

ОБВИНЦЕВА НИНА ЮРЬЕВНА

**МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕЖФАЗНОГО МАССОПЕРЕНОСА В
УСЛОВИЯХ ЕСТЕСТВЕННОЙ КОНВЕКЦИИ**

05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва 2009

Работа выполнена в ФГУП «Научно-исследовательский физико-химический институт им. Л.Я. Карпова»

Научный руководитель:

доктор химических наук, профессор Каминский Владимир Александрович

Научный консультант:

кандидат физико-математических наук Калачинская Ирина Станиславовна

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор Елизарова Татьяна Геннадьевна

доктор физико-математических наук, профессор Тимашев Сергей Федорович

Ведущая организация:

Учреждение Российской академии наук Институт проблем механики

им. А.Ю. Ишлинского РАН

Защита состоится «11» июня 2009 г. в ____ час. ____ мин. на заседании диссертационного совета Д.002.058.01 при институте математического моделирования РАН по адресу: 125047, Москва, Миусская пл. 4а

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке института математического моделирования РАН

Автореферат разослан « » _____ 2009 г.

Ученый секретарь Диссертационного совета Д.002.058.01,

доктор физико-математических наук

Змитренко Н.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы

Межфазный перенос в системах жидкость–газ играет важную роль в различных природных и технологических процессах. Интенсивность тепломассоотдачи во многом определяется режимом переноса в системе, который может осуществляться в результате молекулярного или конвективного механизма, в турбулентных потоках – за счет хаотического движения вихрей. В связи с этим исследование режима переноса в зависимости от физико-химических параметров является важной задачей при описании конкретных процессов.

Возникновение конвективной неустойчивости в системе приводит к развитию самопроизвольных течений, которые могут образовывать упорядоченные диссипативные структуры. По механизму возникновения разделяют неустойчивости, вызванные капиллярными либо плотностными эффектами, связанными в свою очередь с концентрационной или температурной неоднородностью. Переход к режиму развитой конвекции характеризуется интенсификацией межфазного тепломассопереноса. Исследование развития конвекции включает изучение следующих вопросов: определение критических условий потери устойчивости, определение скорости развития конвективной неустойчивости, анализ структуры стационарных конвективных течений и ее влияние на характеристики тепломассопереноса. Основные результаты получены для задач теплопереноса. В задачах массопереноса конвективная неустойчивость исследуется реже, причем такие задачи имеют ряд особенностей: в общем случае необходимо рассматривать двухфазную систему и учитывать возникновение конвективных потоков, связанных с межфазным переходом. Данная работа направлена на исследование возникновения конвективных течений в газовой фазе при испарении жидкостей. Возможность возникновения гравитационной конвекции в газовой фазе в процессе испарения часто не учитывается, в связи с этим его описание в литературе является недостаточно полным. Результаты экспериментальных исследований нестационарного процесса испарения чистых жидкостей и бинарных растворов

[1] показали, что при определенных условиях, происходит возрастание скорости испарения. Переход к интенсивному режиму объяснялся сменой диффузионного режима испарения на конвективный.

Основной задачей при изучении испарения является определение скорости испарения в различных режимах процесса, а при испарении бинарных и более сложных растворов – кроме того, определение состава отходящего пара в зависимости от физико-химических свойств и условий протекания процесса. Для развития представлений о механизме процессов, протекающих при нестационарном испарении, необходимы теоретические исследования, которых к настоящему моменту недостаточно.

Одним из основных методов исследования устойчивости динамических систем является линейный анализ, однако его возможности ограничены классом стационарных задач, т.е. изучением систем с линейным распределением плотности по высоте в начальный момент времени. Использование численных методов для решения уравнений динамики движения среды с учетом свободной и вынужденной конвекции позволяет моделировать физико-химические процессы в широком диапазоне параметров. В данной работе проводится моделирование массопереноса при испарении в условиях развитой конвекции на основе решения нестационарных уравнений Навье–Стокса и конвективной диффузии.

Цели и задачи работы

Исследование условий возникновения и закономерностей развития гравитационной конвекции, изучение режимов массопереноса в процессе нестационарного испарения чистой жидкости и бинарных растворов.

Для достижения поставленной цели в диссертационной работе решаются следующие задачи:

1. разработка численного алгоритма, его верификация и создание на его основе программ для решения уравнений конвективного массопереноса при моделировании процессов испарения чистых жидкостей и бинарных растворов в газовой фазе;

2. анализ условий возникновения конвективной неустойчивости и изучение скорости испарения при разных режимах процесса в зависимости от начальных условий и физико-химических параметров системы;
3. исследование динамики развития конвективных течений и их структуры в газовой фазе;
4. исследование влияния конвекции на массоперенос.

Научная новизна

На основании результатов численных расчетов для одно- и двухкомпонентных систем определены критические условия потери устойчивости для нестационарных процессов испарения. Рассчитана скорость испарения жидкости и определена структура течений в режиме интенсивной конвекции. Для бинарных систем установлено существование более одного стационарного режима, т.е. скорость испарения и состав пара могут различаться в зависимости от распределения концентрации компонентов пара по высоте газовой фазы в начальный момент времени. Показано, что вынужденная конвекция может как увеличивать, так и уменьшать скорость испарения в условиях развития естественной конвекции.

Теоретическая и практическая значимость.

Результаты проведенных в работе исследований могут быть использованы при изучении и моделировании процессов сопровождающихся тепломассопереносом, разработке методов интенсификации процесса испарения, выборе оптимальных режимов проведения технологических процессов, сопровождающихся тепломассопереносом, проектировании соответствующих химических аппаратов и реакторов, при изучении природных явлений, связанных с испарением. Результаты вычислительных экспериментов могут быть использованы для анализа экспериментальных данных и построения теоретических прогнозов.

На защиту выносятся:

– результаты моделирования динамики развития конвективной неустойчивости при нестационарном испарении однокомпонентных жидкостей в условиях гравитационной конвекции;

- результаты моделирования динамики развития гравитационной конвекции в бинарных системах в зависимости от физико-химических параметров и начальных условий;
- результаты моделирования массопереноса в процессе испарения однокомпонентной жидкости в плоском вертикальном канале;
- результаты численных расчетов по сопоставлению влияния вынужденной и естественной конвекции на скорость испарения;
- данные по оценке времени начала влияния конвекции на массоперенос и критических условий возникновения конвективной неустойчивости в зависимости от чисел Релея;
- результаты численных расчетов по интенсивности массообмена для ряда систем при различных числах Релея;
- сопоставление данных численного моделирования с литературными экспериментальными данными по скорости испарения для ряда исследуемых систем.

Апробация работы.

Изложенные в диссертации результаты работы докладывались на XXII Научной конференции стран СНГ “Дисперсные системы” (Одесса, 2006), на 13 Международной конференции “Математика. Компьютер. Образование.” (Пушино, 2007), на XX Международной научной конференции “Математические методы в технике и технологиях” (Ярославль, 2007), на XXIII Научной конференции стран СНГ “Дисперсные системы” (Одесса, 2008).

Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на семинарах НИФХИ им. Л.Я. Карпова (декабрь 2008), Института математического моделирования РАН (апрель 2009), Института проблем механики РАН на семинаре “Численное моделирование процессов тепло- и массообмена”(рук. В.И. Полежаев, Г.С. Глушко) (апрель 2009).

Публикации по теме диссертации.

По теме диссертационной работы опубликовано 3 статьи, 4 трудов и 2 тезисов докладов на научных конференциях.

Структура и объем работы.

Диссертация состоит из введения, четырех глав, выводов, списка литературы и приложения. Работа изложена на 128 страницах, включает 31 рисунок и 1 таблицу. Список литературы содержит 120 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность исследования влияния конвективной неустойчивости на протекание процессов тепломассопереноса. Сформулированы цели и задачи исследования.

В **первой главе** проведен обзор работ по исследованию систем, сопровождающихся тепломассопереносом в условиях неустойчивой стратификации. Рассмотрены основные механизмы возникновения конвективной неустойчивости: под действием сил плавучести (неустойчивость Релея), либо под действием капиллярных сил (неустойчивость Марангони). Обсуждаются проявления этих эффектов в системах при переносе вещества или тепла. Рассмотрены работы, в которых изучаются критические условия возникновения неустойчивости и структуры конвективных течений в установившемся режиме, проанализировано влияние конвекции на характеристики тепломассопереноса. Особое внимание уделено экспериментальным результатам по исследованию процесса испарения в инертный газ чистых жидкостей и бинарных растворов.

Проанализированы основные математические методы, применяемые для анализа устойчивости систем и описания структур конвективных течений. Рассмотрены методы численного моделирования, которые используются для расчета динамики движения вязкой жидкости и нестационарного тепломассопереноса.

Во **второй главе** приводится описание задачи о нестационарном испарении жидкости, математическая постановка и методы ее численного решения.

В процессе испарения в результате молекулярной диффузии по высоте газовой фазы формируется нелинейное распределение концентрации пара и соответствующий ему профиль плотности. Если молекулярная масса испаряющейся жидкости меньше молекулярной массы принимающего газа

($M < M_0$), то в результате диффузии более легкие пары жидкости будут располагаться под тяжелым слоем газа. Такое распределение плотности неустойчиво к возмущениям, что может привести к развитию конвективной неустойчивости за счет гравитационного механизма. В случае $M > M_0$ испарение протекает только в диффузионном режиме. Основным безразмерным параметром, характеризующим свободную конвекцию, является число Релея $Ra = g\beta C^* H^3 / \nu D$, либо связанное с ним число Грасгофа $Gr = g\beta C^* H^3 / \nu^2$, которые могут принимать как положительные, так и отрицательные значения в зависимости от соотношения молекулярных масс. Здесь β - коэффициент линейной зависимости плотности газовой фазы от концентрации пара ($\beta = (RT/P)(1 - M/M_0)$), H - высота газовой фазы, C^* - концентрация насыщенного пара на межфазной поверхности, ν и D - коэффициенты кинематической вязкости и молекулярной диффузии пара в газовой фазе, соответственно. Критические условия в системе, соответствующие условиям потери устойчивости, характеризуются значениями Ra_{cr} и Gr_{cr} . Таким образом, особенностями задачи об испарении жидкости является нестационарный характер исследуемого процесса и нелинейный профиль плотности, формирующийся в результате молекулярной диффузии.

Постановка задачи. Движение парогазовой смеси в газовой фазе описывается в приближении двумерных течений на основе системы уравнений Навье-Стокса в приближении Буссинеска и конвективной диффузии для паров компонентов жидкости:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U}\nabla)\mathbf{U} &= -\frac{1}{\rho_0}\nabla p + \nu\Delta\mathbf{U} + g(\beta_1 C_1 + \beta_2 C_2)\mathbf{e}, \\ \operatorname{div}\mathbf{U} &= 0, \\ \frac{\partial C_i}{\partial t} + (\mathbf{U}\nabla)C_i &= D_i\Delta C_i, \quad i=1, 2, \end{aligned} \tag{1}$$

где $\mathbf{U} = (u, v)$ - вектор локальной скорости, p - давление, ρ_0 - плотность принимающего газа, t - время, g - ускорение силы тяжести, \mathbf{e} - единичный вектор нормали к поверхности жидкости.

В общем случае при постановке задачи об испарении жидкости в газовую фазу необходимо рассматривать двухфазную систему жидкость – газ. Кроме того, при испарении в газовой фазе в результате молекулярной диффузии возникает дополнительный конвективный (стефановский) поток парогазовой смеси, направленный от поверхности жидкости, поскольку на поверхности жидкости $div \mathbf{U} \neq 0$. В работе рассматриваются системы, в которых указанные эффекты несущественны. Поверхность раздела фаз считается недеформируемой. Сильное различие коэффициентов динамической вязкости двух фаз позволяет рассматривать развитие течений только в газовой фазе, при этом нижняя граница считается твердой. Принимается, что парциальные давления паров малы по сравнению с общим давлением в газовой фазе, что позволяет пренебречь стефановскими потоками. Граничные условия к системе уравнений (1):

$$z = 0: \quad \mathbf{U} = 0, \quad C_i = C_i^*, \quad (2)$$

$$z = H: \quad \mathbf{U} = 0, \quad C_i = 0 \quad \text{– для открытой системы или}$$

$$\partial C_i / \partial z = 0 \quad \text{– для закрытой системы,} \quad (3)$$

где H – полная высота сосуда. В используемой модели предполагается, что на границе раздела фаз сохраняется квазиравновесие между жидкостью и приповерхностным слоем пара в течение всего процесса, поэтому на нижней границе задается значение концентрации насыщенных паров C_i^* . Боковые стенки принимались твердыми и непроницаемыми для компонентов газовой фазы.

$$\text{Начальные условия: } \mathbf{U}(x, z, 0) = 0, \quad C_i(x, z, 0) = 0. \quad (4)$$

Задача характеризуется двумя масштабами безразмерного времени: гидродинамическим временем (время передачи импульса за счет вязкости) и диффузионным (время распространения вещества за счет молекулярной диффузии). Данные масштабы использовались при переходе к системе уравнений в безразмерных переменных и введении основных безразмерных параметров.

Для решения поставленной задачи выполнены численные расчеты с помощью двух разностных методов. В первом методе уравнения записывались в переменных “функция тока – вихрь” [2], во втором – в “естественных” переменных на основе квазигидродинамических уравнений (КГД) [3].

Метод расчета течений вязкой несжимаемой жидкости на основе КГД алгоритма является достаточно новым и перспективным. Точные решения КГД уравнений совпадают с известными решениями для ряда задач (например, течения Пуазейля и Куэтта.) Численные расчеты были проведены для задач о течении жидкости в квадратной каверне с подвижной верхней крышкой, о гравитационной конвекции в квадратной полости, подогреваемой сбоку и ряда других задач [3]. Тестирование КГД алгоритма для расчета нестационарных течений проводилось при моделировании тепловой конвекции в расплаве при малых числах Прандтля. Изучение нестационарного тепломассопереноса применительно к процессу испарения на основе КГД алгоритма ранее не проводилось.

Основные результаты численного моделирования, приведенные в данной работе, получены на основе КГД алгоритма.

Методика решения. Для решения уравнений конвективного массопереноса в переменных “функция тока – вихрь” применялась неявная разностная схема. Дифференциальные уравнения аппроксимировались консервативной разностной схемой с использованием направленных разностей против потока для конвективных членов. Для решения разностных уравнений вихря и концентрации использовалась продольно-поперечная схема переменных направлений. Данная разностная схема имеет первый порядок аппроксимации по пространству и времени.

Решение поставленной задачи в естественных переменных проводилось на основе КГД уравнений, которые представляют собой уравнения Навье – Стокса в приближении Буссинеска с дополнительными диссипативными слагаемыми. Последние выполняют роль регуляризаторов численного алгоритма, что позволяет проводить расчеты по явной разностной схеме. Для решения системы уравнений все пространственные производные, в том числе конвективные слагаемые, аппроксимируются центральными разностями. Значения всех искомых переменных – скорости, давления и концентраций – задаются в узлах пространственной сетки. На каждом временном шаге по явной схеме определяются значения скорости и концентрации, затем определяется поле

давления. Разностная схема имеет второй порядок аппроксимации по пространству и первый по времени.

Расчеты были проведены в предположении двумерных течений на равномерной сетке. При проведении вычислений потеря устойчивости происходила под действием возмущений, вызванных самим численным алгоритмом.

В **третьей главе** на основе результатов численных расчетов изучается динамика развития гравитационной конвекции, критические условия и особенности развития конвективной неустойчивости в нестационарных процессах, исследуются режимы массопереноса в газовой фазе при испарении однокомпонентной жидкости.

Моделирование массопереноса проводилось для систем в диапазоне числа Релея $10^4 < Ra < 10^6$. Динамика развития конвективной неустойчивости исследовалась по изменению полей скорости и концентрации и на основе характеристик массопереноса: зависимости от времени безразмерного потока $Sh(t)$ на нижней границе и зависимости полного количества испарившейся жидкости с единицы площади от квадратного корня из времени $Q(\sqrt{t})$. Безразмерный поток определяется как $Sh = q/q_{st}$, где q - поток через нижнюю границу, усредненный по поверхности, $q_{st} = DC^*/H$ - диффузионный поток в стационарном режиме.

На основе результатов моделирования процесса испарения установлено, что развитие исследуемых систем с неустойчивой стратификацией протекает по следующим стадиям. В начале процесса пары занимают тонкий приграничный слой у поверхности жидкости, увеличивающийся со временем. Массоперенос в системе на этой стадии происходит в режиме молекулярной диффузии. При дальнейшем развитии система теряет устойчивость, при этом происходит переход от диффузионного режима к конвективному. Смена режимов наблюдалась по зависимости безразмерного потока на нижней границе от времени $Sh(\tau)$ (рис.1), где $\tau = tD/H^2$ - безразмерное время. Для закрытой (зависимость 1) и открытой (зависимость 2) системы - зависимости $Sh(\tau)$

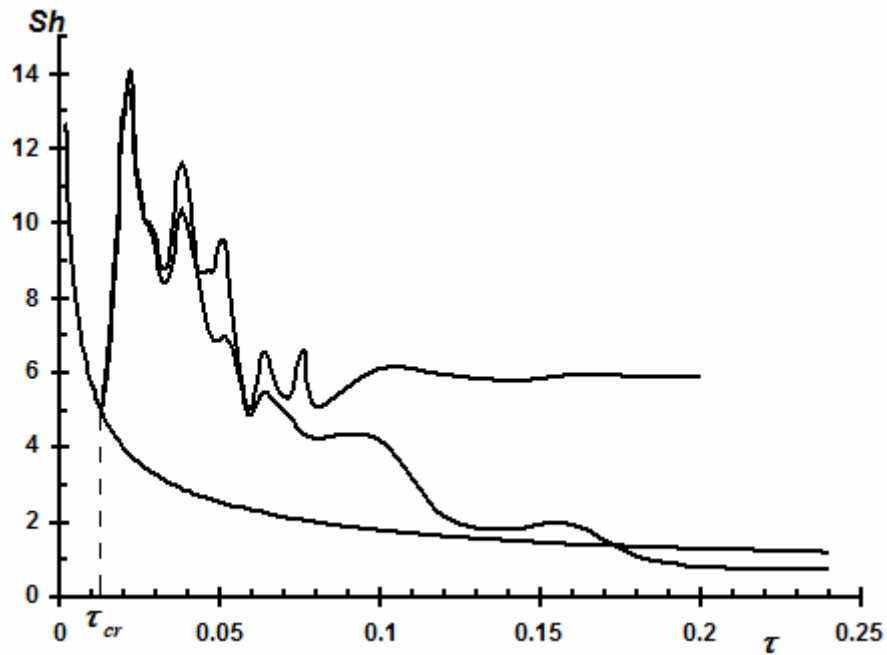


Рис. 1. Зависимости от времени безразмерного потока $Sh(\tau)$ на нижней границе: 1 – открытая система, 2 - закрытая система, 3 – закрытая система без учета конвекции при значениях параметров $Ra = 7.7208 \cdot 10^5$, $Sc = 0.6024$.

сначала плавно убывают, затем испытывают резкий скачок. Момент времени τ_{cr} , соответствующий переходу к конвективному режиму, определялся как время, при котором $Sh(\tau)$ достигает минимального значения.

Существенный переход в закритическую область характеризуется быстрым развитием конвективных течений и увеличением скорости испарения. Результаты расчетов показывают, что на данной стадии развития конвективные течения реализуются в виде крупномасштабных вихрей, которые занимают всю область системы. На заключительной стадии испарения в случае закрытой системы конвекция затухает, и окончательное насыщение газовой фазы парами жидкости происходит в диффузионном режиме. В открытой системе устанавливается стационарный конвективный режим. На основе полученных зависимостей $Sh(\tau)$ исследовалась смена диффузионного и конвективного режимов, были сопоставлены скорости переноса на разных стадиях процесса для открытой и закрытой систем. Механизмы массопереноса в интенсивном режиме изучались по профилям концентрации, а также профилям диффузионного и конвективного потока по высоте области.

При изучении нестационарных процессов важным вопросом является определение момента времени потери устойчивости t_{cr} , поскольку он позволяет уточнить представления о начальной стадии развития неустойчивости. Оценить критическое время можно по появлению замкнутых линий тока, по зависимости $Sh(t)$ на нижней границе и по излому зависимости $Q(\sqrt{t})$. Было показано, что значения t_{cr} , полученные на основе данных критериев, различаются. В связи с этим возникает неоднозначность понятия критических условий для нестационарных процессов.

На основе результатов численных расчетов для исследуемых систем определяется высота диффузионного слоя на момент потери устойчивости, и оценивается критическое число Релея Ra_{cr} , которое, в нестационарной задаче является функцией от времени. На начальной стадии процесса пар занимает тонкий слой у поверхности жидкости, поэтому можно сравнить полученные значения критического числа Релея со значением Ra_{cr} в задаче Релея – Бенара с твердыми границами ($Ra_{cr} = 1708$). Полученные в работе значения намного превышают Ra_{cr} для задачи в стационарной постановке. Такое различие объясняется особенностью нестационарных процессов по сравнению со стационарными, поскольку после потери устойчивости системе требуется дополнительное время для развития возмущений при переходе в закритическую область.

В работе проводится сопоставление результатов моделирования по испарению однокомпонентных жидкостей, которые получены с помощью двух представленных подходов к решению задачи (на основе уравнений в переменных “функция тока - вихрь” и КГД уравнений). Сопоставление показало, что основные стадии развития систем, соответствующие им режимы и характерные структуры конвективных течений совпадают, однако значения критического времени отличаются. Результаты численных расчетов на основе КГД алгоритма хорошо согласуются с экспериментальными данными, полученными в [1].

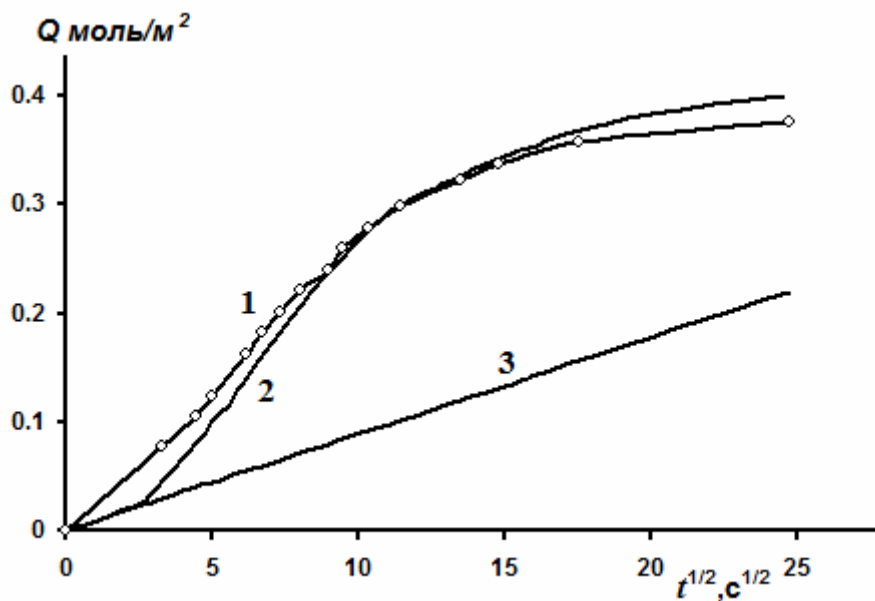


Рис.2. Зависимости $Q(\sqrt{t})$: 1 – экспериментальные данные, 2 – результаты численного моделирования, 3 – диффузионная зависимость.

Сравнение результатов расчета с экспериментальными данными [1] для процесса нестационарного испарения однокомпонентной жидкости представлено для системы вода ($M=18$) - аргон ($M_0=40$). Эксперимент проводился в цилиндрическом сосуде с диаметром 0.112м и высотой 0.257м при температуре 30^0C . Экспериментальные данные по скорости испарения представлены в виде зависимости полного количества испарившейся жидкости от корня из времени $Q(\sqrt{t})$. Численные расчеты выполнены на основе КГД алгоритма и соответствуют реальным физическим параметрам системы. Основным допущением при моделировании является ограничение двумерными течениями. Результаты сравнения соответствующих зависимостей представлены на рис. 2. На начальном этапе процесса расчетная зависимость (2) совпадает с диффузионной прямой (3), переход к режиму развитой конвекции соответствует излому графика $Q(\sqrt{t})$.

Представленные результаты численных расчетов относятся к каналу, неограниченному в направлении оси y , в качестве другого предельного случая рассматривается испарение в вертикальном плоском канале.

На основе результатов моделирования процесса испарения в плоском вертикальном канале было исследовано влияние стенок на развитие

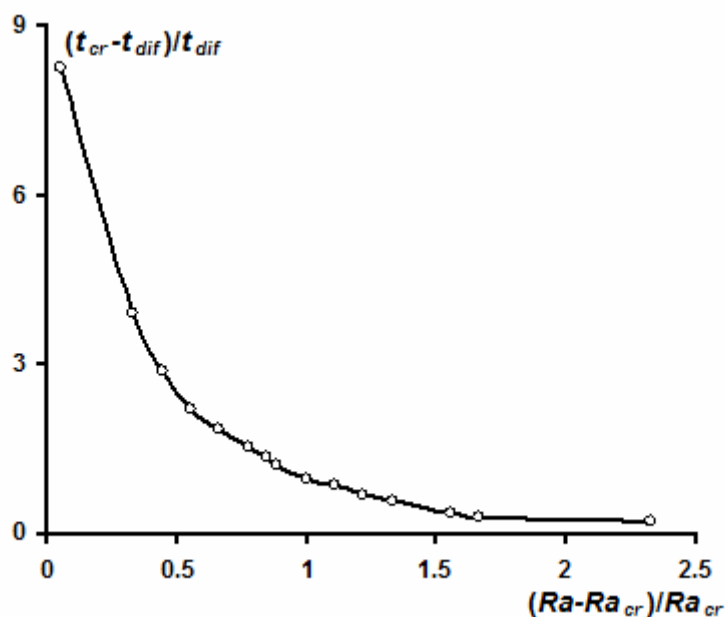


Рис.3. Зависимость времени задержки развития конвекции в вертикальном канале.

конвективной неустойчивости. В процессе испарения сопротивление стенок канала затрудняет движение среды и развитие конвекции, что приводит к увеличению времени перехода к конвективному режиму. Исследование этой системы облегчает изучение критического времени возникновения конвективных течений и характеристик массопереноса.

Канал образован вертикальными параллельными стенками, расположенными в плоскости (x, z) на расстоянии h друг от друга. Для описания взаимодействия пара со стенками в уравнение Навье-Стокса вводится дополнительный член $-AU$, где $A = 12\nu/h^2$ для параболического профиля. Для расчетов использовались граничные условия (3). Моделирование выполнено в канале с квадратными стенками в большом диапазоне чисел Релея.

На основании результатов расчетов для данной системы определено критическое значение числа Релея, которое практически совпадает с Ra_{cr} , полученным на основе линейной теории [5]. Это объясняется тем, что при выбранных условиях, время t_{cr} развития в диффузионном режиме больше времени t_{dif} , за которое пары жидкости вследствие диффузионного переноса достигают верхней границы области. Время задержки развития конвекции по сравнению со временем формирования диффузионного профиля по высоте

области при разных значениях Ra прослежено по зависимости $(t_{cr} - t_{dif})/t_{dif}$ от $(Ra - Ra_{cr})/Ra_{cr}$ (рис.3).

На основе анализа представленных результатов делается вывод о том, что применение “двухвременного приближения”, в котором развитие конвективной неустойчивости рассматривается как быстрый процесс по сравнению с молекулярной диффузией, при исследовании устойчивости в нестационарных процессах требует дополнительного анализа и обоснования.

Приведенные выше результаты численных расчетов описывают испарение жидкости в неподвижную газовую фазу. Представляет интерес рассмотреть испарение в условиях вынужденной конвекции. На основе результатов моделирования испарения жидкости в канале с продольным потоком в газовой фазе изучено влияние вынужденной конвекции на скорость испарения в условиях развития гравитационной конвекции. Расчеты проведены в удлиненной области с аспектным отношением $L/H=2$ (L , H - длина и высота области) в двумерном приближении (x, z) . Испаряющаяся жидкость находится в центре нижней границы при $x_1 < x < x_2$. На боковой границе при входе в канал по высоте газовой фазы задается постоянная горизонтальная скорость u_0 . Движение среды под воздействием вынужденного потока характеризуется числом Рейнольдса $Re = u_0 H / \nu$. На основе результатов расчетов для трех систем показано, что при развитии конвекции Релея в газовой фазе вынужденная конвекция может как увеличивать, так и уменьшать скорость испарения в зависимости от соотношения между безразмерными параметрами системы Re и Ra .

В четвертой главе на основе результатов численного моделирования испарения двухкомпонентного раствора изучаются условия потери устойчивости; исследуются режимы протекания процесса в зависимости от физико-химических параметров и начальных условий.

В зависимости от состава бинарного раствора процесс испарения может протекать в диффузионном или в конвективном режимах. В бинарной системе профиль относительной плотности, который формируется по высоте газовой фазы, определяется отношением $\beta_1 C_1^* / (\beta_2 C_2^*)$ и распределением концентрации компонентов пара в начальный момент времени. Интерес представляет система, в которой молекулярная масса одного компонента больше ($\beta_1 > 0$), а другого

меньше ($\beta_2 < 0$) молекулярной массы принимающего газа. При этом для соответствующих коэффициентов диффузии принимается соотношение $D_1/D_2 < 1$.

При стационарной постановке задачи, т.е. когда в начальный момент времени по высоте газовой фазы задано линейное распределение концентраций обоих компонентов пара ($C_i = C_i^*(1 - z/H)$), это распределение является устойчивым стационарным решением задачи. В этом случае, процесс испарения полностью протекает в устойчивом диффузионном режиме.

При нестационарном испарении диффузия легкого компонента в начале процесса происходит быстрее, чем тяжелого. В результате в газовой фазе у поверхности жидкости образуется слой, плотность которого больше плотности принимающего газа, а выше него - слой пониженной плотности. Таким образом, формируется профиль плотности, который не только нелинейный, но может быть и существенно немонотонным. За счет сил плавучести, конвективные течения в данной системе могут возникнуть выше тяжелого слоя. В такой постановке задача определения критических условий возникновения конвекции и существования стационарных конвективных режимов становится значительно более сложной.

Динамика процесса нестационарного испарения изучается в работе на основе результатов численного решения уравнений (1) с граничными условиями (2) и начальными условиями (4). Расчеты проведены в квадратной области с $H=0.1$ м при следующих параметрах: $Gr_1 = -5.64 \cdot 10^5$, $Gr_2 = 4.89 \cdot 10^5$, $Sc_2 = 0.625$ и при трех разных значениях Sc_1 : 1- $Sc_1 = 0.625$, 2- $Sc_1 = 1.25$, 3- $Sc_1 = 2.5$. Развитие данных систем описывается зависимостями безразмерного потока для компонентов на нижней границе от времени $Sh_i(t)$. В связи с тем, что диффузионный перенос компонентов происходит независимо, различия в зависимостях потоков от времени связаны с конвективным переносом. Зависимость $Sh_2(\tau)$ для легкого компонента, ответственного за развитие

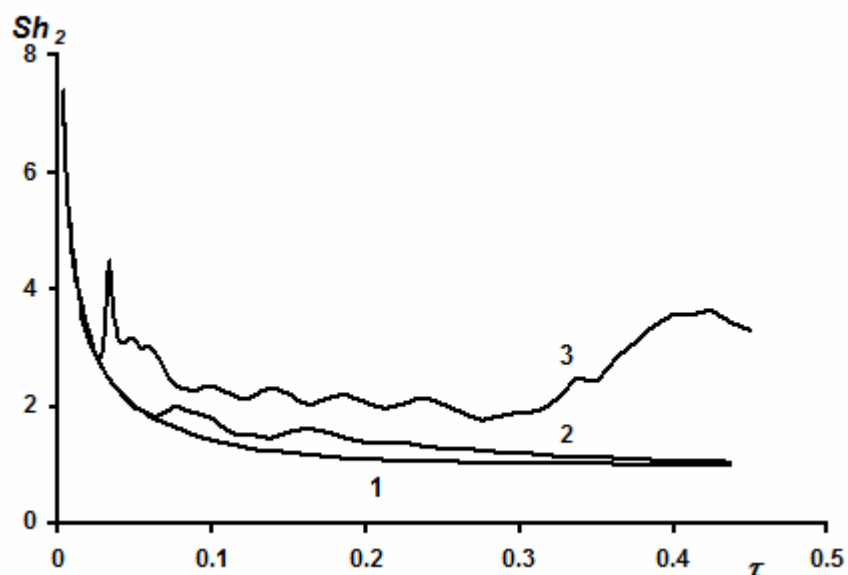


Рис.4. Зависимость $Sh_2(\tau)$ при разных значениях Sc_1 : 1- 0.625, 2- 1.25, 3- 2.5.

конвекции, для трех систем представлена на рис. 4. В системе 1 испарение происходит в диффузионном режиме в течение всего времени.

Во второй системе после потери устойчивости возникают конвективные течения, которые приводят к некоторому ускорению испарения, но со временем они затухают, и устанавливается диффузионный режим. В системе 3 возникает конвекция, которая сохраняется в течение всего процесса. На конечном этапе система выходит на стационарный конвективный режим. Однако, как отмечалось выше, данная система при линейном распределении концентрации компонентов пара в начальный момент времени не теряет устойчивость и развивается в диффузионном режиме в течение всего процесса. Следовательно, для данной бинарной системы наблюдается как минимум два стационарных состояния.

На основе результатов расчетов установлено, что в бинарных системах режим испарения влияет не только на скорость испарения, но и на состав пара отходящего от поверхности жидкости. Состав пара можно характеризовать отношением безразмерных потоков компонентов на нижней границе Sh_1 / Sh_2 . Как видно по зависимости потоков компонентов от времени для системы 3 (Рис.5) в установившемся конвективном режиме $Sh_1 / Sh_2 > 1$. Это значит, что за счет конвекции доля тяжелого компонента в газовой фазе увеличилась по

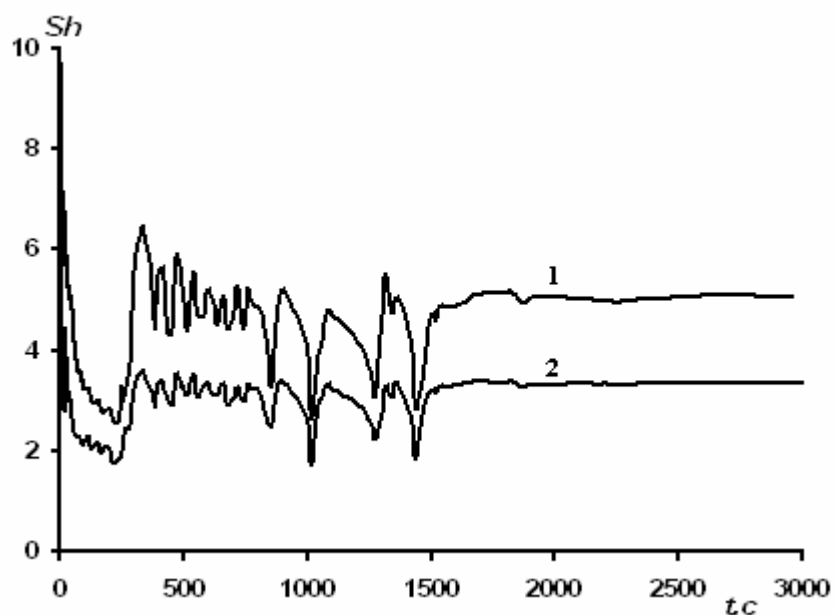


Рис.5. Испарение бинарного раствора. Зависимость от времени Sh_1 (1) и Sh_2 (2).

сравнению с диффузионным режимом. Изменение отношения потоков компонентов раствора связано с тем, что в области интенсивной конвекции скорость переноса определяется скоростью конвекции и слабо зависит от коэффициентов молекулярной диффузии компонентов.

Представлены результаты моделирования развития конвекции в бинарной системе при $D_1/D_2 > 1$. Расчет выполнен при следующих безразмерных параметрах: $Gr_1 = -5.64 \cdot 10^5$, $Gr_2 = 4.89 \cdot 10^5$, $Sc_1 = 0.625$, $Sc_2 = 2.5$. Установлено, что в данной системе в течение всего процесса наблюдаются колебания потока. При заданном начальном линейном распределении концентрации компонентов по высоте слоя в системе также развивается конвекция. При этом в обоих случаях в конвективном режиме по сравнению с диффузионным происходит как увеличение скорости испарения, так и изменение состава паровой смеси по сравнению с диффузионным режимом.

Таким образом, на примере испарения бинарных растворов в работе показано, что для определения конвективной устойчивости систем с неустойчивым распределением плотности недостаточно пользоваться критерием устойчивости для систем с линейным начальным распределением, поскольку

характер установившегося режима может зависеть от распределения концентрации компонентов по высоте слоя в начальный момент времени.

Для сравнения результатов численного моделирования с экспериментальными данными [1] используются данные по нестационарному испарению бинарного раствора муравьиная кислота-вода в аргон в закрытом сосуде. Эксперимент проводился при температуре 30⁰С, с мольной долей муравьиной кислоты 0.5. Численный расчет выполнен для реальных физических параметров системы. Результаты сравнения (рис.6) представлены для зависимостей полного количества испарившейся жидкости за время t $Q(t^{1/2})$.

В данной системе более легкие пары воды ($M_2=18$) при испарении в аргон ($M_0=41$) приводят к возникновению конвекции и более интенсивному переносу муравьиной кислоты ($M_1=46$). Начальный линейный участок зависимости $Q(\sqrt{t})$ описывается уравнением молекулярной диффузии. Время перехода к конвективному режиму соответствует излому приведенной зависимости.

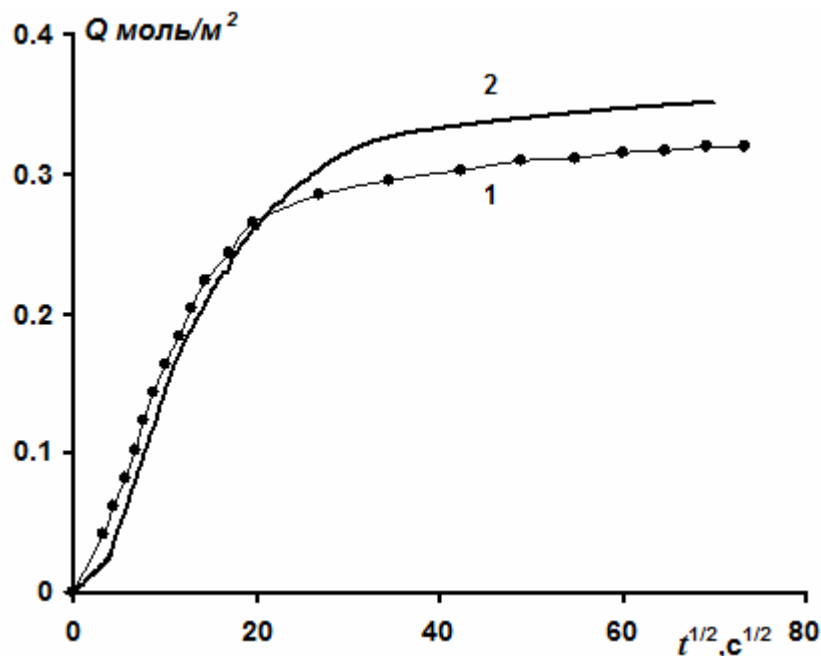


Рис.6. Испарение бинарного раствора муравьиная кислота-вода в аргон. Зависимости $Q(\sqrt{t})$: 1 – экспериментальные данные, 2 – численное моделирование.

Основные результаты и выводы

1. Разработан численный алгоритм и созданы программы для математического моделирования динамики развития систем при нестационарных процессах конвективного теплопереноса применительно к задаче об испарении чистых жидкостей и бинарных растворов.
2. На основе результатов математического моделирования определены критические условия возникновения конвективной неустойчивости для ряда исследуемых систем.
3. Установлено, что для нестационарных процессов массопереноса существует задержка развития конвекции по сравнению с критическим временем, определяемым по линейной теории.
4. Определена структура конвективных течений в режиме развитой конвекции.
5. Установлена зависимость скорости переноса в конвективном режиме от физико-химических параметров при испарении чистых жидкостей и бинарных смесей.
6. Установлено существование более одного стационарного режима для бинарных систем.
7. Показано, что вынужденная конвекция может как увеличивать, так и уменьшать скорость испарения в условиях естественной конвекции.

Цитируемая литература

1. Дильман В.В., Лотхов В.А., Кулов Н.Н., Найденов В.И. Динамика испарения // Теор. основы хим. технол., 2000, т.34, №3, с.227-236.
2. Герасимов Б.П. Один метод расчета задачи конвекции несжимаемой жидкости. М.: Препринт/ИПМ №13, 1975. – 33 с.
3. Елизарова Т.Г., Калачинская И.С., Ключникова А.В., Шеретов Ю.В. Использование квазигидродинамических уравнений для моделирования тепловой конвекции при малых числах Прандтля. // ЖВМиМФ, 1998, т. 38, №10.
4. Каминский В.А., Дильман В.В. Влияние стенок на развитие конвективной неустойчивости в вертикальном канале ограниченной высоты // Теор. основы хим. технол., 2007, т.41, №1, с.1-4.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Каминский В.А., Обвинцева Н.Ю., Калачинская И.С., Дильман В.В. Моделирование конвекции Релея в нестационарном процессе испарения // Матем. моделирование. 2007. Т. 19. № 11. С. 3–10.
2. Каминский В.А., Обвинцева Н.Ю. О режимах испарения бинарных растворов // Теор. основы хим. технол. 2007. Т. 41. № 5. С. 536-542.
3. Каминский В.А., Обвинцева Н.Ю. Испарение жидкости в условиях конвективной неустойчивости в газовой фазе // Журн. физ. химии. 2008. Т. 82. № 7. С. 1368-1373.
4. Обвинцева Н.Ю., Калачинская И.С., Каминский В.А. Моделирование гравитационной конвекции в нестационарном процессе испарения // "Математика. Компьютер. Образование". Сб. трудов XIV международной конференции. Пушкино. 2007. Том 2. С. 173-178.
5. Обвинцева Н.Ю., Каминский В.А., Калачинская И.С. Моделирование динамических режимов испарения // Сб. тр. МНК ММГТ-20. Т.3. Ярославль: Изд-во Яросл. гос. техн. ун-та, 2007.
6. Обвинцева Н.Ю., Каминский В.А., Калачинская И.С. Моделирование нестационарного процесса испарения в замкнутый объем // Тез. докл. "Дисперсные системы" XXII научная конференция стран СНГ, Одесса. 2006.
7. Обвинцева Н.Ю., Каминский В.А., Калачинская И.С. Моделирование процесса испарения одно- и двухкомпонентных жидкостей // Тез. докл. "Дисперсные системы" XXIII научная конференция стран СНГ, Одесса. 2008.
8. Обвинцева Н.Ю., Каминский В.А. Моделирование процесса испарения в условиях естественной и вынужденной конвекции в газовой фазе // Сб. тр. МНК ММГТ-22. Т.3. Псков: Изд-во Псков. гос. политехн. ин-та, 2009.
9. Kaminsky V.A., Obvintseva N.Yu., Kalachinskaya I.S. Numerical simulation of unsteady two-dimensional convection in evaporation process // Modeling of Nonlinear Processes and Systems, Nova Science Publishers, NY, USA, 2009 (IV Quarter), (in press).