кластеров, образовавшихся в ЛДК, от расхода смеси.

При относительно больших пересыщениях пара в ЛДК [6], которые ведут к высоким скоростям нуклеа-

ции, необходимо учитывать еще один эффект локального поля пересыщения. Этот эффект возникает уже на существенно меньших масштабах, порядка средней длины свободного пробега молекул пара. Он связан с тем обстоятельством, что при высокой плотности кластеров новой фазы нельзя рассматривать рост каждого кластера независимо от роста соседних. Сделаем качественные оценки. Обозначим среднее расстояние между возникшими кластерами конденсированной фазы как d , тогда имеем

$$d \sim 1/N_d^{1/3}.$$

Если d порядка средней длины свободного пробега молекул пара λ_v , то

$$(1/N_d)^{1/3} \sim \lambda_v. \quad (5)$$

Для выполнения соотношения (5) скорость нуклеации J должна быть порядка

$$J \sim N_d/\tau. \quad (6)$$

Так как характерное время нуклеации τ порядка 10^{-6} s [12]; и при атмосферном давлении для молекулы пропанола $\lambda_v \sim 10^{-6}$ m, то из (6) имеем оценку скорости нуклеации, необходимой для справедливости соотношения (5), $J \sim 10^{23}$ cluster/m³·s. В силу стохастичности процесса образования кластеров новой фазы кластеры возникают с некоторой задержкой по времени и распределены в пространстве неравномерно. Представим теперь, что один из кластеров начинает расти быстрее, чем соседние. Этот кластер будет подавлять рост соседних в силу нескольких причин. Эти причины включают коалесценцию [11,13,14], а также выделение скрытой теплоты фазового перехода. Крупные кластеры меньше нагреваются в силу их большей теплоемкости и меньшей потери на испарение. Численные оценки, основанные на классической теории кинетики нуклеации, показывают, что в экспериментах с гелием и водородом, представленных в [6], достигались пересыщения, достаточные для достижения таких высоких скоростей нуклеации. Для второго кинетического эффекта, связанного с локальным полем, максимальную плотность числа выросших капель в конденсоре ЛДК N_{eff} можно оценить как

$$N_{\text{eff}} \approx 0.25R^2/R_{\text{eff}}^2.$$

Мы считаем, что максимальный радиальный размер зоны нуклеации составляет порядка половины радиуса конденсатора. При переходе в диффузионный режим роста, когда $Kn \sim 0.1$, типичный радиус кластера пропанола $\sim 2 \mu\text{m}$ (газ-носитель гелий), то для экспериментов, описанных в [6], имеем оценку $N_{\text{eff}} \sim 4 \cdot 10^4$ кластеров. Скорость нуклеации, рассчитанная по формуле (14) из [1] для такой плотности числа кластеров $N_{\text{eff}} \sim 4 \cdot 10^4$, примерно равна $6 \cdot 10^6$ cluster/m³·s, что соответствует данным анализируемых экспериментов [6].

Экстраполяция экспериментальных данных по скоростям нуклеации пропанола, недавно полученных нестационарным методом в работе [15] подтверждает нашу

точку зрения, что в действительности в экспериментах [6] достигалась огромная скорость нуклеации, существенно выше, чем 10^{22} cluster/m³·s. При этом в работе [15] никакой разницы между данными экспериментов по скорости нуклеации, выполненных в гелии и аргоне не наблюдалось. Важно подчеркнуть, что диффузионное взаимодействие между растущими кластерами [11,14], в результате которого исчезает подавляющее число малых кластеров, приводит к восстановлению профилей плотности и температуры в ЛДК, тем самым эффективно расширяя применимость развитой в [1] математической модели для расчета профилей плотности и температуры, а также радиусов частиц. Отметим, что средняя длина свободного пробега молекул пропанола в гелии в несколько раз выше, чем в аргоне [10]. Поэтому при использовании в качестве газа-носителя аргона включение в работу второго эффекта менее вероятно.

4. Обсуждение результатов

Разработан итерационный алгоритм для поиска самосогласованного численного решения при исследовании течений с гомогенной конденсацией в ламинарной диффузионной камере. В ходе численных экспериментов обнаружено, что вблизи входа в конденсор возникает зона максимума пересыщения и частично совпадающая с ней зона минимума свободной энергии образования критических кластеров. Вблизи этого минимума лежит зона нуклеации. Нами обнаружено, что объем зоны нуклеации существенно зависит от теплофизических свойств газа-носителя и расхода смеси. В частности, показано, что при всех остальных одинаковых параметрах ЛДК объем зоны нуклеации в случае использования аргона как газа-носителя существенно больше, чем при использовании гелия. При одинаковой скорости нуклеации число образовавшихся частиц прямо пропорционально объему зоны нуклеации. Как показали наши расчеты, при относительно небольшом увеличении расхода парогазовой смеси объем зоны нуклеации увеличивается по линейному закону. Таким образом, парадоксальный результат (ссылки [2–5] из [1]) о влиянии газа-носителя получил простое физическое объяснение.

Показано, что для исследования гомогенной нуклеации пара ЛДК может применяться только для относительно небольших скоростей нуклеации. В этом случае не происходит возмущения состояния парогазовой смеси растущими кластерами, и может быть корректно решена обратная задача по определению зависимости скорости нуклеации от температуры и пересыщения. Получено аналитически и подтверждено численными расчетами условие, что плотность числа капель (кластеров) в единице объема N_d должна удовлетворять условию:

$$N_d \ll \text{Le} (U/kT_w)^{-1} R^{-2} R_d^{-1}.$$

При невыполнении этого условия рост капель, образовавшихся в начале зоны нуклеации по ходу движения

газа, ведет к серьезному повышению температуры в центральной части диффузионной камеры. Это повышение температуры приводит к резкому уменьшению объема зоны нуклеации и дополнительно к увеличению глобального минимума свободной энергии образования критических кластеров $\Delta\Phi^*$. Последний эффект показан на рис. 6. Повышение температуры в зоне нуклеации приводит к уменьшению общего числа капель, выросших до оптически регистрируемого размера (порядка нескольких микрон). Интересно отметить, что в смесях с аргоном этот эффект выражен сильнее в связи с меньшей теплопроводностью газовой смеси. В стандартной математической модели работы ЛДК максимальная скорость нуклеации лежит на оси камеры. Для больших пересыщений учет конечных размеров зоны нуклеации и быстрого роста капель в свободномолекулярном режиме приводит к тому, что центр канала становится наиболее нагретым участком. В результате в нем падает пересыщение из-за повышения температуры, падает скорость нуклеации и замедляется рост частиц. Максимум скорости нуклеации сдвигается с оси, а объем зоны нуклеации резко уменьшается. Таким образом, если при проведении экспериментальных исследований обнаружено, что максимальное число капель образовано не вблизи оси конденсора, то это может служить указанием на проявление нелинейных эффектов. На рис. 8 показано поведение температуры парогазовой смеси при работе ЛДК в режиме с высокой скоростью нуклеации. При этом рост температуры парогазовой смеси замедляет рост капель в силу падения пересыщения, что, в свою очередь, ведет к уменьшению выделения скрытой теплоты фазового перехода. В результате смесь начинает повторно остывать, но с существенно меньшей скоростью, чем в начале конденсора. Причина, естественно, заключается в продолжающемся росте частиц новой фазы и выделении скрытой теплоты фазового перехода. Если конденсор

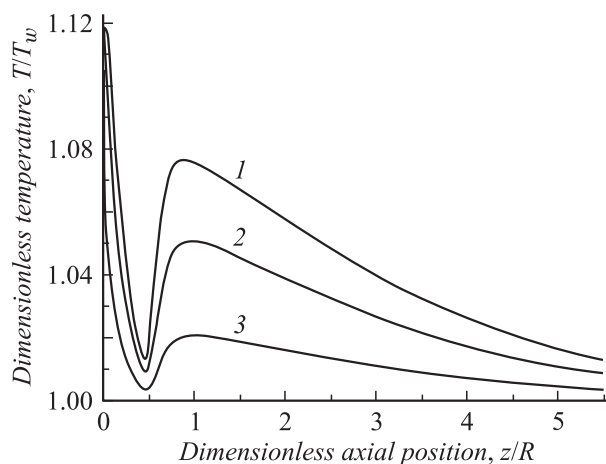


Рис. 8. Профили безразмерной температуры для больших скоростей нуклеации. Кривая 1 — на оси камеры; 2 — для $r/R = 0.286$; 3 — для 0.714.

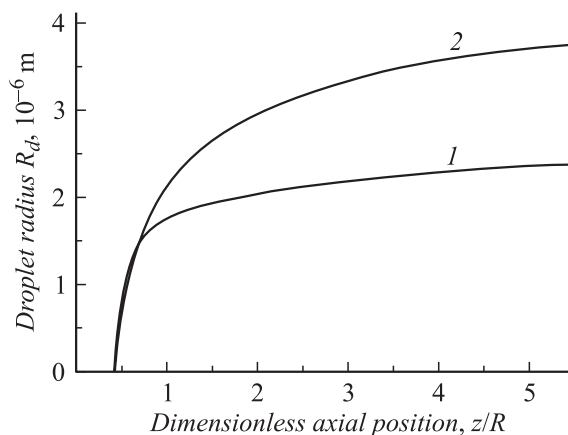


Рис. 9. Влияние радиального положения на рост капель в ЛДК. Кривая 1 — для $r/R = 0.14$; 2 — для 0.286.

имеет достаточную длину, то можно ожидать появления еще одной зоны нуклеации.

Как уже отмечалось, в зависимости от места образования капли дорастают до разных размеров даже при одинаковом пройденном расстоянии вдоль оси камеры. На рис. 9 показан рост кластеров при работе диффузионной камеры в режиме с высокой скоростью нуклеации (при этом общее число частиц в единице объема ЛДК $2 \cdot 10^{10}$). Видно, что в результате перегрева в центральной части канала, где существует максимальная плотность пара, тем не менее пересыщение падает и серьезно уменьшается скорость роста капель в диффузионном режиме. Сближение кривых 1 и 2 есть проявление эффекта роста капель в диффузионном режиме, выявленного в работе [10].

Для высоких пересыщений пара решающую роль начинают играть эффекты локальной структуры полей пересыщения. Представлены качественные оценки их влияния, позволяющие объяснить целый ряд парадоксальных экспериментальных результатов, полученных в ЛДК [6]. Количественное исследование этих эффектов является задачей будущего.

Авторы признательны С.И. Шабуне за полезные консультации по численным методам

Список литературы

- [1] Бринь А.А., Фисенко С.П. // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 4. С. 26–30.
- [2] Петухов Б.С. Теплообмен и сопротивление при ламинарном течении жидкости в трубах. М., 1967. 425 с.
- [3] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. М., 1980. 737 с.
- [4] Вержбицкий В.М. Основы численных методов. М.: Высш. шк., 2002. 848 с.
- [5] Ferziger J.H., Kaper H.G. Mathematical Theory of Transport Processes in Gasses. Amsterdam, 1972. 505 p.
- [6] Vohra V., Heist R. // J. Chem. Phys. 1996. Vol. 104. P. 382–395.

- [7] *Варгафтик Н.Б.* Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М., 1972. 720 с.
- [8] *Reid R.C., Prausnitz J.M., Poling B.E.* The Properties of Gases and Liquids. N.Y., 1987. 704 p.
- [9] *Френкель Я.И.* Кинетическая теория жидкостей. М., 1975. 592 с.
- [10] *Витовец Я., Павлюкевич Н.В., Фисенко С.П.* и др. // Инж.-физ. журн. 1989. Т. 56. № 6. С. 936–942.
- [11] *Fisenko S.P., Heist R.* // Nucleation theory and Applications. Dubna: Joint Institute Nuclear Researches, 2002. P. 146–164.
- [12] *Fisenko S.P., Wilemski G.* // Phys. Rev. 2004. Vol. 70. P. 056119.
- [13] *Питаевский Л.П., Лифшиц Е.М.* Физическая кинетика. М., 1979. 528 с.
- [14] *Madras G., McCoy B.J.* // J. Chem. Phys. 2001. Vol. 115. P. 6699–6706.
- [15] *Wedekind J., Pland K., Wagner P.E.* et al. // Nucleation and Atmospheric Aerosols. Proc. of 16th Int. conf. 2004. P. 49–52.