

## ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА

**УДК 536.24: 541.2**

**М.П. Анисимов, Т.Э. Овчинникова, В.А. Пинаев**

### **ТЕПЛО-МАССООБМЕН В АКСИАЛЬНОМ ПАРОГАЗОВОМ ПОТОКЕ В ПРИБЛИЖЕНИИ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА**

Изучение процессов нуклеации является актуальным направлением в современной науке. При решении многих проблем в современной аэродинамике, газодинамике, теплоэнергетике, металлургии, экологии, материаловедении и других областях науки и техники приходится обращаться к задачам, связанным с образованием зародышей новой фазы в метастабильной исходной фазе. Применение нуклеационных методов является научной основой для генерацииnano частиц, например, в фармацевтической промышленности. Но, к сожалению, в классической теории нуклеации, остается еще достаточно много дискуссионных проблем.

Более того, имеется ряд трудностей для обобщения этой теории для бинарных и тройных систем, для ион-индуцированной нуклеации, для описания зародышеобразования в окрестности критических условий и т.д.

Для исследования процессов нуклеации используются широкий спектр экспериментального оборудования.

Перспективным подходом для исследования кинетики спонтанной нуклеации в газовой среде является метод, основанный на применении ламинарного осесимметричного паро-газового потока, названный М.Анисимовым с соавторами (например [1]) - поточной диффузионной камерой. Поточная диффузионная камера позволяет определять зависимость скорости нуклеации от активности паров исследуемого вещества при различных давлениях газа-носителя.

Одной из основных частей поточно-диффузионной камеры является цилиндрическая трубка по которой протекает паро-газовая система (рис. 1).

Начальные профили скоростей газа-носителя принимаются параболическими, а концентрация пара исследуемого вещества принимается постоянной по сечению потока. Температура  $T_{cm}$  и концентрация компонентов  $C_i$  на стенке участка трубы В (рис. 1) определяют граничные условия стационарной задачи. Изменение температуры стенки от  $T_0$  к  $T_{cm}$  происходит на участке перехода А. Профиль скоростей в потоке считается ламинарным и установившимся. Для того, чтобы найти поля пересыщений и

температур, необходимо решить задачу о стационарном осесимметричном ламинарном потоке вязкого сжимаемого газа и задачу о диффузии в бинарной паро-газовой системе.

Стационарное движение осесимметричного ламинарного потока вязкого газа можно описать системой уравнений пограничного слоя и уравнения состояния, которые в системе цилиндрических координат имеют вид :

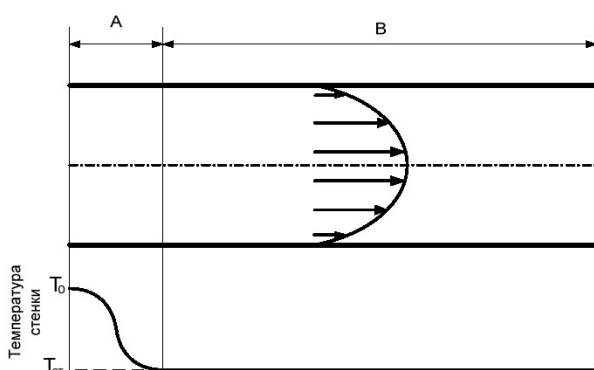
$$P = \frac{\rho \cdot R_0 \cdot T}{m}, \quad (1)$$

$$2 \cdot \pi \cdot \int_0^R r \cdot \rho \cdot u dr = Q, \quad (2)$$

$$\rho \cdot u \cdot \frac{\partial u}{\partial x} = - \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \cdot (r \cdot \eta \cdot \frac{\partial u}{\partial r}), \quad (3)$$

$$\rho \cdot u \cdot C_p \frac{\partial T}{\partial x} - u \frac{\partial P}{\partial x} - \eta \cdot (\frac{\partial u}{\partial r})^2 - \frac{1}{r} \cdot (r \cdot \lambda \frac{\partial T}{\partial r}) = 0 \quad . \quad (4)$$

Здесь  $x$  – координата по оси цилиндрической трубы,  $r$  – координата по радиусу,  $T$  – температура,  $\rho$  – плотность газа,  $\eta$ ,  $\lambda$  – коэффициенты вязкости и теплопроводности газа, соответственно,  $C_p$  – теплоемкость газа,  $R_0$  – универсальная газовая постоянная,  $m$  – молекулярная масса газа,  $R$  – радиус трубы,  $Q$  – массовый расход газа.



*Рис. 1. Схема цилиндрической трубы с парогазовым потоком, иллюстрирующая поточную диффузионную камеру*

Уравнения (1 – 4) имеют следующий физический смысл:

(1) – уравнение состояния идеального газа; (2) – уравнение неразрывности; (3) – уравнение движения (закон сохранения импульса); (4) – закон сохранения энергии (первое начало термодинамики).

Для однозначного решения этой системы уравнений принимаются следующие граничные условия.

На оси симметрии:

$$\frac{\partial u}{\partial r}(0, x) = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r}(0, x) = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial r}(0, x) = 0,$$

на стенке

$$u(R, x) = 0, \quad T(R, x) = T_c(x),$$

$$C(R, x) = C[T_c(x)];$$

на входе

$$T(r, 0) = T_0(r), \quad u(r, 0) = u_0(r),$$

$$P(r, 0) = P[T_0(r)], \quad C(r, 0) = C(T_{\text{vac}}). \quad (5)$$

Здесь  $T_c(x)$  – заданная температура стенки трубы,  $T_0(r)$  – начальный профиль температуры потока при входе в трубку;  $u_0(r)$  – начальный профиль скорости потока при входе в трубку. Поля пересыщений и температур могут быть найдены из уравнений (1 – 4) и граничных условий (5) с помощью метода конечных разностей.

Для нахождения скорости  $u$  и давления  $P$  из уравнений (1- 3) использовался метод прогонки с параметром [2].

Исходя из того, что скорость на входе имеет параболический профиль, соответствующий заданному расходу, получаем

$$u_0(r) = \frac{2Q_0}{\pi R^2 \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)},$$

Из уравнения неразрывности (1), легко получить соотношение:

$$\rho u = \rho_0 u_0 \equiv b_0(r).$$

Разностная аппроксимация уравнения (3) на  $(n+1)$ -ом шаге по  $x$  определялась следующим образом:

$$rb_0(r) \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta x} + r P_x^{n+1} = D_r(u^{n+1}), \quad (6)$$

где  $D_r \equiv \frac{\partial}{\partial r} r \mu \frac{\partial}{\partial r}$ ,  $\Delta x$  – шаг сетки по координате  $x$  (равномерная сетка)

Скорость на  $(n+1)$ -ом шаге представим как

$$u^{n+1} = u^n + z^{n+1} + P_x^{n+1} y^{n+1}, \quad (7)$$

где  $z^{n+1}$  и  $y^{n+1}$  параметры. Подставляя это выражение в (3.1) и группируя члены, содержащие  $P_x$ , и не содержащие эту величину, приходим к системе уравнений

$$rb_0(r) \frac{z^{n+1}}{\Delta x} = D_r(z^{n+1}) + D_r(u^n), \quad (8)$$

$$rb_0(r) \frac{y^{n+1}}{\Delta x} = D_r(y^{n+1}) - r. \quad (9)$$

Граничные условия для параметров  $z^{n+1}$  и  $y^{n+1}$  те же, что и для скорости  $u$ :

$$z^{n+1}(R) = y^{n+1}(R) = 0, \quad \frac{\partial z^{n+1}}{\partial r}(0) = \frac{\partial z^{n+1}}{\partial r}(0) = 0.$$

Для определения  $P_x^{n+1}$  воспользуемся массовым расходом, который не зависит от  $x$ , и формулой (3.2) и получим соотношение

$$P_x^{n+1} = -\frac{\int_0^R r \rho^n z^{n+1} dr}{\int_0^R r \rho^n y^{n+1} dr}, \quad P_{n+1} = P_n + P_x^{n+1} \Delta x$$

После того, как найдена скорость на  $(n+1)$ -ом слое, определяется температура и плотность. Поскольку вязкость и теплопроводность зависят от температуры, то для раскрытия нелинейностей используется итерационный процесс, на каждом шаге которого строится аппроксимация уравнений по координате  $r$ , а для решения полученной трехдиагональной системы линейных уравнений используется метод прогонки. После этого рассчитывается концентрация  $C^{n+1}$ .

Тестирование численного алгоритма выполнено путем сравнения точного аналитического решения при  $\rho = \text{const}$  с результатами численного расчета. В случае  $\rho = \text{const}$  система (1-4) является замкнутой и при  $x \rightarrow \infty$  и  $T_c(x) = T_c = \text{const}$  имеет точное решение:

$$u = \frac{2Q}{RgR^4} \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right); \quad \frac{\partial P(x)}{\partial x} = -\frac{8 \cdot Q \cdot \eta}{\pi \cdot \rho \cdot R^4};$$

$$P(x) = -\frac{8 \cdot Q \cdot \eta}{\pi \cdot \rho \cdot R^4} \cdot x + P_0; \quad T(r) = T_c = \text{const}$$

$$(10)$$

Диффузию паров исследуемого вещества в ламинарном стационарном осесимметричном потоке вязкого газа, движущимся в цилиндрической трубе можно описать решениями уравнения молекулярной диффузии, которое в цилиндрической системе координат записывается в виде:

$$\rho \cdot u \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \cdot (r \cdot \rho \frac{\partial C}{\partial r}) = 0. \quad (11)$$

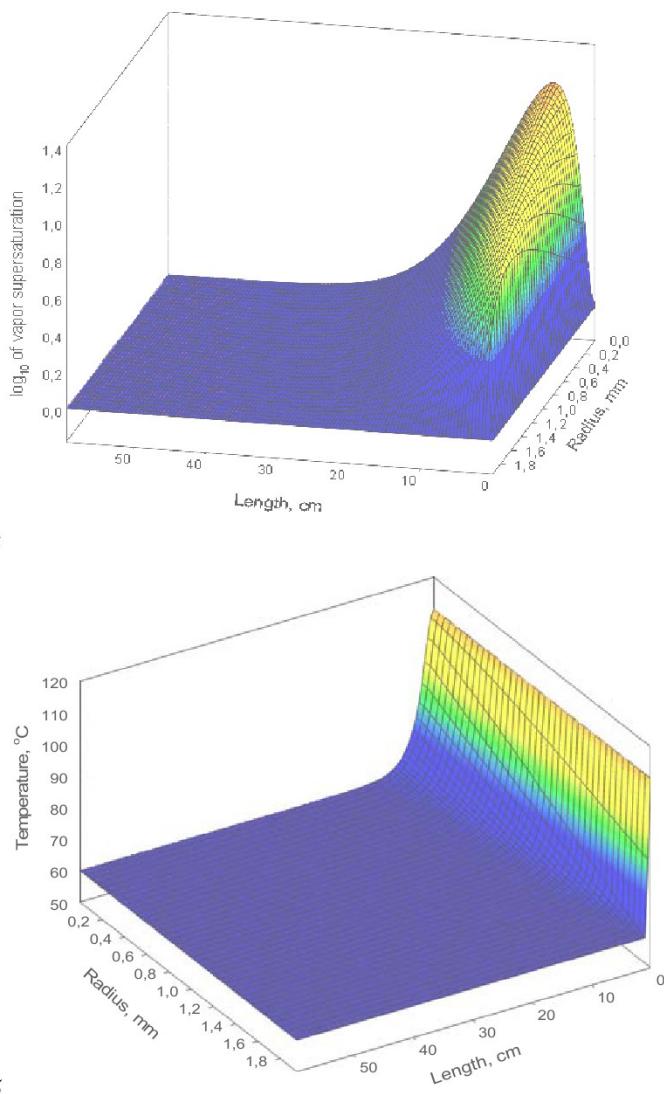


Рис. 2. Поле логарифмов пересыщений, рассчитанных для системы глицерин – двуокись углерода с использованием уравнения состояния идеального газа, при температуре стенки 60 °С, температуре насыщения 110 °С, объемный расход 6,0 см<sup>3</sup>/с и при давлении 1 атмосфера (а). Распределение температур в конденсирующем устройстве (б). Радиус, R, и длина трубы, X.

Это уравнение возможно решить методом конечных разностей при граничных условиях:

$$C(R, x) = C^0(T_c(x)); \frac{\partial C}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0; \\ C(r, 0) = C^*(r)$$

Здесь  $C$  – массовая концентрация пара исследуемого вещества;  $D$  – коэффициент молекулярной диффузии;  $C^0(T_c(x))$  – концентрация насыщенного пара вещества на стенки трубы (предполагалось, что внутренняя сторона трубы покрыта исследуемым веществом);  $C^*(r)$  – начальный профиль концентрации пара на входе в трубку.

Коэффициент диффузии  $D$  [см<sup>2</sup>/с] рассчитывается для бинарных газовых систем по эмпирической корреляции Фуллера, Шлеттера и Гиддингса [3]:

$$D_i = \frac{0,001 \cdot T^{1,75} \cdot (M_1 + M_2) / M_1 \cdot M_2}{P \cdot \left[ (\sum V)_1^{1/3} + (\sum V)_2^{1/3} \right]^2} \quad (12)$$

где  $P$  – общее давление, выражено в барах;  $M_1$ ,  $M_2$  – молекулярные массы исследуемого вещества и соответствующего газа-носителя;  $(\sum V)_1$ ,  $(\sum V)_2$  – молекулярные диффузионные объемы компонент.

Активность (рис. 2а) паров исследуемого вещества  $a(r,x)$  определяется из распределений температуры  $T(r,x)$  и концентрации  $C(r,x)$  через соотношение  $a(r,x) = \frac{C(r,x)}{C^0(r,x)}$ , где  $C^0(r,x)$  – концентрация насыщенного пара исследуемого вещества при температуре  $T(r,x)$ . Решения для  $T(r,x)$  показаны на графике, приведённом на рис. 2б.

Для определения скорости нуклеации по эмпирическим значениям концентрации образующегося аэрозоля пользуются выражением  $J = C/t$ , где  $J$ , [см<sup>-3</sup>/с] – расчетная скорость нуклеации;  $C$ , [см<sup>-3</sup>] – экспериментально найденная концентрация аэрозоля;  $t$ , [с] – время пребывания в нуклеационном объеме парогазовой смеси. Этот метод позволяет находить среднюю скорость генерирования аэрозольных частиц в нуклеационном объе-

ме, имеющем неоднородное распределение условий зародышеобразования.

Более точное значение скорости нуклеации может быть найдено при следовании достаточно простому алгоритму [4]. Очевидно, что отношение максимума теоретической скорости нуклеации  $J_{theor}^{max}$  к расчетному числу аэрозольных частиц ( $N_{theor} = \int J_{theor} dv$ ), производимых аэрозольным генератором в единицу времени, примерно равно соответствующему значению экспериментальных величин, т.е.

$$\frac{J_{theor}^{max}}{\int J_{theor} dv} \cong \frac{J_{exp}^{max}}{N_{exp}} .$$

Неточность равенства связана с недостатками теории. Однако использование теоретических величин позволяет определять отношения с небольшой погрешностью, поскольку недостаточно хорошо определенные коэффициенты теоретического выражения для скорости нуклеации практически точно сокращаются. Это подтверждается сравнением расчетного и экспериментально определенного объемов нуклеации. Отсюда легко получить выражение для максимума скорости нуклеации:

$$J_{exp}^{max} = \frac{N_{exp} J_{theor}^{max}}{\int J_{theor} dv},$$

где  $N_{exp}$ ,  $\int J_{theor} dv$  – экспериментальное и теоретическое число частиц, произведенных генератором аэрозолей в единицу времени,  $J_{theor}^{max}$  – теоретическая скорость нуклеации в зоне наиболее интенсивного зародышеобразования. При соблюдении подобия в распределении концентраций пара и температур (это в эксперименте выполняется) исключается зависимость значения максимальной скорости нуклеации от расхода газа, что снижает требования к точности измерения последнего. Экспериментальное изучение скоростей

объемной конденсации является чрезвычайно трудной задачей, так как параметры процесса, характеризующие процессы образования новой фазы, быстро меняются во времени и пространстве, что крайне осложняет их измерение. Нуклеация в пересыщенном паре изучается различными методами, целью которых является получение скоростей нуклеации и соответствующих ей значений пересыщений и температур, которые используют как для сравнения с классической теорией, так и с различными ее модификациями.

В данной работе приведена постановка и численное решение задачи тепло-массобмена для аксиальной симметрии паро-газового потока. Обосновываются и приводятся алгоритмы эмпирического определения скоростей нуклеации в поточной диффузионной камере.

Результаты могут быть применимы для теоретических расчетов скоростей зародышеобразования на участках технологических цепей, представляющих поток паро-газовой смеси в охлаждаемой трубе. Компьютерная оптимизация позволит не-эмпирическим путем подобрать близкие к оптимальным условия протекания смеси.

В одних случаях необходимо снизить содержание аэрозоля на выходе, поскольку это может привести к появлению аэрозольных вкраплений в конечное изделие. В другом варианте задачи – можно создать условия для генерации аэрозольных частиц.

Оптимизация условий позволяет получать наночастицы, которые, как известно, обладают рядом уникальных свойств, в сравнении с макроскопической фазой образца производимого материала. Создание и углубление научных основ в производстве наноматериалов имеет ясную перспективу в улучшении потребительских свойств широкого спектра материалов.

Авторы благодарят РФФИ за грант № 11-03-00049-а.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Anisimov M.P. and Cherevko A.G. Gas-flow diffusion chamber for vapor nucleation studies. Relations between nucleation rate, critical nucleus size and entropy of transition from a metastable into a stable state. // *J.Aerosol Sci.* 1985 V. 16, № 2, P. 97-107.
2. Воеводин А.Ф., Гончарова О.Н. Метод расщепления по физическим процессам для расчета задач конвекции. //Мат. моделирование, 2001. Т. 13,
3. Лойцянский Л. Г. Механика жидкости и газа. М.: Наука, 1973. 847 с.
4. Wagner P.E. and Anisimov M.P. Evaluation of nucleation rates from gas flow diffusion chamber experiments (1993) *J.Aerosol Sci.*, V.24, Suppl.1., P. 103-104

□Авторы статьи:

Анисимов

Михаил Прокопьевич ,  
докт. физ.-мат. наук, проф., зав. лаб.  
Конструкторско-технологический  
институт научного приборостроения  
СО РАН.  
Email: anisimovmp@mail.ru

Овчинникова

Тамара Эдуардовна ,  
канд. физ.-мат. наук, ст. н. с., доц.  
цент( Институт водных и экологи-  
ческих проблем СО РАН, НГУ).  
Email: teonew@iwep.nsc.ru

Пинаев

Виктор Алексеевич,  
канд. физ.-мат. наук, доц. каф.  
высшей и прикладной математики  
Кемеровского института РЭУ им.  
Плеханова.  
Email: pinaev@kemcity.ru