УДК 533

Министерство образования и науки Российской Федерации

МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

(государственный университет)

ФАКУЛЬТЕТ АЭРОФИЗИКИ И КОСМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

КАФЕДРА КОСМИЧЕСКИЕ ЛЕТАТЕЛЬНЫЕ АППАРАТЫ

(Специализация «Газовая динамика»)

Течение газа по цилиндрическому каналу с внутренним стержнем и химической реакцией на нём

Работа

студента 136 группы

Тихонычева Петра Сергеевича

Научный руководитель

профессор Лунёв В. В. д.ф.-м.н

г. Долгопрудный

2015

Оглавление

Введение....1
Нахождение поля скоростей....2
Уравнение диффузии....3
Граничное условие....5
Решение уравнения диффузии....6
Первый метод....6
Второй метод....7
Третий метод....8
Четвёртый метод....9
Вывод....9
Список используемой литературы....10

Введение

Данная работа имеет отношение к исследованию параметров в химическом реакторе, с помощью которого вычисляются константы реакций. Химический реактор представляет собой длинный цилиндрический канал с тонким стержнем в центре. На стержень нанесено исследуемое вещество, например, графит. Диаметр внутреннего стержня мал по сравнению с диаметром канала[2]. Для измерения константы реакции, через трубку прокачивается смесь инертного газа и кислорода. Доля кислорода обычно мала [1]— в работе Рознера его доля составляет 3%. Кислород постепенно реагирует с материалом внутреннего стержня и он истончается. Чем дальше по течению, тем меньше кислорода остаётся, таким образом внутренний стержень истончается по-разному. Изменения диаметров можно при известных параметрах потока можно связать с константой реакции. Константу реакции так же можно получить измеряя концентрацию кислорода по течению, например, при помощи спектроскопии, но вплотную к стенке подобраться трудно, а так как геометрия устройства способствует резким изменениям параметров около стержня, имеет смысл решить модельную задачу течения жидкости по данной трубе.

Нахождение поля скоростей

Будем решать уравнение Навье-Стокса в длинной трубе со внутренним стержнем. На стержне и внешней стороне трубы ставятся граничные условия прилипания.

$$v_{r=R_1}=0 \qquad v_{r=R_2}=0 \tag{1}$$

Ищем стационарное решение с постоянным градиентом давления, направленным вдоль трубы. В данной задачи небольшие числа Маха, значит можем изменениями температуры и плотностью пренебречь.

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t}+\vec{v}\,\nabla\cdot\vec{v}=\frac{-\nabla p}{\rho}+\nu\Delta\vec{v} \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rightarrow 0 \qquad \frac{\partial}{\partial z}\rightarrow 0$$

Симметрия задачи позволяет упростить решение, если перейти в цилиндрическую систему координат. Ось Z направим вдоль внутреннего стержня, r – расстояние до центра стержня. От угла φ в данной задаче параметры не зависят, следовательно $\frac{\partial}{\partial \varphi}\rightarrow 0$.

Оператор Лапласа в цилиндрической системе координат при данной постановке задачи упрощается: $\Delta\rightarrow\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r}$.

Скорость будет иметь только z компоненту - $\vec{v}(0,0,v)$, тогда уравнение будет иметь вид:

$$\frac{\nabla p}{\rho}=\nu\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r}v \tag{3}$$

Из соображений симметрии зависимость скорости от радиуса может быть только вида $ar^2+br+c+d\ln r$.

Подставляя в граничные условия получаем профиль скорости:

$$v=\frac{\nabla p}{4\nu\rho}\left(\frac{R_2^2-R_1^2}{\ln\frac{R_2}{R_1}}\ln\frac{r}{R_1}-\left(r^2-R_1^2\right)\right) \qquad (4)$$

Можно заметить красивое обстоятельство независимости профиля скорости от основания логарифмов в вышеприведённой формуле. В дальнейшем удобнее перейти к безразмерным величинам n – параметр задачи и ξ — новая переменная

$$n=\frac{R_2}{R_1} \qquad v_0=\frac{R_1^2\nabla p}{4\nu\rho} \qquad \xi=\frac{r}{R_1} \qquad \xi\in[1,n] \qquad (5)$$

$$v=v_0\left(\frac{n^2-1}{\ln n}\ln\xi-\left(\xi^2-1\right)\right) \qquad (6)$$

Ещё одним безразмерным параметром в данной задаче является число Рейнольдса:

$$Re=\frac{v_0 l}{\nu}$$

Уравнение диффузии

На границе внутреннего стержня канала идёт химическая реакция. Пусть c – концентрация кислорода. Будем искать стационарное решение уравнения диффузии с учётом симметрии:

$$\frac{\partial c}{\partial t}+\vec{v}\cdot\nabla c=D\Delta c \qquad (7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rightarrow 0 \qquad \frac{\partial}{\partial\varphi}\rightarrow 0$$

Концентрация вдоль трубы изменяется намного медленнее чем поперёк, поэтому можно пренебречь в правой части членом с $\frac{\partial^2}{\partial z^2}$. Тогда оператор Лапласа и уравнение диффузии будут иметь вид:

$$\Delta\rightarrow\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\approx\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r}$$

$$v\frac{\partial c}{\partial z}=D\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r}c \qquad (8)$$

С граничными условиями

$$\frac{\partial c}{\partial r_{r=R2}}=0 \qquad \frac{\partial c}{\partial r_{r=R1}}=\frac{A}{R_1}c \tag{9}$$

Первое граничное условие показывает отсутствие реакции на внешней стороне канала, второе — ход химической реакции на поверхности стержня. Константа *A* суть вероятность молекулы кислорода прореагировать на стенке. Так как вдоль течения концентрация падает и достигает нуля (весь кислород прореагировал) имеет смысл искать решение в виде:

$$c=C\,\mathrm{e}^{-\alpha z} f(\xi) \tag{10}$$

Константа C не влияет на распределение кислорода по осям, а определяется лишь заданным расходом кислорода.

Перейдём к безразмерной координате вдоль z:

$$\zeta=\frac{\Lambda}{R_1} \qquad \alpha=\frac{\Lambda}{R_1}$$

После подстановки с учётом профиля скорости уравнение диффузии примет вид:

$$\frac{-\Lambda}{R_1}v_0\left(\frac{n^2-1}{\ln n}\ln\xi-(\xi^2-1)\right)f(\xi)=\frac{D}{R_1^2}\left(\frac{1}{\xi}\frac{\partial}{\partial\xi}\xi f(\xi)\right) \tag{11}$$

Введём ещё один параметр задачи; он не новый, так как связан с числом Рейнольдса. Именно им будем пользоваться в дальнейшем, так как при его использовании Λ входит в уравнения линейно.

$$d=\frac{D}{v_0 R_1}$$

Выясним его физический смысл. Для этого выразим характерную скорость течения через Re и через d:

$$v_0=\frac{Re\,\nu}{l}=\frac{D}{d R_1} \qquad d=\frac{lD}{R_1 \nu Re}$$

Из физических соображений ясно, что 1/Λ – количество ячеек размера R_1, за которое концентрация изменяется в e раз. Такое изменение ожидается на длине, равной нескольким диаметрам канала или нескольким десяткам радиусов внутреннего стержня. Таким образом ожидается $1/\Lambda\approx 100$

l – длина канала, можем принять длину, за которую концентрация заметно упадёт, тогда $\frac{l}{R_1} \sim \frac{1}{\Lambda}$. Коэффициенты переноса из кинетической теории D и ν приблизительно равны трети произведения тепловой скорости, помноженной на длину свободно пробега. Тогда:

$$d = \frac{1}{\Lambda Re}$$

$$Re \approx 10 \qquad d \approx 10$$

Таким образом концентрация атомов кислорода определяется следующей системой линейных однородных дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} f'' + \frac{f'}{\xi} + \frac{\Lambda}{d}\left[\frac{n^2-1}{\ln n}\ln\xi - (\xi^2 - 1)\right] f = 0 \\ f' = Af, \xi = 1 \\ f' = 0, \xi = n \end{cases} \tag{12}$$

Граничное условие

На стержне происходит реакция — молекулы кислорода реагируют с материалом стержня. Другими словами на поверхности стержня как бы уничтожается часть молекул кислорода, столкнувшихся со стенкой, равная вероятности прохождения реакции ε. Для установления стационарного решения необходимо, чтобы уничтожение молекул кислорода на стенке уравновешивалось диффузионным потоком извне.

Диффузионный поток записывается в виде:

$$J_{0_2} = -D \frac{\partial n_{0_2}}{\partial r} \tag{13}$$

Количество молекул, попавших на стенку с единицы прилежащего объёма за секунду, равно:

$$\frac{1}{6}\left(\frac{p_{o_2}}{kT}\right)\left(\frac{5\mathrm{kT}}{m_{o_2}}\right)^{1/2} \tag{14}$$

Число прореагировавших молекул определяется выражением (14), помноженным на вероятность реакции ε.

Тогда уравнение баланса частиц даёт следующее соотношение:

$$D\frac{\partial n_{o_2}}{\partial r}=\epsilon\frac{1}{6}\left(\frac{p_{o_2}}{kT}\right)\left(\frac{5\mathrm{kT}}{m_{o_2}}\right)^{1/2} \qquad (15)$$

Так как

$$n_{o_2}=\frac{p_{o_2}}{kT} \quad \text{и} \quad v_T=\left(\frac{5\mathrm{kT}}{m_{o_2}}\right)^{1/2} \quad , \qquad (16)$$

то граничное условие можно записать в следующем виде

$$\frac{\partial c}{\partial r}=\frac{\epsilon v_0 R_1}{6 D R_1}\frac{v_T}{v_0}c=\frac{\epsilon}{6\mathrm{d}}\frac{v_T}{v_0}\frac{c}{R_1} \quad , \qquad (17)$$

Тогда

$$A=\epsilon\frac{1}{6\mathrm{d}}\frac{v_T}{v_0} \qquad (18)$$

Или

$$\frac{\partial c}{\partial r}=\frac{\epsilon v_T R_1}{6 D R_1}c=\frac{\epsilon}{2}\frac{R_1}{l_f}\frac{c}{R_1} \qquad (19)$$

Решение уравнения диффузии

Данное уравнение является однородным линейным дифференциальным уравнением второго порядка с переменными коэффициентами и имеет два линейно независимых решения. Тривиальное решение удовлетворяет уравнению и граничным условиям, следовательно поставленная задача сводится к задаче на собственные значения Λ. К этой задаче можно подойти по-разному.

Первый метод

Для решения можно сначала найти любое нетривиальное решение, удовлетворяющее уравнению и одному граничному условию (удобнее граничному условию на внешней стороне канала), затем по формуле Лиувилля найти второе линейно независимое решение. Так как граничные условия линейны, задача уже сводится к поиску нетривиального решению, которое является линейной комбинацией полученных двух. К сожалению, автору работы не удалось найти или угадать аналитическое решение, поэтому перейдём к другим методам и попыткам решения данной задачи.

Второй метод

Сначала перепишем исходное уравнение в виде:

$$f''_{\xi\xi}+2\lambda(\xi)f'_{\xi}+\Omega(\xi)^2 f=0 \quad (20)$$

и сведём его к уравнению осциллятора с переменной частотой.

Для этого сделаем замену:

$$f=py \qquad p=\exp\left(-\int_1^{\xi}\lambda\,dt\right)=\xi^{-1/2} \quad (21)$$

После этого исходное уравнение примет вид:

$$y''_{\xi\xi}+\omega(\xi)^2 y=0 \quad (22)$$

Где ω имеет смысл частоты осциллятора и

$$\omega^2=\frac{1}{4\xi^2}+\frac{\Lambda}{d}\left[\frac{n^2-1}{\ln n}\ln\xi-(\xi^2-1)\right] \quad (23)$$

Будем искать решение в виде:

$$y=e^{i\varphi} \quad (24)$$

где φ=φ(ξ). Уравнение для φ имеет вид:

$$i\varphi''-\varphi'^2=\omega^2=0\, или\, \varphi'=\pm\sqrt{\omega^2+i\varphi''} \quad (25)$$

Оно может быть упрощено и решено итерационным методом в следующем предельном случае, когда изменение частоты мало по сравнению с самой частотой.

$$i\varphi'\approx\pm\left(1+\frac{i\varphi''}{2\omega^2}\right) \qquad \frac{\omega'}{\omega^2}\ll 1 \quad (26)$$

Первая итерация: φ'=ω; далее φ''=ω' подставляется в уравнение для φ' и производится вторая итерация после которой можно закончить. Тогда выражение (24) порождает действительное решение:

$$y=\frac{1}{\sqrt{\varpi}}\cos\left(\int_1^{\xi}\omega(t)dt+\beta\right) \quad (27)$$

Где β — неизвестная постоянная. Для её исключения из решения подставим решение поочерёдно в каждое граничное условие. При этом на границе стержня интеграл в аргументе тождественно равен нулю. Тогда искомая зависимость A(Λ) будет иметь вид. И опять же
при заданных параметрах задачи этот метод не работает, так как у стенок не выполняется условие (26).

Третий метод

Попробуем найти эту зависимость численно. Для этого разобьём интервал [1,n] на N равных частей и заменим производные функции f конечными разностными соотношениями. Поскольку сразу угадать зависимость A(Λ) и методом прогонки от внутренней границы к внешней и попасть в граничное условие не представляется возможным, то будем считать Λ неизвестной величиной и значение искомой функции в каждой точке разбиения будем хранить в виде функции от Λ. Проход от одного граничного условия к другому будем выполнять от внешней стенке к внутренней, поэтому будем выражать f''_{i+2} и f'_{i+2} через f_{i+2}, f_{i+1} и f_i.

$$f''_{i+2}=\frac{f_{i+2}-2f_{i+1}+f_i}{\Delta\xi^2}$$

$$f'_{i+2}=\frac{f_{i+2}-f_{i+1}}{\Delta\xi}$$

Тогда система уравнений примет вид:

$$\begin{cases} f_i=f_{i+1}(2+a_{i+2}\Delta\xi)-f_{i+2}(1+a_{i+2}\Delta\xi+b_{i+2}\Lambda\Delta\xi^2), i=\overline{0,N-2}; \\ \dfrac{f_1-f_0}{\Delta\xi}=Af_0; \\ f_N=1; f_{N-1}=1, \end{cases} \tag{28}$$

где введены обозначения:

$$a_{i+2}=1/\xi_{i+2} \qquad b_{i+2}=\frac{1}{d}\left[\frac{n^2-1}{\ln n}\ln\xi_{i+2}-(\xi_{i+2}^2-1)\right] \qquad \xi_i=1+i\,\frac{n-1}{N} \tag{29}$$

Для дальнейшего использования граничное условие на внешней стенке перепишем в виде:

$$A=(\frac{f_1}{f_0}-1)/\Delta\xi \tag{30}$$

Как это может быть замечено из (28), зависимость искомой функции от Λ в каждой точке является полиномом, степень которого растёт на единицу с каждым новым шагом. При достижении стенки (i=0), для нахождения связи A(Λ) необходимо воспользоваться граничным условием в виде (30). Отношение f_1/f_0 находится делением с остатком и также является полиномом. Таким образом константа реакции является полиномом степени, заранее не известной. Степень зависит от N и от того, сколькими членами мы ограничимся при делении с остатком. Для нахождения Λ необходимо решить уравнение M степени и из физических соображений он не может зависеть от выбора M. Однако, как показал расчет, коэффициенты полинома растут (Таблица 1 показывает, что при n=10 и d=10 каждый коэффициент больше предыдущего в ~200 раз), поэтому при $\Lambda \gtrsim 1/200$ решение расходится при больших M и выбор M не очевиден. Так же возникает вопрос, какой корень выбрать, существует ли нужный нам положительный корень и не выбросим ли мы нужный нам корень, при уменьшении M.

0.000	0.178	38.210	8456.570	1,873E06	4,15E08	9,19E10

Таблица 1

Четвёртый метод

Ничего не остаётся, кроме как построить зависимость A(Λ) по точкам. Для этого, удовлетворяя граничному условию на внешней стенке канала, построим для каждого наперёд заданного Λ решение уравнение (задача Коши) и, придя к поверхности стержня, найдём из граничного условия константу реакции A. При заданных n=10, d=10 вид зависимости приведён на Рис. 1. Распределение концентрации поперёк оси Z показан на Рис. 2. Необходимо отметить, что при Λ>0,005 (1/ Λ=200) функция опускается ниже нуля, что не допустимо и означает отсутствие стационарного решения и необходимость решать более полное уравнение диффузии. Кстати, предыдущий метод предсказывал отсутствие решения приблизительно в этом же диапазоне чисел Λ.

Вывод

Расчёт показывает отсутствие резкого скачка параметров около стенки стержня, это даёт возможность создать подобный химический реактор и доверять полученным на нём результатам.

Список используемой литературы

1)*Rosner D.E., Allendorf H.D.* Comparative studies of the attack of pyrolytic and isotropic graphite by O and O2 at high temperatures. - AIAA Journal. - 1968. - no.4.

2)*Rosner D.E., Allendorf H.D.* Primary products in the attack of graphite by atomic oxygen and diatomic oxygen above 1100°K. - AIAA Journal. - 1969. - no.7.

Рисунок 1

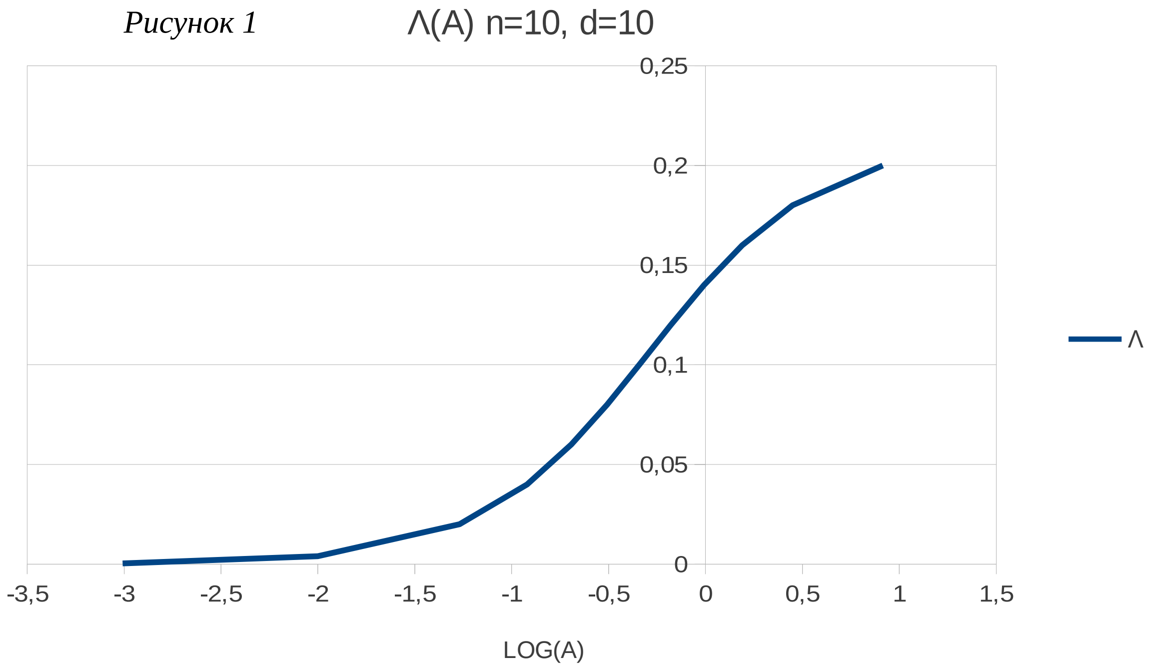

Рисунок 2