

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНВЕКТИВНОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ В СМЕСЯХ С ЭФФЕКТОМ СОРЕ

Думаревская В.В.¹,

научный руководитель Зализняк В. Е., PhD¹

научный консультант к.ф.м.н. Рыжков И.И.²

¹Сибирский федеральный университет

²Институт вычислительного моделирования СО РАН

Термодиффузией (эффектом Сорэ) называют перенос компонент жидких или газовых смесей под действием градиента температуры. Если разность температур поддерживается постоянной, то вследствие термодиффузии в объёме смеси возникает градиент концентрации, что вызывает и обычную диффузию. Термодиффузия в бинарной смеси называется нормальной (аномальной), если лёгкий компонент перемещается в более нагретую (более холодную) область под действием градиента температуры.

Уравнения движения бинарной смеси в безразмерном виде записываются как

$$\partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla^2 \mathbf{u} - Ra(T + C) \mathbf{e}_3,$$

$$\partial_t T + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T = Pr^{-1} \nabla^2 T,$$

$$\partial_t C + (\mathbf{u} \cdot \nabla) C = Sc^{-1} (\nabla^2 C + \psi \nabla^2 T),$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0,$$

где $\mathbf{e}_3 = (0, 1)$. Система содержит четыре безразмерных параметра: число Рэлея

$$Ra = \frac{g \beta_T \Delta T L^3}{\nu \chi},$$

которое пропорционально характерному перепаду температур ΔT ; числа Прандтля $Pr = \nu / \chi$ и Шмидта $Sc = \nu / D$, которые характеризуют относительную интенсивность переноса количества движения и молекулярного переноса тепла и массы соответственно; отношение разделения

$$\psi = -\frac{\beta_C D_T}{\beta_T D},$$

которое характеризует эффект термодиффузии.

Безразмерные переменные связаны с размерными согласно формулам

$$t^* = \frac{L^2}{\nu} t, \quad \mathbf{x}^* = L \mathbf{x}, \quad \mathbf{u}^* = \frac{\nu}{L} \mathbf{u},$$

$$p^* = \rho_0 \frac{\nu^2}{L^2} p, \quad T^* - T_0 = \Delta T, \quad C^* - C_0 = \frac{\beta_T \Delta T}{\beta_C} C,$$

где L – характерный размер, $\mathbf{x} = (x, z)$, $\mathbf{u} = (u, w)$, единица вязкого времени $L^2 / \nu = 7.328$ с.

Состояние механического равновесия является устойчивым, если $Ra < Ra_{\text{крит}}$, где $Ra_{\text{крит}}$ зависит от параметров системы $Pr, Sc, \psi, H/L$. При $Ra > Ra_{\text{крит}}$ в смеси возникает конвекция.

Рассмотрим бинарную смесь в плоском слое с отношением сторон $H/L = 10$ (Рисунок 1). Слой подогревается снизу и охлаждается сверху, боковые стенки полости теплоизолированы.

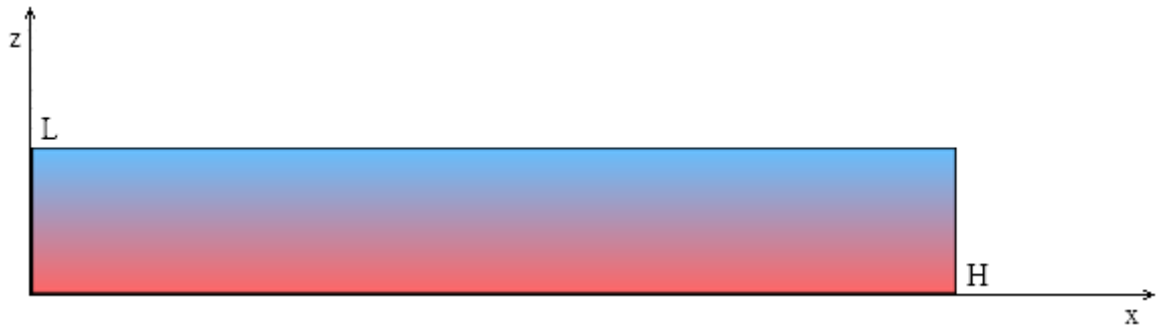


Рисунок 1. Плоский слой бинарной смеси

Таким образом, граничные условия имеют следующий вид:

- 1) боковые границы ($x = 0, H$):

$$U = W = 0,$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial x} = 0.$$

- 2) верхняя и нижняя границы ($z = 0, L$):

$$U = W = 0,$$

$$T = \pm \frac{1}{2}, \quad \frac{\partial C}{\partial z} - \psi \frac{\partial T}{\partial z} = 0.$$

В качестве начальных условий рассмотрим состояние механического равновесия:

$$U = W = 0, \quad T = \frac{1}{2} - z, \quad C = \psi \left(\frac{1}{2} - z \right) + A \cos(\pi x),$$

где к термодиффузионному профилю концентрации добавляется малое возмущение с амплитудой $A = 10^{-3} \psi / 2$.

Основной задачей данной работы является численное моделирование конвективной неустойчивости в бинарной смеси с эффектом Соре.

Аппроксимация уравнений Навье–Стокса по пространству производится с использованием смещённых сеток. Алгоритм расчёта строится на основе метода расщепления по физическим процессам.

- 1) Производится расчёт нелинейного переноса (явная схема).
- 2) Учитывается движение под воздействием вязких сил (неявная схема расщепления).
- 3) Производится корректировка поля скоростей для того, чтобы выполнить условие несжимаемости.
- 4) Для расчёта изменения температуры и концентрации используется неявная схема расщепления.

Для апробации алгоритма проводилось численное моделирование конвективной неустойчивости, наблюдаемой в эксперименте (J.K.Platten et al. Soret Effect and Free Convection: A Way To Measure Soret Coefficients. Lecture Notes in Physics, V. 584, 2002. p. 313-333). Эксперимент проводился следующим образом: в смеси создавалась разность температур (подогрев снизу), затем выжидалось некоторое время установления профилей температуры и концентрации. Если по прошествии данного времени состояние смеси оставалось устойчивым, то разность температур увеличивалась на некоторое фиксированное значение.

В качестве рабочей смеси использовалась смесь этанол-вода (8% – 92%) с параметрами: $Pr = 9.38$, $Sc = 1209$, $\psi = -0.269$. В эксперименте было установлено, что при $Ra = 2350$ ($\Delta T = 4.79 K$) смесь была устойчива, однако при $Ra = 2360$ ($\Delta T = 4.81 K$) возникает конвективное движение.

		Число Рэлея			Круговая частота	
		Min Ra	Max Ra	% от экспер.	ω	% от экспер.
Линейный анализ		2328			1.252	- 3.9 %
Эксперимент		2350	2360	0 %	1.303	0 %
Численное моделирование		Число Рэлея			Круговая частота	
Сетка	Шаг по времени	Min Ra	Max Ra	% от экспер.	ω	% от экспер.
200 x 20	0.002	2260	2270	- 3.99 %	1.272	- 2.38 %
200 x 20	0.001	2320	2330	- 1.33 %	1.278	- 1.92 %
200 x 20	0.0005	2360	2370	0.44 %	1.279	- 1.84 %
200 x 40	0.002	2290	2300	- 2.66 %	1.274	- 2.23 %
200 x 40	0.001	2350	2360	0 %	1.279	- 1.84 %
200 x 40	0.0005	2390	2400	1.77 %	1.283	- 1.53 %
200 x 40	0.00025	2410	2420	2.66 %	1.285	- 1.38 %
400 x 40	0.002	2280	2290	- 3.10 %	1.272	- 2.38 %
400 x 40	0.001	2340	2350	- 0.44 %	1.280	- 1.77 %
400 x 40	0.0005	2380	2390	1.33 %	1.282	- 1.61 %
400 x 40	0.00025	2400	2410	2.22 %	1.284	- 1.46 %

Таблица 1. Сравнение результатов линейного анализа, эксперимента и численного моделирования.

В таблице 1 показаны расчётные данные для различных сеток и шагов по времени.

В работе (Рыжков И.И. Длинноволновая неустойчивость плоского слоя многокомпонентной смеси. Известия РАН: Механика жидкости и газа, № 4, 2013) был проведён линейный анализ для бесконечного слоя ($H/L \rightarrow \infty$) и получено число Рэлея $Ra = 2328$. С уменьшением отношения H/L критическое число Рэлея возрастает из-за влияния боковых стенок. Этим объясняется то, что в эксперименте число Рэлея больше, чем в линейном анализе. Заметим, что в работе (J.K. Platten et al) отношение H/L не было указано. А поскольку число Рэлея, полученное в ходе численного моделирования для $H/L = 10$, больше экспериментального на 2.22%, то можно предположить, что в эксперименте использовался слой с $H/L > 10$.

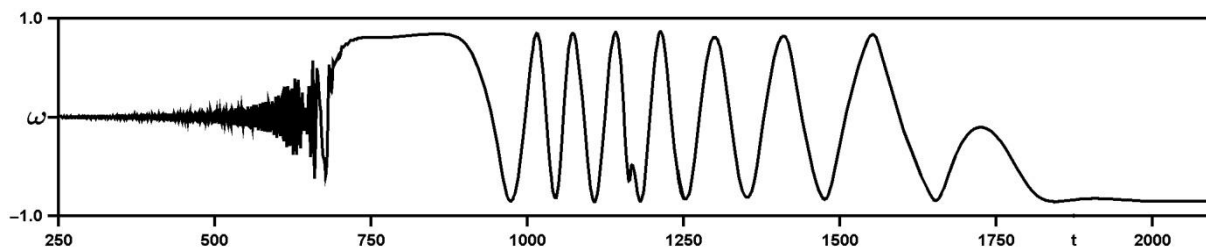


Рисунок 2. Зависимость вертикальной скорости от времени.

На рисунке 2 показана зависимость вертикальной скорости w от времени ($Ra = 2400$, сетка 400×40 , шаг по времени 0.0005). Амплитуда колебаний скорости вначале возрастает экспоненциально, затем, после некоторого периода установления, меняется период колебаний. В конце концов, система выходит на стационар.

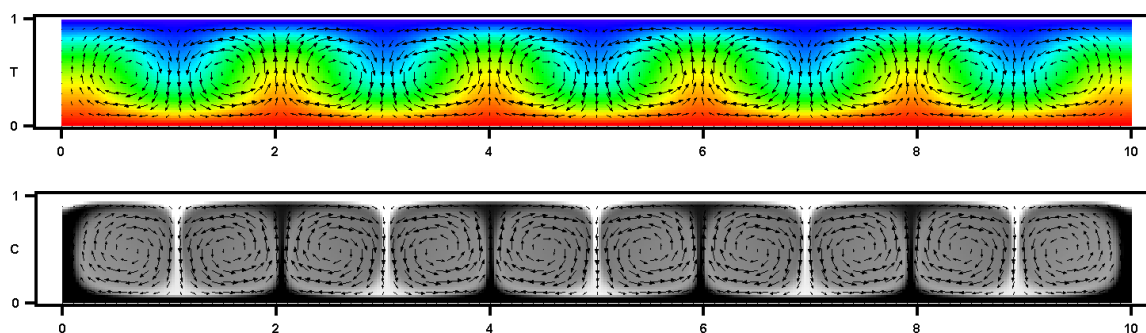


Рисунок 3. Поля скорости, температуры и концентрации в стационарном состоянии.

На рисунке 3 показаны поля скорости, температуры и концентрации в стационарном состоянии (момент времени $t = 2100$, $Ra = 2400$, сетка 400×40 , шаг по времени 0.0005). Восходящие потоки горячей и нисходящие потоки холодной жидкости приводят к образованию конвективных ячеек. Внутри ячеек концентрация не меняется благодаря конвективному перемешиванию, при этом резкие градиенты концентрации имеют место на границах ячеек.

Поскольку отношение разделения $\psi < 0$, эффект Соре в данной смеси аномален, т.е. концентрация более лёгкого элемента (этанола) увеличивается вблизи холодной границы. Более светлые области на графике концентрации соответствуют более высокой концентрации этанола. Более лёгкий нагретый компонент жидкости поднимается вверх, а более тяжёлый холодный компонент опускается вниз. Таким образом, поле температур дестабилизирует систему, а поле концентраций — стабилизирует. Из-за двух противоположных влияний в начале неустойчивости возникают колебания скорости (рис. 2).

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ 12-01-31069.