

01;03

©1995 г.

**К ТЕОРИИ ДИФФУЗИОФОРЕЗА УМЕРЕННО КРУПНОЙ  
ТВЕРДОЙ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ АЭРОЗОЛЬНОЙ  
ЧАСТИЦЫ В БИНАРНОЙ ГАЗОВОЙ СМЕСИ**

*P.A. Сафиуллин, Ю.И. Яламов*

Московский педагогический университет,  
107005, Москва, Россия  
(Поступило в Редакцию 8 сентября 1994 г.)

Решена задача диффузиофореза твердой цилиндрической аэрозольной частицы в неоднородной по концентрации бинарной газовой смеси с использованием в граничных условиях всех эффектов, линейных по числу Кнудсена. Представлены графики зависимости безразмерной величины  $U_D/D_{12}(\nabla C_{1e})_\infty$  от числа Кнудсена для бинарных газовых смесей  $N_2-H_2$ ,  $N_2-O_2$ ,  $N_2-Ar$ ,  $N_2-CO_2$ ,  $N_2-C_2H_2$ .

Движение аэрозольных частиц в неоднородной по концентрации бинарной газовой смеси обусловлено действием на них диффузиофоретической силы [1]. Исследования, посвященные изучению особенностей диффузиофоретического движения частиц, актуальны и имеют не только чисто теоретический, но и практический интерес [1,2]:

Теория диффузиофореза аэрозольных частиц рассматривалась в работах [1,4-8]. Теория развивалась как для крупных и умеренно крупных сферических [1,4,7,8], так и для несферических частиц [5,6]. Как известно, в отличие от крупных частиц для умеренно крупных ( $0.01 \leq \lambda/R \leq 0.3$ ) необходимо учитывать все эффекты, линейные по числу Кнудсена ( $Kn = \lambda/R$ , где  $\lambda$  — средняя длина свободного пробега молекул смеси,  $R$  — радиус аэрозольной частицы) [4,7-9]. В работе [8] были получены граничные условия теории диффузиофореза умеренно крупных нелетучих аэрозольных частиц в бинарной смеси газов с учетом линейных по числу Кнудсена поправок к скорости диффузионного скольжения, барнеттовских и термодиффузионных эффектов, кривизны поверхности, а также растекания в слое Кнудсена потоков диффузии и тепла, среднемассового потока. Но в работе [8] при построении теории в граничных условиях не были учтены скачки температуры бинарной смеси газов, пропорциональные газокинетическим коэффициентам  $K_T^{(T)}$  и  $K_T^{(n)}$ .

Скачки температуры и концентрации вблизи поверхности жидкости в бинарной газовой смеси вычислялись в работе [3]. В этой работе был рассмотрен общий случай бинарной газовой смеси с различными массами молекул, входящих в смесь газов. Авторы работы [3] впервые показали, что скачок температуры в бинарной газовой смеси зависит не только от градиента температуры, но и от градиента концентрации компоненты смеси, испытывающей фазовый переход на поверхности жидкости. С другой стороны, скачок концентрации, согласно [3], зависит как от градиента концентрации, так и от градиента температуры.

Однако в работе [3] не учитывались термодиффузационные эффекты ввиду несовершенства представления интеграла столкновений в кинетических уравнениях Больцмана. Позднее в работе [9] было показано, что учет термодиффузационных членов функции распределения оказывает большое влияние на величину перекрестных членов в скачках. В работе [9] были вычислены различными методами скачки температуры и концентрации в многокомпонентной смеси газов при наличии нескольких компонент, испытывающих фазовый переход на поверхности конденсированной фазы.

С учетом вышесказанного в данной работе дополнительно к [8] учитывается влияние скачка температуры при вычислении диффузиофоре-тической скорости умеренно крупной нелетучей цилиндрической аэро-зольной частицы для частного случая, когда ось ее перпендикулярна направлению векторов градиентов концентраций компонентов бинарной газовой смеси.

Допустим, что в бинарной газовой смеси имеются поддерживающие стационарно градиенты относительных концентраций компонентов смеси ( $\nabla C_{1e}$ ) и ( $\nabla C_{2e}$ ). Под  $C_{1e}$  и  $C_{2e}$  следует понимать отношения  $C_{1e} = n_{1e}/n_e$ ,  $C_{2e} = n_{2e}/n_e$ , где  $n_{1e}$  и  $n_{2e}$  — числа молекул компонентов газовой смеси в единице объема,  $n_e = n_{1e} + n_{2e}$ . Между ( $\nabla C_{1e}$ ) и ( $\nabla C_{2e}$ ) имеется очевидное соотношение  $(\nabla C_{1e}) = -(\nabla C_{2e})$ .

Рассмотрим случай, когда ось частицы совпадает с осью  $z$  системы координат, а направление вектора  $(\nabla C_{1e})_\infty$  совпадает с направлением оси  $x$ . При таком выборе системы координат скорость диффузиофореза частицы  $U_D = -U$ , где  $U$  — скорость движения центра тяжести газовой смеси относительно частицы. Тогда стационарные линеаризованные уравнения Навье—Стокса, диффузии для первого компонента смеси и уравнение, выражающее тот факт, что в стационарном случае скорость частицы остается постоянной, запишутся в виде [5, 7]

$$\operatorname{div} \mathbf{V}^{(e)} = 0, \quad (1)$$

$$U(\nabla \mathbf{V}^{(e)}) = -\frac{1}{\rho_e} \nabla p^{(e)} + \frac{\eta_e}{\rho_e} (\nabla^2 \mathbf{V}^{(e)}), \quad (2)$$

$$\nabla^2 C_{1e} = 0. \quad (3)$$

$$\mathbf{F}_D + \mathbf{F}_C = 0, \quad (4)$$

где  $\eta_e$  — вязкость,  $\rho_e$  — средняя плотность,  $p^{(e)}$  — давление смеси,  $\mathbf{V}^{(e)}$  — скорость обтекания частицы смесью,  $\mathbf{F}_D$  — диффузиофоретическая сила,  $\mathbf{F}_C$  — сила вязкого трения.

Используем граничные условия на поверхности частицы (при  $r = R$ ) с учетом всех эффектов, линейных по числу Кнудсена [8], дополнив их скачком температуры бинарной газовой смеси [3,9],

$$V_r^{(e)} = \text{Kn} D_{12} C_v \operatorname{div}_\theta \left( \frac{1}{r} \frac{\partial C_{1e}}{\partial \theta} \right), \quad (5)$$

$$\begin{aligned} V_\theta^{(e)} = D_{12} & \left[ (K_{DSI} + \text{Kn} K_{DSI}^R) \frac{1}{r} \frac{\partial C_{1e}}{\partial \theta} + \text{Kn} K_{DSI}^B D_{r\theta} \right] + \\ & + \frac{\nu_e}{T_e} K_{TSI} \frac{1}{r} \frac{\partial T_e}{\partial \theta} + \lambda K_{SI} \Pi_{r\theta}, \end{aligned} \quad (6)$$

$$T_e - T_i = K_T^{(T)} \frac{\partial T_e}{\partial r} + K_T^{(n)} T_e \frac{\partial C_{1e}}{\partial r}, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \kappa_e \frac{\partial T_e}{\partial r} - \kappa_i \frac{\partial T_i}{\partial r} + D_{12} p^{(e)} K_T \frac{n_e^2}{n_{1e} n_{2e}} \frac{\partial C_{1e}}{\partial r} = \\ = \text{Kn} p^{(e)} D_{12} C_q \operatorname{div}_\theta \left( \frac{1}{r} \frac{\partial C_{1e}}{\partial \theta} \right), \end{aligned} \quad (8)$$

$$\frac{\partial C_{1e}}{\partial r} = \text{Kn} C_D \operatorname{div}_\theta \left( \frac{1}{r} \frac{\partial C_{1e}}{\partial \theta} \right), \quad (9)$$

где

$$D_{r\theta} = \frac{2}{r} \left[ \frac{\partial^2 C_{1e}}{\partial r \partial \theta} - \frac{1}{r} \frac{\partial C_{1e}}{\partial \theta} \right], \quad \Pi_{r\theta} = r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{V_\theta^{(e)}}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial V_r^{(e)}}{\partial \theta}.$$

На большом расстоянии от частицы (при  $r \rightarrow \infty$ ) имеем следующие граничные условия:

$$V_r^{(e)} = |\mathbf{U}| \cos \theta, \quad (10)$$

$$V_\theta^{(e)} = -|\mathbf{U}| \sin \theta, \quad (11)$$

$$C_{1e} = C_{1e0} + |(\nabla C_{1e})_\infty| r \cos \theta. \quad (12)$$

Здесь  $K_{DSI}$ ,  $K_{TSI}$ ,  $K_{SI}$  — коэффициенты диффузационного, теплового и изотермического скольжения;  $K_{DSI}^R$  и  $K_{DSI}^B$  — поправки на кривизну и барнеттовское скольжение;  $D_{12}$  — коэффициент взаимной диффузии смеси;  $T$  и  $\kappa$  — температура и теплопроводность;  $\nu_e = \eta_e / \rho_e$  — коэффициент кинематической вязкости газа;  $r, \theta$  — полярные координаты;  $V_r^{(e)}, V_\theta^{(e)}$  — компоненты вектора скорости;  $C_{1e0}$  — относительная концентрация первого компонента смеси вдали от частицы;  $C_D, C_q, C_v$  — газокинетические коэффициенты потоков диффузии и тепла, среднемассового потока, растекающихся в слое Кнудсена;  $K_T^{(T)}, K_T^{(n)}$  — коэффициенты скачка температуры [3,9,10]. Индексы  $e, i$  принадлежат величинам, характеризующим газовую смесь и частицу. В работе [8] приведены значения газокинетических коэффициентов, вычисленные для

потенциала Леннарда-Джонса в случае диффузного отражения молекул газа от поверхности частицы. Решение уравнений (1)–(4) с граничными условиями (5)–(12) проводится стандартным образом [5].

В итоге для скорости диффузиофореза умеренно крупной нелетучей цилиндрической аэрозольной частицы получим следующее выражение:

$$\mathbf{U}_D = U_D^* D_{12} (\nabla C_{1e})_\infty, \quad (13)$$

где

$$U_D^* = \frac{-1}{(1 - \text{Kn}C_D)(1 + 2\text{Kn}K_{Sl})} \left\{ K_{DSl} + \text{Kn} \left[ K_{DSl}^R - K_{DSl}^B(1 + \text{Kn}C_D) - C_v(1 + 4\text{Kn}K_{Sl}) + K_{TSl} \frac{\nu_e}{T_e} \frac{p^{(e)}}{\left(1 + \frac{\varkappa_e}{\varkappa_i} + \frac{K_T^{(T)}}{R}\right) \varkappa_i} \times \left( C_q - K_T \frac{n_e^2}{n_{1e} n_{2e}} C_D - \frac{C_D}{D_{12}} \frac{T_e}{p^{(e)}} \frac{K_T^{(n)}}{R} \varkappa_i \right) \right] \right\}. \quad (14)$$

В формуле (14) положим  $K_T^{(T)} = K_T^{(n)} = 0$ , т.е. не будем учитывать скачок температуры в слое Кнудсена (формула (7)), тогда получим следующее выражение:

$$\mathbf{U}_D = U_D^* D_{12} (\nabla C_{1e})_\infty, \quad (15)$$

где

$$U_D^* = \frac{-1}{(1 - \text{Kn}C_D)(1 + 2\text{Kn}K_{Sl})} \left\{ K_{DSl} + \text{Kn} \left[ K_{DSl}^R - K_{DSl}^B(1 + \text{Kn}C_D) - C_v(1 + 4\text{Kn}K_{Sl}) + K_{TSl} \frac{\nu_e}{T_e} \frac{p^{(e)}}{\left(1 + \frac{\varkappa_e}{\varkappa_i} + \frac{K_T^{(T)}}{R}\right) \varkappa_i} \left( C_q - K_T \frac{n_e^2}{n_{1e} n_{2e}} C_D \right) \right] \right\}. \quad (16)$$

Если не будем учитывать дополнительные поправки, связанные с влиянием кривизны поверхности, т.е. положим газокинетические коэффициенты равными нулю, то получим формулу скорости диффузиофореза для крупной цилиндрической частицы в бинарной газовой смеси [5].

По формулам (13)–(16) были проведены численные расчеты зависимости безразмерной величины  $\mathbf{U}_D / D_{12} (\nabla C_{1e})_\infty = U_D^*$  от числа Кнудсена ( $0 \leq \text{Kn} \leq 0.3$ ) для бинарных газовых смесей  $\text{N}_2-\text{H}_2$ ,  $\text{N}_2-\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2-\text{Ar}$ ,  $\text{N}_2-\text{CO}_2$ ,  $\text{N}_2-\text{C}_2\text{H}_2$  (рис. 1–3). Все численные значения параметров бинарных газов, входящих в формулы (14) и (16), взяты из таблиц I и XII работы [11] для температуры  $20^\circ\text{C}$ . Значения газокинетических коэффициентов брались из работ [8, 9]. Из рисунков 1–3

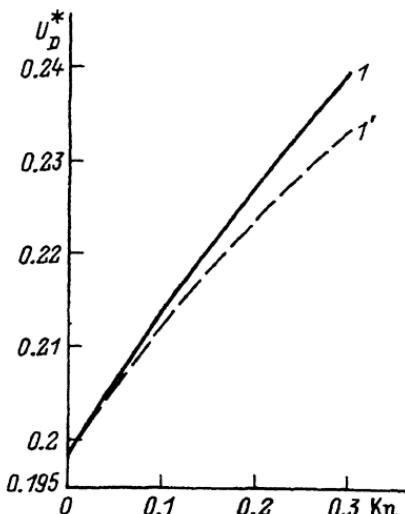


Рис. 1. Зависимость величины  $U_D^*$  от числа  $Kn$  для бинарной газовой смеси  $N_2 - H_2$ .

1 — по формуле (14), 1' — по (16).

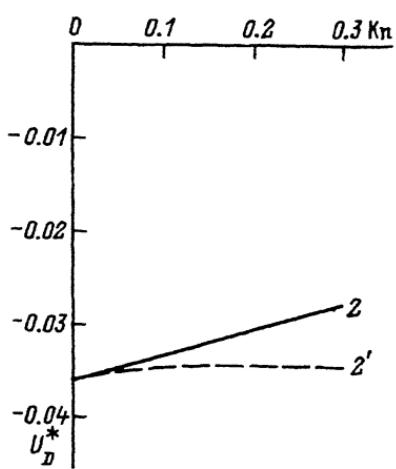


Рис. 2. Зависимость величины  $U_D^*$  от числа  $Kn$  для бинарной газовой смеси  $N_2 - O_2$ .

2 — по формуле (14), 2' — по (16).

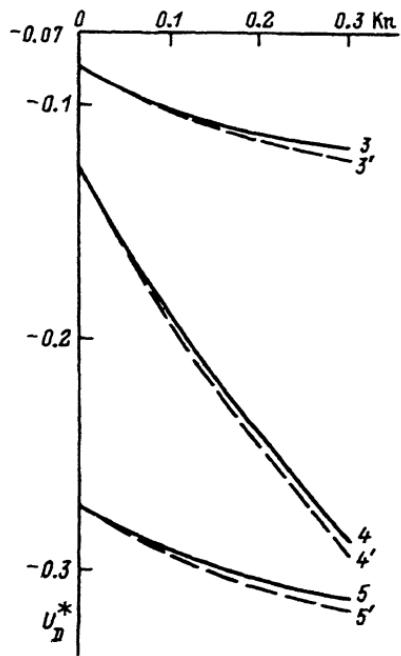


Рис. 3. Зависимость величины  $U_D^*$  от числа  $Kn$  для бинарных газовых смесей  $N_2 - C_2H_2$ ,  $N_2 - Ar$ ,  $N_2 - CO_2$  по формуле (14) (3-5) и по формуле (16) (3'-5').

видно, что  $U_D^*$  может быть как положительным, когда диффузиофоретическая скорость направлена в сторону роста концентрации  $n_{2e}$  (отрицательный диффузиофорез), так и отрицательным, когда диффузиофоретическая скорость направлена в сторону убывания концентрации  $n_{2e}$  (положительный диффузиофорез).

Для бинарной газовой смеси  $N_2 - O_2$  за счет эффектов диффузионного скольжения и кривизны поверхности, среднемассового потока, рас-

текающегося в слое Кнудсена, и теплового скольжения, возникающего вследствие явления термодиффузии, проявляется положительный диффузионный поток, а за счет эффектов барнеттовского скольжения, теплового скольжения, возникающего вследствие растекания потока тепла и скачка температуры в слое Кнудсена, — отрицательный диффузионный поток.

Кривые 1–5 построены по формуле (14) с учетом скачка температуры в слое Кнудсена. Кривые 1'–5' построены по формуле (16) без учета этого эффекта. Учет скачка температуры в слое Кнудсена в задаче диффузионного скольжения умеренно крупных нелетучих цилиндрических аэрозольных частиц в бинарных газовых смесях дает ощутимую поправку к  $U_D^*$  и составляет для бинарной газовой смеси  $N_2-H_2$  (рис. 1) 2.5%, для  $N_2-O_2$  (рис. 2) 22.7%, для  $N_2-C_2H_2$  (рис. 3) 3.9%, для  $N_2-Ar$  (рис. 3) 1.8%, для  $N_2-CO_2$  (рис. 3) 1.6% при  $Kn = 0.3$ . По мере роста числа  $Kn$  величина  $U_D^*$  изменяется по отношению к значению при  $Kn = 0$ : так, при  $Kn = 0.3$  поправка к  $U_D^*$  для бинарной газовой смеси  $N_2-H_2$  составляет 17.8 (1'), 20.8% (1), для  $N_2-O_2$  4.8 (2'), 28.6% (2), для  $N_2-C_2H_2$  46.3 (3'), 40.8% (3), для  $N_2-Ar$  131 (4'), 126.9% (4), для  $N_2-CO_2$  16.5 (5'), 14.6% (5).

Отношение членов безразмерной величины  $U_D^*$  для указанных бинарных газовых смесей показало, что для крупных нелетучих аэрозольных частиц основным эффектом является диффузионное скольжение вдоль поверхности частицы. Для умеренно крупных нелетучих аэрозольных частиц основное влияние на  $U_D^*$  оказывают барнеттовское скольжение, растекание в слое Кнудсена среднемассового потока, кривизна поверхности и скачок температуры в слое Кнудсена. Вклад эффектов, связанных с растеканием потока тепла (слагаемое, пропорциональное  $C_q$ ), и явления термодиффузии (слагаемое, пропорциональное  $K_T$ ) несущественны.

### Список литературы

- [1] Derjaguin B.V., Yalamov Yu.I. // Intern. Rev. in Aerosol Phys. and Chem. Vol. 3. Pt 2. Oxford; New York; Toronto; Sydney; Braunschweig: Pergamon Press, 1972. Vol. 3. P. 1–200.
- [2] Липатов Г.И., Контуш С.М., Шингарев Г.П. // Физика аэродисперсных систем. № 16. Киев; Одесса: Вища школа, 1977. С. 79.
- [3] Метелкин Е.В., Яламов Ю.И. // Изв. АН СССР. Сер. МЖГ. 1973. № 5. С. 142.
- [4] Sony Y. // Rer. Gas. Dyn. 1976. Pt 2. P. 417.
- [5] Яламов Ю.И., Афанасьев А.М. // ЖТФ. 1977. Т. 47. С. 2001.
- [6] Яламов Ю.И., Редчиц В.П., Гайдуков М.Н. // ЖТФ. 1979. Т. 49. Вып. 7. С. 1534.
- [7] Яламов Ю.И., Галоян В.С. Динамика капель в неоднородных вязких средах. Ереван: Луйс, 1985. 204 с.
- [8] Яламов Ю.И., Юшканов А.А., Савков С.А. // ДАН СССР. 1988. Т. 301. № 5. С. 1111.
- [9] Алексин Е.И., Яламов Ю.И. Математические основы решения граничных задач кинетической теории многокомпонентных газов вблизи конденсированной фазы. Учебное пособие к спецкурсу. М., 1991. 150 с.
- [10] Кочин Н.Е., Кибель И.А., Розе Н.В. Теоретическая гидромеханика. М.: Гостехиздат, 1948. 612 с.
- [11] Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: ИЛ, 1961. 930 с.