

А. С. МУРАТОВ

ЭФФЕКТЫ НЕМОНОТОННОЙ РЕЛАКСАЦИИ ПРИ ПЕРЕНОСЕ ТЕПЛА И МАССЫ В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМАХ

В работе [1] на основе термодинамики необратимых процессов, характеризуемой тем, что диссипативные потоки вводятся в качестве параметров локального состояния, дано обобщение уравнений переноса для сильно неравновесных процессов. Данная теория, учитывающая релаксационные эффекты, обладает всеми достоинствами и недостатками феноменологической теории. Альтернативным направлением является использование неравновесной статистической механики, располагающей методами построения таких уравнений, которые позволяют с единой точки зрения описать различные гидродинамические явления, обосновать существующие феноменологические модели, а также доопределить их, т.е. вычислить входящие в феноменологические уравнения неизвестные коэффициенты переноса.

При этом определяющие соотношения, т.е. такие соотношения, которые устанавливают связь между потоками и термодинамическими силами, являются нелокальными и запаздывающими. Пространственная нелокальность может быть обусловлена особенностями взаимодействия структурных элементов среды, а запаздывание связано с конечной скоростью распространения возмущений в среде и с конечной скоростью взаимодействия элементов среды. Получаемые при этом обобщенные уравнения переноса позволяют описывать как классические, так и неклассические среды, а также быстропротекающие и высокоградиентные процессы.

Общая структура потока имеет следующий вид [1-3]:

$$J_n(R, t) = J_n(R, t_0) + J_{n_0}(R, t) + \sum \iint dt_1 dR' N_{ni}(R, R', t, t_1) F_i(R', t), \quad (2)$$

где N_{ni} - релаксационные ядра переноса; F_i - термодинамические силы.

Поэтому перспективен расчет релаксационных ядер переноса методами, использующими различные аппроксимации, основанные на информации о физическом механизме процессов.

Необходимо отметить широкие возможности моделирования с помощью релаксационных ядер переноса при минимуме феноменологических соображений, что делает данный метод перспективным при изучении влияния эффектов пространственно-временной нелокальности на явления тепломассопереноса.

Так, с помощью подобных методов можно вывести уравнения переноса с учетом перекрестных диффузионных потоков.

В этом случае для ядер переноса целесообразно использовать описывающее их дифференциальное уравнение в виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} N(R, s) + \frac{N(R, s)}{\tau} f(t) = 0, \quad (3)$$

где $f(t)$ - некоторая функция времени и пространственных координат.

Для того, чтобы учесть перекрестные эффекты, уравнения для релаксационных ядер переноса тепла и массы должны быть записаны в сопряженной форме. Это можно сделать следующим образом:

$$\frac{\partial N_m}{\partial t} = -N_m \tau_m^{-1} + N_h \tau_x^{-1}, \quad (4)$$

$$\frac{\partial N_h}{\partial t} = N_m \tau_x^{-1} - N_h \tau_h^{-1}. \quad (5)$$

Здесь τ_x может быть определено по аналогии со временем релаксации как время возмущения. Индексы m и h означают массу и тепло соответственно.

Зададим начальные условия при решении системы в виде:

$$N_m(t_0) = N_{m0}, \quad N_h(t_0) = N_{h0}. \quad (6)$$

При этих условиях решение системы уравнений выглядит следующим образом:

$$N_m = \frac{N_{m0}}{\lambda_2 - \lambda_1} \left[\left(\lambda_2 + \frac{1}{\tau_m} \right) \exp(\lambda_1 s) - \left(\lambda_1 + \frac{1}{\tau_m} \right) \exp(\lambda_2 s) \right] + \frac{N_{h0}}{\tau_x (\lambda_1 - \lambda_2)} \times (\exp(\lambda_1 s) - \exp(\lambda_2 s)), \quad (7)$$

$$N_h = \frac{N_{h0}}{\lambda_2 - \lambda_1} \left[\left(\lambda_2 + \frac{1}{\tau_h} \right) \exp(\lambda_1 s) - \left(\lambda_1 + \frac{1}{\tau_h} \right) \exp(\lambda_2 s) \right] + \frac{N_{m0}}{\tau_x (\lambda_1 - \lambda_2)} \times (\exp(\lambda_1 s) - \exp(\lambda_2 s)), \quad (8)$$

где $s = t - t_0$.

Полученные решения показывают, что первые слагаемые в уравнениях связаны с прямыми потоками, а вторые представляют собой потоки, связанные с перекрестными потоками.

Таким образом, можно определить характерные формы для прямых и перекрестных ядер переноса:

$$N_m^{dir} = \frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1} \left[\left(\lambda_2 + \frac{1}{\tau_m} \right) \exp(\lambda_1 s) - \left(\lambda_1 + \frac{1}{\tau_m} \right) \exp(\lambda_2 s) \right], \quad (9)$$

$$N_h^{dir} = \frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1} \left[\left(\lambda_2 + \frac{1}{\tau_h} \right) \exp(\lambda_1 s) - \left(\lambda_1 + \frac{1}{\tau_h} \right) \exp(\lambda_2 s) \right], \quad (10)$$

$$N_x = \frac{1}{\tau_x (\lambda_2 - \lambda_1)} (\exp(\lambda_2 s) - \exp(\lambda_1 s)). \quad (11)$$

Зависимость перекрестного ядра переноса от времени проходит через максимум. Это специфическое явление немонотонности, обусловленное влиянием термодиффузии или эффекта Соре [4].

Максимум зависимости перекрестного ядра переноса от времени определяет период нарастания начальных возмущений температурного и концентрационного полей, обусловленный воздействием перекрестных термодинамических эффектов. Этот максимум найдем из условия:

$$\frac{dN_x}{ds} = 0. \quad (12)$$

Отсюда получаем формулу:

$$\Delta t_{\uparrow} = s_{cr} = \frac{\ln(\lambda_2/\lambda_1)}{\lambda_1 - \lambda_2}. \quad (13)$$

Для более подробного анализа введем безразмерные параметры, характеризующие соотношения времен релаксации прямых и перекрестных возмущений:

$$\alpha_1 = \frac{\tau_m}{\tau_h}; \quad \alpha_2 = \frac{\tau_m}{\tau_x}; \quad \alpha_2 = z\sqrt{\alpha_1}, \quad (14)$$

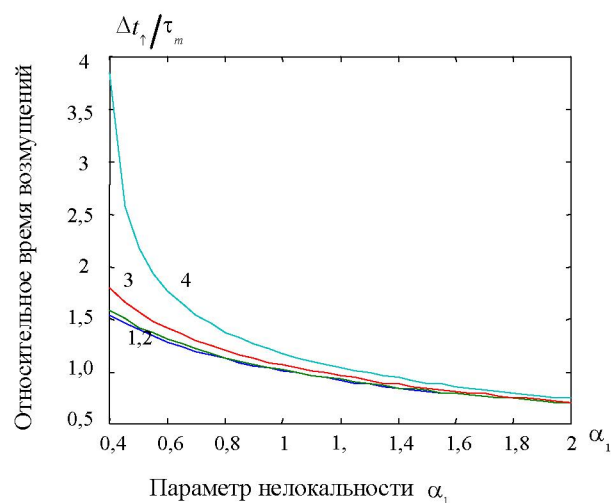
где $0 < z < 1$.

Отсюда получаем безразмерные характеристические показатели в виде:

$$(\lambda_1 \tau_m) = -\frac{1}{2}(\alpha_1 + 1) - \frac{1}{2}\sqrt{(\alpha_1 - 1)^2 + 4z^2\alpha_1}, \quad (15)$$

$$(\lambda_2 \tau_m) = -\frac{1}{2}(\alpha_1 + 1) + \frac{1}{2}\sqrt{(\alpha_1 - 1)^2 + 4z^2\alpha_1}. \quad (16)$$

На рис. 1 показаны некоторые результаты численного эксперимента по определению времени нарастания возмущения, обусловленного перекрестными эффектами типа термодиффузии и эффекта Соре.



1= $\alpha_2 = 0,1$; 2= $\alpha_2 = 0,2$; 3= $\alpha_2 = 0,4$; 4= $\alpha_2 = 0,625$

Рис. 1. Отношение времени нарастания возмущений в системах с перекрестными эффектами к характерному времени диффузионной релаксации

Из графиков видно, что с возрастанием времени перекрестной релаксации τ_x период нарастания также становится более продолжительным.

Как видно из рис. 2, второй характеристический показатель $\lambda_2 \tau_m$ с возрастанием времени диффузионной релаксации постепенно стабилизируется. Это обстоятельство и приводит к

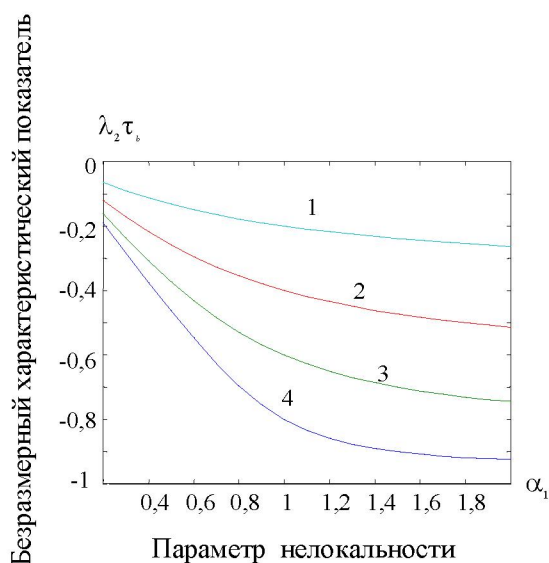
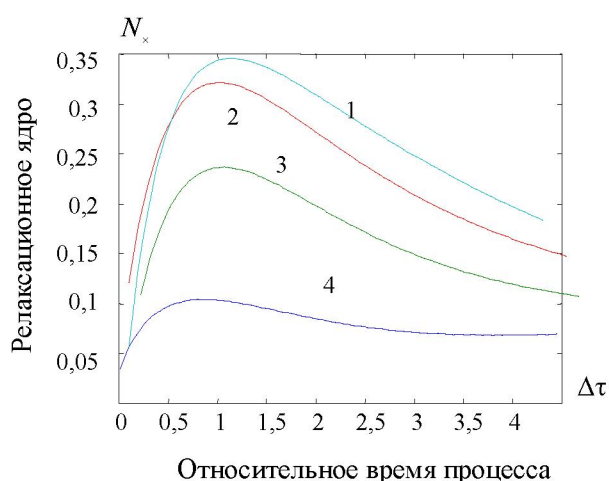


Рис. 2. Зависимость безразмерного характеристического показателя $\lambda_2 \tau_m$ от параметра α_1

характерной немонотонности релаксационного профиля возмущений температурного и концентрационного полей.

Был проведен также специальный численный эксперимент по расчету прямых и перекрестных компонент релаксационных ядер переноса. На рис. 3 показана зависимость перекрестного диффузионного релаксационного ядра переноса от

безразмерного времени $\Delta\tau = \frac{t-t_0}{\tau_m}$ при значении параметра $\alpha_1 = 1,8$.



1- z = 0, 2- z = 2-z = 0, 4; 3- z = 0,6; z = 0,8

Рис. 3. Развитие перекрестного релаксационного возмущения - $\alpha_1 = 1,8$

При выборе более сложных ядер переноса, учитывающих более тонкие свойства среды, получаем более сложные уравнения переноса [5]. При этом можно применить такую же процедуру исключения потоков, как при выводе полученных выше уравнений. Разработанный метод обладает возможностями адаптации к реальным физико-химическим системам, поскольку при вычислении релаксационных ядер переноса могут быть использованы экспериментальные данные о свойствах реагирующих сред.

Нелинейное обобщение уравнений потоков можно представить в виде нелокальной формы второй степени с тензорными ядрами [5]:

$$J_i = - \sum_{k=1}^{n+1} \int_0^t dt_1 N_{ik}^{(1)}(R, t-t_1) \cdot \nabla \left(\frac{v_k(R, t_1)}{T} \right) - \sum_{k=1}^{n+1} \sum_{p=1}^{n+1} \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 N_{ikp}^{(2)} \times \quad (17)$$

$$(R; t-t_1; t-t_2) : \nabla \left(\frac{v_k(R, t_1)}{T} \right) \nabla \left(\frac{v_p(R, t_2)}{T} \right).$$

В слабонелинейном приближении положим

$$\|N_{ikp}^{(2)}\| = \varepsilon \|N_{ik}^{(1)}\| \|N_{ip}^{(1)}\|, \quad (18)$$

где ε - малый параметр.

В качестве такого параметра можно использовать отношение двух чисел Кнудсена, рассчитанных по двум характерным пространственным масштабам, - для упругого и неупругого молекулярных столкновений соответственно [2, 3]:

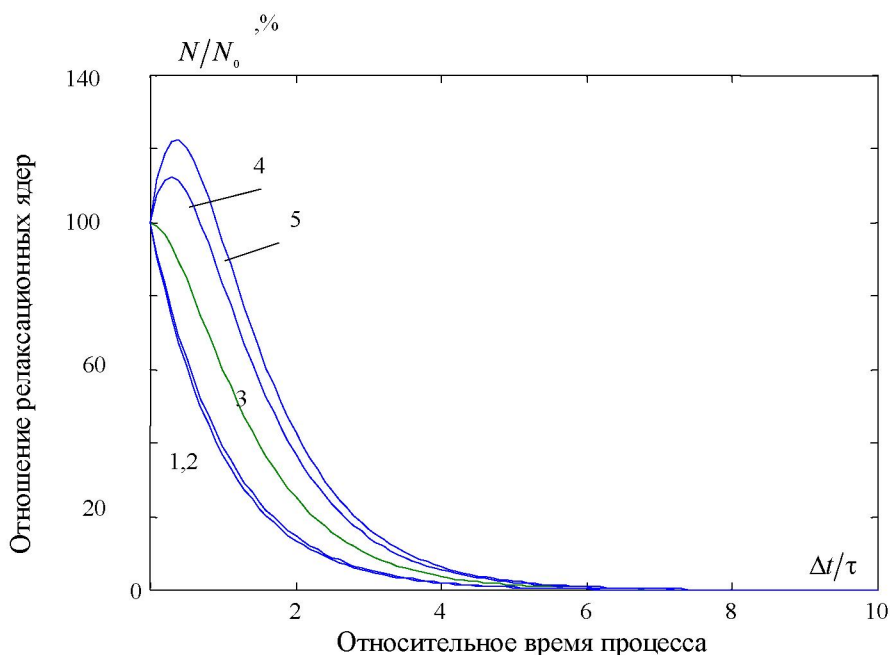
$$\varepsilon = \frac{Kn_{in}}{Kn_{el}} \ll 1. \quad (19)$$

Такой подход, называемый также приближением Пригожина [6], основан на допущении, что число неупругих столкновений в единицу времени много меньше числа упругих столкновений. Будем рассматривать разложение релаксационных ядер в асимптотический ряд по принятому малому параметру.

Соответствующее слабонелинейное модельное уравнение для релаксационных ядер в системе без перекрестных эффектов запишем в виде:

$$\frac{dN}{dt} = -\frac{1}{\tau} N(1 - \varepsilon N), \quad (20)$$

где $N(r, t_1) = N_0(r)$.



1 – $\varepsilon = 0,02$;
 2 – $\varepsilon = 0,04$;
 3 – $\varepsilon = 0,06$;
 4 – $\varepsilon = 0,08$;
 5 – $\varepsilon = 0,1$

Рис. 4. Влияние нелинейных поправок на релаксационные ядра переноса

Исключая члены второго и выше порядков малости получаем следующее решение:

$$N = N_0 \exp\left(\frac{t_1 - t}{\tau}\right) - \varepsilon N_0^2 \left[\exp\left(\frac{2(t_1 - t)}{\tau}\right) - \exp\left(\frac{t_1 - t}{\tau}\right) \right]. \quad (21)$$

На рис. 4 приведены результаты численного эксперимента по расчету влияния нелинейных поправок на релаксационные ядра переноса при различных параметрах нелинейности.

При временах релаксации, малых по сравнению со временем наблюдения, эти уравнения нужно рассматривать как сингулярно возмущенные по времени. Проведенные исследования показывают, что эффекты немонотонности релаксации возмущений температурного и концентрационного полей в многокомпонентных физико-химических системах проявляются в силу влияния перекрестных диффузионных и тепловых потоков, а также вследствие нелинейности связей потоков и градиентов термодинамических параметров. Именно эта немонотонность обуславливает сложность и динамическое разнообразие таких систем.

ЛИТЕРАТУРА

1. Рудяк В.Ю. Статистическая теория диссипативных процессов в газах и жидкостях. Новосибирск: Наука, 1987. 272 с.

2. Ким Л.А., Бренер А.М. Временная нелокальность уравнений переноса тепла и массы в интенсивных технологических процессах // ТОХТ. 1996. Т. 30, №3. С. 258-262.

3. Ким Л.А., Бренер А.М. Учет перекрестных эффектов в нелокальных уравнениях переноса тепла и массы // ТОХТ. 1998. Т. 32, №3. С. 247-250.

4. Kim L., Brenner A.M., Berdaliyeva G.A. The consideration of cross effects in non-local equations of heat and mass transfer. Proceedings of the 1-st European Congress on Chemical Engineering, V. 3. Florence, 1997. P. 1809-1813.

5. Brenner A.M., Muratov A.S., Tashimov L. Non-linear model of time dependent relaxation cores for the systems with cross transfer effects. Proceedings of the Advan. Comp. Methods in Heat Transfer, VIII, Lisbon, 2004. P. 321-332.

6. Алексеев Б.В. Математическая кинетика реагирующих газов. М.: Наука, 1982. С. 420.

Резюме

Күрделі көпкомпонентті жүйелердегі қиылысты термодинамикалық ағымдардың өзара әсері, жүйедегі температуралық және концентрациялық өрістердің ұйытқыған бимонотонды релаксациясы эффектісіне алып келетіні көрсетілген. Осы әсердің жүйенің негізгі өлшемсіз басқару параметріне тәуелді ұйытқының күшею уақыты және ең жоғарғы мәні түріндегі негізгі сипаттамалары анықталған.

Summary

It is shown that interaction between cross thermodynamic fluxes leads to the phenomena of non-monotonically of the perturbations relaxation of temperature and concentration fields in the system. The main characteristics of this phenomenon such as the time of perturbation increasing and maximum values of the perturbations in dependence on the dimensionless government parameters have been described.

ЮКИУ

Поступила 5.11.07г.