

УДК 533.15:536.25

¹В.Н. Косов*, ²О.В. Федоренко¹Научно-исследовательский институт экспериментальной и теоретической физики,
КазНУ имени аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы²Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы*E-mail: kosov_vlad_nik@list.ru**Инверсия градиента плотности при многокомпонентном смешении газов в вертикальном цилиндрическом канале**

Рассмотрена задача о квазистационарном распределении массовой плотности трехкомпонентных газовых смесей в вертикальном цилиндрическом канале. Показано, что при достаточно больших значениях концентрации тяжелого компонента экспоненциальный член в выражении для распределения концентрации компонента по длине канала приводит к существенной нелинейности в распределении плотности по длине канала, что определяет возможность инверсии градиента плотности. Приведены расчеты распределения плотности внутри канала для некоторых смесей, содержащих углеводороды, для которых экспериментально зафиксировано возникновение конвекции.

Ключевые слова: квазистационарное устойчивое диффузионное смешение газов, распределение концентрации, распределение плотности, инверсия градиента плотности.

В.Н. Косов, О.В. Федоренко

Тік цилиндрлік каналдағы көпкомпонентті араласу кезіндегі тығыздық градиентінің инверсиясы

Тік цилиндрлік каналдағы үшкомпоненттік газ қоспаларының массалық тығыздығының квазистационарлық таралуының есебі қарастырылды. Ауыр компонент концентрациясының үлкен мәнінде экспоненциал мүше канал ұзындығы бойынша компонент концентрациясының таралуы канал ұзындығы бойымен тығыздықтың таралуының біртексіздігін айқындайды, ол тығыздық градиенті инверсиясының мүмкіндігін анықтайтындығы көрсетілді. Конвекцияның пайда болуы тәжірибе түрінде анықталған құрамы көмірсутекті кейбір қоспалар үшін канал ішінде тығыздықтың таралуының есептелуі келтірілді.

Түйін сөздер: газдың орнықты квазистационарлық диффузиялық араласуы, концентрацияның таралуы, тығыздықтың таралуы, тығыздықтың инверсия градиенті.

V.N. Kossov, O.V. Fedorenko

Inversion of the density gradient under multicomponent mixing of gases in the vertical cylindrical channel

Problem of the quasistationary distribution of mass density of ternary gas mixtures in a vertical cylindrical channel is considered. It is shown, that the exponential term in the expression for the distribution of component concentration along channel length at sufficiently large values of the heavy component concentration leads to the essential nonlinearity in the density distribution along channel length that determines the possibility of inversion of the density gradient. Calculation of the density distribution inside channel for some mixtures containing hydrocarbons, where the convection occurrence has been shown, is given.

Key words: quasistationary stable diffusion mixing of gases, concentration distribution, density distribution, inversion of density gradient.

Введение

В условиях внешнего гравитационного поля (диффузия через вертикальный канал) возможность существования экстремума плотности смеси внутри канала может привести как к неустойчивости диффузионного процесса, так и к возникновению конвективных потоков даже в условиях, когда вверху располагается менее плотная смесь. Возникновение экстремума плотности внутри канала является первопричиной конвекции. Возможно, что для ряда газовых смесей с прекращением конвекции диффузия компонентов вновь создает условия для образования плотности с экстремумом, а это опять приведет к конвекции. Само появление минимума плотности связано с присутствием третьего компонента в смеси, и для его образования необходимо значительное различие в коэффициентах диффузии компонентов. Определение условий, при которых возможна инверсия градиента плотности, является актуальной задачей. В данной работе рассмотрена задача о квазистационарном распределении плотности при многокомпонентном смешении, в част-

ности смешения трех газов в вертикальном цилиндрическом канале.

Распределение массовой плотности в газовых смесях при многокомпонентной диффузии

Рассмотрим задачу квазистационарного устойчивого диффузионного смешения газов в системе двух колб [1; 2]. Каждая из колб первоначально заполнена тройной смесью с различными концентрациями, что показано на рисунке 1. Здесь и далее будем считать, что индекс $i = 1, 2, 3$ нумерует компоненты смеси, и они упорядочены таким образом, чтобы $m_1 < m_3 < m_2$.

Плотность смеси в верхней части аппарата при любых значениях температуры T и давления P всегда меньше, чем плотность газовой смеси в нижней части. Будем считать, что объемы колб равны ($V_1 = V_2 = V$) и значительно превосходят объем соединительного капилляра длиной L и площадью сечения $S = \pi r^2$ (r – радиус капилляра), а $L \gg r$.

Изотермическая диффузия сопровождается возникновением разности давления в колбах ΔP (диффузионный бароэффект [3]), но для рассматриваемого в задаче вязкого режима (число Кнудсена $Kn = \lambda/r \ll 1$, где λ – средняя длина свободного пробега) величина $\Delta P/P$ имеет порядок Kn^2 и является пренебрежимо малой. Считаем, что давление P однородно по системе и постоянно во времени. Тем не менее возникшая малая разность давлений обуславливает квазистационарный режим диффузии, при котором средняя числовая скорость обращается в ноль [4]:

$$V = c_1 u_1 + c_2 u_2 + c_3 u_3$$

трехкомпонентная диффузия через цилиндрический канал описывается системой уравнений:

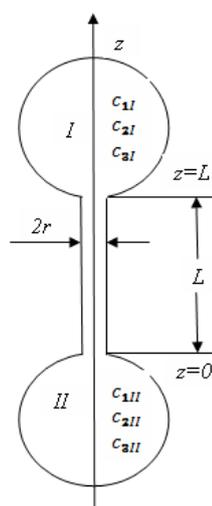


Рисунок 1 – Схема двухколбового аппарата. Система координат

$$\left\{ \begin{array}{l} P_i = \text{const}, \quad i = 1, 2; \\ T = \text{const}, \\ \sum_{i=1}^3 c_i = 1; \quad n \sum_{i=1}^3 c_i \vec{u}_i = 0, \\ \text{div}(n \cdot c_i \cdot \vec{u}_i) = 0, \quad i = 1, 2; \\ \sum_{j \neq i} \frac{c_i \cdot c_j}{D_{ij}} \cdot (c_i - c_j) = -\text{grad}(c_i), \quad i = 1, 2; \quad j = 1, 2, 3, \end{array} \right. \quad (1)$$

где u_i – средняя скорость молекул i -го компонента; D_{ij} коэффициенты взаимной диффузии бинарной смесей. Последнее уравнение системы носит название уравнения Стефана-Максвелла. Концентрация i -го компонента определяется соотношением:

$$c_i = \frac{n_i}{n_1 + n_2 + n_3} = \frac{n_i}{n}.$$

Для рассматриваемого случая система (1) состоит из 6 неизвестных (c_i, \vec{u}_i) и 6 независимых уравнений, т.е. она является замкнутой. Далее будем полагать, что время выравнивания состава в системе колб τ много больше времени τ_L установления распределения концентраций по длине капилляра. Тогда для времени $\tau \gg \tau_L$ смешение газов можно считать квазистационарным. В этом

случае распределение концентраций компонентов сравнительно быстро подстраивается под заданные значения состава смеси в колбах и медленно меняется по мере выравнивания концентраций в системе.

Рассмотрим случай малого перепада давления, которое определяет медленное ламинарное течение газа. Случай больших перепадов давления приводит к новой постановке граничных условий для диффузии, поскольку необходимо решение для поля концентрации в окрестности концов капилляра, однако, вид решения останется верным для ламинарных течений и в этом случае.

Поскольку соединяющий капилляр длинный и тонкий, а течение ламинарное, то в первом приближении можно пренебречь поперечным распределением концентрации и скорости в нем и решить одномерную задачу диффузии. Усредняя (1) по сечению канала, получим систему уравнений скоростей и концентраций:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^3 c_i = 1, \quad P = \text{const}, \quad T = \text{const}; \\ n \cdot \sum_{i=1}^3 c_i \cdot u_i = 0, \\ n \cdot c_i \cdot c_j = j_i = \frac{J_i}{S} = \text{const}_i, \quad i = 1, 2; \\ \sum_{j \neq i} \frac{c_i \cdot c_j}{D_{ij}} \cdot (u_i - u_j) = -\frac{dc_i}{dz}, \quad i = 1, 2; \quad j = 1, 2, 3, \end{array} \right. \quad (2)$$

где J – полный числовой поток смеси через капилляр; J_i – парциальный числовой поток i -го компонента через капилляр; S – площадь

поперечного сечения капилляра; n – числовая плотность газа; j и j_i – полная и парциальные плотности числового потока, соответственно.

С учетом граничных условий

$$z = L, c_1 = c_{1I}, c_2 = c_{2I}, c_3 = c_{3I}, z = 0, c_1 = c_{1II}, c_2 = c_{2II}, c_3 = c_{3II},$$

полное решение системы уравнений для одномерной трехкомпонентной стационарной диффузии имеет вид:

$$\begin{aligned} c_1(z) &= -Z \cdot \left[j_1 \cdot \left(X_3 \cdot z - X_1 + \frac{A}{Z} \right) - X_2 \cdot K_1 \cdot \exp\left(\frac{z}{Z}\right) \right], \\ c_3(z) &= -Z \cdot \left[j_3 \cdot \left(X_3 \cdot z - X_1 + \frac{A}{Z} \right) + X_2 \cdot K_3 \cdot \exp\left(\frac{z}{Z}\right) \right], \\ c_2(z) &= 1 - c_1(z) - c_3(z), \end{aligned} \quad (3)$$

где

$$X_1 = K_3 \cdot c_{1II} + K_1 \cdot c_{3II} + A \cdot (K_3 \cdot j_1 - K_1 \cdot j_3),$$

$$X_2 = -j_1 \cdot c_{3II} + 2 \cdot A \cdot j_1 \cdot j_3 + j_3 \cdot c_{1II},$$

$$X_3 = \frac{J_1 \cdot K_3 \cdot D_{23} + J_3 \cdot K_1 \cdot D_{12}}{D_{12} \cdot D_{23}}$$

$$K_1 = \left(\frac{1}{D_{13}} - \frac{1}{D_{12}} \right), K_3 = \left(\frac{1}{D_{12}} - \frac{1}{D_{23}} \right),$$

$$Z = \frac{1}{j_1 \cdot K_3 + j_3 \cdot K_1}, A = \frac{Z}{2} \cdot \frac{D_{12} - D_{23}}{D_{12} \cdot D_{23}},$$

c_{ik} – концентрации компонентов в колбах ($i = 1, 2, 3$ – индекс компонента, $k = I, II$ – индекс колбы).

Константы j_i определяются численным образом для заданных концентраций c_{ik} .

В отличие от бинарной диффузии, решение (3) содержит экспоненциальный по координате член. Для многокомпонентных систем с близкими значениями КВД ($D_{12} \approx D_{13} \approx D_{23}$) распределения концентраций по длине канала практически линейные. Для систем, где КВД резко отличаются друг от друга ($D_{23} \ll D_{12}, D_{13}$), (3) приводит к существенно нелинейному профилю концентраций. Нелинейность в распределении концентраций компонентов при неизменных D_{ij} зависит от значения от c_{2I} в системе. При $c_{2I} \rightarrow 0$ смесь становится бинарной, в этом пределе нелинейность исчезает.

Распределение концентраций при взаимной

диффузии бинарной смеси легкого (1) и тяжелого (2) компонентов, расположенных в верхней колбе, в чистый газ (3) для устойчивых систем с близкими значениями КВД и систем, где имеет место диффузионный «завор», приведены на рис. 2 и 3, соответственно.

Для нарушения устойчивости механического равновесия наиболее опасной является та координата капилляра, где реализуется максимальное значение производной от плотности газовой смеси ($\nabla \rho > 0$). Очевидно, что такой точкой является верхний торец капилляра.

Противоположное расположение бинарной смеси и чистого газа относительно диффузионного канала также приводит к нелинейным профилям. Распределения концентраций компонентов смеси для системы $N_2 - (0,25 H_2 + 0,75 Ar)$ приведены на рисунке 4. Как и в предыдущих случаях, для самого тяжелого компонента в смеси наблюдается нелинейное распределение c_2 вдоль диффузионного канала.

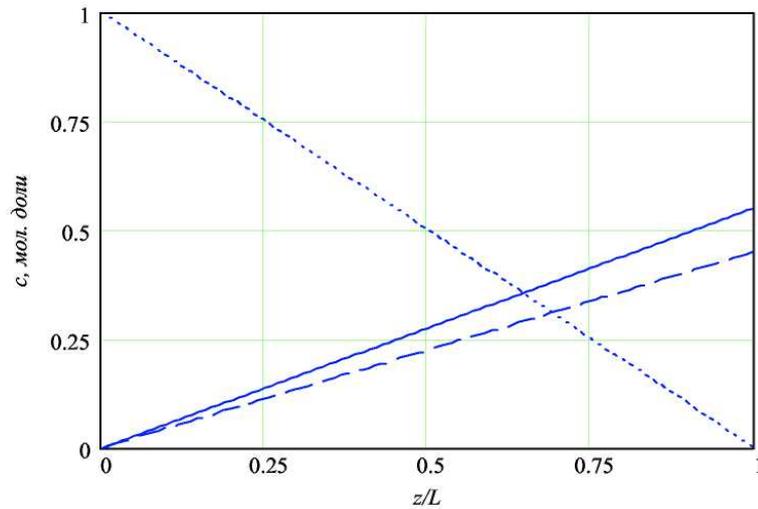
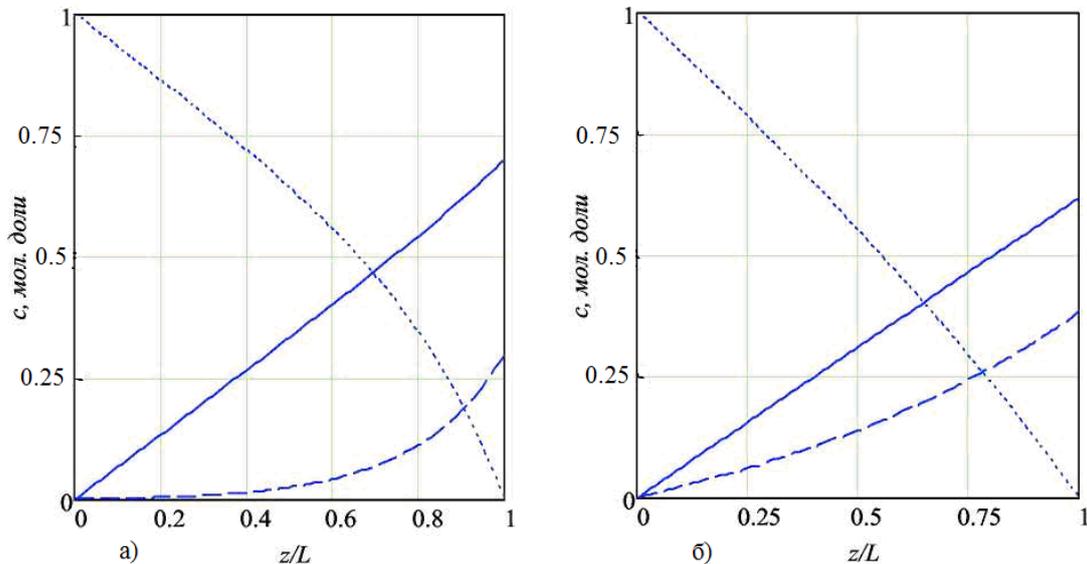


Рисунок 2 – Распределение концентраций по длине канала для диффузионно устойчивой системы $(0,55 \text{ CH}_4 + 0,45 \text{ Ar}) - \text{N}_2$ при $T = 298 \text{ K}$. 1 – CH_4 ; 2 – N_2 ; 3 – Ar

Таким образом, если в тройной смеси коэффициенты диффузии резко отличаются друг от друга ($D_{23} \ll D_{12}, D_{13}$), в системе реализуются условия для нелинейного распределения концентраций. При увеличении концентрации тяжелого компонента нелинейность распределения $c_2(z)$ стано-

вится более явной и приводит к инверсии градиента плотности газовой смеси, которая, в свою очередь, может явиться причиной возникновения неустойчивости механического равновесия смеси с последующим возникновением концентрационной гравитационной конвекции.



а – $(0,70 \text{ He} + 0,30 \text{ R12}) - \text{Ar}$; 1 – He , 2 – Ar , 3 – R12 ; б – $(0,617 \text{ H}_2 + 0,383 \text{ N}_2) - \text{CH}_4$; 1 – H_2 , 2 – CH_4 , 3 – N_2 .

Рисунок 3 – Распределение концентрации по длине канала для диффузионно неустойчивых систем при $T = 298 \text{ K}$

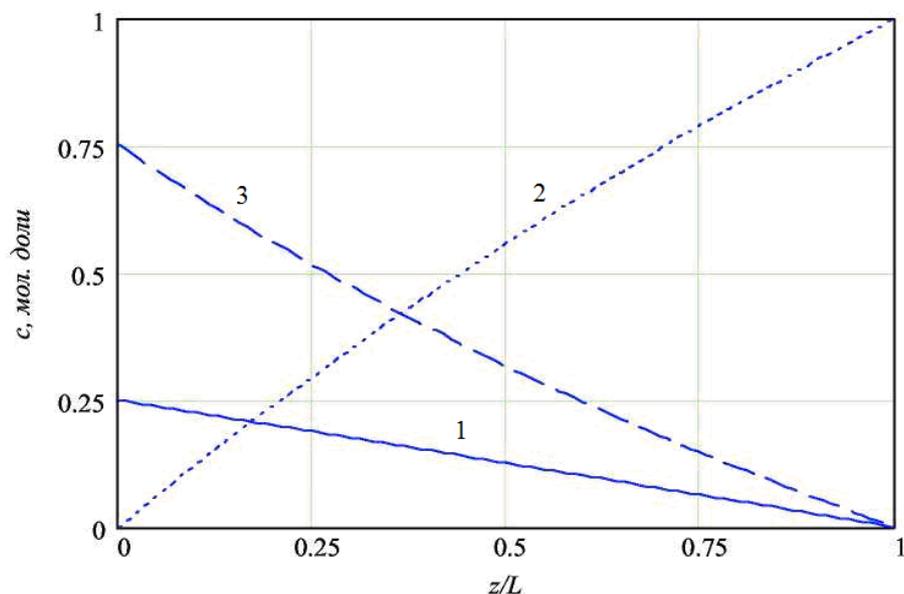


Рисунок 4 – Распределение концентрации по длине канала для диффузионно неустойчивой системы $N_2 - (0,25 H_2 + 0,75 Ar)$ при $T = 298$ К. 1 – H_2 , 2 – N_2 , 3 – Ar .

Соотношения (3) позволяют найти распределение плотности, а также градиент этой функции:

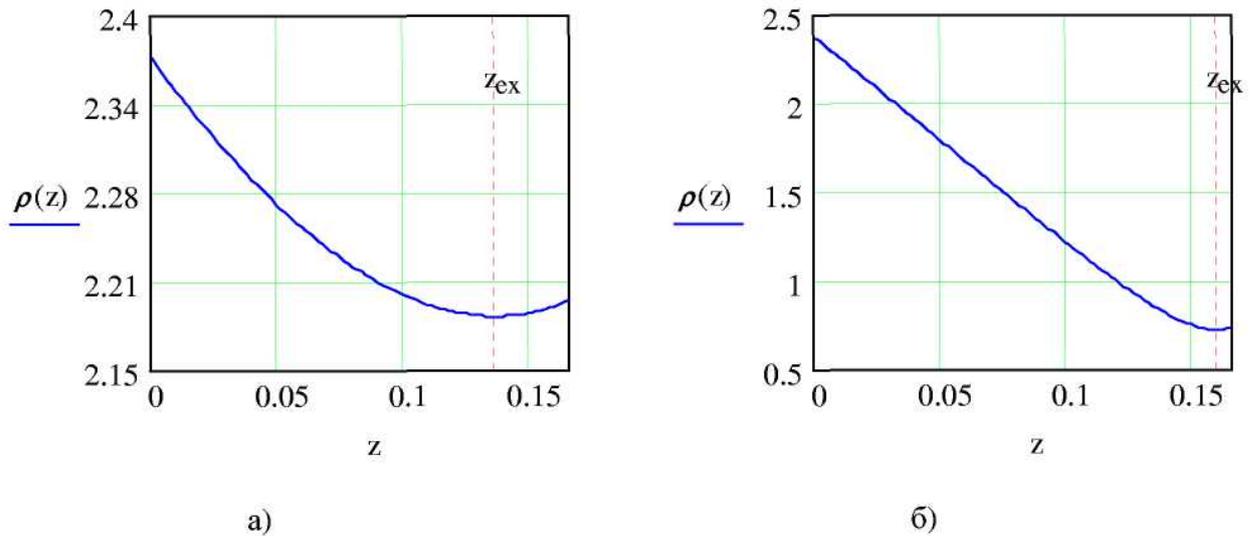
$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \frac{d\rho}{dz} &= (m_1 - m_2) \cdot \frac{dc_1}{dz} + (m_3 - m_2) \cdot \frac{dc_3}{dz} = -Z \cdot X_3 \cdot (\Delta m_1 \cdot j_1 + \Delta m_3 \cdot j_3) + \\ &+ X_2 \cdot e^{\frac{z}{L}} \cdot (\Delta m_1 \cdot K_1 - \Delta m_3 \cdot K_3), \end{aligned} \quad (4)$$

$$\Delta m_i = m_i - m_2.$$

Анализ (4) показывает, что при достаточно больших значениях c_{2I} экспоненциальный член приводит к нелинейности в распределении плотности по длине канала, что определяет возможность инверсии градиента плотности в течение процесса подстройки под граничные условия с $\rho_I < \rho_{II}$. Перейдем к рассмотрению возникновения инверсии градиента плотности смеси для различных начальных размещений газовых компонентов относительно диффузионного канала.

Рассмотрим инверсию градиента при смешении бинарной газовой смеси с чистым

компонентом, расположенным в нижней колбе. На рисунке 5 приведено распределение плотности смеси по длине капилляра для систем $(0,6388 CH_4 + 0,3612 R12) - n-C_4H_{10}$ и $(0,88 He + 0,12 R12) - n-C_4H_{10}$, иллюстрирующее возможность инверсии градиента плотности в течение процесса подстройки под граничные условия с $\rho_I < \rho_{II}$. Очевидно, что такое распределение плотности может служить причиной возникновения конвекции при диффузионном смешении. Рассмотрим условие возникновения нелинейности $\rho(z)$ при различных значениях величины c_{2I} для $\rho_I < \rho_{II}$.



а – $(0,6388 \text{ CH}_4 + 0,3612 \text{ R12}) - \text{н-C}_4\text{H}_{10}$ при $P = 0,1 \text{ МПа}$, $T = 298 \text{ К}$;
 б – $(0,88 \text{ He} + 0,12 \text{ R12}) - \text{н-C}_4\text{H}_{10}$ при $P = 0,1 \text{ МПа}$, $T = 298 \text{ К}$.

Рисунок 5 – Распределение концентрации по длине канала для диффузионно неустойчивых систем при $T = 298 \text{ К}$

Продифференцировав и приравняв к нулю выражение (4), можно получить координату экстремума плотности в канале:

$$z_{\text{extr}} = Z \cdot \ln \left[\frac{(j_1 \cdot \Delta m_1 + j_3 \Delta m_3) \cdot Z \cdot X_3}{(K_1 \cdot \Delta m_1 - K_3 \cdot \Delta m_3) \cdot X_2} \right]. \quad (5)$$

Для уточнения типа экстремума вычислим вторую производную плотности в координате z

$$\frac{1}{n} \frac{d^2 \rho}{dz^2} = \frac{X_2}{Z} \cdot e^{\frac{z}{Z}} \cdot (\Delta m_1 \cdot K_1 - \Delta m_3 \cdot K_3). \quad (6)$$

Значение второй производной (6) в точке экстремума не равно нулю, т.е. это экстремум, а не перегиб. Значение второй производной может быть как положительным, так и отрицательным. Следовательно, внутри канала возможен как максимум, так и минимум плотности.

Заключение. Таким образом, решена система уравнений трехкомпонентной стационарной диффузии через цилиндрический вертикальный канал. Установлено, что по мере увеличения концентрации самого тяжелого по

плотности компонента смеси его нелинейность распределения по длине канала становится более явной. Существуют такие исходные составы смеси, когда за счет различия в коэффициентах диффузии компонентов может наблюдаться сосредоточение самого тяжелого по плотности компонента в определенной вертикальной координате. При этом возможна инверсия градиента плотности.

Анализ на экстремум нелинейного распределения плотности смеси в канале показывает, что внутри канала возможен как максимум, так и минимум плотности смеси. Такое распределение плотности в смеси может явиться причиной возникновения неустойчивости механического равновесия системы с возможным возникновением концентрационной гравитационной конвекции. В этих условиях конвективный перенос самого тяжелого по плотности компонента будет являться преимущественным по отношению к другим. Сравнительный анализ и численный расчет распределений концентраций и плотности в смесях с углеводородами и экологически вредными примесями (фреоны) показал обоснованность такого предположения.

References

- 1 Kosov V.N., Seleznev V.D., Zhavrin Yu. I. The inversion of density gradient during the isothermal binary diffusion of gases equally diluted by a third gas // Thermophysics and aeromechanic. – 1998. – Vol. 5, No. 2. – P. 189-194.
- 2 Aleksandrov O.E. The exact solution of the equation for diffusion of a three-component mixture through a capillary // Tech. Phys. – Vol. 46, No. 11. – P. 1367-1370.
- 3 Suetin P.E., Volobuev P.V. Barroeffect pri vzaimnoi diffuzii gazov // Zh.Tech.Phys. – 1964. – Vol. 34, No. 6. – P. 1107-1114.
- 4 Seleznev V.D., Smirnov V.H. Diffusiya trekhkomponentnoi smesi gazov v sisteme dvukh kolb // Zh.Tekh.Fis. – 1981. – Vol. 51, No. 4. – P. 975-980.