

УДК 532.542.2

ДИСПЕРСИЯ ДИНАМИЧЕСКИ ПАССИВНОЙ ПРИМЕСИ ПРИ НЕОДНОМЕРНОМ ТЕЧЕНИИ ЖИДКОСТИ

А. И. Мошинский

Российский научный центр "Прикладная химия", 197198 Санкт-Петербург

Дан вывод уравнений, описывающих дисперсию вещества при неоднородном течении несжимаемой жидкости в плоском канале. Рассматриваемая модель обобщает традиционную модель Тейлора на предмет учета релаксационных процессов переноса и наличия источников вещества. Получены дополнительные условия для уравнений дисперсии. Анализируется связь предложенной и тейлоровской моделей. На основе полученных уравнений выполнен расчет массообмена между циркуляционными областями и построена система уравнений ячеечной модели для непроточных каверн.

Ключевые слова: дисперсия вещества, диффузионная (тейлоровская) модель, волновая модель, тепломассоперенос, релаксационные явления.

Введение. Для описания процессов тепло- и массообмена широко используется модель продольной дисперсии вещества Тейлора [1]. Эта модель базируется на уравнении эффективной диффузии (дисперсии), содержащем на одну пространственную координату меньше, чем фундаментальное уравнение конвективной диффузии. По существу, модель Тейлора — асимптотически обоснованное (при определенных условиях) осреднение уравнения конвективной диффузии. В случае одномерных течений в трубах различной конфигурации уравнение дисперсии содержит только постоянные коэффициенты в отличие от исходного уравнения конвективной диффузии. Подобное упрощение (учитывая широкую область практических приложений) вызвало большой интерес к модели Тейлора, в результате чего она была обобщена для анализа более сложных явлений тепломассопереноса, при этом были предложены оригинальные подходы к выводу уравнений дисперсии вещества (см., например, [2–4]).

Однако уравнение дисперсии как некоторое приближение к фундаментальному уравнению конвективной диффузии имеет ограниченную область применения и поэтому не может обеспечить требуемую точность расчета и описать качественные особенности решения некоторых задач. Недостатки модели Тейлора обсуждались в ряде работ (см., например, [5, 6]). Основным недостатком является непригодность модели для описания задач с интенсивными источниками тепла и массы. Поскольку диффузионная модель Тейлора лежит в основе анализа работы проточных химических реакторов, для которых увеличение скорости химического превращения часто является желательным, ясно, что отмеченный недостаток существен. Поэтому разрабатывались более общие модели, описывающие релаксационные и волновые явления при переносе тепла и массы [5–7]. В настоящей работе подобная модель рассматривается в общем виде. Расчеты по предложенной модели позволяют решать задачи тепломассопереноса в случае неоднородных течений (например, в кавернах).

1. Вывод основных уравнений. Будем рассматривать плоскую задачу. Процесс массопереноса в канале высотой h определяется уравнениями конвективной диффузии

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + Q(c) = D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) \quad (1.1)$$

и неразрывности

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (1.2)$$

Предполагается, что поле скоростей (u, v) в общем случае неодномерное и в рамках данного анализа считается известным. Оно должно находиться из решения соответствующей гидродинамической задачи. В уравнении (1.1) c — локальная концентрация; D — коэффициент молекулярной диффузии; $Q(c)$ — интенсивность источника массы, связанная, в частности, с химическими превращениями; x, y — пространственные декартовы координаты; τ — время. Вещество примеси динамически пассивное, т. е. его распространение в потоке не влияет на течение жидкости в канале. Поле скоростей может быть любым, но должны выполняться условия прилипания на стенках канала

$$u|_{y=0;h} = v|_{y=0;h} = 0. \quad (1.3)$$

Далее будет показано, что понадобятся только определенные интегральные характеристики поля скорости.

Задача дополняется начальным

$$c|_{\tau=0} = c_0(x, y) \quad (1.4)$$

и граничными условиями

$$\frac{\partial c}{\partial y} \Big|_{y=0;h} = 0. \quad (1.5)$$

Условия по переменной x для вывода упрощенной системы уравнений не нужны, поэтому на данном этапе они не конкретизируются. Соотношения (1.5) выражают отсутствие потока вещества на стенках канала.

Обратим внимание на определенные сложности, возникающие при анализе задачи (1.1)–(1.5) (с учетом граничных условий по переменной x) численными методами в случае течений с замкнутыми линиями тока (или близкими к замкнутым). Важным свойством подобных задач является изменение характерных временных и пространственных масштабов переменных по мере развития процесса. При этом возникают и исчезают пограничные слои, происходит выравнивание концентрации вещества вдоль определенных направлений и т. д. Это приводит к существенным трудностям при описании процесса во всем пространстве в большом диапазоне времени. Фактически необходимо использовать различные численные методы для решения одной и той же задачи в разных пространственно-временных областях. Заметить необходимость перехода к новой схеме (в простейшем случае — к изменению шагов в конечно-разностных методах) довольно трудно, поскольку в предельных ситуациях масштабы переменных изменяются на порядки.

Перестройка механизма массообмена при течениях с замкнутыми линиями тока в ограниченном пространстве наблюдается и в других задачах, близких к рассматриваемым в данной работе. Хорошо исследован процесс тепло- и массообмена между каплей жидкости и обтекающим ее потоком (см., например, [8, 9]). В [8, 9] обсуждаются механизмы перестройки массопереноса и трудности, возникающие при описании процесса одной моделью. Отметим также, что по методам решения задачи проводились дискуссии (см., например, [10]), вызванные рассогласованием результатов, полученных разными авторами. Анализ [8, 9] и других работ показывает, что модели, обсуждаемые в [10], и некоторые

другие достоверно описывают процесс только в определенных пространственно-временных областях.

В рамках теории Тейлора задача (1.1)–(1.5) приводится к виду [11]

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} + U \frac{\partial C}{\partial x} + Q(C) = \frac{\partial}{\partial x} \left[(D + D_*(x)) \frac{\partial C}{\partial x} \right], \quad (1.6)$$

где U — средняя скорость потока; C — средняя по сечению концентрация вещества; $D_*(x)$ — конвективная часть коэффициента дисперсии (полный коэффициент дисперсии равен $D + D_*$). Средняя по сечению величина некоторой функции $F(x, y, \tau)$ определяется по формуле

$$\langle F(x, \tau) \rangle = \frac{1}{h} \int_0^h F(x, y, \tau) dy. \quad (1.7)$$

Величина D_* в (1.6) находится из выражения

$$D_*(x) = \langle \psi^2 \rangle / D, \quad (1.8)$$

где $\psi(x, y)$ — функция тока в системе координат, движущейся со средней скоростью U , которая определяется из уравнений

$$u = U + \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}. \quad (1.9)$$

Для удобства направление оси x выберем совпадающим с направлением вектора средней скорости, т. е. в дальнейшем $U \geq 0$. Отметим, что средняя скорость U не зависит от координаты x . Действительно, после использования соотношений (1.2), (1.3), (1.7) имеем

$$\frac{\partial U}{\partial x} = \left\langle \frac{\partial u}{\partial x} \right\rangle = -\left\langle \frac{\partial v}{\partial y} \right\rangle = \frac{v|_{y=0}}{h|_{y=h}} = 0,$$

т. е. $U = \text{const}(x)$.

Ясно, что для анализа общих проблем уравнение (1.6) значительно проще системы (1.1), (1.2), однако его использование ограничивается слабыми источниками вещества $Q(C)$ и достаточно большими характерными временами процесса. Поэтому обобщим уравнение (1.6) с целью построения системы уравнений моделей типа релаксационных (или волновых) моделей продольного перемешивания.

При выводе уравнений гиперболического типа для описания распространения вещества применялись различные итерационные методы [4, 12, 13], разложение решения по определенным функциям [5], обобщение метода Галеркина [6, 7]. Опыт показывает, что приемлемую аппроксимацию известным точным решениям дает приближение, содержащее систему двух уравнений, что соответствует двум основным функциям метода Галеркина. В частности, в [5] путем сопоставления с точными решениями на ряде примеров установлено, что учет третьего слагаемого в разложениях типа Галеркина приводит лишь к незначительному повышению точности результата, тогда как поиск решения осложняется. С учетом сказанного выше будем искать решение задачи (1.1)–(1.5) в виде суммы двух функций (отрезка ряда) метода Галеркина

$$c(x, y, \tau) = C(x, \tau) + R(y)j(x, \tau). \quad (1.10)$$

Здесь первой функцией разложения Галеркина является единица, а второй — функция $R(y)$, удовлетворяющая следующим требованиям:

$$R'(0) = R'(h) = 0, \quad \langle R \rangle = 0, \quad \langle R^2 \rangle = 1. \quad (1.11)$$

В (1.11) первые два соотношения удовлетворяют граничным условиям (1.5), а третье — условию ортогональности функций 1 и $R(y)$ (оно определяет функцию $C(x, \tau)$ как среднюю по сечению концентрацию целевого вещества), последнее соотношение представляет собой условие нормировки.

Подставим (1.10) в уравнение (1.1) и согласно процедуре метода Галеркина потребуем ортогональности получившегося выражения (невязки) выбранной системе функций (в нашем случае только 1 и $R(y)$). Ортогональность в данном случае означает равенство нулю интеграла по y в пределах $(0, h)$ произведения двух функций. После некоторых выкладок, учитывая (1.2), (1.3) и (1.11), приходим к системе уравнений

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} + U \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} [K(x)j] + Q(C) = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}; \quad (1.12)$$

$$\frac{\partial j}{\partial \tau} + V(x) \frac{\partial j}{\partial x} + K(x) \frac{\partial C}{\partial x} + \left[\frac{V'(x)}{2} + Q'(C) + \frac{1}{\vartheta} \right] j = D \frac{\partial^2 j}{\partial x^2}, \quad (1.13)$$

где параметры модели K, V, ϑ определяются выражениями

$$K(x) = \langle uR \rangle, \quad V(x) = \langle uR^2 \rangle, \quad \vartheta^{-1} = D \langle (R')^2 \rangle. \quad (1.14)$$

При выводе (1.12), (1.13) функция источника $Q(c)$ в (1.1) аппроксимирована отрезком ряда Тейлора $Q(c) \cong Q(C) + Q'(C)Rj$. Выбор точки C для разложения $Q(c)$ в ее окрестности продиктован тем, что эта величина определяет первое (главное) слагаемое представления (1.10), и поэтому второе слагаемое Rj в (1.10) носит поправочный характер. Заметим, что подобная аппроксимация является точным равенством в случае линейности функции $Q(c)$ (реакция первого порядка).

В случаях, когда функция $Q(C)$ нелинейная и резко изменяется (производная $Q'(C)$ велика), может потребоваться более точное приближение к выражениям

$$\langle Q(C + jR) \rangle, \quad \langle RQ(C + jR) \rangle, \quad (1.15)$$

которые должны входить в (1.12) и (1.13) вместо слагаемых $Q(C)$ и $jQ'(C)$ соответственно. В некоторых случаях, например для реакции второго порядка $Q(c) = k_2 c^2$ ($k_2 = \text{const}$), осреднение в (1.15) можно выполнить. Имеем

$$k_2(C^2 + j^2), \quad k_2(2Cj + j^2 \langle R^3 \rangle).$$

В противном случае может потребоваться вычислять интегралы в (1.15), связанные с процедурой осреднения (1.7).

2. Связь с диффузионной моделью Тейлора. Приведем систему (1.12), (1.13) к безразмерному виду

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial z} + \frac{1}{\varepsilon_K \text{Pe}_*} \frac{\partial}{\partial z} [k(z)j] + \Phi(C) = \frac{1}{\text{Pe}} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}; \quad (2.1)$$

$$\varepsilon_U \left(\frac{\partial j}{\partial t} + w(z) \frac{\partial j}{\partial z} \right) + \varepsilon_K k(z) \frac{\partial C}{\partial z} + \left[1 + \frac{\varepsilon_U w'(z)}{2} + \varepsilon_Q \Phi'(C) \right] j = \frac{\varepsilon_U}{\text{Pe}} \frac{\partial^2 j}{\partial z^2}. \quad (2.2)$$

Здесь $w = V/U$ (при этом считаем, что $w = O(1)$, т. е. величина U (полагая $U \neq 0$) служит масштабом переменной $V(x)$); $\varepsilon_U = \vartheta U/L$ — параметр, показывающий относительное влияние времени релаксации ϑ и времени переноса $T_U = L/U$ на протекание процесса; $\varepsilon_Q = \vartheta/T_Q$ — отношение характерных времен релаксации (ϑ) и химического превращения (T_Q); L — длина канала; $t = \tau/T_U$; $z = x/L$. Величина T_Q равна величине, обратной масштабу производной интенсивности реакции dQ/dc (Q, c — размерные параметры). Обозначив масштаб функции $K(x)$ через K_* , т. е. $k(z)$ — безразмерное значение $K(x)$, для

параметра ε_K имеем $\varepsilon_K = \vartheta K_*/L$. Далее, $\Phi(C) = Q(C)L/U$ — безразмерная интенсивность химической реакции (при этом масштаб производной dQ/dc определяет T_Q , а не величину T_U , входящую в определение функции $\Phi(C)$), $Pe_* = UL/(\vartheta K_*^2) = UL/D_*$, поскольку, как показано ниже, величина ϑK_*^2 является масштабом коэффициента дисперсии Тейлора. При этом коэффициент дисперсии находится из соотношения $D_* = K^2(x)\vartheta$ ($D_* > 0$). Таким образом, Pe_* — число Пекле, соответствующее конвективной части коэффициента дисперсии. Число Пекле, определяемое по обычному (молекулярному) коэффициенту диффузии D , находится по формуле $Pe = UL/D$.

Несколько безразмерных параметров (ε_U , ε_Q , ε_K , Pe_* , Pe), определяющих протекание процесса на основе системы (2.1), (2.2), дают возможность рассматривать ряд упрощенных (предельных) ситуаций, когда между этими параметрами и значением 1 реализуются некоторые предельные соотношения. Ниже рассматриваются наиболее типичные для практики случаи, когда $\varepsilon_U \ll 1$, $Pe \gg 1$ и $Pe \gg Pe_*$, в предположении, что остальные параметры, если они оставлены в уравнениях, порядка единицы.

Переход к диффузионной модели происходит, когда параметры ε_U и ε_Q пренебрежимо малы, т. е. наименьшим временным масштабом в системе является время релаксации ϑ , а интерес представляют процессы с характерным временем T_U . При $\varepsilon_U \ll 1$ и $\varepsilon_Q \ll 1$ из уравнения (2.2) получаем $j = -[\varepsilon_K k(z)]\partial C/\partial z$ — соотношение типа закона Фика в безразмерной форме, подставив которое в уравнение (2.1), приходим к безразмерному уравнению диффузионной модели

$$Pe_* \left(\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial z} + \Phi(C) \right) = \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(D^*(z) + \frac{Pe_*}{Pe} \right) \frac{\partial C}{\partial z} \right], \quad (2.3)$$

где $D^* = k^2(z)$ — безразмерный коэффициент тейлоровской диффузии.

Для того чтобы Pe_* было порядка единицы, необходимо выполнение предельного неравенства $U \ll K_*$ при $T_U \gg \vartheta$, т. е. осредненная согласно первому выражению в (1.14) продольная скорость значительно превышает среднюю. В системе наблюдается достаточно интенсивное перемешивание, поскольку в силу третьего соотношения в (1.11) постоянная составляющая скорости (в частности, U) не влияет на результат осреднения при определении $K(x)$, т. е. по существу осредняется пульсационная скорость.

Следует отметить, что для обычно реализуемых неравенств $Pe \gg 1$ и $Pe \gg Pe_*$ слагаемые в правой части (2.1), (2.2), как правило, можно опустить. Это относится и к слагаемому в (2.3), содержащему множитель Pe_*/Pe . Однако указанные слагаемые играют важную роль на поверхностях раздела циркуляционных зон, где нормальная компонента скорости обращается в нуль и вместе с ней становятся равными нулю параметр K и коэффициент эффективной диффузии D_* . Конвективное движение достаточно быстро выравнивает концентрацию вещества в пределах замкнутой циркуляционной зоны, однако массообмен между зонами из-за равенства $D_* = 0$ на границе определяется обычной диффузией, т. е. происходит, как правило, значительно медленнее. Конвективное движение в зоне контакта ячеек только подводит вещество к границе, но в переносе через границу не участвует, поскольку скорость переноса параллельна поверхности раздела зон.

На начальной стадии могут иметь место быстрые процессы с характерным масштабом ϑ . В таком случае уравнение (2.1) дополняет уравнение типа релаксационного закона Максвелла с зависящим от координаты коэффициентом, вытекающее из (2.2) при $\varepsilon_U \rightarrow 0$, $\varepsilon_Q \rightarrow 0$:

$$\varepsilon_U \frac{\partial j}{\partial t} + \varepsilon_K k(z) \frac{\partial C}{\partial z} + j = 0, \quad (2.4)$$

где нестационарным слагаемым нельзя пренебрегать при малых временах.

Заметим, что переменная j связана с потоком вещества J соотношением $J = K(x)j$. Будем использовать переменные j и K отдельно, поскольку в теории они введены отдельно. Кроме того, переход к переменной J при $K(x) \neq \text{const}$ в системе (2.1), (2.2) несколько усложняет ее вид. Переход к потоку J в (1.12) и (2.4) позволяет записать систему уравнений релаксационного типа в размерной форме

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} + U \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial J}{\partial x} + Q(C) = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \quad \vartheta \frac{\partial J}{\partial \tau} + D_*(x) \frac{\partial C}{\partial x} + J = 0, \quad D_*(x) = K^2(x)\vartheta.$$

Время релаксации ϑ обычно меньше характерного времени $T_U = L/U$, а неравенство $\vartheta \ll T_Q$ часто может нарушаться. В случае реакции первого порядка ($Q(c) = k_1c$) имеем $T_Q = 1/k_1$ и для применимости диффузионной модели необходимо выполнение предельного неравенства $\vartheta k_1 \ll 1$. Факт снижения точности расчета по диффузионной модели по сравнению с расчетом по фундаментальному уравнению конвективной диффузии, когда имеют место соотношения $\vartheta k_1 = O(1)$ или $\vartheta k_1 \gg 1$, установлен в работах [5, 6]. В тех же условиях релаксационная модель дает удовлетворительные результаты и для $\vartheta k_1 \gg 1$.

Рассмотрим примеры, когда одно из неравенств $\vartheta \ll T_U$ или $\vartheta \ll T_Q$ нарушается. Случай, когда $\vartheta \ll T_Q$, а $\varepsilon_U = O(1)$, малоинтересен, поскольку происходит незначительное упрощение предложенной модели (отбрасывается слагаемое $\varepsilon_Q \Phi'(C)$ в уравнении (2.2)). Более важен случай, когда имеет место неравенство $\vartheta \ll T_U$, а соотношение $\vartheta \ll T_Q$ не выполняется. Тогда из уравнения (2.2) следует закон Фика с коэффициентом диффузии (дисперсии), зависящим от концентрации целевого вещества: $j = -\varepsilon_K k(z)[1 + \varepsilon_Q Q'(C)]^{-1} \partial C / \partial z$. Запишем соответствующее уравнение дисперсии, вытекающее из уравнения (1.12), в размерном виде

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} + U \frac{\partial C}{\partial x} + Q(C) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_0(C, x) \frac{\partial C}{\partial x} \right), \quad (2.5)$$

где $D_0(C, x) = D_*(x) / [1 + \vartheta Q'(C)] + D$ — модифицированный коэффициент дисперсии.

Следует, однако, заметить, что $D_0(C, x)$ в (2.5) можно считать коэффициентом, аналогичным коэффициенту диффузии, только когда в рассматриваемой области $D_0(C, x) > 0$, что требует выполнения неравенств $1 + \vartheta Q'(C) > 0$ или $1 + \vartheta Q'(C) < -D_*(x)/D$, поскольку тейлоровский коэффициент D_* и коэффициент диффузии D всегда положительны. Первое неравенство может нарушаться, когда кинетическая функция $Q(C)$ имеет участок достаточно резкого понижения ($Q'(C) < -1/\vartheta$). Второе неравенство нарушается при $D_* \gg D$, что обычно и реализуется на практике. Для рассмотренного в работах [14, 15] случая с автокаталитическим источником вещества $Q(C) = bC/(g + C)^2$ ($b > 0$, $g > 0$) модифицированный коэффициент дисперсии $D_0(C, x)$ будет всегда положительным в области $C > 0$, если выполнено условие $b\vartheta < 27g^2$. В противном случае при достаточно большом значении $D_*(x)/D$ в области положительных значений концентрации коэффициент $D_0(C, x)$ на некотором интервале концентраций будет отрицательным. По-видимому, в этом случае переход от релаксационной модели к диффузионной нецелесообразен. Отметим, что на зависимость коэффициента дисперсии от параметров источника массы для химической реакции первого порядка указывалось в работе [12].

3. Выбор функции R в методе Галеркина. Систему функций метода Галеркина целесообразно подчинить требованиям согласованности с дополнительными условиями, свойствами решения и т. д. Удачный выбор основных функций этого метода способен улучшить аппроксимацию точного решения и позволяет ограничиться малым числом уравнений. Эти функции удобно выбирать по возможности простыми, чтобы вычисление интегралов было легко выполнить аналитически. В данной работе функция R выбрана в виде полинома, удовлетворяющего как можно большему числу условий, согласованных с рассматриваемой задачей.

Кроме выполнения условий (1.11), желательно, чтобы коэффициенты дисперсии диффузионной модели (1.8) и релаксационной модели в предельной форме совпадали:

$$\langle \psi^2 \rangle = DK^2\vartheta = \langle uR \rangle^2 / \langle (R')^2 \rangle.$$

Тем не менее в силу неравенства Коши — Буняковского с учетом определения функции тока (1.9) имеем

$$\langle uR \rangle^2 = \left(\frac{\psi R}{h} \Big|_0^h - \langle \psi R' \rangle \right)^2 = \langle \psi R' \rangle^2 \leq \langle \psi^2 \rangle \langle (R')^2 \rangle,$$

т. е. коэффициент дисперсии в диффузионной модели (1.8) превышает соответствующий коэффициент в предложенной модели. Равенство возможно, если функции ψ и R' пропорциональны с постоянным коэффициентом. Однако в общем случае функция тока зависит от двух координат, тогда как функцию $R(R')$ удобно выбирать зависящей только от y . В частном случае течения Пуазейля в плоском канале функция тока зависит только от y , и можно добиться совпадения указанных коэффициентов дисперсии хотя бы в этой частной задаче. В данном варианте функция тока выражается через переменную y как полином $\psi = Uh(3\eta^2 - 2\eta^3 - \eta)$, где $\eta = y/h$. Приравняв последнее выражение с неопределенным множителем к величине $R'(y)$, выполнив интегрирование и используя два интегральных условия (1.11), находим постоянную интегрирования и указанный множитель. Таким образом, для функции R получаем выражение

$$R(y) = \sqrt{7/3} (1 + 60\eta^3 - 30\eta^4 - 30\eta^2), \quad \eta = y/h. \quad (3.1)$$

Формула (3.1) позволяет в общем случае найти время релаксации ϑ (см. (1.14)):

$$\vartheta = h^2 / (40D).$$

4. Гиперболическая система уравнений переноса. Будем считать, что $Re \gg 1$, а коэффициент K непостоянен, но отделен от нуля некоторым интервалом. Тогда в размерной (1.12), (1.13) и безразмерной (2.1), (2.2) системах можно пренебречь правыми частями соответствующих уравнений. Следуя [16], определим основные свойства полученной таким образом системы. Для этого запишем ее в матричной форме, выделив слагаемые с производными, и найдем собственные числа соответствующей матрицы [16]. Запишем (1.12), (1.13) с нулевой правой частью в виде

$$\frac{\partial S}{\partial \tau} + A(x) \frac{\partial S}{\partial x} + BS = f, \quad S = \begin{pmatrix} C \\ j \end{pmatrix}, \quad A(x) = \begin{pmatrix} U & K(x) \\ K(x) & V(x) \end{pmatrix}, \quad (4.1)$$

где компоненты матриц B и f определяются из (1.12) и (1.13). Для установления основных свойств системы они не нужны, поэтому здесь не приводятся. Собственные числа λ матрицы $A(x)$ определяются уравнением

$$|A(x) - \lambda(x)E| = 0 \quad (4.2)$$

(E — единичная матрица). Раскрыв определитель (4.2), получаем квадратное уравнение относительно λ

$$\lambda^2 - (U + V)\lambda + \Delta = 0, \quad \Delta = UV - K^2. \quad (4.3)$$

Дискриминант уравнения (4.3) равен $(U - V)^2 + 4K^2$. Он всегда положителен, а значит, корни уравнения (4.3) вещественные и некратные, т. е. система (4.1) относится к гиперболическому типу. Ключевую роль в постановке дополнительных условий для данной системы играет параметр $\Delta = UV - K^2$, равный определителю матрицы $A(x)$.

Пусть процесс массопереноса протекает в области $x \in (0, L)$. Для определенности направление оси x выбрано совпадающим с направлением вектора средней скорости, т. е.

$U > 0$. Легко видеть, что бóльший корень (4.3) $\lambda_+ = 0,5\{U + V + [(U - V)^2 + 4K^2]^{1/2}\}$ всегда положителен, тогда как знак второго корня $\lambda_- = 0,5\{U + V - [(U - V)^2 + 4K^2]^{1/2}\}$ совпадает со знаком величины Δ . Возможны три случая: $\Delta > 0$, $\Delta < 0$ и $\Delta = 0$ в некоторой точке x .

В первом случае ($\Delta > 0$ во всех точках $x \in (0, L)$) наклон обеих характеристик (знак волновых скоростей) $dx_{\pm}/d\tau = \lambda_{\pm}(x)$ положителен и поэтому следует ставить два граничных условия для системы (4.1) на левой границе области $x = 0$ и не ставить ни одного условия при $x = L$. Этот вариант в системе с постоянными коэффициентами, отвечающий распространению вещества в круглой трубе при течении Пуазейля, исследован в работах [5, 6].

Покажем, что в потоке жидкости с однонаправленным по оси x течением $u(x, y) \geq 0$ реализуется случай $\Delta > 0$. В случае турбулентного течения жидкости под функцией $u(x, y)$ понимается осредненное (без пульсационной составляющей) значение скорости. Для доказательства заметим, что неравенство $\Delta > 0$, т. е. $UV > K^2$, при $u \geq 0$ эквивалентно интегральному неравенству Коши — Буняковского. Действительно,

$$K^2 = \langle uR \rangle^2 = \langle \sqrt{u} R \sqrt{u} \rangle^2 \leq \langle u \rangle \langle uR^2 \rangle = UV,$$

поскольку квадратный корень из u вещественный.

Отметим, что при вычислении коэффициентов гиперболической модели обычно [5, 6] использовались известные профили скорости в трубах при ламинарном и турбулентном режимах течения жидкости. При этом $u \geq 0$ (для турбулентного движения это осредненная скорость без турбулентных пульсаций), т. е. согласно сказанному выше $\Delta > 0$. Этот вариант хорошо изучен.

Для всех значений Δ с линии $\tau = 0$ в рассматриваемую область $\tau > 0$, $x \in (0, L)$ выходят два семейства характеристик. Поэтому следует ставить два условия (начальных) на этой линии [16]. Они получаются после применения процедуры осреднения (1.7) начального распределения концентрации $c_0(x, y)$ (1.4), связанной с разложением Галеркина (1.10). В этом легко убедиться, поскольку выполнение стандартной процедуры метода Галеркина (требование ортогональности невязки, получающейся после подстановки разложения Галеркина в некоторое равенство, системе выбранных функций) эквивалентно осреднению данного равенства, умноженного по очереди на каждую функцию системы Галеркина. Имеем

$$C|_{\tau=0} = \langle c_0 \rangle, \quad j|_{\tau=0} = \langle Rc_0 \rangle. \quad (4.4)$$

Начальную концентрацию часто считают не зависящей от поперечной потоку координаты y . В первом соотношении (4.4) знак осреднения можно опустить, а второе соотношение в силу (1.11) приводит к равенству $j(x, 0) = 0$. Те же допущения обычно принимаются и для концентрации вещества на входе в систему $c_+(0, y, \tau) = \text{const}(y) = c_+(\tau)$. Получим граничные условия для системы (4.1). Для этого применим процедуру осреднения по методу Галеркина к балансу (закону сохранения) вещества на входе в систему:

$$u(0, y)c_+(\tau) = u(0, y)[C(0, \tau) + R(y)j(0, \tau)]. \quad (4.5)$$

После непосредственного осреднения (4.5) и осреднения с весом $R(y)$ получаем систему линейных уравнений относительно $C(0, \tau)$ и $j(0, \tau)$

$$UC(0, \tau) + K(0)j(0, \tau) = Uc_+(\tau), \quad K(0)C(0, \tau) + V(0)j(0, \tau) = K(0)c_+(\tau) \quad (4.6)$$

с определителем $\Delta(0) > 0$. Отсюда находим, что эта система имеет единственное решение вида

$$C|_{x=0} = c_+(\tau), \quad j|_{x=0} = 0. \quad (4.7)$$

Во втором случае ($\Delta(0) = 0$) с линии $x = 0$ в область $\tau > 0$, $x \in (0, L)$ выходит только одна система характеристик λ_+ , а с линии $x = L$ не выходит ни одной. При этом соотношение (4.5) используется при осреднении только один раз и предпочтение отдается осреднению с первой функцией метода Галеркина — значением единица. Таким образом, приходим к первому равенству (4.6)

$$(CU + jK)|_{x=0} = Uc_+(\tau). \tag{4.8}$$

В третьем случае ($\Delta(0) < 0$) с линии $x = 0$ в область $\tau > 0$, $x \in (0, L)$ выходит система характеристик λ_+ . При этом, как и во втором случае, будет выполняться граничное условие (4.8). На выходе из системы (при $x \geq L$) аналогично ситуации на входе в систему примем, что концентрация c_- не зависит от y . Будем предполагать, что функция $c_-(\tau)$ неизвестна. Построив аналогичную (4.6) систему в сечении $x = L$ и получив единственное при $\Delta < 0$ решение типа (4.7), для построения граничных условий с известными функциями выберем второе условие

$$j|_{x=L} = 0 \tag{4.9}$$

в дополнение к (4.8) для гиперболической системы при $\Delta < 0$. Отметим, что данный вариант ($\Delta < 0$) всегда реализуется для непроточных каверн, когда $U = 0$ и $\Delta = -K^2 < 0$.

Предложенные граничные условия (4.7) при $\Delta > 0$, (4.8) при $\Delta = 0$ и (4.8), (4.9) при $\Delta < 0$ не исчерпывают возможных вариантов постановки граничных условий и рассматриваются здесь потому, что аналогичны условиям Данквертса

$$D_* \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=0} = U[C - c_+(\tau)], \quad \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=L} = 0, \tag{4.10}$$

широко применяемым в диффузионной модели. Напомним, что диффузионная модель получается из гиперболической в предельной ситуации ($\varepsilon_U \ll 1$, $\varepsilon_Q \ll 1$), когда поток связан с градиентом средней концентрации законом Фика $j = -\vartheta K(x) \partial C / \partial x$. В процессе предельного перехода будет реализовываться третий случай ($\Delta < 0$) гиперболической модели, и из формул (4.8), (4.9) с учетом равенства $D_* = K^2(x)\vartheta$ получаем (4.10).

Диффузионная модель с условиями Данквертса (4.10) получила широкое распространение при анализе многих процессов в природе и технике. Как показано выше, наиболее близким к ней оказался третий вариант ($\Delta < 0$) гиперболической модели, поскольку он также представляет собой краевую задачу. По-видимому, это обстоятельство сдерживало использование на практике гиперболической модели, появившейся прежде всего в случае $\Delta > 0$ [5, 6], который относится к задаче Коши по переменной x (условия (4.7)), несмотря на то, что расчеты по гиперболической модели лучше соответствовали точным решениям.

5. Расчет коэффициента массообмена между кавернами. В качестве примера использования системы уравнений (1.12), (1.13) определим коэффициент массообмена между кавернами, тем самым обобщая результаты [17], полученные на основе диффузионной модели. При этом будем опираться на обычно реализуемые на практике соотношения между параметрами.

В диффузионной модели (1.6) при учете (1.8) имеем неравенство для полного коэффициента дисперсии

$$D_* + D \geq 2\langle \psi^2 \rangle^{1/2},$$

т. е. значение коэффициента дисперсии ограничено снизу. Однако конвективная часть коэффициента дисперсии D_* значительно превышает молекулярную составляющую D практически во всем объеме системы, и только там, где $D_* = 0$, существенна роль коэффициента D . Это приводит к необходимости рассмотрения проблемы в приближении пограничного слоя [17]. Аналогичная ситуация возникает при анализе задачи на основе уравнений (1.12), (1.13). Большое значение имеют области, где обращается в нуль функция $K(x)$

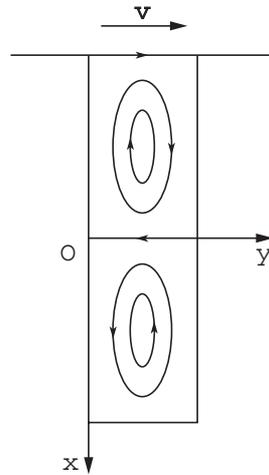


Рис. 1. Схема обтекания каверны

(напомним, что $D_* = K^2\vartheta$). Задачу будем рассматривать для непроточных каверн ($U = 0$) при отсутствии химической реакции. Подобная ситуация реализуется, например, при обтекании каверны по схеме М. А. Лаврентьева [18], когда может наблюдаться несколько циркуляционных зон (рис. 1). Границей раздела зон будем считать прямолинейный участок при $x = 0$ (обычно эта граница немного искривлена). На этой линии всюду $u = 0$. В приближении пограничного слоя ($K_*^2\vartheta \gg D$) в окрестности линии $x = 0$ можно ограничиться первыми слагаемыми разложения в ряд Тейлора функций $K(x)$ и $V(x)$. Имеем

$$K(x) = \varkappa x, \quad V(x) = \mu x, \quad \varkappa = \left\langle \frac{\partial u}{\partial x} R \right\rangle \Big|_{x=0}, \quad \mu = \left\langle \frac{\partial u}{\partial x} R^2 \right\rangle \Big|_{x=0}. \quad (5.1)$$

Далее будем считать, что $\varkappa \neq 0$. Равенство нулю этого параметра возможно, если производная $\partial u/\partial x$ (или $\partial v/\partial y$ в силу уравнения неразрывности (1.2)) при $x = 0$ ортогональна второй функции $R(y)$ ортогональной системы Галеркина. Ограничиваясь анализом двучленного разложения (1.10), вряд ли последовательно связывать производную $\partial v/\partial y$ с высшими функциями разложения Галеркина. Поэтому реальным представляется случай $\partial v/\partial y = \text{const}$ при $x = 0$. Из условий прилипания при $y = 0$ и $y = h$ после интегрирования по y вытекает, что $v = 0$. Последнее означает, что граничная линия $x = 0$ эквивалентна твердой, поскольку на ней $u = v = 0$. Это имеет место на дне каверны. При анализе массообмена на твердой поверхности (на ней $\varkappa = 0$) необходима квадратичная аппроксимация функции $K(x)$, так же как и для движущейся со скоростью $v = \text{const}$ поверхности вдоль оси y . Заметим, что для расчета коэффициентов \varkappa и μ согласно (5.1) из всего поля скоростей необходимо знать только значение компоненты v на поверхности раздела ячеек. Причем если использовать степенную аппроксимацию v при $x = 0$, то достаточно определить только слагаемые до порядка y^7 включительно, поскольку как функцию $R(y)$, так и $v(0, y)$ можно разложить по системе ортогональных функций (полиномов Лежандра с переходом к интервалу $(-1, +1)$), при этом полиномы выше седьмого порядка не влияют на расчет параметра μ , а выше третьего — на расчет \varkappa .

Таким образом, система уравнений массопереноса при указанных положениях в окрестности линии контакта между циркуляционными зонами имеет вид

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial x} (\varkappa x j) = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}; \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial j}{\partial \tau} + \mu x \frac{\partial j}{\partial x} + \varkappa x \frac{\partial C}{\partial x} + \left(\frac{\mu}{2} + \frac{1}{\vartheta} \right) j = D \frac{\partial^2 j}{\partial x^2}. \quad (5.3)$$

В силу того, что система (5.2), (5.3) содержит решения типа погранслоя, граничными условиями к ней будут следующие:

$$C|_{x \rightarrow \pm\infty} \rightarrow C_{\pm}, \quad j|_{x \rightarrow \pm\infty} < \infty, \quad (5.4)$$

где C_{\pm} — концентрации вещества в контактирующих кавернах вдали от границы раздела. Подобные задачи обсуждались ранее в работах [11, 17], на основе которых можно сделать вывод, что для описания массообмена между кавернами в рассматриваемом диапазоне времени применимо квазистационарное приближение, т. е. для расчета коэффициента обмена между циркуляционными областями следует использовать стационарное решение задачи (5.2)–(5.4). При этом величины C_{\pm} с приемлемой точностью будут соответствовать средним по циркуляционным областям концентрациям целевого вещества. Поскольку на границе раздела ячеек скорость переноса параллельна ей, массообмен между ячейками определяется молекулярной диффузией. Для коэффициента обмена ζ веществом между ячейками через границу контакта $x = 0$, следуя [17], выводим соотношение

$$\zeta = \frac{D}{l\delta C} \left. \frac{dC}{dx} \right|_{x=0}, \quad \delta C = C_+ - C_-, \quad (5.5)$$

где l — длина каверны.

Запишем стационарные уравнения (5.2), (5.3) в безразмерных переменных

$$q = \frac{j}{\delta C}, \quad H = \frac{C}{\delta C}, \quad \frac{\xi}{x} = \sqrt{\frac{\varkappa}{D \sin 2\varphi}}, \quad 2\nu + 1 = \frac{\sin 2\varphi}{\vartheta \varkappa}. \quad (5.6)$$

Угол φ определяется двумя уравнениями

$$\sin 2\varphi = \frac{2\varkappa}{\sqrt{\mu^2 + 4\varkappa^2}}, \quad \operatorname{tg} 2\varphi = \frac{2\varkappa}{\mu}, \quad (5.7)$$

где квадратный корень понимается в арифметическом смысле. В общем случае различных знаков величин \varkappa и μ можно считать $\varphi \in (-\pi/2, \pi/2)$. Таким образом, φ является однозначной функцией параметров \varkappa и μ . Из (5.2), (5.3), (5.6) получаем

$$\sin 2\varphi \frac{d}{d\xi} (\xi q) = \frac{d^2 H}{d\xi^2}; \quad (5.8)$$

$$\xi \sin 2\varphi \frac{dH}{d\xi} + 2\xi \cos 2\varphi \frac{dq}{d\xi} + [2\nu + 1 + \cos 2\varphi]q = \frac{d^2 q}{d\xi^2}. \quad (5.9)$$

Первый интеграл уравнения (5.8) имеет вид

$$\xi q \sin 2\varphi + A = \frac{dH}{d\xi}, \quad (5.10)$$

где A — постоянная интегрирования, которая связана с коэффициентом массообмена ζ (см. (5.5)) (A — в известном смысле безразмерное значение ζ (см. (5.12))). Сделав замену $q \sin 2\varphi = -AZ$, из (5.9) для новой искомой функции Z получим уравнение

$$\frac{d^2 Z}{d\xi^2} = 2\xi \cos 2\varphi \frac{dZ}{d\xi} + [2\nu + 1 + \cos 2\varphi + \xi^2 \sin^2 2\varphi]Z - \xi \sin^2 2\varphi. \quad (5.11)$$

Проинтегрировав (5.10) в бесконечных пределах и используя (5.10) при $\xi = 0$, для коэффициента массообмена ζ в (5.5) получаем выражение

$$\frac{1}{A} = \frac{1}{l\zeta} \sqrt{\frac{\varkappa D}{\sin 2\varphi}} = \int_{-\infty}^{\infty} [1 - \xi Z(\xi)] d\xi. \quad (5.12)$$

Формула (5.12) показывает, что для расчета ζ важна только нечетная часть функции $Z(\xi)$ в ее разложении $Z(\xi) = 0,5[Z(\xi) + Z(-\xi)] + 0,5[Z(\xi) - Z(-\xi)]$. Поэтому вначале найдем нечетное решение уравнения (5.11).

Сделаем замену искомой функции $Z(\xi) = Y(\xi) \exp[(\xi^2 \cos 2\varphi)/2]$. Для новой функции $Y(\xi)$ получаем

$$\frac{d^2 Y}{d\xi^2} - (2\nu + 1 + \xi^2)Y + \xi \sin^2 2\varphi \exp\left(-\frac{\xi^2 \cos 2\varphi}{2}\right) = 0. \quad (5.13)$$

Это уравнение связано с функциями Эрмита. Его нечетное решение, ограниченное на бесконечности, имеет вид

$$Y(\xi) = Y_1(\xi) \int_0^\xi Y_2(x) \sigma(x) dx + Y_2(\xi) \int_\xi^\infty Y_1(x) \sigma(x) dx, \quad (5.14)$$

$$\sigma(x) = x \sin^2 2\varphi \exp\left(-\frac{x^2 \cos 2\varphi}{2}\right),$$

где

$$Y_1(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) H_{-1-\nu}(x), \quad (5.15)$$

$$Y_2(x) = Y_1(x) \int_0^x \frac{d\xi}{Y_1^2(\xi)} = \frac{\Gamma(1+\nu)}{2^{-\nu} \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) [H_{-1-\nu}(-x) - H_{-1-\nu}(x)].$$

Здесь $\Gamma(x)$ — гамма-функция Эйлера, а $H_\nu(x)$ — функция Эрмита соответствующего индекса [19]. Формулы (5.14), (5.15) позволяют определить свойства функции Y , необходимые в предельных случаях для последующих выкладок.

Для выполнения расчетов получим разложение функции Y по полиномам Эрмита. Как известно [19], функции $S_k = \exp(-\xi^2/2) H_k(\xi)$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) удовлетворяют уравнениям

$$\frac{d^2 S_k}{d\xi^2} + (2k + 1 - \xi^2) S_k = 0. \quad (5.16)$$

Умножим уравнение (5.16) на Y , а уравнение (5.13) — на S_k и вычтем результаты. Далее полученное выражение проинтегрируем по ξ в бесконечных пределах, учитывая асимптотическое поведение функций Y и S_k при $\xi \rightarrow \pm\infty$. В результате получим соотношение

$$2(\nu + k + 1) \int_{-\infty}^{\infty} Y S_k d\xi = \sin^2 2\varphi \int_{-\infty}^{\infty} \xi S_k d\xi \exp\left(-\frac{\xi^2 \cos 2\varphi}{2}\right), \quad (5.17)$$

представляющее собой связь коэффициентов разложения функций $Y(\xi) \exp(\xi^2/2)$ и $\xi \exp[\xi^2/2 - (\xi^2 \cos 2\varphi)/2] = \xi \exp[\xi^2 \sin^2 \varphi]$ в ряды по полиномам Эрмита с весом $\exp(-\xi^2)$. В [19] приведено разложение

$$\exp(x^2 \sin^2 \varphi) = \frac{1}{\cos \varphi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\operatorname{tg}^{2k} \varphi}{2^{2k}} \frac{H_{2k}(x)}{k!}, \quad x \in (-\infty, \infty), \quad |\varphi| \leq \frac{\pi}{4}, \quad (5.18)$$

записанное в удобных для нашего анализа переменных. Продифференцировав обе части (5.18) по x и используя формулу $H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x)$ теории полиномов Эрмита [19] и соотношение (5.17), получаем разложение функции Y по полиномам Эрмита

$$Y \exp\left(\frac{\xi^2}{2}\right) = \frac{\sin^2 2\varphi}{8 \cos^3 \varphi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\operatorname{tg}^{2k} \varphi}{2^{2k} k!} \frac{H_{2k+1}(\xi)}{k + 1 + \nu/2}, \quad \xi \in (-\infty, \infty), \quad |\varphi| < \frac{\pi}{4}. \quad (5.19)$$

Правомерность почленного дифференцирования (5.18) обосновывается установлением абсолютной сходимости ряда производных при помощи асимптотических формул для полиномов Эрмита [19], которая имеет место при $|\varphi| < \pi/4$.

Согласно (5.7) переменная φ при любых знаках параметров \varkappa и μ может без ограничения общности меняться в пределах от $-\pi/2$ до $\pi/2$. Однако в рассматриваемом случае непроточных каверн ($U = 0$) направление оси x можно не связывать с направлением вектора средней скорости. Если направление оси x выбрать так, чтобы параметр μ был неотрицательным (при смене направления оси x согласно (5.1) знаки параметров \varkappa и μ меняются на противоположные), то можно ограничиться интервалом $\varphi \in [-\pi/4, \pi/4]$, причем границам интервала соответствует $\mu = 0$. Поскольку зависимости (5.18), (5.19) являются четными по переменной φ , то можно ограничиться анализом в интервале $\varphi \in (0, \pi/4]$ (напомним, что случай $\varkappa = 0$ выше был исключен, поэтому вариант $\varphi = 0$ также исключен). Данный интервал изменения φ соответствует $\varkappa > 0$. Далее считаем $\varphi \in (0, \pi/4)$. При этом ряды (5.18), (5.19) будут сходиться.

Используя полученные результаты (5.14), (5.15), (5.18), можно получить следующие представления функции Z в области малых и больших значений основного аргумента ξ :

$$Z = \frac{\sin^2 2\varphi}{2(2+\nu)} F\left(1, \frac{3}{2}, 2 + \frac{\nu}{2}, \sin^2 \varphi\right) \left\{ \xi + \frac{\xi^3}{6} [3 \cos 2\varphi + 2\nu + 1] \right\} - \frac{\xi^3 \sin^2 2\varphi}{6} + o(\xi^5), \quad \xi \rightarrow 0,$$

$$Z = \frac{1}{\xi} \left\{ 1 - \frac{2[\nu + \sin^2 \varphi]}{\xi^2 \sin^2 2\varphi} + O\left(\frac{1}{\xi^4}\right) \right\}, \quad \xi \rightarrow \infty. \quad (5.20)$$

Здесь $F(\alpha, \beta, \gamma, z)$ — гипергеометрическая функция перечисленных аргументов.

Функцию H в (5.8) без ограничения общности можно считать, как и Z , нечетной функцией ξ . Действительно, учитывая (5.4) и структуру уравнений (5.2), (5.3), (5.8), можно сделать замену функции C по формуле $C = (C_+ + C_-)/2 + C^*$, где для новой искомой функции C^* граничное условие по переменной ξ становится нечетно-симметричным: $C^* \rightarrow \pm \delta C/2$ при $x \rightarrow \pm\infty$, причем, поскольку C_{\pm} постоянны, вид указанных уравнений не изменится. Поэтому будем считать, что преобразование $C \rightarrow C^*$ проделано и используем функцию C^* (точнее, H) как искомую, опуская верхний индекс “*”.

Используя нормировочный множитель A в выражении $H = AW$, для функции W , учитывая (5.10), запишем уравнение

$$\frac{dW}{d\xi} = 1 - \xi Z, \quad (5.21)$$

из которого при помощи разложений (5.20) получаются следующие зависимости:

$$W = \xi - \frac{\sin^2 2\varphi}{2(2+\nu)} F\left(1, \frac{3}{2}, 2 + \frac{\nu}{2}, \sin^2 \varphi\right) \left\{ \frac{\xi^3}{3} + \frac{\xi^5 [3 \cos 2\varphi + 2\nu + 1]}{30} \right\} + \frac{\xi^5 \sin^2 2\varphi}{30} + o(\xi^7),$$

$$\xi \rightarrow 0,$$

$$W = \frac{1}{2A} - \frac{2[\nu + \sin^2 \varphi]}{\xi \sin^2 2\varphi} + O\left(\frac{1}{\xi^3}\right), \quad \xi \rightarrow \infty. \quad (5.22)$$

Параметр A в (5.22) будет определен ниже.

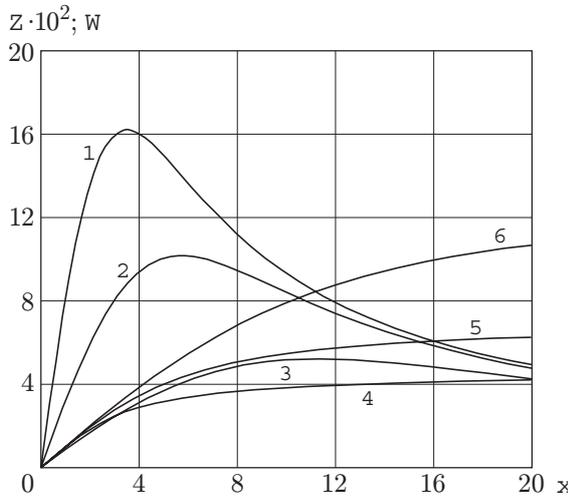


Рис. 2

Рис. 2. Функции $Z(\xi)$ (кривые 1–3) и $W(\xi)$ (кривые 4–6) при $\nu = 2$:
 1, 4 — $\varphi = \pi/7$; 2, 5 — $\varphi = \pi/12$; 3, 6 — $\varphi = \pi/24$

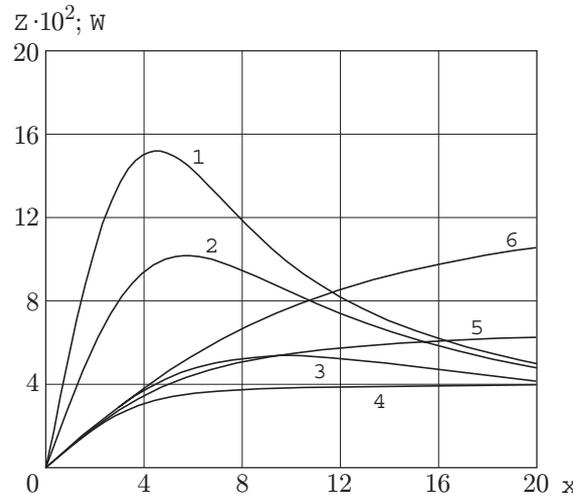


Рис. 3

Рис. 3. Функции $Z(\xi)$ (кривые 1–3) и $W(\xi)$ (кривые 4–6) при $\varphi = \pi/12$:
 1, 4 — $\nu = 0,2$; 2, 5 — $\nu = 2$; 3, 6 — $\nu = 10$

Приведем аналог формулы (5.19) для Z , т. е. разложение функции $W(\xi)$ по полиномам Эрмита:

$$W = \frac{Z}{2 \sin^2 \varphi} + \frac{(1 + \nu) \exp(-\xi^2 \sin^2 \varphi)}{4 \cos^3 \varphi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\text{tg}^{2k} \varphi}{2^k} \frac{H_{2k+1}(\xi)}{(2k + 1)!!} \sum_{j=0}^k \frac{(2j - 1)!!}{2^j (j + 1 + \nu/2) j!}, \quad (5.23)$$

$$\xi \in (-\infty, \infty), \quad |\varphi| < \pi/4, \quad (2j - 1)!! = 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2j - 1), \quad (-1)!! = 1,$$

полученное с помощью формул (5.18), (5.19), (5.21).

Графики функций $Z(\xi)$ и $W(\xi)$ при различных значениях переменных φ, ν приведены на рис. 2, 3. При расчете функции W вместо (5.23) удобнее использовать численную процедуру интегрирования уравнения (5.21). Из рис. 2, 3 следует, что уменьшение параметра φ (см. (5.7)) влияет на форму кривых так же, как и увеличение ν (см. (5.6)). Кривые 2 и 5 на обоих рисунках одни и те же.

Для вычисления интеграла (5.12) представим единицу под знаком интеграла как $1 = \exp(-\xi^2 \sin^2 \varphi) \exp(\xi^2 \sin^2 \varphi)$ и используем разложение (5.18) для $\exp(\xi^2 \sin^2 \varphi)$. Слагаемое $\xi Z(\xi)$ под знаком интеграла в (5.12) также преобразуем с помощью формул теории полиномов Эрмита к разложению по функциям $H_{2k}(x)$, опираясь на ряд (5.19). В результате приходим к выражению

$$\begin{aligned} \frac{1}{A} &= \int_{-\infty}^{\infty} [1 - \xi Z(\xi)] d\xi = \frac{\nu + 1}{2 \cos \varphi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\xi^2 \sin^2 \varphi) d\xi \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\text{tg}^{2k} \varphi}{2^{2k} k!} \frac{H_{2k}(\xi)}{k + 1 + \nu/2} = \\ &= \frac{\nu + 1}{2 \cos \varphi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\text{tg}^{2k} \varphi}{2^{2k} (k + 1 + \nu/2) k!} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\xi^2 \sin^2 \varphi) H_{2k}(\xi) d\xi = \\ &= \frac{\nu + 1}{\sin 2\varphi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k + 1/2) \Gamma(k + 1 + \nu/2)}{\Gamma(k + 2 + \nu/2) k!} = \end{aligned}$$

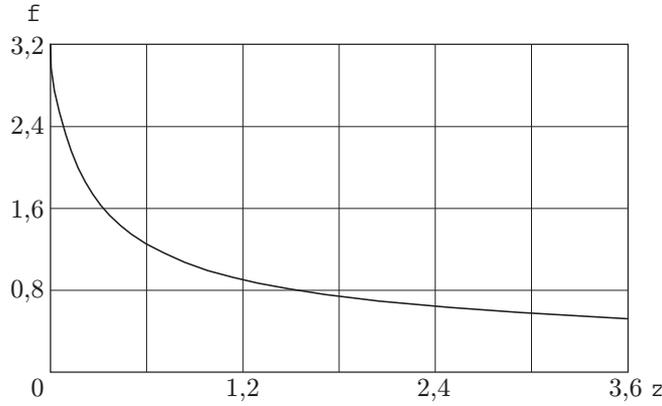


Рис. 4. Функция $f(z)$, описывающая коэффициент массообмена ζ в (5.24)

$$= \frac{\nu + 1}{\sin 2\varphi} \frac{\Gamma(1/2)\Gamma(1 + \nu/2)}{\Gamma(2 + \nu/2)} F\left(\frac{1}{2}, 1 + \frac{\nu}{2}, 2 + \frac{\nu}{2}, 1\right) = \frac{2\pi\Gamma(1 + \nu/2)}{\Gamma(1/2 + \nu/2) \sin 2\varphi}.$$

Здесь использованы известные формулы теории гамма-функции и гипергеометрической функции. Значение интеграла от $\exp(-\xi^2 \sin^2 \varphi) H_{2k}(\xi)$ в бесконечных пределах вычислено в работе [19]. Правомерность перемены порядка интегрирования и суммирования следует из абсолютной сходимости, имеющей место при $|\varphi| \leq \pi/4$.

Таким образом, для коэффициента массообмена ζ в (5.12) получаем зависимость

$$\zeta = \frac{\sqrt{\varkappa D \sin 2\varphi}}{2\pi l} \frac{\Gamma(1/2 + \nu/2)}{\Gamma(1 + \nu/2)}. \tag{5.24}$$

Кроме того, разложение функции W в (5.22) при $\xi \rightarrow \infty$ теперь полностью определено.

Диффузионной модели, рассмотренной в [17], соответствует предельный случай $\nu \rightarrow \infty, \mu \rightarrow 0$. Используя асимптотическую формулу для отношения гамма-функций при $\nu \rightarrow \infty$ $\Gamma(1/2 + \nu/2)/\Gamma(1 + \nu/2) \cong (2/\nu)^{1/2}$ [19], получаем

$$\zeta = \varkappa \sqrt{D\vartheta} / (\pi l).$$

На рис. 4 представлена функция $f(z) = \Gamma(1/4 + z)/\Gamma(3/4 + z)$, описывающая неэлементарную часть коэффициента массообмена ($z = \nu/2 + 1/4, f = 2\pi l \zeta / [\varkappa D \sin 2\varphi]^{1/2}$). Из формул теории гамма-функции [19] следует, что функция $f(z)$ монотонно убывает с ростом z . Действительно,

$$f'(z) = -f(z) \int_0^1 \frac{x^{z-3/4} dx}{1 + x^{1/2}} < 0,$$

поскольку в диапазоне $z \in (0, \infty)$ как интеграл, так и функция $f(z)$ положительны, а значит, $f'(z) < 0$ и функция $f(z)$ убывает.

6. Система нескольких граничащих циркуляционных областей. Если в системе имеется несколько циркуляционных ячеек с одинаковыми параметрами, то, следуя [17], получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений для средних по ячейкам концентраций вещества c_k

$$\begin{aligned} \frac{dc_1}{d\tau} &= \zeta(c_2 + c_+ - 2c_1), & \frac{dc_N}{d\tau} &= \zeta(c_{N-1} - c_N), \\ \frac{dc_k}{d\tau} &= \zeta(c_{k+1} + c_{k-1} - 2c_k), & k &= 2, 3, \dots, N - 1. \end{aligned} \tag{6.1}$$

Здесь принято, что последняя N -я ячейка граничит со стенкой, от которой вещество не может поступать в нее, а в первую ячейку может поступать вещество с концентрацией $c_+(\tau)$, точнее, на границе системы с первой ячейкой как бы находится еще одна ячейка с нулевым номером, концентрация вещества в которой известна и меняется по закону $c_+(\tau)$. Систему (6.1) следует дополнить начальными условиями общего вида

$$c_k|_{\tau=0} = c_k^0, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (6.2)$$

Нетрудно обобщить систему (6.1), (6.2) на более сложные ситуации, когда коэффициенты обмена ζ могут различаться на разных границах ячеек и для граничных ячеек $j = 1$ и $j = N$ имеет место более сложное взаимодействие с окружающей средой.

Заключение. Одним из основных результатов работы следует считать вывод системы (1.12), (1.13) уравнений волновой (при равенстве нулю правых частей (1.12), (1.13)) модели с дополнительными условиями (4.4), (4.7)–(4.9). Эта система обобщает полученные ранее результаты [5–7] на процессы переноса с двумерными течениями и может использоваться при анализе природных и технологических процессов в проточных аппаратах. В частности, она полезна для анализа работы химических реакторов. В то же время гиперболическая (волновая) модель включает диффузионную модель как частный случай, т. е. имеет более широкую область применения.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Taylor G.** Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A. 1953. V. 219, N 1137. P. 186–203.
2. **Aris R.** On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A. 1956. V. 235, N 1200. P. 67–77.
3. **Gill W. N., Sankarasubramanian R.** Exact analysis of unsteady convective diffusion // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A. 1970. V. 316, N 1526. P. 341–350.
4. **Марон В. И.** Перемешивание взаимно растворимых жидкостей в турбулентном потоке в трубе // ПМТФ. 1971. № 5. С. 96–102.
5. **Дильман В. В., Кронберг А. Е.** Релаксационные явления при продольном перемешивании // Теорет. основы хим. технологии. 1983. Т. 17, № 5. С. 614–629.
6. **Дильман В. В., Кронберг А. Е.** Соотношение временных масштабов процесса и моделирование химических реакторов // Хим. пром-сть. 1983. № 8. С. 464–470.
7. **Хонькин А. Д.** О тейлоровской и гиперболической моделях нестационарной продольной дисперсии пассивной примеси в конвективно-диффузионных процессах // Прикл. математика и механика. 2000. Т. 64, вып. 4. С. 631–643.
8. **Полянин А. Д.** О нестационарном конвективном массо- и теплообмене капли при соизмеримых фазовых сопротивлениях // ПМТФ. 1984. № 3. С. 105–116.
9. **Гупало Ю. П., Полянин А. Д., Рязанцев Ю. С.** Массотеплообмен реагирующих частиц с потоком. М.: Наука, 1985.
10. **Броунштейн Б. И., Фишбейн Г. А.** Гидродинамика, массо- и теплообмен в дисперсных системах. Л.: Химия. Ленингр. отд-ние, 1977.
11. **Мошинский А. И.** Эффективная диффузия многокомпонентных смесей в неоднородных потоках // ПМТФ. 1991. № 4. С. 113–120.
12. **Марон В. И.** Дисперсия радиоактивной примеси в потоке в трубе // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. 1975. № 1. С. 174–176.
13. **Колтунова Л. Н.** О диффузии в неоднородном поле скорости // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. 1989. № 5. С. 122–128.

14. Берман В. С., Востоков В. В., Рязанцев Ю. С. О множественности стационарных режимов в проточной системе с химической реакцией // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. 1982. № 3. С. 177–180.
15. Matsuura T., Kato M. Concentration stability of the isothermal reactor // Chem. Eng. Sci. 1967. V. 22, N 2. P. 171–183.
16. Годунов С. К. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1971.
17. Мошинский А. И. Эффективная диффузия динамически пассивной примеси в узких траншеях // ПМТФ. 1987. № 3. С. 62–71.
18. Лаврентьев М. А., Шабат Б. В. Проблемы гидродинамики и их математические модели. М.: Наука, 1977.
19. Лебедев Н. Н. Специальные функции и их приложения. М.: Физматгиз, 1963.

*Поступила в редакцию 18/III 2003 г.,
в окончательном варианте — 3/IX 2003 г.*
