

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
“Пермский государственный национальный исследовательский университет”

На правах рукописи



Петухов Максим Иванович

**ТЕПЛОВАЯ КОНВЕКЦИЯ В УЗКИХ КАНАЛАХ И ПОЛОСТЯХ
С УЧЕТОМ СОРБЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ И ТЕМПЕРАТУРНОЙ
ЗАВИСИМОСТИ ВЯЗКОСТИ**

01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

научный руководитель:
д.ф.-м.н., доцент В.А. Демин

Пермь, 2020

Оглавление:

Введение	5
Глава 1. Анализ современного состояния проблемы	12
1.1 Конвективный тепло- и массоперенос в жидких средах с учетом температурной и концентрационной зависимости физических свойств	12
1.2 Влияние пленок сурфактанта на конвективные течения	19
1.3 Разделение бинарных металлических расплавов	28
Глава 2. Влияние зависимости вязкости жидкости от температуры на стационарные режимы тепловой конвекции в ячейке Хеле – Шоу	37
2.1 Постановка задачи и линейный анализ устойчивости	37
2.2 Метод решения нелинейной задачи	45
2.3 Анализ экспериментальных данных и расчеты в отсутствие зависимости вязкости от температуры	47
2.4 Результаты расчетов в случае неоднородной вязкости	52
Глава 3. Зависимость коэффициента поверхностного натяжения от характеристик среды в бинарных металлических расплавах на несмачиваемых границах полости	57
3.1 Конвективный перенос в двумерном тонком канале с несмачиваемыми границами	57
3.1.1 Постановка задачи	57
3.1.2 Аналитическое решение	62
3.1.3 Метод численного решения	64
3.1.4 Результаты аналитического решения и численного моделирования	66
3.2 Термокапиллярная конвекция в вертикальном канале при наличии концентрационно-капиллярного механизма	69

3.2.1	Учет зависимости коэффициента поверхностного натяжения от концентрации	69
3.2.2	Безразмерные параметры задачи	70
3.2.3	Численные результаты	71
3.3	Вертикальный цилиндрический канал с учетом концентрационно-капиллярного механизма	76
3.3.1	Система уравнений межфазной конвекции в цилиндрических координатах	76
3.3.2	Специфика численного решения	79
3.3.3	Обсуждение результатов	81
3.4	Двухкомпонентная смесь с легким поверхностно-активным компонентом в цилиндрическом канале	87
3.4.1	Изменение плотности поверхностно-активного вещества в системе уравнений межфазной конвекции	87
3.4.2	Разделение смеси за счет поверхностной активности легкого компонента	88
3.5	Наклонный плоский слой	93
3.5.1	Постановка задачи и основные уравнения	93
3.5.2	Описание расчетной процедуры и выбор параметров	97
3.5.3	Результаты расчетов	98
3.6	Стекание тяжелого поверхностно-активного компонента по затравочному стержню в тигле	108
3.6.1	Постановка и геометрия задачи	108
3.6.2	Описание численной процедуры	111
3.6.3	Обсуждение результатов	115
Глава 4.	Термокапиллярная и термоконцентрационная конвекция в прямоугольном контейнере при наличии сурфактанта на свободной поверхности	122
4.1	Динамика пленки нерастворимого сурфактанта	122

4.1.1 Постановка задачи	122
4.1.2 Описание численной процедуры	126
4.1.3 Обсуждение результатов	128
4.2 Случай растворимого сурфактанта на свободной поверхности	133
4.2.1 Учет растворимости поверхностно-активного вещества	133
4.2.2 Обсуждение результатов	136
Заключение	141
Список литературы	144

Введение

Современное материаловедение, ядерная энергетика, биотехнологии, приборостроение, химическое производство предъявляют все новые и новые требования к сырью и своим конечным продуктам [1]. Производство в этих отраслях промышленности, отвечающее макроскопическому уровню, тесно связано с механикой сплошных сред, в частности, с гидродинамикой по причине того, что используемые исходные и конечные продукты часто производятся из субстратов, находящихся в жидком состоянии. При наличии неоднородностей температуры, внешних силовых полей и дополнительных осложняющих факторов в рассматриваемых средах возникает конвективный массоперенос и различные термодинамические потоки, сопровождающиеся переносом тепла в физической системе, что сильно осложняет возможности управления тем или иным процессом [2].

Локальность в настоящее время является основной особенностью современных технологических процессов. Это свойство не позволяет описывать физические явления интегрально с помощью простых зависимостей и формул, а требует решения сложных эволюционных систем нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных с большим числом неизвестных полевых характеристик [3].

В результате высокотехнологичные отрасли промышленности, упомянутые выше, зачастую представляют собой синтез физики, химии и колоссально сложных расчетных методов с применением структурированных сеток, многоточечных разностных схем и высокопроизводительных вычислений. Зачастую даже микрофлюидические системы характеризуются наличием сильных локальных неоднородностей, в результате чего их поведение описывается теоретическими моделями, которые учитывают пространственное распределение физических полей и неоднородные граничные условия.

Причиной локальности процессов в сплошнородных системах, как правило, являются значительные перепады внешних параметров, в роли которых могут выступать неоднородности температуры, давления, электрического потенциала или концентрации того или иного компонента. В ходе количественного описания поведения таких систем зачастую приходится отказываться не только от простых интегральных формул, но и общепринятых моделей в виде активно используемых законов и дифференциальных уравнений. В частности, известно, что в классической системе уравнений тепловой конвекции в приближении Буссинеска [4], в известных уравнениях термоконцентрационной конвекции [5], в уравнениях межфазной гидродинамики [6] различные члены характеризуются довольно низкой точностью. Потoki в этих уравнениях имеют феноменологический характер и линейны по термодинамическим силам [7]. Иными словами, точность эмпирических формул для потоков, как правило, ограничена первыми членами разложений. В качестве еще одного недостатка перечисленных классических моделей можно указать на то, что в ходе их использования чаще всего предполагается, что материальные параметры среды являются константами. Однако на сегодняшний день для количественного описания гидродинамических явлений часто этого бывает недостаточно. В настоящее время можно указать на много работ, в которых эти особенности, существенные для описания физических явлений, принимаются во внимание. Однако представляется, что данная тематика далеко не исчерпана, и предлагаемая диссертационная работа принадлежит к их числу.

Актуальность и степень разработанности темы диссертации. Исследования, представленные в диссертации, вносят вклад в теорию конвективного тепло- и массопереноса. Реализованные математические и численные модели позволяют понять особенности возникновения и эволюцию течений в условиях, когда решающую роль играют локальные

неоднородности характеристик сплошной среды, а именно, температурная неоднородность вязкости, а также температурная и концентрационная неоднородность поверхностного натяжения. Помимо этого, указанные модели были применены при рассмотрении адсорбционных и десорбционных эффектов, которые тоже локально проявляют себя на межфазных поверхностях.

Все это позволяет использовать разработанные модели при решении задач, связанных с получением сверхчистых материалов, а также при проектировании и разработке технологических процессов, в которых требуется управление конвективными режимами.

Цели и задачи. Цель работы заключается в аналитическом и численном исследовании течений жидкостей с ярко выраженными локальными неоднородностями вязкости и поверхностного натяжения в рассматриваемых системах; продемонстрировать на конкретных примерах необходимость учета в теоретических моделях фактора локальности физических характеристик среды для непротиворечивого объяснения экспериментальных данных.

Методология и методы диссертационного исследования. При решении поставленных задач были использованы различные аналитические и численные подходы, традиционно применяющиеся в гидродинамике. В их число входят: техника решения дифференциальных уравнений в терминах рядов, методы линейной теории устойчивости и различные модификации методов конечных разностей.

Научная новизна

1) Установлена роль температурной неоднородности вязкости жидкости при смене одного стационарного течения другим в ячейке Хеле – Шоу, равномерно подогреваемой снизу. Для данной гидродинамической системы выявлен вариационный принцип, согласно которому происходит выбор

наиболее предпочтительного течения при конкуренции нескольких стационарных режимов.

2) Построена математическая модель, объясняющая процесс разделения двухкомпонентных эвтектических металлических расплавов в тонких капиллярах. Проведено численное моделирование процесса разделения в задачах с различными рабочими смесями и геометрическими постановками.

3) Выявлено влияние фазового перехода в пленке нерастворимого поверхностно-активного вещества на образование и динамику точки стагнации на поверхности жидкости при неоднородном нагреве сверху. Для случая растворимого сурфактанта определены условия возникновения области нейтральной плавучести струйного движения, несущего примесь.

Положения, выносимые на защиту:

1) Теоретическая модель, описывающая формирование стационарных конвективных течений в ячейке Хеле – Шоу с учетом зависимости вязкости от температуры, данные численного моделирования на основе разработанной модели и результаты анализа слабого нарушения симметрии этих течений.

2) Результаты численного исследования динамики пленки нерастворимого и растворимого сурфактанта на свободной поверхности узкого зазора в ячейке Хеле – Шоу с учетом термо- и концентрационно-капиллярных сил и анализ взаимодействия поверхности с конвективным движением в объеме.

3) Теоретическая модель продольного перераспределения компонентов эвтектических расплавов металлов в тонких капиллярах. Утверждение, что перенос компонентов определяется регулярной силой, действующей вдоль несмачиваемых поверхностей.

4) Результаты расчетов по разделению на компоненты бинарных расплавов металлов в вертикальном и наклонном тонком капилляре.

5) Результаты численного моделирования переноса компонентов бинарного металлического расплава в прямоугольном контейнере при помощи несмачиваемого неоднородно нагретого рабочего стержня.

Теоретическая и практическая значимость. Результаты, полученные в отношении неоднородновязких жидкостей при установлении стационарных течений в ячейке Хеле – Шоу, могут быть востребованы в теплофизических приложениях. Перенос массы и теплоотвод сильно зависят от режима движения жидкости. Отбор того или иного сценария установления течения, умение управлять этим процессом, однозначно определенный выход на тот или иной нужный режим представляются чрезвычайно актуальными при конструировании, а также эксплуатации различных теплообменных устройств и технологических линий.

Модель и результаты расчетов, полученные при описании эффекта разделения эвтектических металлических расплавов в тонких капиллярах, позволяют понять механизмы возникновения трудно контролируемых неоднородностей концентрации при распределении компонентов расплавов в микрофлюидических системах. Эти данные могут представлять интерес для микроэлектроники, при совершенствовании оптоволоконных технологий и получении сверхчистых материалов.

Результаты, касающиеся моделирования поведения пленок ПАВ на неоднородно нагретых поверхностях несущей жидкости, расширяют фундаментальные представления о технологии очистки поверхностей от загрязняющих веществ. Выявленные механизмы позволяют управлять концентрацией сурфактанта на поверхности в зависимости от внешних условий.

Диссертационная работа выполнялась при финансовой поддержке гранта Ведущих научных школ РФ (НШ-9176.2016.1), а также гранта Правительства Пермского края (Программа поддержки Научных школ Пермского края, № С-26/788). Исследования, представленные в главах 3 и 4, выполнялись в рамках проекта Российского фонда фундаментальных исследований № 16-01-00662-а.

Достоверность результатов. Все задачи, рассмотренные в диссертации, так или иначе, были инициированы экспериментами. Поэтому результаты теоретических исследований по каждой из глав в первую очередь сопоставлялись с экспериментальными данными. Оказалось, что в зависимости от полноты имеющегося экспериментального материала, результаты, полученные в ходе диссертационного исследования, полностью согласуются с опытом. Соответствие экспериментальным данным обусловлено применением моделей, которые были апробированы в предельных случаях на известных задачах. Применявшиеся в ходе расчетов численные методики стандартно верифицировались, в том числе, всегда проводился анализ результатов на предмет достаточности порядка точности у используемых разностных схем. Точность разностных формул и густота сеток всегда контролировались, чтобы добиться приемлемых значений погрешностей.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы были представлены и обсуждались на следующих научных конференциях, семинарах и съездах:

- Всероссийская конференция с международным участием “Пермские гидродинамические научные чтения” (Пермь, 2015, 2016, 2018);
- Научно-практическая конференция молодых ученых “Физика для Пермского края” (Пермь, 2015, 2016);
- Второй всероссийский научный форум “Наука будущего – наука молодых” (Казань, 2016);
- First International Conference on Multiscale Applications of Surface Tension (Belgium, Brussels, 2016);
- Зимняя школа по механике сплошных сред (Пермь, 2017, 2019);
- Международный симпозиум “Неравновесные процессы в сплошных средах” (Пермь, 2017);

- 12-th International Conference “Two-Phase Systems for Space and Ground Applications” (Novosibirsk, 2017);
- VI Всероссийская конф. с участием зарубежных ученых (Барнаул, 2017);
- XXIII Международная конференция “Нелинейные задачи теории гидродинамической устойчивости и турбулентность” (Звенигород, 2018);
- The Third Russian Conference on Magnetohydrodynamics (Perm, 2018);
- Всероссийская научная конф. по математике и механике (Томск, 2018);
- Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики (Уфа, 2019);

Помимо перечисленных выше конференций результаты исследований докладывались на 10-ом Всероссийском семинаре “Физикохимия поверхностей и наноразмерных систем” (Москва, 2019, рук. акад. Л.Б. Бойнович), Пермском городском гидродинамическом семинаре имени проф. Г.З. Гершуни, Е.М. Жуховицкого и Д.В. Любимова (Пермь, 2017, 2018, номера заседаний 1470, 1492, 1496, рук. проф. Т.П. Любимова) и научном семинаре кафедры Нанотехнологий и микросистемной техники ПГНИУ (Пермь, 2019, рук. проф. А.Б. Волынцев).

Публикации и личный вклад автора. Основные материалы диссертации изложены в работах [8–36,114], которые включают 8 статей в периодических изданиях из перечня ВАК [10,12,13,15,21,25,30,32], из них 7 индексируются в международных базах данных Scopus и Web of Science. Все численные результаты, опубликованные в этих работах, получены и обработаны диссертантом лично. Анализ и сравнение с экспериментом осуществлялись совместно с научным руководителем и остальными соавторами.

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и списка литературы, состоящего из 148 наименований. Диссертация содержит 52 рисунка и 5 таблиц. Общий объем диссертации составляет 158 страниц.

Глава 1. Анализ современного состояния проблемы

1.1 Конвективный тепло- и массоперенос в жидких средах с учетом температурной и концентрационной зависимости физических свойств

Одним из первых обстоятельных экспериментальных исследований конвективных течений, формируемых в вертикальной ячейке Хеле – Шоу при равномерном подогреве снизу, было проведено в работе Г.Ф. Путина и Е.А. Ткачевой [37]. Широкие вертикальные стенки полости были выполнены из плексигласа, а горизонтальные представляли собой медные теплообменники. Высота используемой ячейки варьировалась от 2 до 8 см, длина – от 1.5 до 13 см, а толщина – от 1 до 4 мм. При этом, как указывалось самими авторами, наиболее интересными получились результаты в полостях, длина которых была вдвое меньше высоты. В качестве рабочей жидкости была выбрана дистиллированная вода. В результате проведенных экспериментов были определены пороговые значения числа Рэлея для полостей с разными размерами, а также изучен характер изменения течений при потере устойчивости с ростом перепада температур. Для этого использовались как визуальные наблюдения, так и термопарные измерения. Было установлено, что при преодолении порогового значения числа Рэлея в полости формируется симметричное одновихревое течение. С ростом надкритичности у такого течения появляются дополнительные угловые вихри с противоположной закруткой. При дальнейшем увеличении надкритичности это течение становится неустойчивым и возникает двухвихревой стационарный режим, который, в свою очередь, при определенном значении параметра, также становится неустойчивым и приводит к формированию автоколебательного режима, который, по сути, является комбинацией одновихревой и двухвихревой моды.

Подробный теоретический анализ конкуренции нижних мод при формировании конвективного движения в ячейке Хеле – Шоу был выполнен в работе Д.В. Любимова и В.И. Чернатынского [38]. Для описания течений использовались классические уравнения тепловой конвекции в приближении Буссинеска. В первую очередь, для полости с широкими гранями высокой теплопроводности был выполнен линейный анализ устойчивости равновесия, по результатам которого были получены критические значения числа Рэлея для разных гидродинамических мод:

$$\text{Ra}_{nm} = \frac{\pi^4 L^2}{n^2} \left(\frac{n^2}{L^2} + \frac{m^2}{H^2} \right) \left(\left(\frac{n}{L} \right)^2 + \left(\frac{m}{H} \right)^2 + \frac{1}{4} \right)^2. \quad (1.1)$$

Здесь n и m – целые числа, определяющие периодичность течения вдоль горизонтали и вертикали соответственно, L – длина, H – высота полости. Из данной формулы можно предсказать структуру течения при малых надкритичностях для полости с определенными L и H . Далее, при помощи метода Галеркина-Канторовича, численно было получено решение нелинейных уравнений. Интересно заметить, что в области умеренных значений надкритичности как стационарные, так и колебательные течения могут быть описаны при помощи всего лишь 12 мод (5 гидродинамических, и 7 для температуры). Было показано, что система уравнений для некоторого подпространства из трех простейших амплитуд совпадает с триплетом Лоренца [39], что позволило получить аналитическое решение для одновихревого стационарного течения и рассмотреть его устойчивость по отношению к малым возмущениям.

Впоследствии достаточно большое количество теоретических работ было посвящено течениям, формируемым в ячейке Хеле – Шоу с теплоизолированными вертикальными широкими гранями. Так, в работе [40] были рассмотрены течения при наличии вертикального перепада температур и высокочастотных горизонтальных вибраций, продольных широким граням. Было установлено, что наличие внешнего вибрационного воздействия

понижает порог устойчивости равновесия всех гидродинамических мод. Другими словами, при воздействии высокочастотных вибраций, ориентированных перпендикулярно градиенту температуры, в полости возможно возникновение конвективных режимов даже в условиях невесомости. Оказалось, что для порога термовибрационной конвекции в ячейке Хеле – Шоу тоже можно получить аналитическое выражение для критических чисел Рэлея, которое имеет следующий вид:

$$\text{Ra}_{nm} = \frac{\pi^6 L^2}{8n^2} \left(\frac{n^2}{L^2} + \frac{m^2}{H^2} \right) \left(\left(\frac{n}{L} \right)^2 + \left(\frac{m}{H} \right)^2 + \frac{1}{4} \right)^2 - \text{Ra}_v \left(1 + \left(\frac{mL}{nH} \right)^2 \right)^{-1}. \quad (1.2)$$

Здесь Ra_v – так называемый вибрационный аналог числа Рэлея. В последнее время этот параметр в литературе иногда называют числом Гершуни [41,42].

В работе [43] экспериментально и теоретически была рассмотрена задача, аналогичная [37], правда в качестве рабочей жидкости бралось трансформаторное масло. В результате была построена более подробная карта режимов для полости 2:20:40. Показано, что в ячейке с теплоизолированными вертикальными гранями усложнение течения при постепенном нарастании перепада температур между горизонтальными стенками выглядит следующим образом: после потери устойчивости механического равновесия возникает одновихревое стационарное течение, а затем при дальнейшем увеличении числа Рэлея рождается двухвихревое стационарное движение. Когда оно теряет устойчивость, в полости возникает специфический автоколебательный, так называемый пульсационный режим. Он является следствием нарастания возмущений, нарушающих симметрию двухвихревого течения, когда один из вихрей начинает вытеснять противоположный. Но при данной надкритичности одновихревое движение тоже уже не является устойчивым. В итоге, после некоторого переходного процесса, устанавливается течение, которое представляет собой колебания сравнительно небольшого углового вихря на фоне основного, тоже пульсирующего, но доминирующего одновихревого течения. Размеры

углового вихря меняются с течением времени и достигают примерно трети высоты полости в момент максимального увеличения. Следует отметить, что данный режим существует в достаточно узкой области чисел Рэлея. Однако он был не только зарегистрирован в эксперименте, но и воспроизведен теоретически [43].

Дальнейшее увеличение разности температур приводит к рождению автоколебательного четырехвихревого режима с перезамыканием угловых вихрей, наблюдавшегося еще в [37]. Спектральный анализ этих двух автоколебательных режимов был выполнен в работах [44,45]. Было определено для разных надкритичностей, что течениям обоих типов соответствует набор различных кратных основных частот. При смене одного течения другим спектральный состав колебаний качественно меняется. По скачкообразному изменению частот можно сделать вывод, что пульсационный режим нельзя рассматривать как слегка видоизмененное непрерывное продолжение четырехвихревого движения с перезамыканием угловых вихрей. Это течение имеет самостоятельный характер, и только визуально кажется, что его можно интерпретировать как “недоразвитый” четырехвихревой режим с перезамыканием угловых вихрей.

При более детальном теоретическом рассмотрении некоторых эффектов, получаемых экспериментально можно столкнуться с тем, что математическая постановка задачи, использующая стандартные уравнения, является слишком грубой и в ней требуется учет дополнительных осложняющих факторов. В качестве одного из примеров можно упомянуть задачу о тепловой конвекции в ячейке Хеле – Шоу [46], где проводилось дополнительное исследование специфических конвективных эффектов, наблюдавшихся в сильновязких неоднородно нагретых текучих средах. В качестве рабочей жидкости в опытах использовалось трансформаторное масло. В частности, усложнение математической модели в виде учета температурной неоднородности вязкости позволило объяснить отсутствие симметрии “верх-низ” у типичного

для данной полости четырехвихревого автоколебательного режима. Сначала эксперименты показали, а затем расширенная теоретическая модель подтвердила, что верхние вихри, которые располагаются в более холодной области, существенно превышают по размерам нижние вихри в более горячей области. Ранее в [37] данный эффект не проявлял себя, поскольку коэффициент температурной неоднородности вязкости у воды почти на 2 порядка меньше чем у трансформаторного масла [47,48].

Влияние неоднородности вязкости, в первую очередь сказывается на интенсивности движения. В работе [49] при изучении тепловой конвекции в замкнутой полости с локальным источником энергии, показано, что с ростом параметра зависимости вязкости от температуры конвективное движение жидкости становится менее интенсивным. В противовес этому усиливается прогрев полости. Иными словами, гидродинамической системе становится более выгодно поддерживать теплопроводный режим, чем конвективный.

Еще одно яркое подтверждение необходимости рассмотрения зависимости материальных параметров от термодинамических характеристик среды можно найти в работах [50,51], где исследовались течения, образуемые в процессе смешивания двух химически-активных сред в тонком плоском вертикальном реакторе. Объяснение возникновения нового типа хемоконвективных структур стало возможным только благодаря учету зависимости коэффициента диффузии от концентрации.

Здесь крайне важно отметить, что учет неоднородности тех или иных параметров среды всегда требует сопоставления теоретических результатов с экспериментом. В работе [52] представлены данные теоретического исследования тепловой конвекции в плоском горизонтальном слое жидкости при учете зависимости температуропроводности среды от температуры. Численно выполнен линейный анализ устойчивости состояния механического равновесия жидкости для разных значений безразмерного параметра, характеризующего этот эффект. Методом конечных разностей

проведено численное моделирование нелинейных режимов двумерной тепловой конвекции. Найдены значения параметров, при которых необходимо учитывать влияние зависимости температуропроводности от температуры при расчете конвективных движений. Показано, что эффект зависимости температуропроводности среды от температуры весьма специфичен, и для большинства жидкостей он незначителен, чтобы наблюдаться на практике.

Справедливости ради следует указать, что роли неоднородности различных материальных параметров при формировании конвективных течений посвящено обширное количество экспериментальных и теоретических работ. Здесь наиболее наглядной и в меру простой гидродинамической системой для изучения возможности реализации большого числа разнообразных конвективных структур является горизонтальный слой жидкости. Главным предметом обсуждения в рамках рассматриваемой геометрии является проблема выбора конвективной системой того или иного устойчивого режима. А именно, при подогреве слоя снизу анализируется конкуренция надкритических движений в виде двухмерных валов и трехмерных ячеек той или иной формы. В работе [53] было зафиксировано определяющее влияние температурной неоднородности вязкости на результирующее направление циркуляции в конвективных ячейках в виде подъемного или опускного движения в центре ячейки. При разработке теоретической модели, учитывающей указанную неоднородность посредством линейного разложения коэффициента вязкости, было обнаружено [54] изменение порога устойчивости течения, а также объяснены [55,56] условия, при которых рождается определенный тип течения.

В этом контексте особый интерес представляют задачи, в которых гидродинамическая система имеет свободную поверхность. В экспериментальной работе [57] продемонстрирована роль температурной неоднородности поверхностного натяжения в формировании ячеистой

структуры в субкритической области. Одним из классических исследований, в котором теоретически было показано, что термокапиллярный механизм может отвечать за потерю устойчивости механического равновесия в бесконечном горизонтальном слое в результате развития монотонных возмущений, является работа Пирсона [58]. Большой вклад в изучение взаимодействия термогравитационного и термокапиллярного механизмов возбуждения конвекции внесли Кошмидер [59–61] и Нилд [62]. Скрупулезный анализ фундаментальных проблем, связанных с вопросами формирования картины течения в подогреваемом снизу горизонтальном слое, когда материальные параметры жидкости зависят от локальных характеристик среды, можно найти в известных и весьма обстоятельных обзорных работах А.В. Гетлинга [63,64].

Неоднородность поверхностного натяжения, определяющая термокапиллярный эффект, может служить не только причиной неустойчивости основного состояния, которое формируется какими-то другими физическими факторами, но может выступать в роли основной движущей силы в ходе тех или иных гидродинамических процессов. Р.В. Бирих [65] рассмотрел основное течение, имеющее чисто термокапиллярную природу, которое возникает в бесконечном горизонтальном слое со свободной поверхностью, когда вдоль нее поддерживается линейное распределение температуры. Исследование [66], которое является логическим продолжением [65], посвящено решению более реалистичной задачи о горизонтальном слое конечной длины с продольным распределением температуры. Граничное условие на свободной поверхности для баланса касательных напряжений включало зависимость поверхностного натяжения от температуры и в дополнение учитывало кривизну поверхности.

1.2 Влияние пленок сурфактанта на конвективные течения

В настоящее время среди гидродинамических задач со свободной поверхностью большой интерес вызывают те, в которых поверхностное натяжение зависит от различных дополнительных осложняющих факторов. Помимо температуры это могут быть концентрация сурфактанта или электрический потенциал. Так, нанесение на свободную поверхность молекул поверхностно-активного вещества в большинстве ситуаций приводит к возникновению неоднородностей концентрации и, как следствие, к локальному изменению поверхностного натяжения с последующим возникновением концентрационно-капиллярного течения. В [67,68] изучено поведение пленки нерастворимого сурфактанта, равномерно распределенного вдоль поверхности жидкости, помещенной в вертикальный зазор. Как и в работе [66], одна вертикальная боковая стенка прямоугольной полости является горячей, другая – холодной, и вдоль всего объема навязывается линейное горизонтальное распределение температуры, которое создает термокапиллярное течение, смещающее пленку ПАВ к холодной стенке. По этой причине вдоль поверхности формируется градиент концентрации сурфактанта, который стремится сгенерировать концентрационно-капиллярное течение, направленное в противоположную сторону, т.е. к горячей стенке. На стадии установления баланс термокапиллярных и концентрационно-капиллярных сил порождает механическое равновесие пленки, когда сосуществуют полностью “открытый” участок, на котором нет поверхностно-активного вещества, и “покрытая” сурфактантом область. Их разделяет так называемая точка стагнации, которая с хорошей степенью точности регистрируется в эксперименте. Для количественного описания размеров окна, свободного от ПАВ, в работе [67] вводится безразмерный параметр упругости, который по сути представляет собой отношение термо- и концентрационно-капиллярных

сил $E = c_0 \sigma_C / \Delta T \sigma_T$. Здесь c_0 – начальная концентрация сурфактанта, ΔT – перепад температур между вертикальными боковыми стенками; σ_T и σ_C – коэффициенты температурной и концентрационной неоднородности поверхностного натяжения. Также, этими авторами была получена аналитическая модельная формула, определяющая положение точки стагнации в зависимости от параметра E .

Снос пленки сурфактанта термокапиллярным течением, предсказанный в [68], был экспериментально исследован А.И. Мизевым и А.В. Шмыровым [13,69]. Для опытов была изготовлена специализированная ячейка Хеле – Шоу с оптической системой нагрева поверхности сверху. В качестве рабочей жидкости использовалась дистиллированная вода, а роль нерастворимого поверхностно-активного вещества играла олеиновая кислота. Особенности проведения эксперимента не позволили реализовать линейное горизонтальное распределение температуры внутри ячейки. Вместо горячей и холодной вертикальной стенок полости неоднородность температуры создавалась лампой накаливания при помощи нагрева сверху с последовательным пропусканием света через систему линз так, чтобы вдоль свободной поверхности поддерживалось распределение температуры максимально близкое к линейному. Результаты экспериментов показали, что поверхность в действительности разделяется на “закрытую” и “открытую” части, но положение точки стагнации в опытах имело сильное отклонение от формулы, полученной в [68]. Теоретическое описание опытов [13,69] выполнили Д.А. Брацун, В.А. Демин и М.И. Петухов [13,32,33]. Результаты расчетов дали хорошее согласие с экспериментом.

Гораздо более сложной по постановке в сравнении с [13,68] является работа [70] с пленкой сурфактанта, испытывающей двумерные деформации, когда пленка находится на плоской поверхности жидкости в цилиндрической открытой кювете. При создании неоднородного распределения температуры на поверхности с максимумом в центре кюветы в самосогласованной

гидродинамической системе можно организовать условия, при которых возникает линия стагнации, разделяющая внутреннюю, очищенную от сурфактанта область поверхности, и периферийную, на которой присутствует поверхностно-активное вещество. В зависимости от управляющих параметров задачи распределение концентрации ПАВ у периферии и характеристики течения в объеме зависят как от радиальной координаты, так и азимутального угла. При наличии областей с опускным и подъемным движением эта особенность приводит к тому, что гидродинамическая задача становится существенно трехмерной. Причем степень трехмерности движения зависит от интенсивности нагрева и упругих свойств пленки сурфактанта. В центре кюветы со свободной поверхностью течение жидкости является чисто радиальным и направлено от оси симметрии кюветы к периферии. Пленка сурфактанта сносится радиальным течением к внешней границе полости и занимает сопоставимую площадь по сравнению со свободной поверхностью. После того, как жидкость подныривает под пленку ПАВ, течение теряет устойчивость и у него возникает азимутальная составляющая скорости. В результате под пленкой сурфактанта возникает система достаточно плотно упакованных периодических азимутальных вихрей, количество которых зависит от значений управляющих параметров.

Концентрационно-капиллярный механизм не всегда является вторичным по отношению к термокапиллярному и иногда сам без вспомогательных сил может порождать течения. Фактор концентрационно-капиллярных сил начинает выходить на передний план в микрофлюидических системах. Так, в работах [71,72] в неподвижную жидкость, на которой располагалась изначально однородная пленка нерастворимого сурфактанта, дополнительно вводился растворимый сурфактант, при перераспределении которого вдоль границы раздела возникали нестационарные градиенты поверхностной концентрации, генерировавшие конвективный массоперенос в объеме. Нетривиальным следствием этих исследований стал вывод о том, что течения

в такой системе возникают пороговым образом в зависимости от толщины ячейки и концентрации сурфактанта.

В зависимости от геометрии задачи и режимов нагрева термокапиллярный механизм может приводить к возникновению весьма нетривиального отклика гидродинамической системы на внешнее температурное воздействие. В работах [73,74] экспериментально было рассмотрено поведение декана в цилиндрической кювете со свободной поверхностью, на оси симметрии которой под поверхностью был расположен точечный нагреватель. Положение нагревателя внутри рабочей жидкости можно было изменять вдоль оси кюветы. В зависимости от мощности нагрева и расстояния до поверхности в кювете наблюдалось стационарное торообразное течение, проявлявшее себя в виде монотонного радиального растекания жидкости вдоль поверхности. При определенных положениях нагревателя в системе также возникали более сложные самосогласованные режимы движения, сопровождавшиеся распространением цилиндрических или спиральных раскручивающихся волн.

Даже без учета термо- и концентрационно-капиллярных сил задача о точном положении деформированной межфазной поверхности не является тривиальной. В частности, в подобных гидродинамических системах, когда имеет место стекание тонкого слоя жидкости вдоль поверхности твердого тела, возможны течения, сопровождающиеся возникновением уединенных волн. Классические эксперименты [75], проведенные П.Л. Капицей, демонстрируют в тонких стекающих слоях жидкости, форма межфазной границы которых формируется только капиллярными силами, наличие неустойчивости, порождающей структуры солитонного типа. В дальнейшем волновой характер данного течения активно исследовался как экспериментально, так и теоретически. Некоторое внимание было посвящено резонансным явлениям в стекающих пленках [76,77]. Развитие более сложной неустойчивости, связанное с дополнительным учетом

неоднородности поверхностного натяжения, за счет адсорбции поверхностно активного вещества на границу раздела жидкость-газ было исследовано теоретически в работе [78]. В ней было показано действие перекрестного механизма неустойчивости, связанного с взаимодействием гидродинамических и диффузионных мод в спектрах возмущений.

Следует упомянуть, что роль поверхностных эффектов является определяющей при формировании структуры материала в ходе кристаллизации объема жидкости, зажатого между двумя твердыми торцами. Данная геометрия представляет собой так называемый капиллярный мост, свободные боковые границы которого удерживаются силами поверхностного натяжения. Процессы формирования течений в такой гидродинамической системе весьма активно исследуются в связи с ее близостью по постановке к условиям, возникающим в технических приложениях, связанных с выращиванием кристаллов. При нагреве боковой границы и охлаждении торцов в данной конфигурации возможно развитие самых разнообразных течений, в том числе колебательного характера. Особенно сложными конвективные режимы становятся при больших надкритичностях. В частности, в работах [79,80] были исследованы сложные трехмерные течения, характеризующиеся наличием бегущих в азимутальном направлении волн, которые возникают в системе пороговым образом. В работе [81] показано, что указанные нестационарные режимы весьма чувствительны к граничным условиям на свободной поверхности и зависят от высоты жидкого моста, а именно, увеличение аспектного соотношения L/R приводит к хаотизации течения и возникновению более сложного частотного спектра. В свою очередь, если поместить капиллярный мост в специальную теплостабилизирующую трубу, которая позволяет выравнивать окружающую температуру, то это способствует регуляризации течений, делая их более устойчивыми. В работе [82] проведено численное моделирование течений в вертикальном жидком мосте с учетом температурной неоднородности

вязкости среды. Показано, что этот эффект способствует усилению интенсивности движения в азимутальном направлении, правда он проявляется при сравнительно больших надкритичностях, поскольку является вторичным.

На сегодняшний день исследованию устойчивости термокапиллярных течений в жидком мосте в зависимости от условий нагрева посвящено большое число работ. Так, в [83] рассматривается взаимодействие термокапиллярного эффекта, возникающего вдоль жидкой зоны, и течения воздуха, обдувающего свободную поверхность. Показано, что при определенных скоростях обдува поток воздуха может полностью погасить эффект Марангони.

В работе [84] рассматривалась термогравитационная колонна, наполненная многокомпонентной жидкостью, в которой допускалась возможность локального действия эффекта Соре. Продемонстрировано, что для стандартных условий нагрева неустойчивая стратификация может возникнуть только в случае отрицательной термодиффузии.

Задачи с межфазной поверхностью, в которых присутствует термокапиллярный эффект, могут быть осложнены другими факторами. Так, в [85] при решении задачи о горизонтальной поверхности раздела двух сред учитывалось испарение с межфазной границы жидкость-газ. Авторами был разработан оригинальный численный метод, согласно которому по точному решению для двухфазной гидродинамической системы с испарением и недеформируемой поверхностью раздела можно эффективно получить форму искривленной границы раздела. В [86] изучалось влияние точечного нагрева границы раздела жидкость-газ от лазерного излучения, за счет чего действие термокапиллярных сил имело решающее значение при формировании рельефа свободной поверхности. Проведено количественное сравнение численного решения с экспериментальными данными, которое показало соответствие физической модели описываемым явлениям.

Пленочное движение жидкости вдоль твердой границы связано с такой актуальной производственной задачей как управление эффективностью теплоотвода в различных устройствах и микрофлюидических системах. Помимо термокапиллярного механизма на теплоотдачу, как правило, влияют фазовые переходы, происходящие в гидродинамической системе. Так, в работах О.А. Кабова с соавторами [87,88] изучается процесс испарения тонкой пленки, движущейся по поверхности нагревателя, а также сопутствующее явление образования сухих пятен, нарушающее профиль течения и, как следствие, процесс теплоотвода. Показано, что в силу достаточно больших перепадов температуры вдоль пленки, температурные неоднородности сказываются как на процессе возникновения термокапиллярного механизма, так и на самом процессе испарения.

В случае, когда поверхность твердого тела обладает структурой в виде системы микроканалов, силы поверхностного натяжения могут удерживать жидкость, расположенную на такой поверхности от попадания в канавки. Это позволяет сформировать так называемую супергидрофобную поверхность, вдоль которой возможна организация течения жидкости, в том числе, за счет температурной неоднородности поверхностного натяжения [89,90].

При объяснении поведения поверхностно-активных веществ часто приходится учитывать их растворимость. В этом случае они могут находиться как на поверхности жидкости, так и в объеме и переходить из одной фазы в другую. Для рассмотрения процессов перехода сурфактанта из объема на поверхность и обратно необходимо принимать в расчет адсорбционные и десорбционные потоки вещества, что сильно влияет на баланс касательных напряжений на свободной поверхности. Это означает, что наличие молекул ПАВ в объеме способно оказывать серьезное влияние на движение жидкости. В микрофлюидических системах взаимодействие поверхностной и объемной фазы может приводить к весьма неожиданному поведению, которое можно проиллюстрировать работами [91,92]. В них

исследовалось поведение капли хлорбензола, помещенной в водный раствор изопропилового спирта в плоском горизонтальном слое. В такой системе молекулы сурфактанта (изопропилового спирта) адсорбируются на межфазной поверхности, тем самым, создавая градиенты концентрации, приводящие к течению в водном растворе. Помимо этого, за счет десорбции спирт проникает в объем капли, создавая течение в ней. Любопытный эффект наблюдается, если каплю поместить в раствор с начальным вертикальным перепадом концентрации: взаимодействие потоков вещества приводит к тому, что его перенос вблизи межфазной границы будет осуществляться колебательным образом с последовательным насыщением или обеднением границы сурфактантом. Такой процесс сопровождается постепенным затуханием колебаний и продолжается до тех пор, пока в капле не устанавливается равновесная концентрация ПАВ.

В работах [93,94] была решена задача об обтекании сферического пузыря внешним потоком, содержащим ПАВ. В этом случае, так же как в [68] вся поверхность гидродинамической системы делится на две части: свободный участок и занятый сурфактантом. Новизна полученных результатов заключалась в том, что данная поверхность служила межфазной границей всплывающего пузырька сферической формы, на который в начальный момент времени наносилась однородная тончайшая пленка растворимого сурфактанта. По мере движения “передний” полюс пузырька полностью очищался от сурфактанта. В то же время течение внешней жидкости, обтекающее пузырек, смещало пленку в сторону “заднего” полюса, который всегда оставался закрытым.

Теоретическое описание поведения пленок сурфактантов на поверхности жидкости банально осложнено наличием гигантского разнообразия поверхностно-активных веществ [95,96]. К примеру, если молекулы сурфактанта являются гомологами, то в зависимости от того, какое место они занимают в гомологическом ряду, определяется их взаимодействие

друг с другом (в результате чего формируются упругие свойства пленок), а также с адсорбентом, что регулирует растворимость. С точки зрения физических моделей поведение каждого ПАВ определяется конкретной изотермой состояния [97,98]. В самом простом случае, когда требуется описать его отклик на неоднородное распределение температуры или концентрации вдоль поверхности, используется так называемая изотерма Генри. Необходимо учитывать, что данная изотерма справедлива только при небольших изменениях характеристик поверхности, однако во многих работах, приведенных ранее и посвященных термо- и концентрационно-капиллярному эффекту, использовалась именно она. С другой стороны, более реалистичная постановка задачи требует учета насыщения поверхности сурфактантом. Данный эффект учитывается в изотерме Ленгмюра [99]. В случае, когда молекулы сурфактанта являются ионами, взаимодействие поверхности с объемом описывается известной изотермой Фрумкина [100].

В процессе заполнения молекулами ПАВ поверхности может происходить переориентация последних [97,101]. В случае, когда концентрация ПАВ на поверхности достаточно мала, молекулы свободно занимают максимальную площадь поверхности, т.е. располагаются по всей плоскости. Когда поверхность постепенно заполняется, это приводит к постепенному сближению молекул ПАВ друг с другом и усилению межчастичного взаимодействия. В зависимости от того, какие части молекул являются гидрофильными, а какие гидрофобными, происходит их переориентация в определенном направлении с уменьшением занимаемой площади поверхности. В конечном итоге молекулы перестраиваются в наиболее плотную и энергетически выгодную упаковку. Данный процесс можно описать с точки зрения фазовых переходов: в зависимости от плотности упаковки молекул (от самой разреженной к более плотной) выделяют газообразное, жидкорасширенное, жидкоконденсированное и твердое состояния сурфактанта, которые характеризуются вполне

определенной степени взаимодействия молекул. Изотерма, описывающая возможность таких переходов в случае ионных поверхностно-активных веществ, молекулы которых имеют разные размеры, была предложена в [102,103].

1.3 Разделение бинарных металлических расплавов

Эффекты, связанные с локальной неоднородностью параметров среды, описанные выше, касались различных гидродинамических явлений при комнатных температурах. Эксперименты показывают, и простейшие теоретические модели это подтверждают, что с ростом средней температуры интенсивность некоторых эффектов должна сильно снижаться. В частности, термодиффузионное разделение смесей значительно ослабляется при увеличении средней температуры среды. Однако большинство гидродинамических эффектов все же должно сохраняться даже при очень высоких температурах. И эти явления действительно наблюдаются в жидких металлах. А именно, при возникновении перепада температур в расплавах металлов могут оказаться существенными неоднородности плотности [104], вязкости [105], поверхностного натяжения [106,107] и даже температуропроводности [108]. Если речь заходит о смесях металлических расплавов, то заметными становятся, в обязательном порядке, концентрационные неоднородности плотности [109], и в дополнение приходится учитывать зависимость коэффициента диффузии от концентрации компонентов [110]. Все это говорит о том, что при определенных условиях в жидких металлах могут работать те же механизмы развития конвективной неустойчивости, что и в обычных жидкостях.

Опыт показывает, что неоднородность параметров в зависимости от характеристик среды порождает нетривиальные явления, которые, как правило, сначала регистрируются экспериментально и только потом находят

какое-то теоретическое объяснение. В качестве примера можно привести эффект крупномасштабного перераспределения компонентов в изначально однородной смеси жидких металлов, который был открыт в экспериментах И.В. Гаврилина [111] и долгое время в течение нескольких десятилетий оставался абсолютно необъяснимым. Тонкий алундовый или кварцевый капилляр, высота которого варьировалась в пределах от 40 до 220 мм, а диаметр составлял 0.8 – 1.2 мм, заполнялся двухкомпонентной смесью жидких легкоплавких металлов (Sn–Pb, Cd–Bi или Al–Si) и в вертикальном положении помещался в печь при температуре, когда оба компонента находились в расплавленном состоянии. Спустя время порядка 1 ч его вынимали и немедленно остужали. По причине отсутствия адгезии алундовое покрытие удалялось, после чего изучалось распределение компонентов сплава в продольном и поперечном сечениях. Эксперименты продемонстрировали, что указанного времени выдержки в печи достаточно для того, чтобы получить ощутимое продольное разделение смеси порядка 5 – 20 %. Конечный профиль концентрации вдоль капилляра был близок к экспоненциальному распределению и отвечал, как правило, уменьшению концентрации тяжелого компонента с высотой. В случае, когда эксперимент проводился с горизонтально расположенным образцом, перераспределение компонентов вдоль капилляра не наблюдалось. Следует отметить, что данные работы были порождены запросом промышленности на получение сверх чистых материалов с повышенными требованиями к однородности конечного продукта. Указанные сплавы производили смешением чистых компонентов, содержание основного элемента в которых было не менее 99.9 % от весового состава. Для получения однородных по составу смесей расплавы перегревали на 300 – 400 °С выше точки плавления и тщательно механически перемешивали в течение длительного времени. Перегрев обеспечивал полную растворимость компонентов друг в друге и предотвращал объединение родственных атомов в кластеры.

Аналогичные результаты, но с гораздо меньшим конечным перепадом концентрации, были получены в экспериментах со смесью углерода и расплава чугуна [112].

Попытка объяснить результаты опытов [111,112] за счет седиментации кластеров атомов была предпринята в [113]. Однако этот теоретический подход не нашел подтверждения. Расчетное время седиментации оказалось на много порядков больше, чем в экспериментах даже для достаточно крупных по величине конгломератов, вообще не содержащих чужеродных атомов. В ходе последующих экспериментов состав этих частиц, а также их радиус, который в теории играл роль подгоночного параметра, так и остались неопределенными. Попытка оценить радиус этих частиц на основе данных рентгеноструктурного анализа тоже не дала положительного результата.

Для адекватного количественного описания эффекта разделения смеси жидких металлов на компоненты в [114] было сделано предположение о совместном действии адсорбционно-десорбционного и конвективного механизмов переноса. Авторами было отмечено, что на вертикальных стенках рассматриваемого капилляра, вследствие особенностей процессов теплообмена в печи, всегда устанавливается небольшой градиент температуры, направленный вертикально вверх. В рамках неравновесной термодинамики этот градиент температуры играет роль термодинамической силы. Предполагается, что в силу специфики используемого в экспериментах материала капилляра (алунда или кварцевого стекла), на вертикальных гранях имеет место условие несмачивания. Алунд и кварцевое стекло весьма специфически контактируют с жидкими металлами за счет большой разницы в энергии межчастичного взаимодействия. Известно [115], что условием смачиваемости поверхности является превосходство ван-дер-ваальсового взаимодействия твердой границы с жидкостью над силами межчастичного взаимодействия внутри самой жидкости. В результате на низкоэнергетических поверхностях, которыми являются алунд и кварцевое

стекло, адгезия должна быть слабой (в зависимости от выбранной жидкости). Если жидкостью является расплав металла, то эффект несмачиваемости становится ощутимо более сильным. Это предположение косвенно подтверждается экспериментами с образцами при разной температуре выдержки в печи, в ходе которых было показано, что с ростом абсолютной температуры эффект разделения становится слабее. Таким образом, на стенках вертикального капилляра, нагреваемого сверху, возникает температурная неоднородность поверхностной энергии, которая приводит к термокапиллярному эффекту. Результирующее перераспределение концентрации компонентов в капилляре объясняется взаимодействием поверхностной и объемной фаз за счет механизмов адсорбции-десорбции, а также наличием ползущего течения в объеме капилляра.

В действительности вероятнее всего в алундовых и кварцевых капиллярах на границе раздела имеет место более сложная картина, чем полное несмачивание. Границы капилляров указанных материалов характеризуются определенной шероховатостью. Мельчайшие пузырьки газа оказываются запертыми в порах нанометровых размеров, на которых имеет место свободная поверхность. Эти поры непрерывным образом в случайном порядке покрывают всю поверхность. На таких порах возникает термокапиллярная сила, которая среднестатистически движет поверхностно-активный компонент [116,117]. Теоретическое описание подобного движения возможно [118,119], но требует специальных граничных условий, в которые должны входить характеристики смачиваемости алунда, количественные данные о геометрии пор и их распределении на поверхности. На сегодняшний день подобные данные для алунда или кварца не известны. По этой причине использовать более точные и физически обоснованные краевые условия на поверхности расплав – твердая граница не имеет смысла, так как подгоночных параметров в этом случае будет только больше. Таким образом, модель полной несмачиваемости на поверхности раздела расплав – твердая

граница вполне приемлема для описания механики осредненного движения поверхностного слоя.

Очевидно, что поведение любой из выше описанных систем можно рассмотреть исходя из более общих соображений, а именно, с точки зрения неравновесной термодинамики. Нет никаких сомнений в том, что физическая система при заданных внешних параметрах рано или поздно достигает установившегося конечного состояния. При этом подобное состояние может оказаться простым случаем термодинамического равновесия, колебаниями или демонстрировать сложное нерегулярное поведение. Однако, прежде чем выйти на режим установления, система за некоторое время релаксации проходит через множество промежуточных состояний, к которым никогда больше не возвращается. Так, если рассматривать какую-либо конвективную систему, то в зависимости от надкритичности, возможна реализация тех или иных переходных течений. При смене надкритичности в такой системе можно наблюдать весьма большое разнообразие сложных конвективных движений, прежде чем она достигнет установившегося режима. Также, у системы возможно наличие гистерезисных областей, в которых при одном и том же наборе внешних параметров возможна реализация нескольких состояний.

На протяжении достаточно большого количества времени остается открытым вопрос: существует ли критерий, по которому происходит выбор конечного состояния системы, и можно ли для этих процессов сформулировать определенный вариационный принцип? В рамках замкнутых систем такой принцип вытекает из второго начала термодинамики: при заданных стационарных условиях из всех возможных состояний система стремится к такому, которое соответствует максимальному значению энтропии [120–122]. Наличие многочисленных теоретических и экспериментальных работ, обосновывающих данный принцип, позволяет утвердиться в его справедливости. Если рассматривать неравновесные

системы, то по аналогии с вышеупомянутым принципом, следует ожидать, что из множества состояний будет реализовано то, которому соответствует экстремальное значение производства энтропии. Данный вопрос активно обсуждается последние несколько десятилетий. Однако, попытки сформулировать однозначно закон на основе базовых теоретических принципов, приводит к разночтениям в интерпретации и часто не подтверждается конкретными задачами и опытами. Иными словами, остается нерешенным вопрос будет ли эволюция физической системы соответствовать максимуму или минимуму производства энтропии, что оставляет некоторую двойственность при оценке получаемых результатов.

Исторически законы максимума или минимума производства энтропии происходят из соответствующих принципов диссипации энергии. Если следовать [123], то впервые такой принцип был получен после обобщения Кирхгофом закона Ома для разветвленных цепей. Суть заключается в том, что при заданной разности потенциалов токи в разветвленной цепи распределяются так, чтобы диссипация энергии была минимальной. Сомневаться в пригодности закона минимума диссипации энергии в указанной электродинамической системе не приходится, однако, его использование в термодинамических системах (в частности, для нахождения производства энтропии) ограничивается серьезными упрощениями системы, что делает такой принцип неподходящим для расчетов реальных систем.

В качестве доказательства принципа минимума диссипации энергии достаточно рассмотреть систему [123,124] из двух резисторов R_1 и R_2 , соединенных параллельно, через которые проходит ток $J = J_1 + J_2$. Для такой системы диссипируемая за единицу времени энергия будет вычисляться по формуле

$$\dot{E} = J_1^2 R_1 + J_2^2 R_2 = J_1^2 R_1 + (J - J_1)^2 R_2.$$

Считая общий ток J постоянным, можно продифференцировать данное выражение по J_1 :

$$\frac{\partial \dot{E}}{\partial J_1} = 2J_1 R_1 - 2(J - J_1) R_2.$$

Производная от этого выражения обращается в ноль при

$$\bar{J}_1 = R_2 J / (R_1 + R_2).$$

С одной стороны, данный ток минимизирует энергию диссипации, а с другой является током, который напрямую можно получить из закона Ома.

Если стремиться получить для такой системы производство энтропии, необходимо рассматривать резисторы, находящиеся в тепловом контакте с общим резервуаром, имеющим температуру T . Для этого достаточно воспользоваться известным соотношением

$$\dot{S} = \dot{E} / T.$$

Таким образом, принцип наименьшего производства энтропии вытекает из принципа наименьшей диссипации энергии. Однако, на примере такой системы можно убедиться, что энергия диссипации минимальна и не противоречит закону Ома только в случае общего теплового резервуара. Если рассмотреть отдельные резервуары с температурами T_1 и T_2 для каждого резистора, то минимум диссипации энергии возникнет при

$$\bar{J}_1 = \frac{R_2 J}{T_2} \left(\frac{R_1}{T_1} + \frac{R_2}{T_2} \right)^{-1},$$

что не соответствует закону Ома.

Попытку получения вариационного принципа для производства энтропии из законов Кирхгофа можно увидеть в [125]. Здесь рассматривалась система из произвольного количества контуров с источниками питания и резисторами. Основное допущение заключалось в том, что внешняя температура для резисторов была одинаковой. Только благодаря этому в результате был получен принцип минимума производства энтропии. Правда авторы статьи назвали полученный результат принципом максимума производства энтропии, так как в расчетах ими использовалась работа,

совершенная резисторами, а не диссипация энергии на них. Это является одной из причин вышеупомянутой двойственности в интерпретации получаемых результатов.

Наличие тока в резисторе обусловлено наложенной разностью потенциалов, что не имеет ничего общего с потоками, связанными, например, с теплопроводностью, которые будут, очевидно, зависеть от температуры резервуара.

Подробный анализ понятия производства энтропии в гидродинамических системах был проведен в [124]. В качестве иллюстрации в этой работе был рассмотрен бесконечный горизонтальный слой жидкости с твердыми идеально теплопроводными гранями. На нижней границе осуществлялся равномерный подогрев, что свидетельствовало о наличии тепловых резервуаров с разными температурами. Во время численного решения уравнений Буссинеска было реализовано 2 случая: конвекция продольных валиков и конвекция поперечных валиков.

По результатам моделирования автором исследовалась зависимость различных вкладов полного производства энтропии системы (теплопроводного, вязкого и гравитационного) от надкритичности и волнового числа. Было установлено, что по абсолютной величине вклад, обусловленный теплопроводностью, существенно преобладает над остальными. По результатам можно сказать, что система подчиняется принципу минимума производства энтропии.

Подробное математическое описание методики вычисления производства энтропии приведено в [126]. Следует отметить, что рабочая формула для производства энтропии системы здесь подразумевает однородность потоков вдоль всей исследуемой полости, что позволяет использовать данный подход только в рамках малых надкритичностей, при которых отсутствуют сложные конвективные структуры. Однородные тепловые потоки вычислялись по среднему перепаду температур, а вязкие

диссипативные члены считались пренебрежимо малыми. Очевидно, что наличие сложных нестационарных течений в системе должно приводить к серьезным погрешностям при использовании указанной формулы. Подобные упрощения выражения для производства энтропии приводят к серьезным ограничениям при интерпретации результатов для конкретной физической системы в задачах о поиске вариационного принципа. При использовании принципа наименьшего производства энтропии в рамках приближения [126] можно описать только наиболее простые состояния системы, а именно, механическое равновесие и переход к первому критическому движению. В этом случае сложная конкуренция между допустимыми первыми критическими движениями не может зависеть от предыстории системы, и в соответствии с вариационным принципом наблюдается единственный переход в новое состояние, которое сменяет предыдущее согласно линейному анализу устойчивости при определенных значениях параметров. Такое упрощение нельзя использовать при анализе производства энтропии гидродинамической системы, рассматриваемой в [37,38], где даже при умеренных значениях надкритичности наблюдаются сложные нелинейные режимы, переходы между которыми зависят от начального состояния. В данном случае, во-первых, необходимо использовать более общее выражение для производства энтропии, в котором учитываются неоднородности потоков, полный вид которых можно найти в [7], а во-вторых, как утверждается в [127], принцип наименьшего производства энтропии требует существенного уточнения. В результате чего Ф. Аттард в уже упомянутых работах [124,126,127] для описания неравновесных переходов в физических системах предлагает использовать понятие энтропии перехода, которую он называет второй энтропией.

Глава 2. Влияние зависимости вязкости жидкости от температуры на стационарные режимы тепловой конвекции в ячейке Хеле – Шоу

2.1 Постановка задачи и линейный анализ устойчивости

В ходе теоретического описания конвективного движения или объяснения экспериментов часто вполне оправданным является упрощение задачи путем пренебрежения различными осложняющими факторами, в роли которых могут выступать неоднородность вязкости или температуропроводности, кривизна поверхности, неидеальность тепловых условий на границах и т.д. Однако далеко не всегда подобные упрощения позволяют адекватно описать протекаемые в экспериментах процессы. Бывают ситуации, когда упрощение физической модели приводит к увеличению числа возможных состояний, многие из которых потом не наблюдаются в эксперименте, а учет осложняющих факторов, наоборот, снимает отмеченное вырождение и позволяет отсеять нереализуемые в опыте решения. Таким образом, сравнение с экспериментом представляется наиважнейшим элементом исследования, т.к. позволяет объяснить, какие именно физические процессы определяющим образом влияют на поведение системы в конкретных условиях. В данной главе проводится исследование влияния неоднородности вязкости на образование экспериментально наблюдаемого двухвихревого течения с однозначно определенной закруткой вихрей в ячейке Хеле – Шоу, равномерно подогреваемой снизу.

Ячейка Хеле – Шоу представляет собой полость в форме прямоугольного параллелепипеда, одна из сторон которого много меньше двух других (рис. 2.1). Аналогично серии экспериментальных и теоретических работ [43,46,128], будем рассматривать ячейку с соотношением сторон $2d:L:H = 2:20:40$. Для такой полости изучим

конвективное поведение рабочей жидкости, находящейся в условиях при равномерном подогреве снизу и наличии поля тяжести. При этом для простоты предполагается, что вязкость уменьшается с ростом температуры [42] по линейному закону $\nu = \nu_0(1 - \varepsilon T)$, где ε – коэффициент зависимости вязкости от температуры.

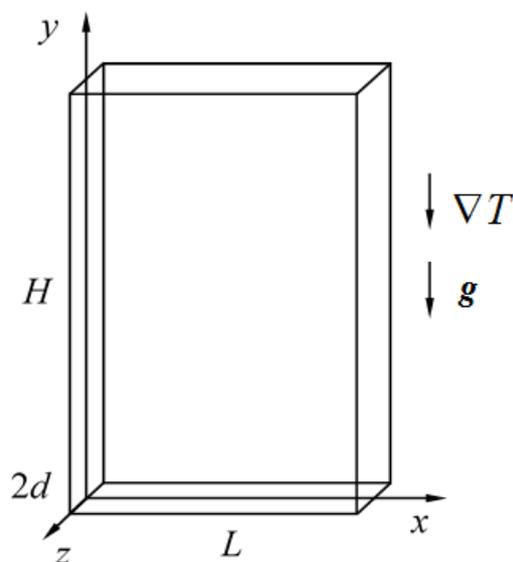


Рис. 2.1. Ячейка Хеле – Шоу

В качестве граничных условий были рассмотрены два предельных случая: 1) теплоизолированных и 2) идеально теплопроводных узких вертикальных граней. При этом широкие грани обладали конечной теплопроводностью так, чтобы имелось максимальное соответствие эксперименту, в котором полость была ограничена плексигласовыми пластинами толщиной $2 \div 3$ см. На идеально теплопроводных горизонтальных гранях поддерживалась определенная разность температур.

Для численного моделирования конвективных течений использовалась система безразмерных уравнений тепловой конвекции в приближении Буссинеска [4,7] при наличии неоднородности вязкости [42]:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}} (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + (1 - kT) \Delta \mathbf{v} - 2k(\nabla T \nabla) \mathbf{v} - k \nabla T \times \text{rot} \mathbf{v} + \text{Ra} T \gamma, \quad (2.1)$$

$$\text{Pr} \frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) T = \Delta T, \quad \text{div } \mathbf{v} = 0. \quad (2.2)$$

Здесь \mathbf{v} , p , T – безразмерные поля скорости, давления и температуры, γ – единичный вектор, направленный вертикально вверх. Система уравнений (2.1) – (2.2) содержит безразмерные управляющие параметры: числа Рэлея и Прандтля, а также параметр, характеризующий зависимость вязкости от температуры:

$$\text{Ra} = \frac{g\beta\Theta d^3}{\nu_0\chi}, \quad \text{Pr} = \frac{\nu_0}{\chi}, \quad k = \varepsilon\Theta, \quad (2.3)$$

где ν_0 – коэффициент кинематической вязкости воды при температуре 20 °С [47]; χ , β – коэффициенты температуропроводности и теплового расширения, Θ – характерная разность температур по вертикали на расстоянии, равном полутолщине слоя d , g – величина ускорения свободного падения.

За единицы измерения расстояния, времени, скорости, давления и температуры выбраны, соответственно: d , d^2/ν_0 , χ/d , $\rho\nu_0\chi/d^2$, Θ (ρ – средняя плотность жидкости). Число Прандтля в расчетах для простоты принималось равным $\text{Pr} = 6$, что приблизительно соответствует воде.

На всех границах полости выполнялось условие прилипания жидкости: $\mathbf{v}|_{\Gamma} = 0$. Соответственно, краевое условие для температуры на широких гранях имеет вид:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{\Gamma} = -a(T - T_0),$$

где a – коэффициент теплоотдачи, T_0 – температура окружающей среды, которая в данной задаче бралась за начало отсчета.

Поставленная задача предполагает использование приближения плоских траекторий, следовательно, можно ввести функцию тока и завихренность:

$$v_x = \frac{\partial \Psi}{\partial y}, \quad v_y = -\frac{\partial \Psi}{\partial x}, \quad \varphi = \frac{\partial v_x}{\partial y} - \frac{\partial v_y}{\partial x}.$$

После исключения давления и получения уравнений в терминах “вихрь – функция тока” решение системы будем искать в виде:

$$\Psi = \psi(x, y, t) \cos\left(\frac{\pi z}{2}\right), \quad T = -y + \theta(x, y, t) \left(1 + \frac{2a}{\pi} \cos\left(\frac{\pi z}{2}\right)\right),$$

где ψ и θ – подлежащие определению поля амплитуды функции тока и отклонения температуры от линейного профиля, соответственно. После осреднения по поперечной координате система уравнений (2.1) – (2.2) будет иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = & \frac{8}{3\pi \text{Pr}} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial y} - \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \left(1 + ky - k \left(1 + \frac{16a}{3\pi^2} \right) \theta \right) \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} - \frac{\pi^2}{4} \varphi \right) + \\ & + k \left[\left(1 + \frac{16a}{3\pi^2} \right) \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \right) \varphi + \frac{\pi^2}{4} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) \right] - \frac{\pi^2}{4} \frac{\partial \psi}{\partial y} - \\ & - \frac{2}{3} a \left(\varphi \theta + \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) - 2k \left(1 + \frac{16a}{3\pi^2} \right) \left[\frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial \theta}{\partial y} - \right. \\ & \left. - \frac{3\pi^2}{3\pi^2 + 16a} \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + 2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x \partial y} \right] - \text{Ra} \frac{2(2+a)}{\pi} \frac{\partial \theta}{\partial x}, \\ \text{Pr} \left(1 + \frac{2a(4+a)}{\pi^2} \right) \frac{\partial \theta}{\partial t} = & \frac{2}{\pi} \left(1 + a + \frac{8a^2}{3\pi^2} \right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \theta}{\partial y} - \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) - \frac{2+a}{\pi} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \\ & + \left(1 + \frac{2a(4+a)}{\pi^2} \right) \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \right) - \frac{a(2+a)}{\pi} \theta, \\ \varphi = & \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2}. \end{aligned}$$

Как указывалось выше, в данной задаче рассматриваются различные тепловые граничные условия для узких вертикальных граней, которые во введенных обозначениях будут следующими: при $x = 0, L$: $\theta = 0$ (идеально теплопроводные грани); $\partial \theta / \partial x = 0$ (теплоизолированные вертикальные узкие грани). Узкие горизонтальные грани всегда рассматривались идеально теплопроводными ($y = 0, H$: $\theta = 0$). Граничные условия для функции тока будут следующими:

$$x = 0, x = L: \quad \psi = \frac{\partial \psi}{\partial y} = 0,$$

$$y = 0, y = H: \quad \psi = \frac{\partial \psi}{\partial x} = 0.$$

Из анализа экспериментальных работ, посвященных рассматриваемой конвективной системе [37,43,46], следует, что в ней может быть реализовано достаточно большое разнообразие стационарных течений. Ведь форма результирующего течения зависит от множества факторов: геометрии полости, значений управляющих параметров, начальных возмущений, граничных условий и т.д. Обнаружение конкретного течения сильно осложняется тем, что указанные факторы могут приводить к образованию гистерезисных областей, в которых при одном и том же наборе внешних параметров возможно установление разных типов движений. При этом каждое из реализующихся состояний в определенном смысле должно быть устойчиво и иметь свою область притяжения. Поэтому задача изучения влияния различных осложняющих факторов, таких как температурная неоднородность вязкости, на формирование течения актуальна с точки зрения классификации результирующих конвективных режимов при варьируемых внешних условиях. В качестве характеристики конкретного течения удобно использовать различные интегральные величины, такие как число Нуссельта или его более общую форму – производство энтропии. Помимо этого, такую величину предпочтительно использовать для возможного обнаружения вариационного принципа, которому должна подчиняться рассматриваемая система [127].

Для вычисления производства энтропии использовалась формула, полученная из общих соображений в [7]. В безразмерной форме она будет иметь вид

$$\dot{S} = \frac{1}{\text{EcPr}} \left(\int_V \left(\frac{\nabla \bar{T}}{\bar{T}} \right)^2 dV + \oint_{\Omega} \frac{\nabla \bar{T}}{\bar{T}} d\mathbf{F} \right),$$

где \mathbf{F} – вектор внешней нормали, \bar{T} – безразмерная абсолютная температура

$$\bar{T} = \frac{T_0}{\Theta} - y + \theta(x, y, t) \left(1 + \frac{2a}{\pi} \cos\left(\frac{\pi z}{2}\right) \right),$$

$T_0 = 293$ К; Ec – это число Эккерта [129], которое равно в принятых единицах измерения

$$Ec = \chi^2 / c_p d^2 \Theta.$$

За единицу измерения энтропии было взято $\chi^2 / \Theta d^2$, в определении c_p – теплоемкость при постоянном давлении. Из-за крайне малого значения числа Эккерта ($Ec \sim 10^{-11}$) вязким диссипативным вкладом в производство энтропии пренебрегается. Первое слагаемое имеет смысл объемного производства энтропии «подсистемы», т.е. той части системы, которая находится между тепловыми резервуарами, второе слагаемое – это «резервуарный» вклад, характеризующий поток энтропии через границы открытой системы.

Также, очевидно, что производство энтропии подсистемы будет всегда давать положительный вклад, в то время как для термодинамически открытой системы, резервуарный вклад в производство энтропии может быть как отрицательным [123,124], так и положительным. Легко убедиться, что в случае механического равновесия, когда поле температуры будет характеризоваться линейным распределением вдоль вертикальной координаты $\bar{T} = T_0 / \Theta - y$, вклад подсистемы в производство энтропии равен

$$\dot{S}_v = \frac{1}{EcPr} \int_V \left(\frac{\nabla T}{T} \right)^2 dV = \frac{2dL}{EcPr} \int_0^H \frac{dy}{\left(\frac{T_0}{\Theta} - y \right)^2} = \frac{2dLH}{EcPr} \frac{\Theta^2}{(T_0 - \Theta H)}$$

и будет с точностью до знака равен вкладу со стороны границ

$$\dot{S}_s = \frac{1}{EcPr} \oint_{\Omega} \frac{\nabla T}{T} d\mathbf{F} = \frac{1}{EcPr} \int_0^L \int_0^{2d} \left(\frac{\Theta}{T_0} - \frac{\Theta}{T_0 - \Theta H} \right) dx dz = - \frac{2dLH}{EcPr} \frac{\Theta^2}{(T_0 - \Theta H)}.$$

Таким образом, в состоянии механического равновесия полное производство энтропии $\dot{S} = \dot{S}_v + \dot{S}_s$ обращается в ноль. В свою очередь, при превышении

порогового значения числа Рэлея неизбежно происходит развитие неустойчивости и разрушение механического равновесия с последующим формированием различных конвективных режимов, которые будут давать дополнительные как положительные, так и отрицательные вклады в производство энтропии. Таким образом, каждый режим будет характеризоваться своим значением производства энтропии системы. Представляется, что данная характеристика является более информативной при анализе конкуренции неоднородных по температуре гидродинамических течений, нежели число Нуссельта.

Чтобы оценить влияние коэффициента теплоотдачи на течение, а также для выбора наиболее близкого к эксперименту [43,46,128] значения этого параметра (сравнение велось по пороговому значению моды $n = 1, m = 1$), сначала была решена задача линейной устойчивости механического равновесия относительно малых нормальных возмущений. Поскольку нагрев полости происходит исключительно со стороны нижней горизонтальной грани и, как следствие, градиент температуры направлен вертикально вниз, любые колебательные возмущения будут затухать с течением времени [130]. Поэтому имеет смысл рассматривать устойчивость только по отношению к монотонным возмущениям. По аналогии с [38] в систему вносились монотонные нормальные возмущения функции тока и температуры вида:

$$\psi = \psi_{nm} \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \sin\left(\frac{\pi m}{H} y\right), \quad \theta = \theta_{nm} \cos\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \sin\left(\frac{\pi m}{H} y\right). \quad (2.4)$$

Здесь m и n – целые числа, определяющие периодичность возмущений по осям x и y . Границы устойчивости соответствующих мод находятся аналитически при использовании метода Галеркина:

$$\begin{aligned} \text{Ra}_{nm} = & \frac{\pi^4 L^2}{n^2} \left(1 + \frac{H}{2} k\right) \left(\left(\frac{n}{L}\right)^2 + \left(\frac{m}{H}\right)^2 \right) \left(\left(\frac{n}{L}\right)^2 + \left(\frac{m}{H}\right)^2 + \frac{1}{4} \right) \times \\ & \times \left(\frac{\pi^2 + 4a}{2(2+a)^2} \left(\left(\frac{n}{L}\right)^2 + \left(\frac{m}{H}\right)^2 \right) + \frac{a}{2+a} \left(\left(\frac{n}{L}\right)^2 + \left(\frac{m}{H}\right)^2 + \frac{1}{4} \right) \right). \end{aligned} \quad (2.5)$$

При $k = 0$ найденные значения критического числа Рэля в предельных случаях совпадают с известными формулами (1.1), (1.2) [40] теплоизолированных ($a = 0$) и идеально теплопроводных широких граней ($a \rightarrow \infty$), которые были представлены в главе 1. Графически значения первых пяти гидродинамических мод в исследованном диапазоне коэффициента теплоотдачи представлены на рис. 2.2. Все дальнейшие расчеты проводились при $a = 0.2$, что примерно соответствует плексигласу при толщине стенок 2 см. Пороговым значением числа Рэля для данного коэффициента теплоотдачи является $Ra \approx 0.8$.

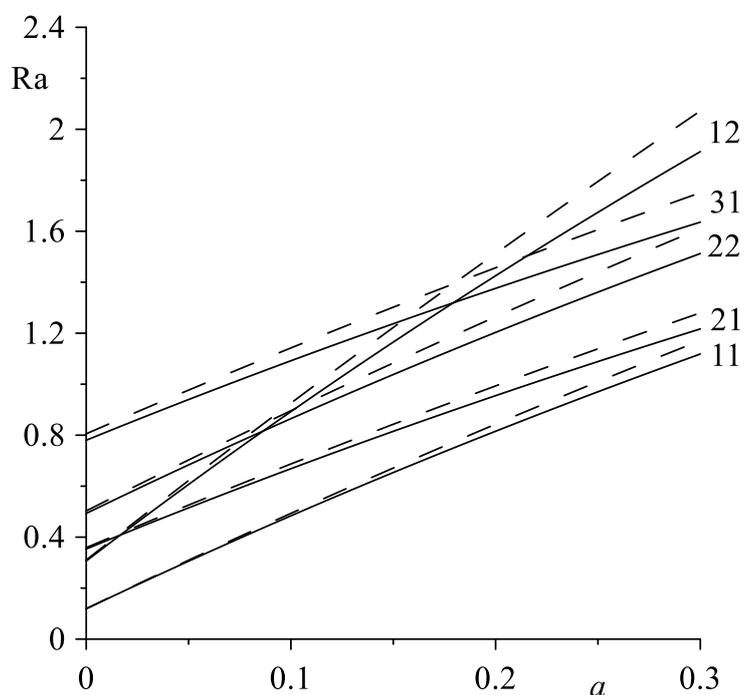


Рис. 2.2. Порог устойчивости механического равновесия для первых пяти гидродинамических мод. Сплошные линии – случай однородной вязкости, штриховые – случай неоднородной вязкости для $\varepsilon = 0.02$ 1/К

Для уточнения значений пороговых чисел Рэля, необходимо учесть, что $k = \varepsilon\theta$, т.е. параметр зависимости вязкости от температуры является функцией характерной разности температур. При $\varepsilon = 0.02$ 1/К разность температур θ перерабатывалась в число Рэля, после чего решалось уравнение (2.5):

$$\text{Ra}_{nm} = \frac{2\text{Ra}_{nm}^0}{2 - \varepsilon k' H \text{Ra}_{nm}^0}, \quad k' = \frac{\nu_0 \chi}{g \beta d^3},$$

где k' – вспомогательный размерный параметр, Ra_{nm}^0 – пороговое значение числа Рэлея для моды n, m в предельном случае отсутствия зависимости вязкости от температуры:

$$\text{Ra}_{nm}^0 = \frac{\pi^4 L^2}{n^2} \left(\left(\frac{n}{L} \right)^2 + \left(\frac{m}{H} \right)^2 \right) \left(\left(\frac{n}{L} \right)^2 + \left(\frac{m}{H} \right)^2 + \frac{1}{4} \right) \times \\ \times \left(\frac{\pi^2 + 4a}{2(2+a)^2} \left(\left(\frac{n}{L} \right)^2 + \left(\frac{m}{H} \right)^2 \right) + \frac{a}{2+a} \left(\left(\frac{n}{L} \right)^2 + \left(\frac{m}{H} \right)^2 + \frac{1}{4} \right) \right).$$

В результате можно видеть, что учет реалистичной температурной зависимости вязкости способствует незначительному усилению устойчивости равновесия для всех исследованных гидродинамических мод во всей области возможных значений коэффициента теплоотдачи.

2.2 Метод решения нелинейной задачи

Для решения полной нелинейной задачи использовался метод конечных разностей. Алгоритм был разработан в соответствии с явной схемой решения уравнений в частных производных и основан на двухполевой методике [131]. Программный код был написан на языке Fortran-90. В ходе расчетов использовался метод установления. При аппроксимации производных по времени и производных по координатам использовались, соответственно, односторонние и центральные разности [132]. Шаг по времени выбирался из соображений устойчивости численной процедуры. При решении уравнения Пуассона для функции тока в каждый момент времени применялся метод простых итераций [133]. На границах полости для вычисления вихря скорости применялись известные формулы Тома [134].

Сходимость метода проверялась сравнением максимальных значений функции тока для разного количества вычислительных узлов сетки (Таб. 2.1, рис. 2.3). Расчеты проводились в удаленном режиме на суперкомпьютере Научно-образовательного центра “Параллельные и распределенные вычисления” Пермского государственного национального исследовательского университета “ПГУ – Тесла”. При проведении расчетов осуществлялась периодическая запись искомых полей на диск, что позволяло анализировать эволюцию полей в каждый момент времени.

Для проведения основных расчетов количество узлов в сечении канала было выбрано 25:46.

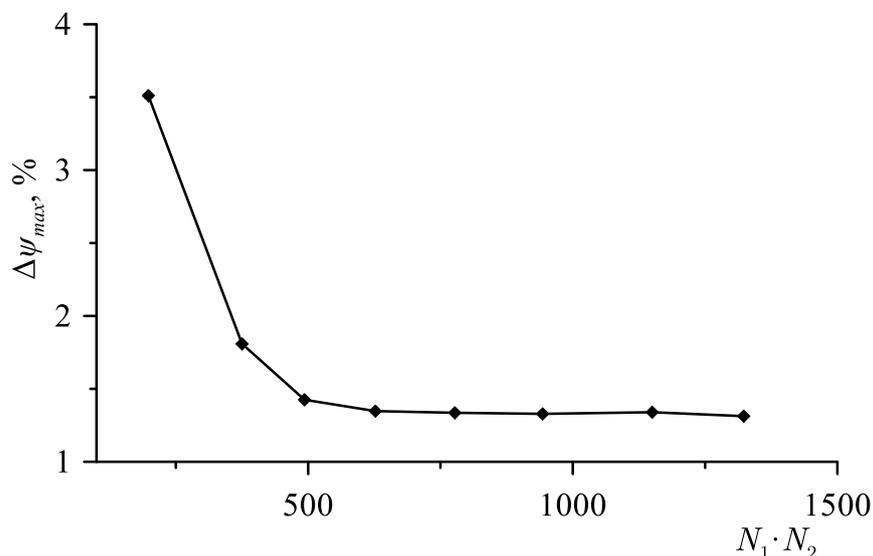


Рис. 2.3. Относительная ошибка для максимума функции тока (%) в зависимости от общего числа узлов сетки

Таблица 2.1. Сходимость метода

	N_1	N_2	$N_1 N_2$	ψ_{max}	$\Delta\psi_{max}, \%$
1	9	14	126	32.80	
2	11	18	198	31.68	$\Delta\psi_{12} = 3.511$
3	15	25	375	31.12	$\Delta\psi_{23} = 1.808$
4	17	29	493	30.68	$\Delta\psi_{34} = 1.425$
5	19	33	627	30.28	$\Delta\psi_{45} = 1.347$
6	21	35	735	29.88	$\Delta\psi_{56} = 1.336$
7	23	37	851	29.48	$\Delta\psi_{67} = 1.328$

8	25	46	1150	29.09	$\Delta\psi_{78} = 1.339$
9	27	49	1323	28.72	$\Delta\psi_{89} = 1.312$
10	29	53	1537	28.35	$\Delta\psi_{910} = 1.304$

2.3 Анализ экспериментальных данных и расчеты в отсутствие зависимости вязкости от температуры

Сначала проанализируем результаты численного моделирования стационарных течений в ячейке Хеле – Шоу в пределе $\varepsilon = 0$ (однородная вязкость). Пусть узкие вертикальные грани теплоизолированы. Несмотря на то, что в эксперименте [43] узкие вертикальные грани обладают конечной теплопроводностью, данное условие, как будет видно из дальнейшего обсуждения, чуть более приближено к действительности, чем предел идеально теплопроводных вертикальных узких граней. Согласно линейному анализу устойчивости, при прохождении порогового значения $Ra \approx 0.8$, в ячейке рождается одновихревой стационарный режим (рис. 2.4а, 2.5а).

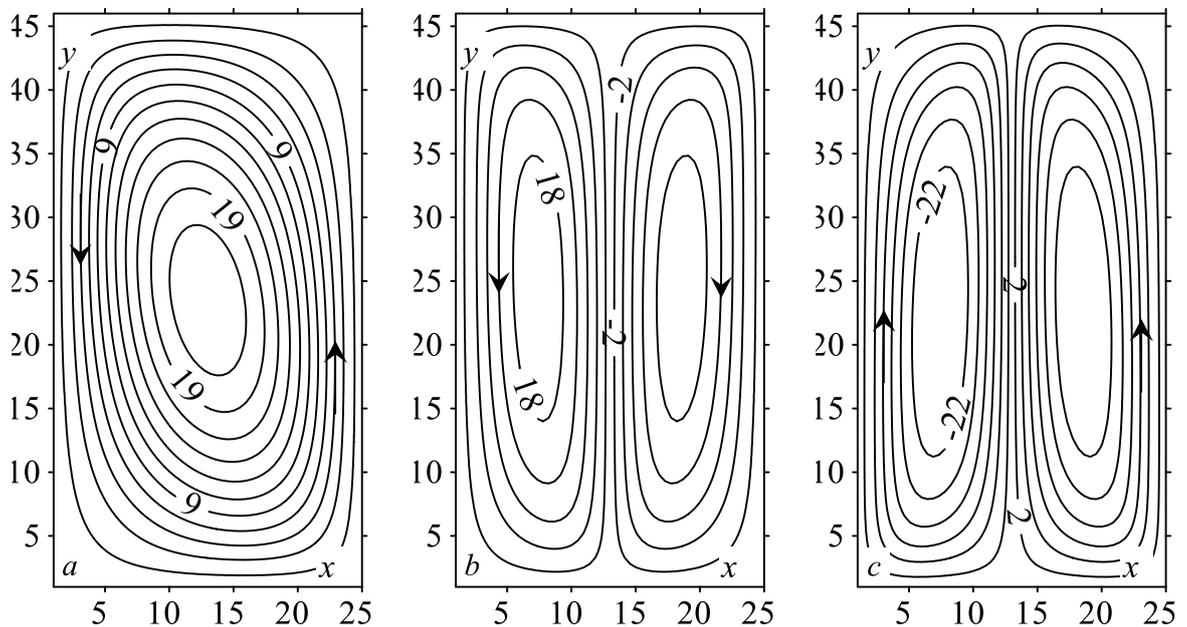


Рис. 2.4. Поля функций тока стационарных конвективных течений для случая однородной вязкости и теплоизолированных узких граней, а) – одновихревой режим при $Ra = 1.6$; б) и в) – соответственно двухвихревые режимы с “не экспериментальной” и “экспериментальной” закруткой при $Ra = 2.7$

При увеличении надкритичности ось симметрии основного вихря наклоняется, а в углах появляются небольшие застойные зоны, что сначала неплохо согласуется с экспериментом (рис. 2.5*a*). Однако, имитируя в ходе численного моделирования эксперимент, а именно, медленно продвигаясь вверх по параметру, одновихревое течение при $\varepsilon = 0$ сохраняет свою устойчивость вплоть до $Ra = 1.9$ (кривая 1, рис. 2.6), после чего в системе рождается автоколебательный пульсационный режим.

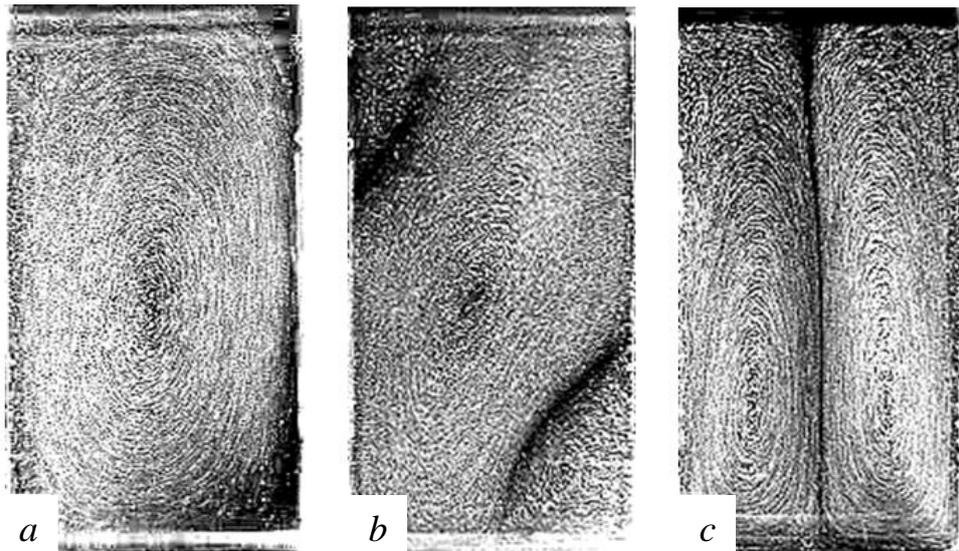


Рис. 2.5. Течения, наблюдавшиеся в эксперименте [43]: *a*) и *b*) – одновихревой режим при $Ra = 0.9$ и 1.4 ; *c*) – двухвихревой режим при $Ra = 1.5$

Расчеты показывают, что одновихревое течение демонстрирует фантастическую устойчивость и сменяется только пульсационным режимом. Рождение моды $(2,1)$ при $Ra \approx 1.0$ (рис. 2.2) и ее нелинейное взаимодействие с основной модой $(1,1)$ не приводит визуально к перестройке течения, т.е. мода $(1,1)$ остается доминирующей. Это явно противоречит наблюдениям, в которых одновихревой режим теряет устойчивость при $Ra \approx 1.5$ и в эксперименте переходит в двухвихревой стационарный режим (рис. 2.5*c*).

Еще одна более серьезная нестыковка с экспериментом связана с тем, что в расчетах, задавая начальные условия для двухвихревого движения с разной закруткой, можно на равных правах реализовать оба режима (рис. 2.4*b*, 2.4*c*). В то время как в эксперименте двухвихревое течение всегда

характеризовалось опускным движением в центре и подъемом жидкости по бокам полости. В дополнение, если в расчетах двухвихревое течение путем навязывания специальных начальных условий все же устанавливалось, то при движении вниз по надкритичности (кривые 2 и 3 на рис. 2.6a) такое течение будет сохранять устойчивость вплоть до $Ra = 1.1$, где экспериментально оно никогда не наблюдалось. Только при числах Рэлея $Ra < 1.1$ оба двухвихревых течения теряют устойчивость и перестраиваются в одновихревой режим.

Таким образом, можно заключить, что динамика переходов от одного режима к другому, не совсем адекватно описывается стандартными уравнениями тепловой конвекции в приближении Буссинеска.

Для полноты описания было проведено численное моделирование стационарных течений в ячейке Хеле – Шоу в случае идеально теплопроводных узких вертикальных граней.

При движении вверх по надкритичности из состояния равновесия, после прохождения порогового числа Рэлея $Ra = 1.1$, состояние механического равновесия сменяется одновихревым стационарным режимом, которое практически с самого начала обладает угловыми вихрями с противоположной основному течению закруткой (кривая 1 на рис. 2.6b и рис. 2.7a). Этот факт противоречит эксперименту, в котором сначала при малых надкритичностях всегда наблюдалось более или менее симметричное одновихревое течение без обратных угловых вихрей.

Дальнейшее увеличение перепада температур в расчетах приводит к тому, что один из угловых вихрей начинает расти, вытесняя тем самым основное течение. При этом вихрь в противоположном углу поглощается основным течением. Так, одновихревое течение теряет свою устойчивость и переходит в двухвихревое стационарное течение при $Ra = 1.65$. В этом смысле подобный сценарий перестройки течения несколько ближе к эксперименту. Однако в расчетах переход в двухвихревой режим возможен

двумя способами: за счет нарастания верхнего углового вихря и поглощения нижнего, так и путем нарастания нижнего вихря и поглощения верхнего. Более того, в расчетах могут быть реализованы двухвихревые течения как с подъемным (кривая 3 на рис. 2.6*b*, рис. 2.7*b*), так и с опускным движением в середине полости (кривая 2 на рис. 2.6*b*, рис. 2.7*c*). Выбор окончательного направления закрутки устанавливается начальными условиями при подаче небольших возмущений в ходе перестройки течения.

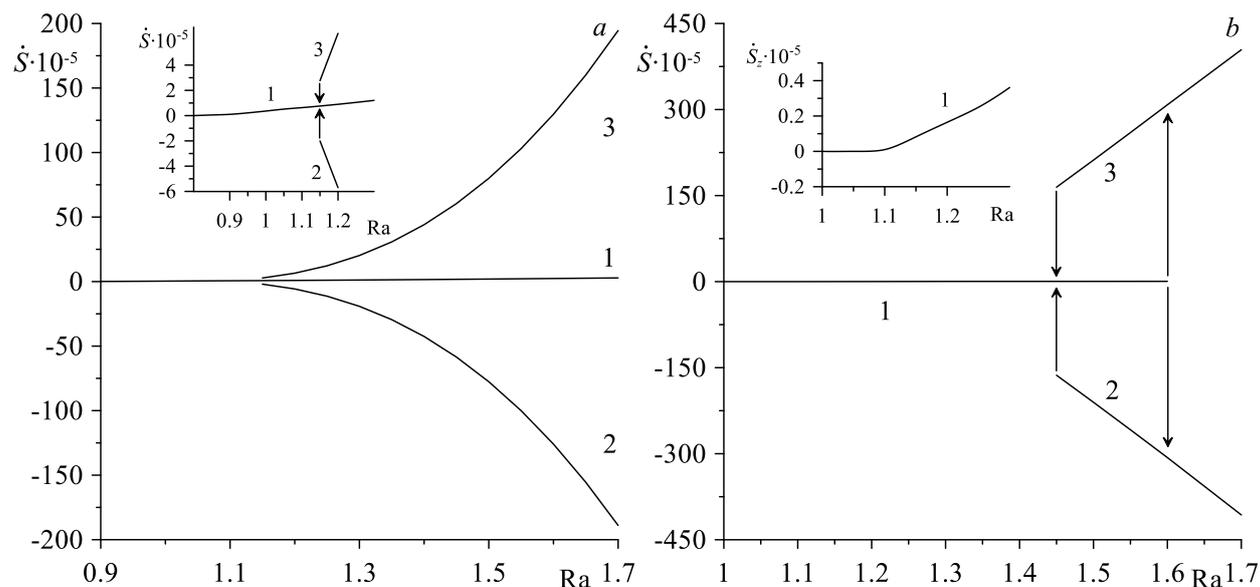


Рис. 2.6. Зависимость полного производства энтропии системы от надкритичности для случая однородной вязкости: теплоизолированные узкие вертикальные грани (а), идеально теплопроводные узкие вертикальные грани (б). 1 – одновихревой режим, 2 – двухвихревой режим с не экспериментальной закруткой, 3 – двухвихревой режим с экспериментальной закруткой.

При движении вниз по надкритичности с начальными условиями, соответствующими любой из закруток двухвихревого режима обязательно произойдет смена течения ($Ra = 1.5$) на одновихревой режим. В итоге можно утверждать, что теплопроводность узких вертикальных граней играет некоторую роль в определении сценария усложнения конвективных течений в ячейке Хеле – Шоу.

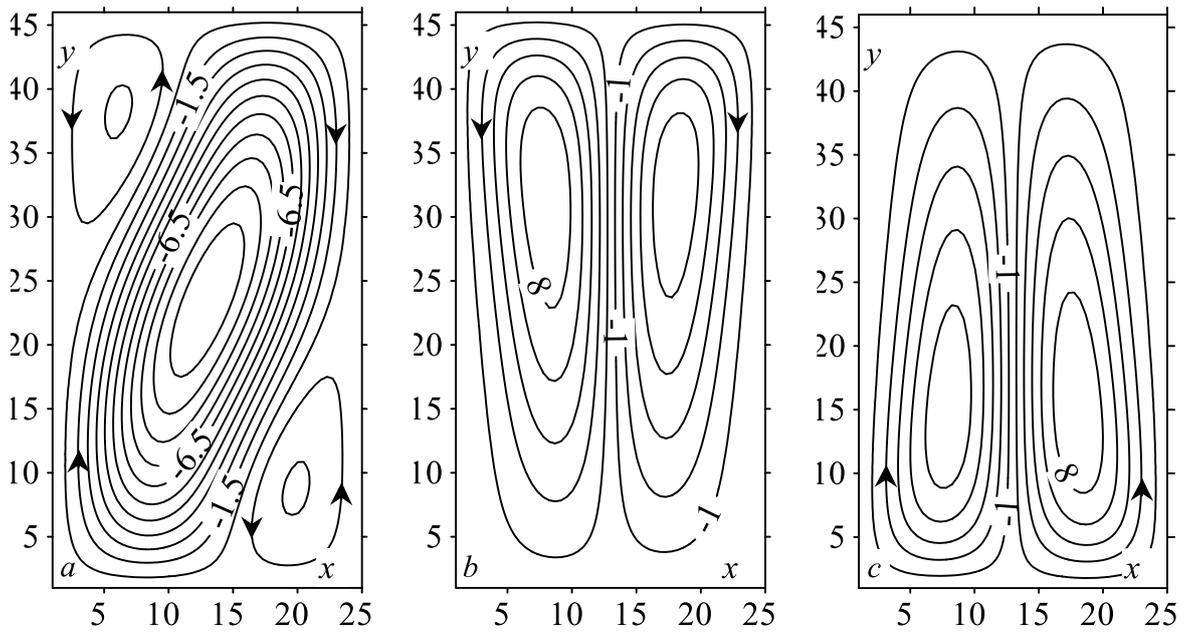


Рис. 2.7. Поля функций тока стационарных течений для случая однородной вязкости и идеально теплопроводных узких вертикальных граней *a*) одновихревой режим при $Ra = 1.4$; *b*) и *c*) двухвихревые режимы с “не экспериментальной” и “экспериментальной” закруткой при $Ra = 1.6$

Факт того, что при переходе от одновихревого режима к двухвихревому нет предпочтительного конечного состояния в виде течения с экспериментальной или не экспериментальной закруткой явно следует из рис. 2.6. Независимо от перепада температуры между верхней и нижней границами ячейки величина производства энтропии одновихревого течения (кривая 1) и двухвихревого течения с экспериментальной закруткой (кривая 3) всегда положительна, причем последняя всегда существенно больше. Производство энтропии двухвихревого течения с не экспериментальной закруткой всегда отрицательно и по абсолютной величине примерно равно производству энтропии течения с противоположной закруткой (кривая 2). С ростом числа Рэлея разница между производством энтропии одновихревого течения и двухвихревого течения с определенной закруткой (энтропия перехода) увеличивается. В то же время энтропия перехода между одновихревым течением и двухвихревым течением с разными направлениями закрутки при любом фиксированном значении Ra примерно

одинакова, т.е. с точки зрения неравновесной термодинамики разницы между этими переходами практически нет. Находясь в области значений числа Рэлея, при котором возможна реализация всех трех стационарных режимов и имея развитый одновихревой режим в качестве начального условия, достаточно внести в систему соответствующие возмущения для того, чтобы совершить один или другой переход.

2.4 Результаты расчетов в случае неоднородной вязкости

Случай неоднородной вязкости будет описан для $\varepsilon \approx 0.02$ 1/К, что примерно соответствует воде при температуре 20 °С [47]. При использовании теплоизолированных узких вертикальных граней пороговое число Рэлея смещается до $Ra \approx 0.95$ и приближается к экспериментальному значению. В полости возникает одновихревой стационарный режим (рис. 2.8а), правда течение имеет четко выраженный угловой противовихрь в только одном из нижних углов ячейки. Однако, теперь какую бы закрутку не имело основное течение, сопутствующий угловой вихрь всегда будет отвечать подъемному движению у вертикальной стенки! Аналогично случаю однородной вязкости, одновихревой режим является очень устойчивым и может наращивать свою интенсивность вплоть до $Ra = 2$ (кривая 1 на рис. 2.9а). Однако, далее это течение становится неустойчивым в силу отсутствия симметрии. При увеличении перепада температур угловой вихрь постепенно увеличивается и вблизи точки бифуркации достигает размеров в треть высоты полости. Далее, он всегда перестраивает течение в двухвихревое с экспериментальной закруткой.

Если стартовать из начальных условий, соответствующих двухвихревому течению с “экспериментальной” или противоположной закруткой (рис. 2.8б, 2.8с), и идти вниз по надкритичности, то также как и в случае однородной вязкости, это приводит к появлению неустойчивости

данного течения и рождению одновихревого режима лишь при $Ra = 1.15$ (кривые 2 и 3 на рис. 2.9а).

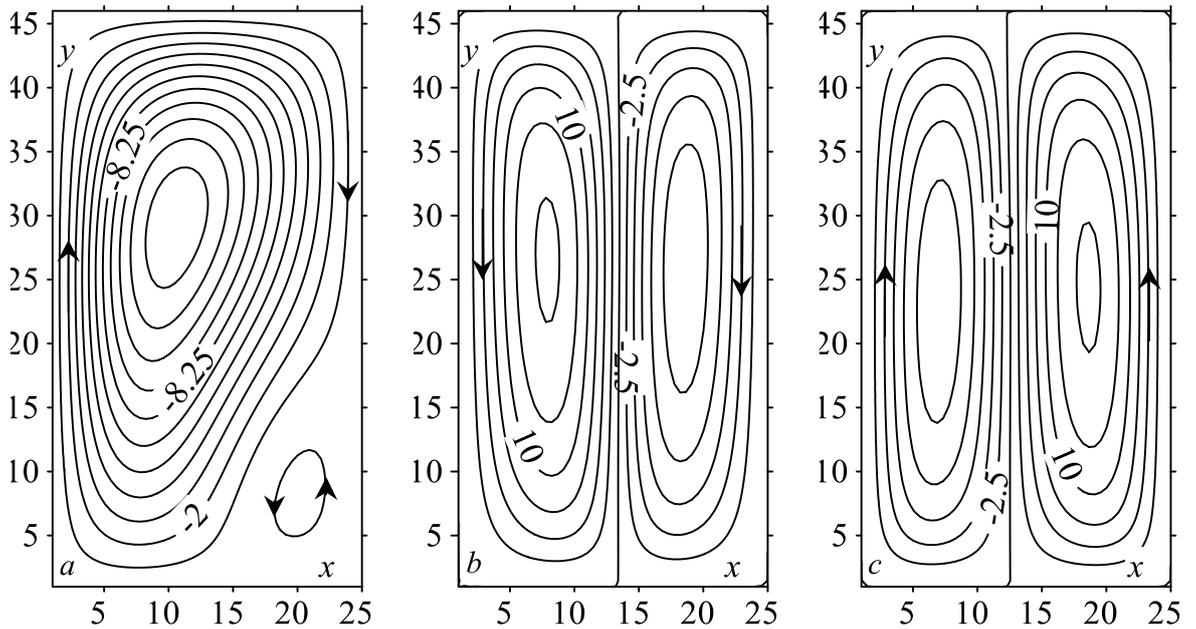


Рис. 2.8. Поля функций тока стационарных конвективных течений для теплоизолированных узких граней в случае неоднородной вязкости; а) одновихревой режим при $Ra = 1.2$; б) и в) двухвихревые режимы с “не экспериментальной” и “экспериментальной” закруткой при $Ra = 1.6$

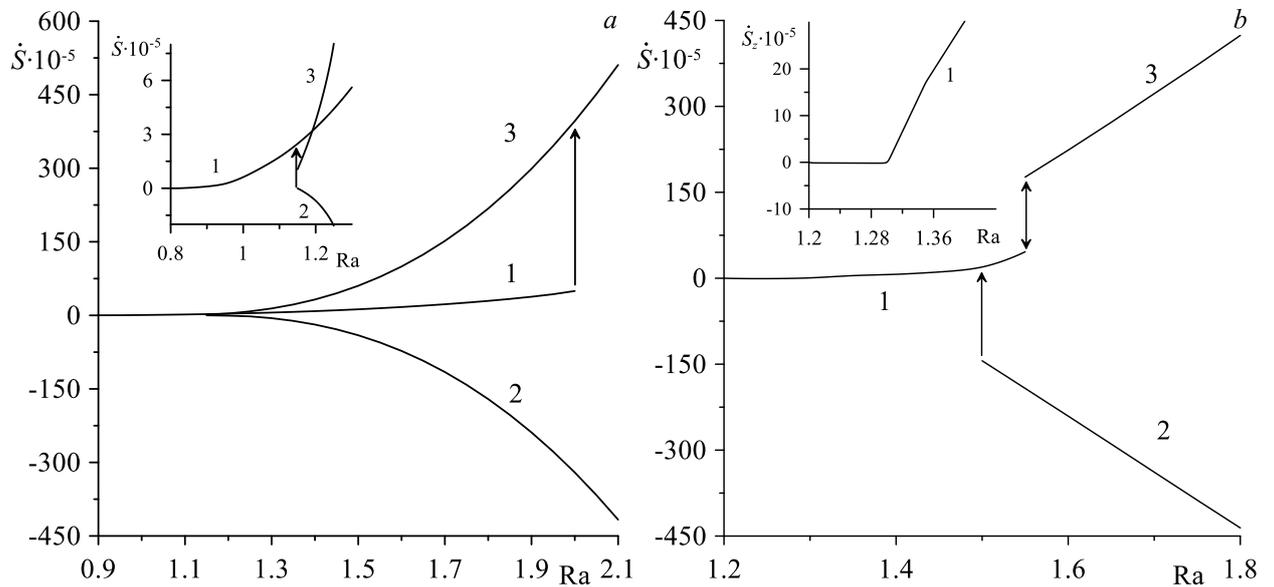


Рис. 2.9. Зависимость производства энтропии системы от надкритичности для случая неоднородной вязкости: теплоизолированные узкие вертикальные грани (а), идеально теплопроводные узкие вертикальные грани (б): 1 – одновихревой режим, 2 – двухвихревой режим с не экспериментальной закруткой, 3 – двухвихревой режим с экспериментальной закруткой

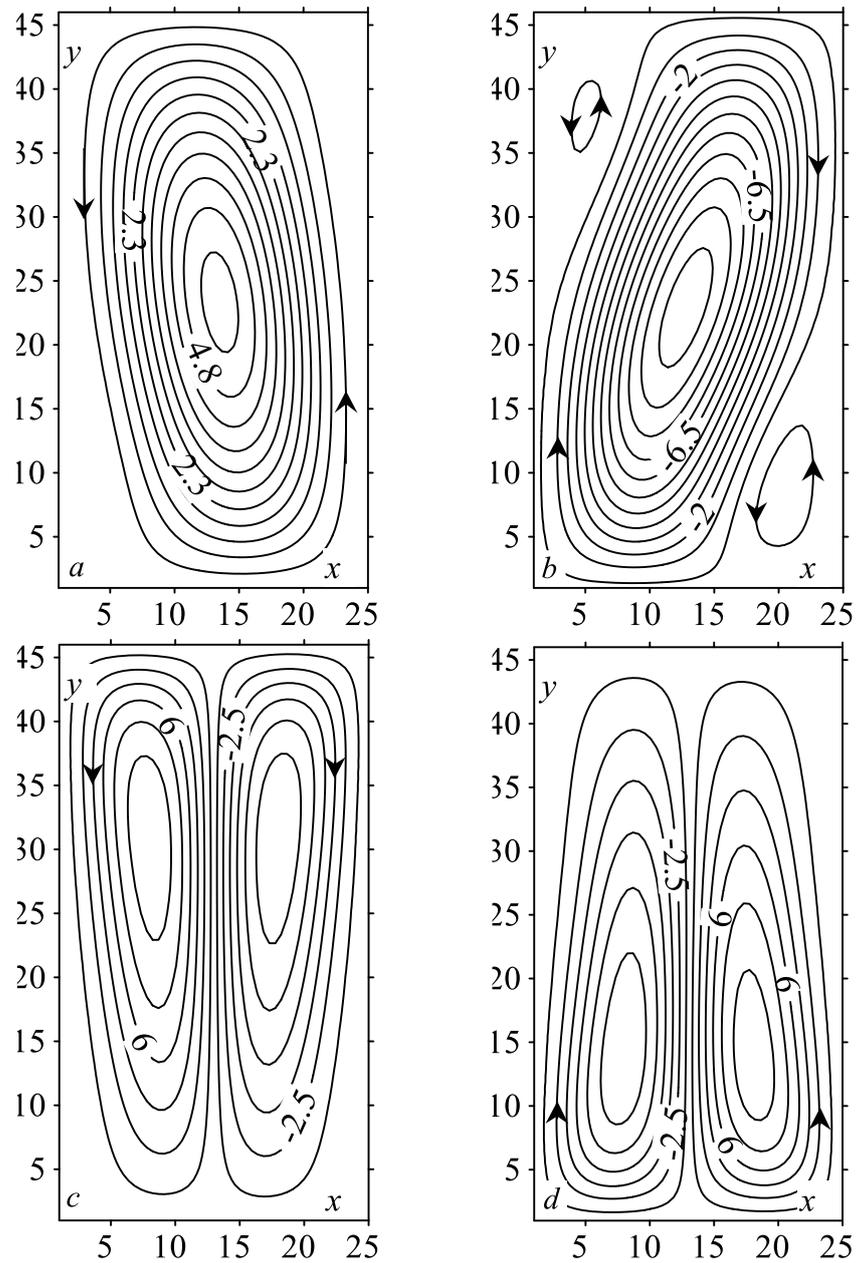


Рис. 2.10. Поля функций тока стационарных конвективных течений для идеально теплопроводных узких граней в случае неоднородной вязкости; *a)* и *b)* одновихревой режим при $Ra = 1.2$ и $Ra = 1.4$; *c)* и *d)* двухвихревые режимы с “не экспериментальной” и “экспериментальной” закруткой при $Ra = 1.8$

В итоге можно сказать, что такая модель воспроизводит структуру течения гораздо ближе к эксперименту. В расчетах отражается даже факт наличия достаточно широкой области значений чисел Рэлея, в которой двухвихревой режим сосуществует с одновихревым.

Наконец исследуем влияние идеально теплопроводных вертикальных узких граней в случае $\varepsilon \approx 0.02$ 1/К. Здесь пороговое значение числа Рэлея

имеет значение $Ra \approx 1.2$. После рождается одновихревой стационарный режим (рис. 2.10a). С ростом числа Рэлея симметрия этого течения нарушается, а именно, в углах ячейки образуются вихри с противоположной основному течению закруткой (рис. 2.10b).

Следует отметить, что в силу неоднородности вязкости нижний вихрь всегда немного больше верхнего, что согласуется с опытом. Поскольку в экспериментах как правило рабочей жидкостью было трансформаторное масло, у которого ε в разы больше, чем у воды, эффект подобного нарушения симметрии при больших числах Прандтля будет выражен сильнее.

Увеличение надкритичности приводит к тому, $Ra = 1.55$ становится точкой бифуркации, при прохождении которой вверх по параметру нижний угловой вихрь начинает вытеснять основное течение (кривая 1 на рис. 2.8b). В свою очередь, основное течение поглощает верхний угловой вихрь. В ходе такой перестройки в ячейке останутся два симметричных вихря с экспериментальной закруткой. Такой переход от одного режима к другому из-за отсутствия симметрии между угловыми вихрями теперь является единственно возможным. Второй фактор, подтверждающий роль зависимости вязкости от температуры, заключается в воспроизводстве эффекта смещения центров вихрей в нижнюю часть полости (рис. 2.5c и 2.10d).

Следует отметить, что в расчетах все же можно также получить оба типа двухвихревых течений с обеими закрутками (рис. 2.10c, 2.10d), если при больших надкритичностях задать соответствующие начальные условия и стартовать из состояния покоя. При уменьшении числа Рэлея данные течения будут сохранять свою устойчивость вплоть до $Ra = 1.6$ (кривые 2 и 3 на рис. 2.9b), после чего перестроятся в одновихревой режим. Однако, специально в эксперименте подобные условия никогда не реализовывались. Как и в предыдущем разделе, учет теплопроводности узких вертикальных граней приближает значения точек бифуркации к экспериментальным.

В заключении можно сказать, что учет температурной неоднородности вязкости достаточен для того, чтобы реализовать экспериментальный сценарий развития течений, а именно, возникновение одновихревого течения из механического равновесия и его дальнейшую перестройку в двухвихревой режим с подъемным течением вблизи вертикальных стенок. Так же, как и в случае однородной вязкости, производство энтропии одновихревого и экспериментального двухвихревого течений (кривые 1 и 3 на рис. 2.9) всегда положительно, а для “неэкспериментального” течения (кривая 2) – всегда отрицательно. Однако, несимметричность одновихревого течения и постепенное увеличение вихря, расположенного в углу полости, с ростом надкритичности приближает как форму изолиний функции тока (рис. 2.10), так и поле температуры данного течения к экспериментальному двухвихревому. Как следствие, производство энтропии данного течения сильно увеличивается вблизи точки бифуркации $Ra = 2$ (рис. 2.9a) и $Ra = 1.55$ (рис. 2.9b) в сравнении с одновихревым течением для однородной вязкости (рис. 2.8). Другими словами, энтропия перехода между течениями, наблюдавшимися в эксперименте, становится меньше, чем при нереализуемом с точки зрения эксперимента переходе между режимами. При сопоставлении этих результатов с данными, полученными в разделе 2.3, можно сделать вывод, что исследуемая неравновесная система подчиняется вариационному принципу минимальной энтропии перехода.

Глава 3. Зависимость коэффициента поверхностного натяжения от характеристик среды в бинарных металлических расплавах на несмачиваемых границах полости

3.1 Конвективный перенос в двумерном тонком канале с несмачиваемыми границами

3.1.1 Постановка задачи

Проблема разделения сложных по составу жидкостей на компоненты, в основном, сопряжена с практической необходимостью обогащения или, наоборот, обеднения истинных растворов различными составляющими. В ходе технологического цикла рабочая среда, как правило, неоднородно нагрета, что создает дополнительные трудности при управлении проходящими там физическими процессами вследствие появления дополнительного конвективного механизма тепло- и массопереноса. В подобных системах чаще всего процесс обогащения происходит за счет вторичных теплофизических процессов разделения типа термодиффузии [135, 136], в результате чего полезный выход продукта оказывается весьма низким, а сама технология малоэффективной как по затратам энергии, так и времени.

Даже при использовании методов разделения, в основе которых лежит прямое воздействие на систему внешних неоднородных силовых полей в большинстве случаев требуется многократная последовательность прогонок смеси через рабочее пространство используемой установки. Так, для эффективного разделения смеси с помощью центробежных сил, приходится пропускать ее через целый каскад центрифуг и сочетать этот процесс с

процедурой механического отделения центрифугированного продукта на каждом промежуточном этапе.

Таким образом, в настоящее время поиск и исследование новых физических механизмов разделения смесей на атомарном (молекулярном) уровне являются важными задачами в естественных науках. Особую актуальность приобретает развитие данного направления физики применительно к микрофлюидическим явлениям массопереноса в тонких каналах. Причем сами каналы могут иметь небольшие, но макроскопические размеры, в то время как природа процессов, лежащих в основе рассматриваемого явления, при этом оказывается микрофлюидической.

Теоретическое описание одного из таких эффектов, обнаруженного еще в 80-х годах прошлого столетия, будет предложено ниже в данной главе.

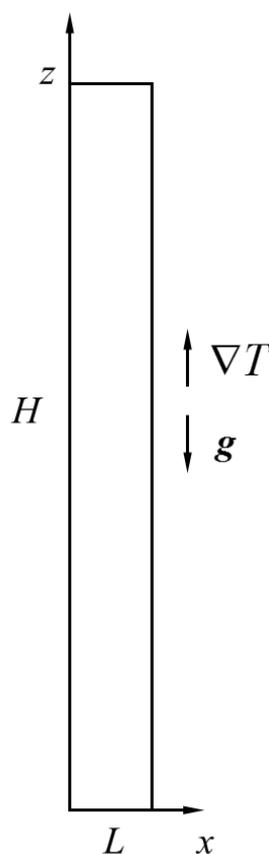


Рис. 3.1. Геометрия задачи. Система координат

Рассмотрим вертикально ориентированный капилляр, заполненный бинарной смесью металлов в расплавленном состоянии. На боковых границах канала поддерживается постоянный градиент температуры, направленный вертикально вверх (рис. 3.1). Подобное распределение температуры объективно имеет место в печах при плавлении металлов: даже при однородном нагреве всех стенок нагревательной камеры в верхней части рабочего объема образуется так называемая тепловая шапка из более горячего воздуха. В результате на вертикальных границах длинного капилляра, помещенного в эту камеру, неизбежно возникает неоднородное продольное распределение температуры, соответствующее нагреву сверху. Предварительные оценки показывают, что разность температур от одного до пяти градусов между торцами уже может вызвать крупномасштабный массоперенос компонентов, приводящий к сегрегации расплава. Для более ясной демонстрации специфического механизма массопереноса задача решалась в двумерной постановке. Далее будем предполагать, что на боковых стенках капилляра справедливо условие полного несмачивания. Вследствие этого эффекта на вертикальных границах формируется свободная поверхность, на которой за счет внешнего продольного градиента температуры возникает термокапиллярная сила, заставляющая перемещаться жидкие элементы вниз, вдоль границы раздела по направлению возрастания коэффициента поверхностного натяжения.

Для описания конвективных течений бинарной молекулярной смеси воспользуемся уравнениями для несжимаемой жидкости, представляющими собой систему гидродинамических уравнений в приближении Буссинеска [4]:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \Delta \mathbf{v} + g(\beta_T T - \beta_C C) \boldsymbol{\gamma}, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) T = \chi \Delta T, \quad \operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) C = D \Delta C, \quad (3.3)$$

где \mathbf{v} , p , T , C – поля скорости, давления, температуры и концентрации тяжелого компонента смеси, β_T , β_C – коэффициенты температурного и концентрационного увеличения плотности, ν , χ , D – кинематическая вязкость, температуропроводность и коэффициент диффузии, g – величина ускорения свободного падения, γ – единичный вектор, направленный вертикально вверх.

Также рассматривалось уравнение для поверхностной концентрации с учетом на ней адсорбционно-десорбционных процессов [6]:

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \nabla^s (\mathbf{v} \Gamma) = D_s \Delta^s \Gamma + k_A C - k_D \Gamma, \quad (3.4)$$

где Γ – поле поверхностной концентрации тяжелого компонента смеси; D_s , k_A , k_D – коэффициенты поверхностной диффузии, адсорбции и десорбции. Индекс s у операторов обозначает дифференцирование по координатам поверхности.

Горизонтальные торцы канала считались твердыми, и на них для простоты ставилось условие прилипания, а также условие отсутствия потока вещества через границу. Граничное условие для концентрации на несмачиваемых поверхностях выводится из закона сохранения массы с учетом всех возможных потоков вещества. Принимая во внимание явления адсорбции и десорбции, запишем связь между объемной и поверхностной концентрациями на несмачиваемых границах в следующем виде [137]:

$$\begin{aligned} x = 0: \quad & -D \frac{\partial C}{\partial x} = -k_A C + k_D \Gamma, \\ x = L: \quad & -D \frac{\partial C}{\partial x} = k_A C - k_D \Gamma. \end{aligned}$$

Пример использования подобных граничных условий можно увидеть в [138,139].

В безразмерной форме система уравнений (3.1) – (3.4) принимает вид:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}} (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \Delta \mathbf{v} + \text{Ra} (T - C) \gamma,$$

$$\text{Pr} \frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) T = \Delta T, \quad \text{div} \mathbf{v} = 0,$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}} (\mathbf{v} \nabla) C = \frac{1}{\text{Sc}} \Delta C,$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}} \nabla^s (\mathbf{v} \Gamma) = \frac{1}{\text{Sc}_s} \Delta^s \Gamma + k_+ C - k_- \Gamma,$$

$$x = 0: \quad -\frac{1}{\text{Sc}} \frac{\partial C}{\partial x} = -k_+ C + k_- \Gamma, \quad (3.5)$$

$$x = l: \quad -\frac{1}{\text{Sc}} \frac{\partial C}{\partial x} = k_+ C - k_- \Gamma, \quad (3.6)$$

$$y = 0, y = h: \quad \frac{\partial C}{\partial y} = \frac{\partial \Gamma}{\partial y} = 0, \quad \mathbf{v} = 0, \quad (3.7)$$

где

$$\text{Ra} = \frac{g \beta_T \Theta L^3}{\nu \chi}, \quad \text{Pr} = \frac{\nu}{\chi}, \quad \text{Sc} = \frac{\nu}{D}, \quad \text{Sc}_s = \frac{\nu}{D_s}, \quad k_+ = \frac{k_A L}{\nu}, \quad k_- = \frac{k_D L^2}{\nu}. \quad (3.8)$$

Ra , Pr , Sc – числа Рэлея, Прандтля и Шмидта; Sc_s – поверхностное число Шмидта, l и h – безразмерные толщина и высота капилляра, Θ – перепад температуры вдоль вертикальной оси. Коэффициенты k_+ и k_- имеют смысл безразмерных коэффициентов адсорбции и десорбции. Единицы измерения расстояния, объемной и поверхностной концентрации, времени, скорости, температуры и давления выбираются следующим образом: L , $\Theta \beta_T / \beta_C$, $\Theta \beta_T L / \beta_C$, L^2 / ν , χ / L , Θ , $\rho \nu \chi / L^2$.

Задача решалась в терминах функции тока ψ , которая связана с компонентами скорости стандартными соотношениями:

$$v_x = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v_y = -\frac{\partial \psi}{\partial x}.$$

Далее вводилась дополнительная скалярная функция, равная с точностью до знака завихренности:

$$\varphi = \Delta \psi, \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}.$$

Уравнения в терминах указанных переменных будут иметь следующий вид:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} - \text{Ra} \left(\frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial C}{\partial x} \right), \quad (3.9)$$

$$\text{Pr} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}, \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial y} \right) = \frac{1}{\text{Sc}} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right), \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} - \frac{1}{\text{Pr}} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \Gamma \right) = \frac{1}{\text{Sc}_s} \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial y^2} + k_+ C - k_- \Gamma. \quad (3.12)$$

Поверхностное натяжение зависит от температуры линейно: $\sigma = \sigma_0 - \sigma_T T$ (σ_0 – поверхностное натяжение в отсутствие неоднородностей температуры, σ_T – коэффициент, описывающий связь поверхностного натяжения с температурой). В итоге граничные условия для касательных напряжений на вертикальных свободных границах задавались следующим образом:

$$x = 0: \quad \eta \frac{\partial v_y}{\partial x} = \sigma_T \frac{\partial T}{\partial y},$$

$$x = L: \quad \eta \frac{\partial v_y}{\partial x} = -\sigma_T \frac{\partial T}{\partial y}.$$

где η – динамическая вязкость. После обезразмеривания с учетом определения φ они представляются в виде:

$$x = 0: \quad \varphi = -\text{Ma} \frac{\partial T}{\partial y}, \quad (3.13)$$

$$x = l: \quad \varphi = \text{Ma} \frac{\partial T}{\partial y}. \quad (3.14)$$

Здесь $\text{Ma} = \sigma_T \Theta L / \eta \chi$ – число Марангони.

3.1.2 Аналитическое решение

На бесконечно больших временах рассматриваемая система должна достигнуть стационарного состояния, которое характеризуется устойчивым

конвективным течением, распределением температуры и концентрации. Пусть в начальный момент времени распределение температуры на вертикальных стенках является линейным, причем градиент температуры направлен вверх. Тогда, вследствие процессов теплообмена внутри капилляра, на больших временах поле температуры может быть представлено в виде:

$$T(x, y) = \frac{y}{h} + \theta(x, y).$$

Здесь θ – отклонение температуры от линейного профиля, h – безразмерная высота капилляра. Если полагать течение ползущим, то систему уравнений (3.9) – (3.10) можно рассматривать в линейном приближении, и оно будет иметь аналитическое решение. Так, уравнение Навье – Стокса преобразуется к однородному бигармоническому уравнению [140]:

$$\Delta\Delta\psi = 0, \quad (3.15)$$

а уравнение теплопроводности – к уравнению Пуассона с заданной правой частью:

$$\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\theta}{\partial y^2} = -\frac{1}{h} \frac{\partial\psi}{\partial x}. \quad (3.16)$$

При этом граничными условиями для данной задачи будут:

$$\begin{aligned} \psi(x, 0) = \psi(x, h) = \psi(0, y) = \psi(1, y) = 0, \\ \left. \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \right|_{x=0} = -\text{Ma} \cdot A, \quad \left. \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \right|_{x=1} = \text{Ma} \cdot A, \\ \theta(x, 0) = \theta(x, h) = \theta(0, y) = \theta(1, y) = 0. \end{aligned}$$

Здесь $A = 1/h$ – безразмерный градиент температуры.

Решение сформулированной линеаризованной краевой задачи можно найти в виде рядов [140, 141]:

$$\begin{aligned} \psi &= \sum_{n=0}^{\infty} (c_1 \text{sh} \lambda_n x + c_2 x \text{sh} \lambda_n x + c_3 x \text{ch} \lambda_n x) \sin \lambda_n y, \\ \theta &= \sum_{n=0}^{\infty} (c_4 \text{sh} \lambda_n x + c_5 \text{ch} \lambda_n x) \sin \lambda_n y, \end{aligned}$$

$$\lambda_n = \frac{\pi(2n+1)}{h},$$

$$c_1 = \frac{2\text{Ma}A}{h\lambda_n^2} \left(1 - (1 + \text{ch}\lambda_n) \frac{\text{ch}\lambda_n}{\text{sh}^2\lambda_n} \right), \quad c_2 = -\frac{2\text{Ma}A}{h\lambda_n^2},$$

$$c_3 = \frac{2\text{Ma}A}{h\lambda_n^2} \frac{1 + \text{ch}\lambda_n}{\text{sh}\lambda_n}, \quad c_4 = \frac{\text{Ma}A}{2h^2\lambda_n^4} \frac{\text{sh}\lambda_n - 2\lambda_n}{1 - \text{ch}\lambda_n},$$

$$c_5 = \frac{\text{Ma}A}{2h^2\lambda_n^3} \frac{\lambda_n - \text{sh}\lambda_n - \text{cth}\lambda_n(1 - \text{ch}\lambda_n)}{1 - \text{ch}\lambda_n}.$$

Обсуждение полей функции тока и температуры, а также профилей скорости, полученных аналитически, и их сравнение с результатами численного моделирования представлены в разделе 3.1.4.

3.1.3 Метод численного решения

В общей постановке система нелинейных уравнений (3.9) – (3.12) с граничными условиями (3.5) – (3.7), (3.13) – (3.14) требует решения с использованием численных методов. Численное моделирование проводилось на суперкомпьютере “ПГУ – Тесла” Научно-образовательного центра Пермского государственного национального исследовательского университета “Параллельные и распределенные вычисления”. Численный код был написан на языке Fortran-90. Для решения использовался метод конечных разностей в комбинации с явной схемой [131], при этом уравнение Пуассона решалось методом простых итераций [133]. При аппроксимации производных по времени и координатам использовались, соответственно, односторонние и центральные разности [132]. Шаг по времени выбирался исходя из соображений устойчивости численной процедуры. В ходе решения использовался метод установления.

Следует отметить, что для повышения устойчивости счета в граничных условиях на потоки вещества, а также в нелинейном слагаемом уравнения

для поверхностной концентрации производные функции тока и концентрации вычислялись при помощи пятиточечной аппроксимации:

$$\frac{\partial f}{\partial n} = \mp \frac{25f_0 - 48f_{\pm 1} + 36f_{\pm 2} - 16f_{\pm 3} + 3f_{\pm 4}}{12\Delta h}.$$

Здесь нижний индекс отвечает отступу от узла, в котором определяется производная. Производная берется по выделенному направлению n , Δh – шаг сетки вдоль указанного направления.

Начальными условиями служили невозмущенные поля функции тока ($\psi = 0$), завихренности ($\varphi = 0$), объемной ($C = 0.05$) и поверхностной концентрации ($\Gamma = 0$). В поле температуры внутри капилляра в начальный момент времени также отсутствовали возмущения ($T = 0$), однако на поверхности задавалось ее линейное распределение так, чтобы градиент был направлен вверх. Для набора безразмерных параметров выбирались следующие значения (см. 3.2.2): $Ra = 0.005$, $Pr = 0.05$, $Sc = 300$, $Sc_S = 200$, $k_+ = 0.0001$, $k_- = 0.054$. Все расчеты продолжались до момента времени 2000, что примерно соответствует 1.5 – 2 ч.

Для тестирования устойчивости численной схемы было произведено сравнение относительных ошибок в отношении общей кинетической энергии ΔE и максимума функции тока $\Delta\psi_{max}$ для разного значения вычислительных узлов вдоль осей x и y (N_1 и N_2 , соответственно) при этом высота полости бралась много больше толщины: $h = 40$, $l = 1$. Результаты сходимости представлены в таблице 3.1 и рис. 3.2.

Таблица 3.1. Сходимость метода

	N_1	N_2	$N_1 N_2$	$\Delta E, \%$	$\Delta\psi_{max}, \%$
1	11	161	1771		
2	13	177	2301	$\Delta E_{12} = 11.92$	$\Delta\psi_{12} = 4.293$
3	15	199	2985	$\Delta E_{23} = 8.153$	$\Delta\psi_{23} = 2.618$
4	17	229	3893	$\Delta E_{34} = 5.946$	$\Delta\psi_{34} = 1.023$
5	19	265	5035	$\Delta E_{45} = 4.538$	$\Delta\psi_{45} = 0.320$
6	21	311	6531	$\Delta E_{56} = 3.578$	$\Delta\psi_{56} = 0.221$
7	23	369	8487	$\Delta E_{67} = 2.893$	$\Delta\psi_{67} = 0.202$

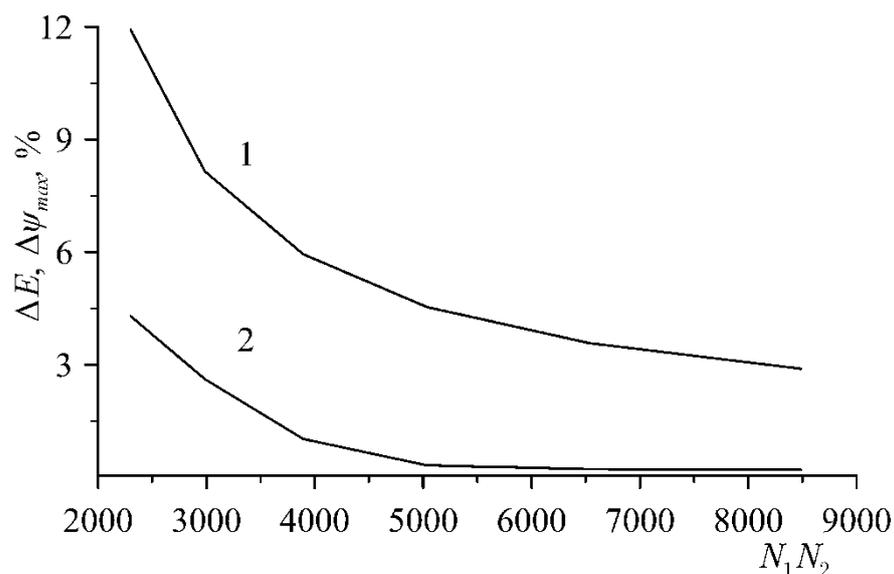


Рис. 3.2 Относительная разность полной кинетической энергии (% , кривая 1) и максимума функции тока (% , кривая 2) в зависимости от числа узлов сетки.

Исходя из приведенного анализа устойчивости численной схемы, в расчетах использовалась рабочая сетка 21:311.

3.1.4 Результаты аналитического решения и численного моделирования

Как решение в виде рядов, так и результаты численного моделирования показывают, что в данной постановке в капилляре возникает медленное стационарное двухвихревое течение, которое может переносить примесь, вследствие чего в капилляре начинается разделение изначально однородной смеси на компоненты. На вертикальных стенках капилляра генерируется опускное течение, из-за этого в центре формируется подъемное движение (рис. 3.3, 3.4). При умеренных числах Марангони размерные значения скорости переноса вблизи границы могут достигать величины ~ 0.01 мм/с. Профиль скорости вдоль вертикальной границы имеет практически постоянное значение, что говорит о равномерности продольного переноса компонентов. При этом вблизи торцов они испытывают сильное ускорение.

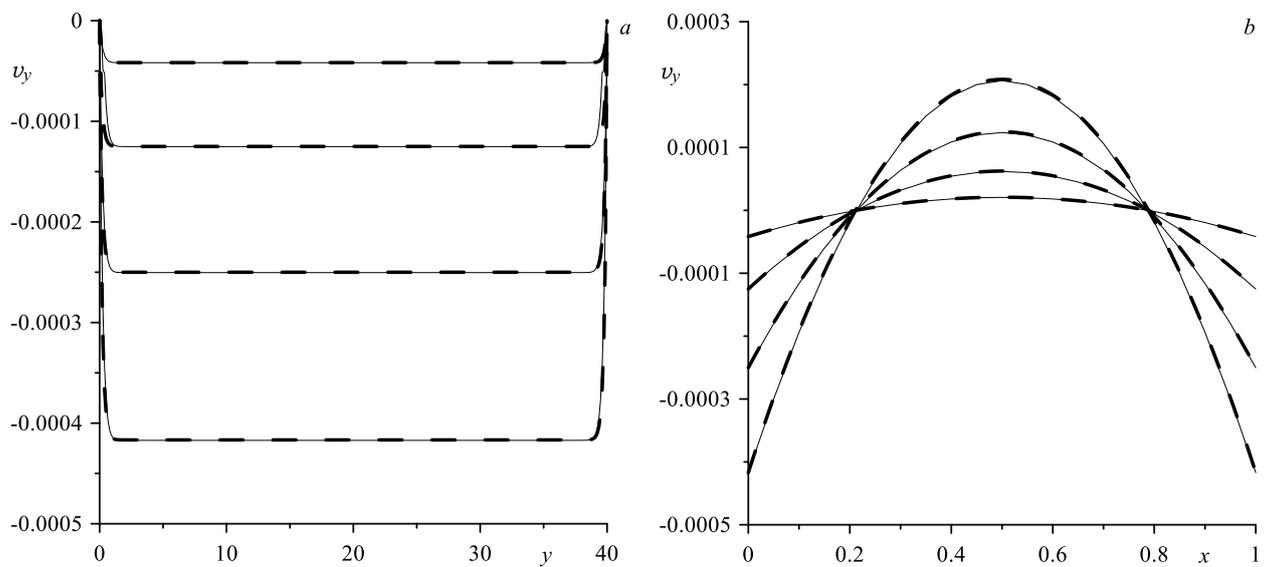


Рис. 3.3. Профили вертикальной компоненты скорости вдоль вертикальной стенки капилляра (a) и вдоль поперечной координаты на высоте $y = h/6$ (b). Сплошные линии – результаты численного моделирования, штриховые линии – аналитическое решение. 1 – $Ma = 0.01$, 2 – $Ma = 0.03$, 3 – $Ma = 0.06$, 4 – $Ma = 0.1$

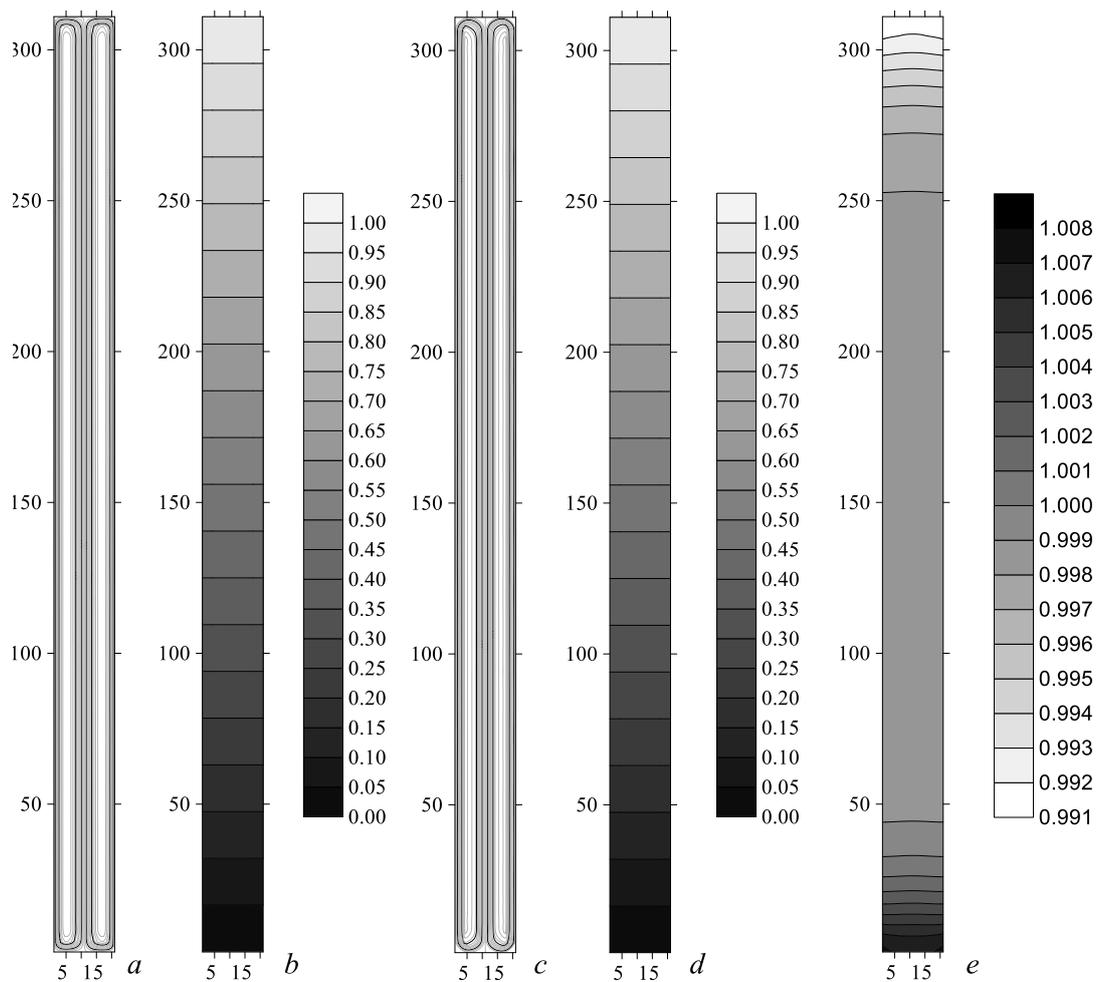


Рис. 3.4 Поля функции тока (a, c), температуры (b, d) и концентрации (e) при $Ma = 0.06$: a, c – аналитическое решение, b, d, e – численное моделирование

Конвективные процессы в капилляре происходят достаточно быстро. Численное моделирование показало, что достаточно 0.5 безразмерных временных единиц для того, чтобы поля функции тока и температуры вышли на стационар (рис. 3.5). Таким образом, аналитическое решение, полученное в стационарном приближении, можно считать справедливым и можно проводить его сравнение с численными результатами в момент времени $t = 2000$. Отклонения поля температуры от линейного профиля при этом практически не вносят вклада в конечное распределение.

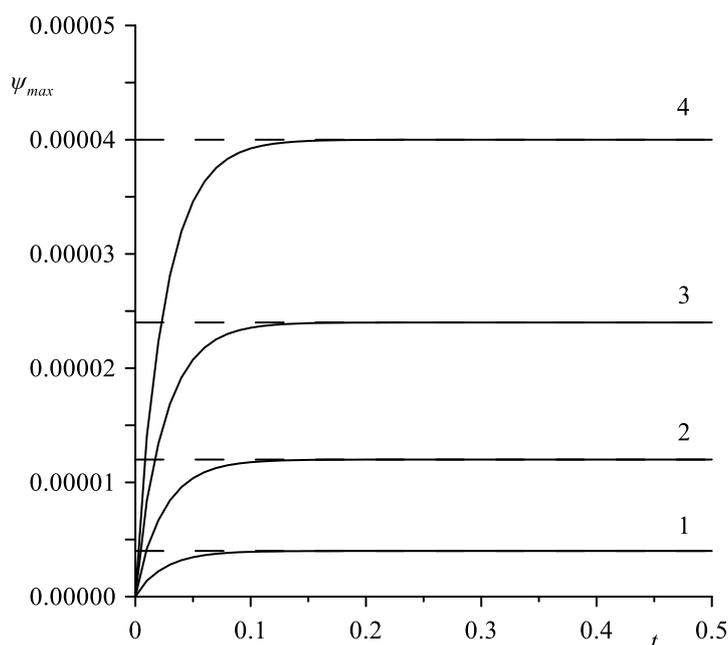


Рис. 3.5. Максимальное значение функции тока в зависимости от времени. Сплошные линии – результаты численного моделирования, штриховые линии – аналитические значения на бесконечно-больших временах. 1 – Ма = 0.01, 2 – Ма = 0.03, 3 – Ма = 0.06, 4 – Ма = 0.1

Численные расчеты показывают, что в процессе перераспределения компонентов смеси между торцами капилляра возникает разность концентраций, которая достигает значений сравнимых с экспериментом. Более подробно механизм разделения описан в разделе 3.2.3 с учетом действия концентрационно-капиллярного эффекта.

3.2 Термокапиллярная конвекция в вертикальном канале при наличии концентрационно-капиллярного механизма

3.2.1 Учет зависимости коэффициента поверхностного натяжения от концентрации

Помимо термокапиллярного механизма, в задачах со свободной поверхностью может присутствовать и концентрационно-капиллярный механизм, который способен оказывать существенное влияние на исследуемую систему. При аналогичной предыдущему случаю постановке задачи такой механизм можно учесть, введя концентрационную неоднородность поверхностного натяжения: $\sigma = \sigma_0 - \sigma_T T - \sigma_\Gamma \Gamma$ (σ_Γ – коэффициент, описывающий связь поверхностного натяжения с концентрацией).

Граничные условия для касательных напряжений на вертикальных свободных границах в таком случае будут иметь более общий вид:

$$\begin{aligned}x = 0: \quad \eta \frac{\partial v_y}{\partial x} &= \sigma_T \frac{\partial T}{\partial y} + \sigma_\Gamma \frac{\partial \Gamma}{\partial y}, \\x = L: \quad \eta \frac{\partial v_y}{\partial x} &= -\sigma_T \frac{\partial T}{\partial y} - \sigma_\Gamma \frac{\partial \Gamma}{\partial y}.\end{aligned}$$

После обезразмеривания появляется дополнительный управляющий параметр:

$$\begin{aligned}x = 0: \quad \varphi &= -\text{Ma}_T \frac{\partial T}{\partial y} - \text{Ma}_\Gamma \frac{\partial \Gamma}{\partial y}, \\x = l: \quad \varphi &= \text{Ma}_T \frac{\partial T}{\partial y} + \text{Ma}_\Gamma \frac{\partial \Gamma}{\partial y}, \\ \text{Ma}_T &= \sigma_T \frac{\Theta L}{\eta \chi}, \quad \text{Ma}_\Gamma = \sigma_\Gamma \frac{\Theta \beta_T L^2}{\beta_c \eta \chi}.\end{aligned} \tag{3.17}$$

Ma_T и Ma_Γ – температурное и концентрационное числа Марангони.

Система уравнений решалась численно. Описание численной процедуры было приведено в 3.1.3. В расчетах использовалась рабочая сетка 21:311, при этом высота полости бралась много больше толщины: $h = 30$.

3.2.2 Безразмерные параметры задачи

Для оценки ключевых безразмерных параметров (3.8), (3.17) использовались значения коэффициентов, соответствующие реальным сплавам металлов: $\beta_T = 3 \cdot 10^{-4}$ 1/К, $\Theta = 1$ К, $\nu = 3 \cdot 10^{-7}$ м²/с, $\chi = 2 \cdot 10^{-5}$ м²/с, $L = 10^{-3}$ м, $\eta = 2 \cdot 10^{-3}$ Па·с [142,143]. В отношении приведенных величин следует отметить, что температуропроводность металлов в расплавленном состоянии достаточно велика, а толщина капилляра, наоборот, мала, поэтому, при подстановке получается число Рэлея $Ra = 0.5$, позволяющее оценить его значение сверху. Коэффициент зависимости поверхностного натяжения от температуры для различных расплавов металлов можно найти в литературе [106,107,144]. В частности, для олова $\sigma_T = 2 \cdot 10^{-3}$ Н/(мК). Поэтому тепловое число Марангони получается небольшим: $Ma_T = 5$. Коэффициент зависимости поверхностного натяжения от концентрации для известных сурфактантов, обычно, на три порядка больше по величине, чем коэффициент зависимости поверхностного натяжения от температуры. Однако при оценке концентрационного числа Марангони увеличение σ_C по отношению к σ_T на три порядка компенсируется домножением на L . Поэтому Ma_T и Ma_C должны быть одного порядка.

Вопрос о величине реальных параметров адсорбции–десорбции для расплавов металлов является более сложным, и до сих пор остается открытым. Несмотря на тесное сотрудничество автора диссертации с разными группами экспериментаторов, достоверные данные по количественным значениям этих параметров в настоящее время отсутствуют. Численное моделирование показывает, что, в первую очередь, на форму

концентрационной вилки сильно влияет отношение коэффициентов адсорбции и десорбции вследствие того, что в рассматриваемой задаче должен соблюдаться определенный баланс между этими процессами. В результате значения этих коэффициентов подбирались из условия соответствия формы концентрационной вилки и степени разделения, которые наблюдались в эксперименте. Любопытно, что концентрационные вилки, похожие по форме на экспериментальные, дают как раз нужный эффект разделения на реальных временах.

В конечном итоге расчеты проводились при следующих фиксированных значениях параметров: $Ra = 0.005$, $Pr = 0.05$, $Sc = 300$, $Sc_S = 200$, $k_+ = 0.0001$, $k_- = 0.054$.

3.2.3 Численные результаты

Результаты численного моделирования показали, что в процессе разделения смеси на компоненты в объеме устанавливается достаточно сильный перепад концентрации (~20 %), что значительно больше, чем в первых расчетах [114] и гораздо ближе к результатам экспериментов [111,113]. Характерные профили концентрации, функции тока и температуры представлены на рис. 3.6. Видно, что конвективный перенос охватывает весь капилляр, однако, в отличие от эксперимента, наиболее сильные неоднородности концентрации формируются только в нижней части капилляра. Данный эффект объясняется тем, что опускное течение на поверхности скапливает примесь в самой нижней части капилляра, при этом именно распределение поверхностной концентрации устанавливает форму профиля в объеме. При сравнении профилей поверхностной и объемной концентраций (рис. 3.7, 3.8) можно увидеть их подобие. Тем не менее, стоит отметить, что параметры, характеризующие поверхностные эффекты, в

данных расчетах скорее всего не полностью соответствуют эксперименту и подлежат дальнейшему уточнению.

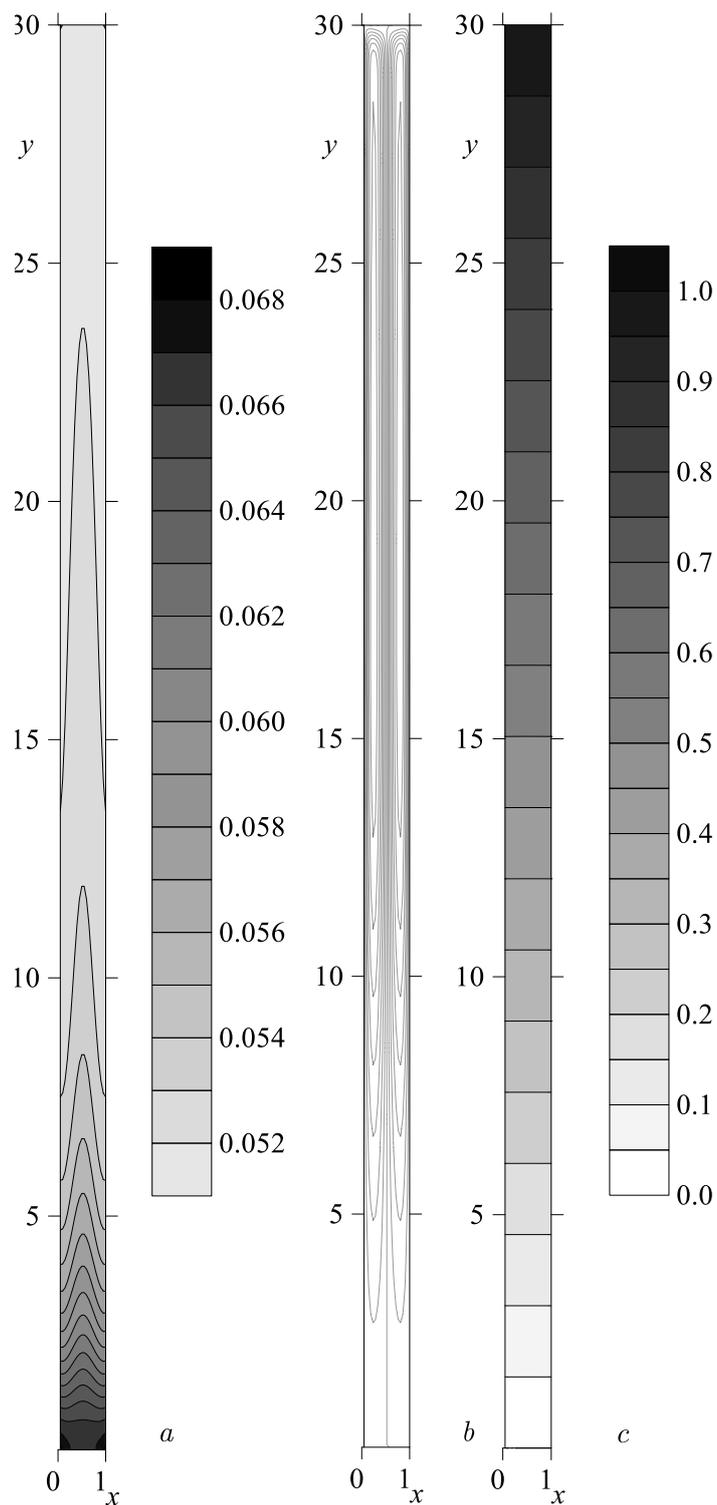


Рис. 3.6. Поля концентрации (*a*), функции тока (*b*) и температуры (*c*) при $Ma_T = 8$, и $Ma_T = 7$, $t = 800$

На рис. 3.7, 3.8 и 3.9 продемонстрирована роль отдельных механизмов (термо- и концентрационно-капиллярного) в формировании профилей скорости, поверхностной и объемной концентраций. Так, рост теплового числа Марангони (усиление термокапиллярного механизма) закономерно приводит к увеличению перепада концентрации. В то время как увеличение концентрационного числа Марангони, отвечающего за концентрационно-капиллярный механизм, дает обратный результат.

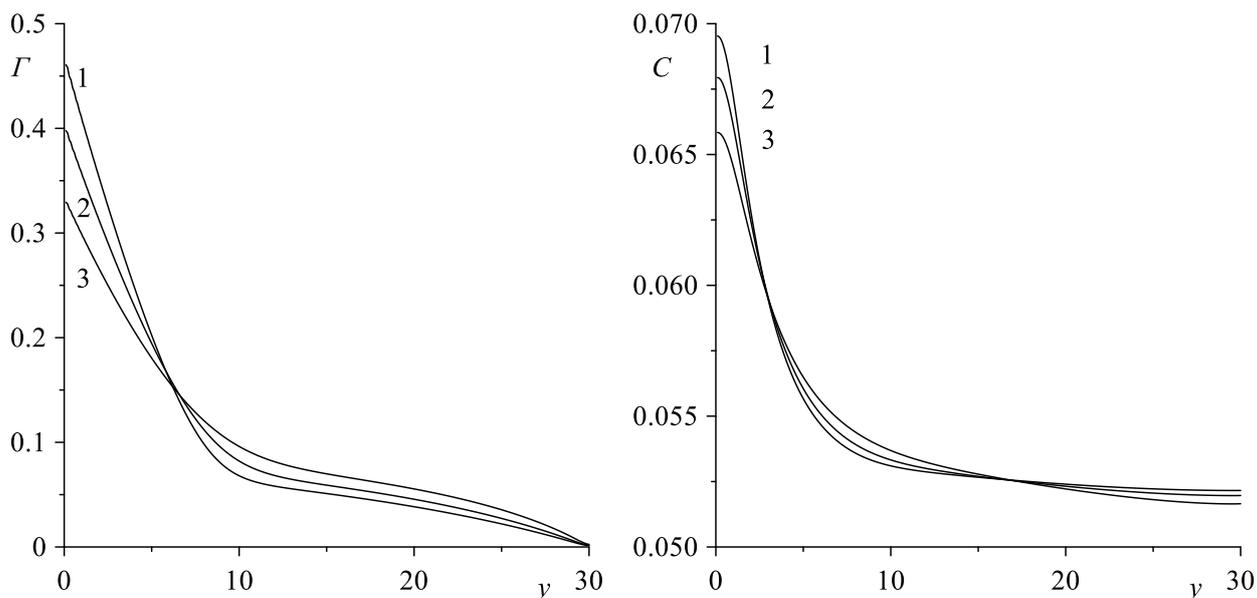


Рис. 3.7. Профили поверхностной (слева) и объемной (справа) концентрации при $Ma_T = 5$. 1 – $Ma_T = 10$, 2 – $Ma_T = 8$, 3 – $Ma_T = 6$

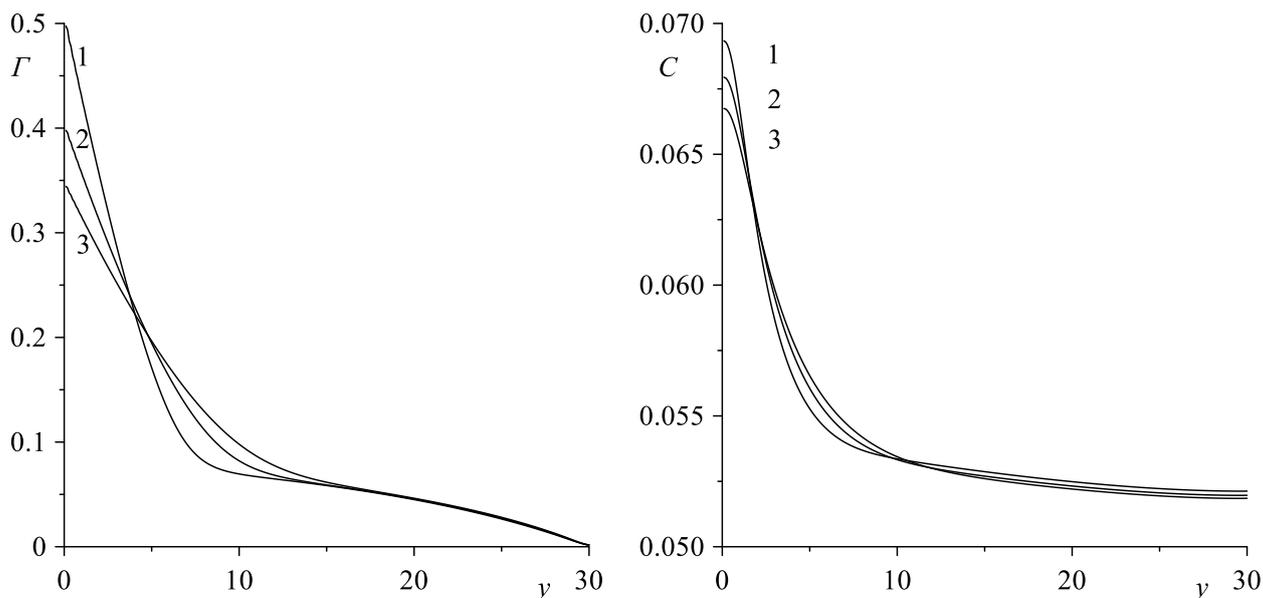


Рис. 3.8. Профили поверхностной (слева) и объемной (справа) концентрации при $Ma_T = 8$. 1 – $Ma_T = 3$, 2 – $Ma_T = 5$, 3 – $Ma_T = 7$

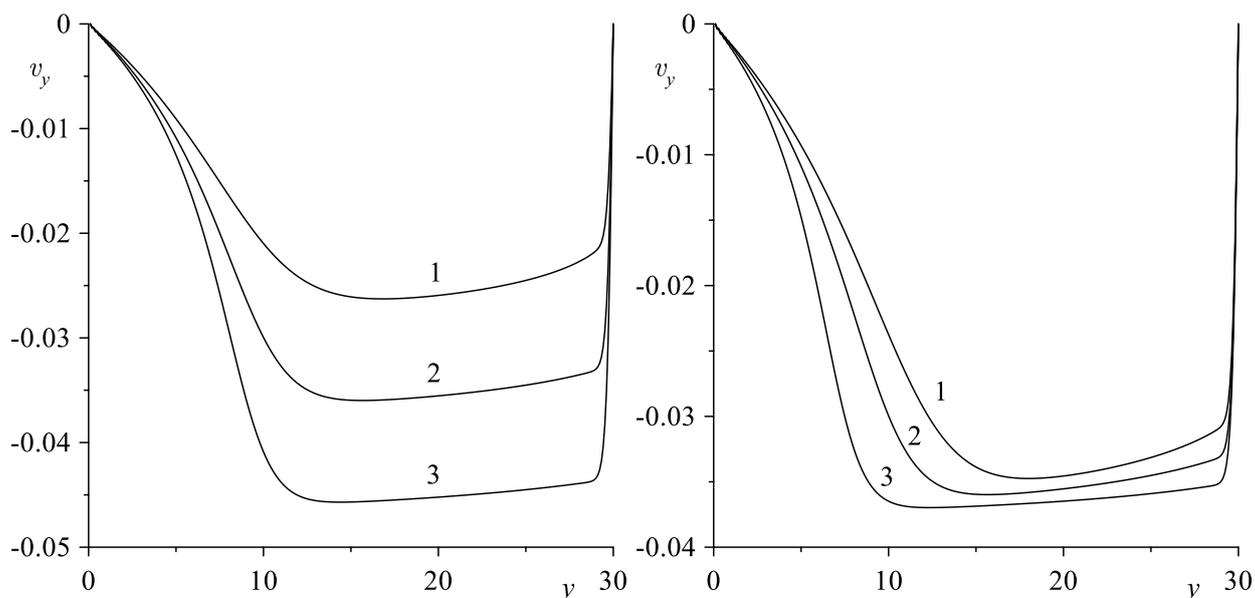


Рис. 3.9. Вертикальная компонента скорости на поверхности капилляра. Слева: $Ma_T = 5$. 1 – $Ma_T = 6$, 2 – $Ma_T = 8$, 3 – $Ma_T = 10$. Справа: $Ma_T = 8$. 1 – $Ma_T = 7$, 2 – $Ma_T = 5$, 3 – $Ma_T = 3$

Аналогичное поведение проявляется и на профилях скорости. Однако, изменение теплового числа Марангони вносит гораздо большие изменения в продольное распределение скорости, чем изменение концентрационного.

Данный эффект подтверждает один из выводов работы [114], а именно, что из-за термокапиллярного механизма генерируется опускное течение на свободной поверхности, в то время, как концентрационно-капиллярный механизм является скорее вторичным, однако, действуя в противоположном направлении, также вносит существенный вклад и стабилизирует систему.

Эволюция разделения смесей, т.е. поведение системы с течением времени, показана на рис. 3.10. Графики во многом похожи на зависимости, представленные в [111]. При достижении момента времени ~ 1 ч в размерных единицах система практически полностью выходит на стационарный режим. При этом окончательный конвективный перенос (профиль функции тока), а также профиль поверхностной концентрации формируется гораздо быстрее, чем профиль объемной концентрации.

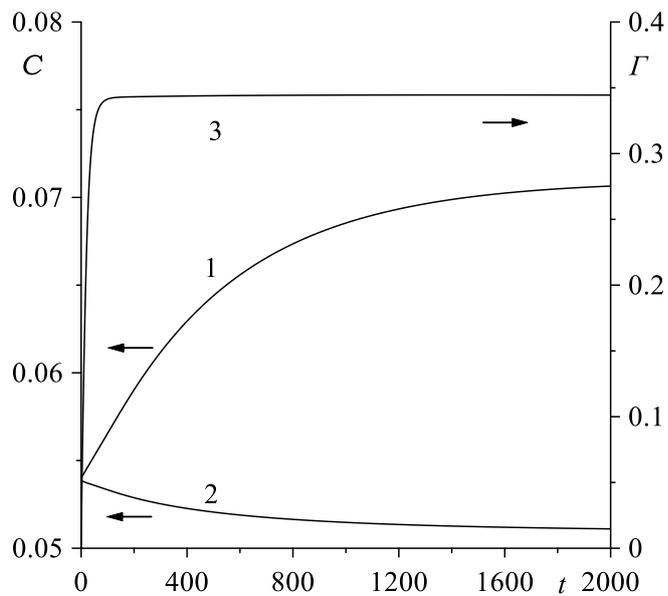


Рис. 3.10. Максимальное (1) и минимальное (2) значение поля объемной концентрации и максимальное (3) значение профиля поверхностной концентрации в зависимости от времени при $Ma_T = 8$, $Ma_T = 7$

Форма концентрационной вилки на рис. 3.10, а именно, отсутствие симметрии между верхней и нижней ветками, величина разделения и время выхода на стационар хорошо согласуются с экспериментом.

3.3 Вертикальный цилиндрический канал с учетом концентрационно-капиллярного механизма

3.3.1 Система уравнений межфазной конвекции в цилиндрических координатах

В экспериментах всегда использовались капилляры цилиндрической формы. Поэтому для количественного согласования результатов моделирование процессов необходимо проводить для цилиндрической геометрии (рис. 3.11).

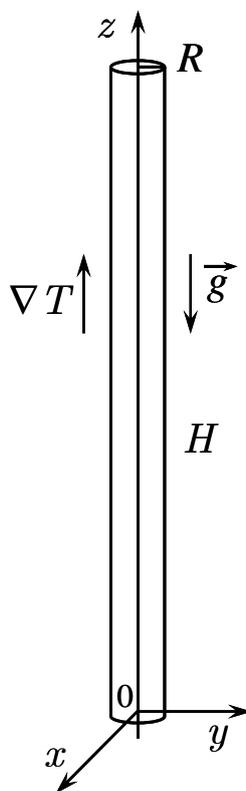


Рис. 3.11. Цилиндрический капилляр. Система координат

Процесс разделения, также как и в предыдущем случае, будет описываться системой уравнений (3.1) – (3.4), для которой будут выполняться следующие граничные условия:

$$z = 0, h: \quad \mathbf{v} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial \Gamma}{\partial z} = 0.$$

$$r = R: \quad -D \frac{\partial C}{\partial r} = k_A C - k_D \Gamma.$$

За единицы измерения расстояния, времени, скорости, температуры, давления, объемной и поверхностной концентрации принимаются следующие величины: R , R^2/ν , χ/R , Θ , $\rho\chi\nu/R^2$, C_0 , RC_0 . Здесь R – радиус канала, C_0 – начальная объемная концентрация. После процедуры обезразмеривания уравнения и граничные условия записываются в следующей форме:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}} (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \Delta \mathbf{v} + (\text{Ra}_T T - \text{Ra}_C C) \boldsymbol{\gamma}, \quad \text{div} \mathbf{v} = 0, \quad (3.18)$$

$$\text{Pr} \frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) T = \Delta T, \quad \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}} (\mathbf{v} \nabla) C = \frac{1}{\text{Sc}} \Delta C, \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}} \nabla^s (\mathbf{v} \Gamma) = \frac{1}{\text{Sc}_s} \Delta^s \Gamma + k_+ C - k_- \Gamma, \quad (3.20)$$

$$r = 1: \quad -\frac{1}{\text{Sc}} \frac{\partial C}{\partial r} = k_+ C - k_- \Gamma, \quad (3.21)$$

$$z = 0, H: \quad \mathbf{v} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial \Gamma}{\partial z} = 0. \quad (3.22)$$

Для данных уравнений имеется следующий набор управляющих параметров:

$$\text{Ra}_T = \frac{g \beta_T \Theta R^3}{\nu \chi}, \quad \text{Ra}_C = \frac{g \beta_C C_0 R^3}{\nu \chi}, \quad \text{Pr} = \frac{\nu}{\chi}, \quad \text{Sc} = \frac{\nu}{D}, \quad \text{Sc}_s = \frac{\nu}{D_s},$$

$$k_+ = \frac{k_A R}{\nu}, \quad k_- = \frac{k_D R^2}{\nu}.$$

Здесь Ra_T , Pr , Sc – числа Рэлея, Прандтля и Шмидта, Sc_s – поверхностное число Шмидта, H – безразмерная высота капилляра в граничном условии. Параметры k_+ , k_- имеют смысл безразмерных коэффициентов адсорбции и десорбции, Ra_C – концентрационный аналог числа Рэлея.

Задача решалась в осесимметричной постановке ($\partial/\partial \vartheta = 0$, где ϑ – угловая переменная в цилиндрических координатах). В дополнение

предполагалось, что $v_g = 0$, поэтому описание течения производилось в терминах функции тока ψ и вихря φ . Функция тока и вихрь скорости, соответственно, в цилиндрических координатах вводятся стандартным образом:

$$v_r = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad v_z = -\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r},$$

$$\varphi = \frac{\partial v_r}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}.$$

В терминах функции тока и вихря уравнения переноса тепла и Навье – Стокса, а также уравнения для объемной и поверхностной концентраций имеют окончательный вид:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{1}{r \text{Pr}} \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial \varphi}{\partial r} - \frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial \varphi}{\partial z} - \frac{\varphi}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) = \Delta \varphi - \frac{1}{r^3} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - \text{Ra}_r \frac{\partial T}{\partial r} + \text{Ra}_c \frac{\partial C}{\partial r}, \quad (3.23)$$

$$\text{Pr} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial T}{\partial r} - \frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial z} = \Delta T, \quad (3.24)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}} \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial C}{\partial r} - \frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial C}{\partial z} \right) = \frac{1}{\text{Sc}} \Delta C, \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} - \frac{1}{r \text{Pr}} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r} \Gamma \right) = \frac{1}{\text{Sc}_s} \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial z^2} + k_+ C - k_- \Gamma, \quad (3.26)$$

где оператор Лапласа в цилиндрической системе координат с учетом осевой симметрии записывается в форме:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

На оси капилляра для осесимметричной задачи были приняты стандартные в цилиндрических координатах граничные условия

$$r = 0: \quad \psi = \frac{\partial \psi}{\partial r} = \varphi = 0. \quad (3.27)$$

При учете на свободной боковой границе термо- и концентрационно-капиллярного механизмов зависимость поверхностного натяжения от температуры и поверхностной концентрации рассматривалась в линейном приближении:

$$\sigma = \sigma_0 - \sigma_T T - \sigma_\Gamma \Gamma,$$

где σ_T и σ_Γ – соответственно, коэффициенты, описывающие зависимость поверхностного натяжения от температуры и концентрации. Таким образом, уравнение баланса касательных напряжений дает на границе стандартное граничное условие:

$$r = R: \quad \eta \frac{\partial v_z}{\partial r} = -\sigma_T \frac{\partial T}{\partial z} - \sigma_\Gamma \frac{\partial \Gamma}{\partial z}.$$

По-прежнему η – динамическая вязкость. После обезразмеривания это граничное условие приводится к виду:

$$r = 1: \quad \varphi = \text{Ma}_T \frac{\partial T}{\partial z} + \text{Ma}_\Gamma \frac{\partial \Gamma}{\partial z}, \quad (3.28)$$

где Ma_T и Ma_Γ – температурное и концентрационное числа Марангони:

$$\text{Ma}_T = \sigma_T \frac{\Theta R}{\eta \chi}, \quad \text{Ma}_\Gamma = \sigma_\Gamma \frac{C_0 R^2}{\eta \chi}.$$

Таким образом, имеем десять безразмерных параметров в рассматриваемой краевой задаче, включая дополнительно безразмерную длину капилляра H .

3.3.2 Специфика численного решения

Система дифференциальных уравнений (3.23) – (3.26) совместно с краевыми условиями (3.21), (3.22), (3.27), (3.28) и (19) решалась методом конечных разностей. Алгоритм был разработан в соответствии с явной схемой решения уравнений в частных производных и основан на двухполевой методике [131]. При решении уравнения Пуассона для функции тока использовался метод последовательной верхней релаксации [133]. В ходе расчетов по времени применялась процедура установления. Компьютерный код был реализован на языке программирования Fortran-90. Задача решалась на суперкомпьютере “ПГУ–Кеплер” Научно-образовательного центра Пермского государственного национального

исследовательского университета “Параллельные и распределенные вычисления”. При проведении численного моделирования осуществлялась периодическая запись искомым полей концентрации, завихренности, функции тока и температуры на диск, что позволяло анализировать структуру полей в каждый момент времени.

Для повышения точности и, как следствие, устойчивости счета в граничном условии на поток вещества, а также в нелинейном слагаемом уравнения для поверхностной концентрации производные полей функции тока и концентрации находились при помощи многоточечных аппроксимационных формул. Начальными условиями служили невозмущенные поля функции тока ($\psi = 0$), завихренности ($\varphi = 0$), объемной ($C = 0.05$) и поверхностной концентрации ($\Gamma = 4 \cdot 10^{-3}$). Возмущения в поле температуры внутри капилляра в начальный момент времени также отсутствовали ($T = 0$), однако на поверхности задавалось ее линейное распределение так, чтобы градиент был направлен вверх и соответствовал нагреву сверху.

С целью контроля сходимости результатов были выполнены расчеты на разных сетках. В табл. 3.2 приведены значения относительной погрешности расчета (в процентах) в зависимости от общего числа узлов на этапе установления: показаны изменения величин при переходе с предыдущего уровня точности на текущий.

Представленные табличные данные, которые визуализированы графически на рис. 3.12, демонстрируют удовлетворительную сходимость как по максимуму функции тока (локальной характеристике), так и суммарной кинетической энергии течения.

В расчетах по координатам r и z использовалась рабочая сетка 21:311, при этом высота канала бралась много больше толщины и варьировалась в пределах $H = 30 \div 55$.

Таблица 3.2. Оценка сходимости метода

	N_1	N_2	$\Delta E, \%$	$\Delta\psi_{max}, \%$
1	7	121	-	-
2	9	141	$\Delta E_{12} = 23.18$	$\Delta\psi_{12} = 3.764$
3	11	161	$\Delta E_{23} = 14.66$	$\Delta\psi_{23} = 1.084$
4	13	177	$\Delta E_{34} = 10.14$	$\Delta\psi_{34} = 0.574$
5	15	199	$\Delta E_{45} = 7.44$	$\Delta\psi_{45} = 0.399$
6	17	299	$\Delta E_{56} = 5.70$	$\Delta\psi_{56} = 0.398$
7	19	265	$\Delta E_{67} = 4.51$	$\Delta\psi_{67} = 0.323$
8	21	311	$\Delta E_{78} = 3.66$	$\Delta\psi_{78} = 0.313$
9	23	369	$\Delta E_{89} = 3.03$	$\Delta\psi_{89} = 0.244$

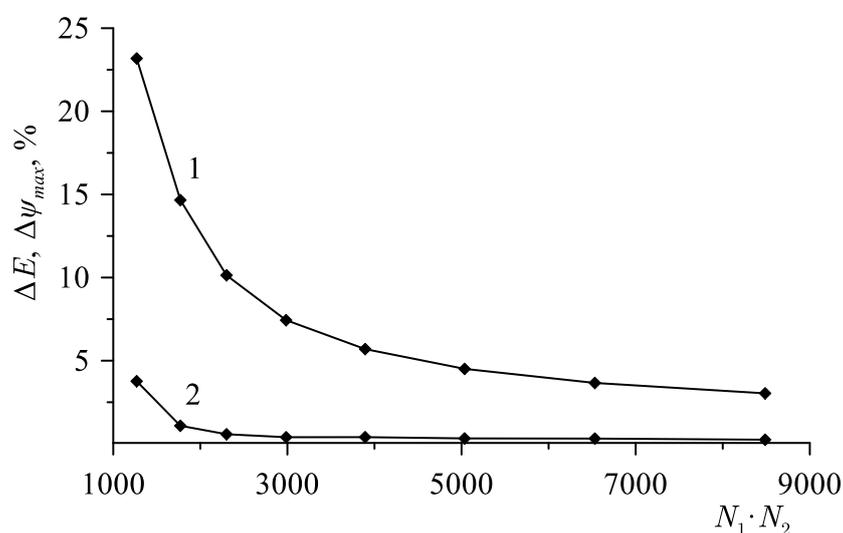


Рис. 3.12. Относительная ошибка для кинетической энергии (% , кривая 1) и максимума функции тока (% , кривая 2) в зависимости от общего числа узлов сетки

3.3.3 Обсуждение результатов

Отличительной особенностью рассматриваемой геометрии является топологическая специфика задачи, связанная с симметрией в цилиндрических координатах. Всплывающий вдоль оси симметрии капилляра поток жидкости растекается теперь в разные стороны по большей площади, нежели в случае канала с плоскими границами при двумерной постановке [12,114]. Таким образом, интуитивно понятно, что для

обеспечения того же эффекта, что и в плоской задаче должны требоваться заметно меньшие значения теплового числа Марангони, что подтверждается прямым численным моделированием и сравнением с [12,114].

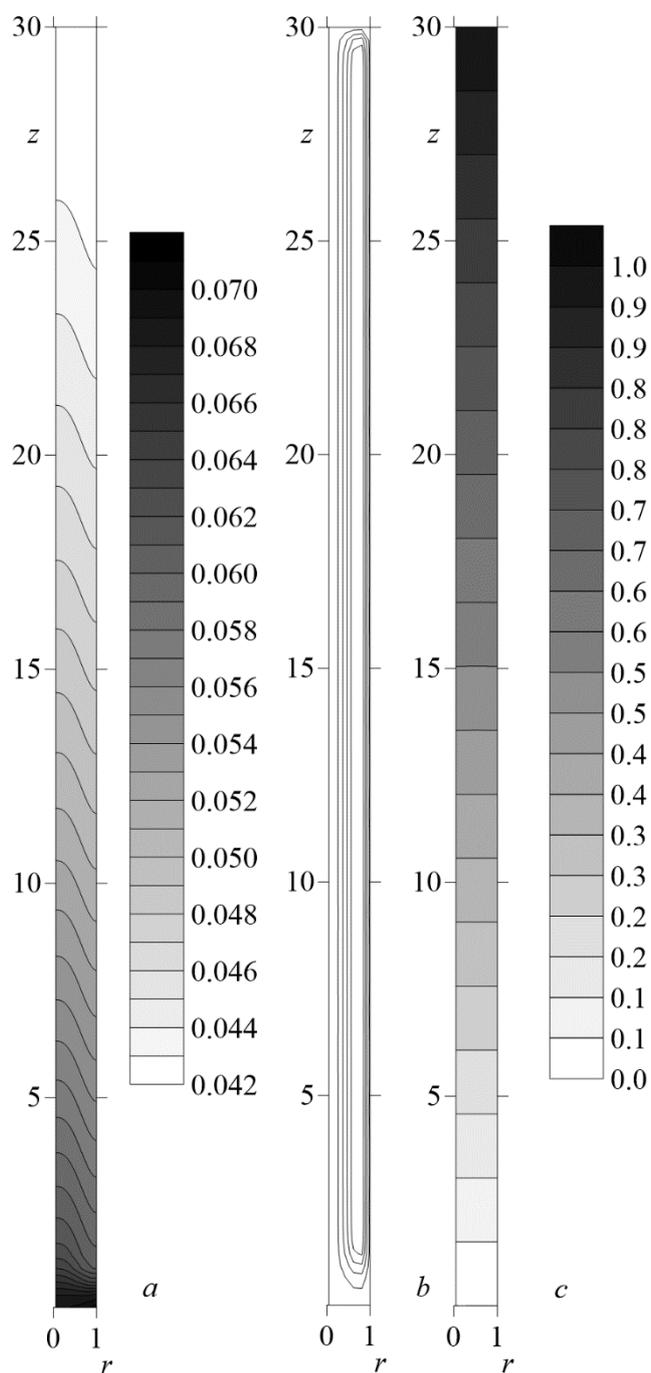


Рис. 3.13. Поля объемной концентрации (a), функции тока (b) и температуры (c) в момент времени $t = 10^4$ при $Ra_T = 0.015$, $Ra_C = 0.05$, $k_+ = 2 \cdot 10^{-5}$, $k_- = 6 \cdot 10^{-3}$, $Sc = 300$, $Sc_S = 180$, $Ma_T = 0.8$, $Ma_\Gamma = 0.4$, $Pr = 0.045$, $H = 30$

На рис. 3.13 представлены характерные поля объемной концентрации, функции тока и температуры в момент времени $t = 10^4$, что примерно соответствует 3 ч. В сравнении с работами [12,114] максимум функции тока сдвигается от оси симметрии к внешней границе, т.е. изолинии функции тока расположены плотнее вблизи цилиндрической поверхности капилляра.

Представленные на рис. 3.13 поля демонстрируют специфику процесса разделения изначально однородного расплава на компоненты. Вследствие подогрева сверху жидкость, опускаясь вниз по внешней границе, постепенно охлаждается. Иными словами, в нижней части капилляра она была бы устойчиво стратифицированной, и ее дальнейшее всплытие вдоль оси симметрии обуславливается исключительно законом сохранения массы, т.е. требованием нулевого расхода жидкости через поперечное сечение. Термокапиллярная сила создает вдоль поверхности капилляра напорное движение жидкости вниз, в результате чего вдоль оси симметрии канала возникает возвратное течение вертикально вверх. Опускной поток жидкости обогащен тяжелым компонентом, и архимедова сила препятствует ее дальнейшему всплытию, поэтому изолинии температуры практически горизонтальны в поперечном сечении капилляра. Избыток поверхностной концентрации в нижней части капилляра переносится за счет эффекта десорбции в объемную фазу (рис. 3.13а). Тяжелый компонент лишь частично переносится возвратным течением в верхнюю часть канала. Далее, за счет адсорбции, компоненты снова выносятся на поверхность. В ходе данного процесса на поверхности формируется достаточно большой перепад концентрации, из-за чего проявляется роль концентрационно-капиллярного механизма, который стабилизирует течение. В результате такого круговорота происходит интенсивное крупномасштабное перераспределение компонентов, выражающееся в возникновении продольного перепада объемной концентрации $\sim 20\%$. При этом на оси капилляра формируется

нелинейное распределение концентрации (рис. 3.14a), близкое к экспоненциальному, которое хорошо согласуется с экспериментом.

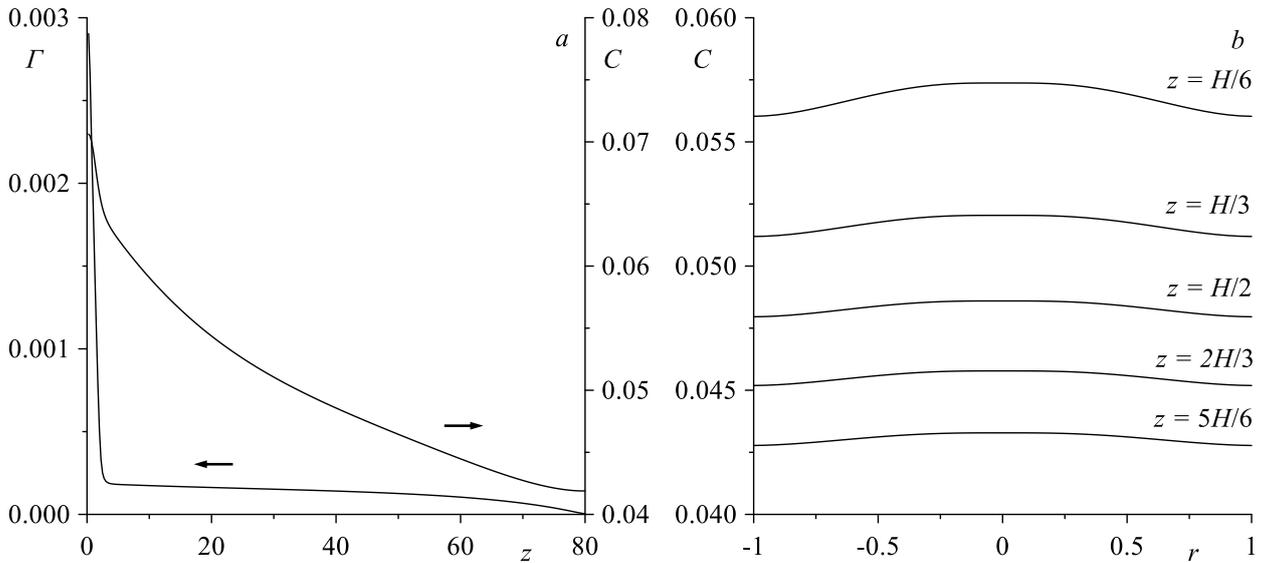


Рис. 3.14. Продольное (a) распределение поверхностной и объемной концентрации в центре капилляра и радиальное (b) распределение объемной концентрации на разных высотах

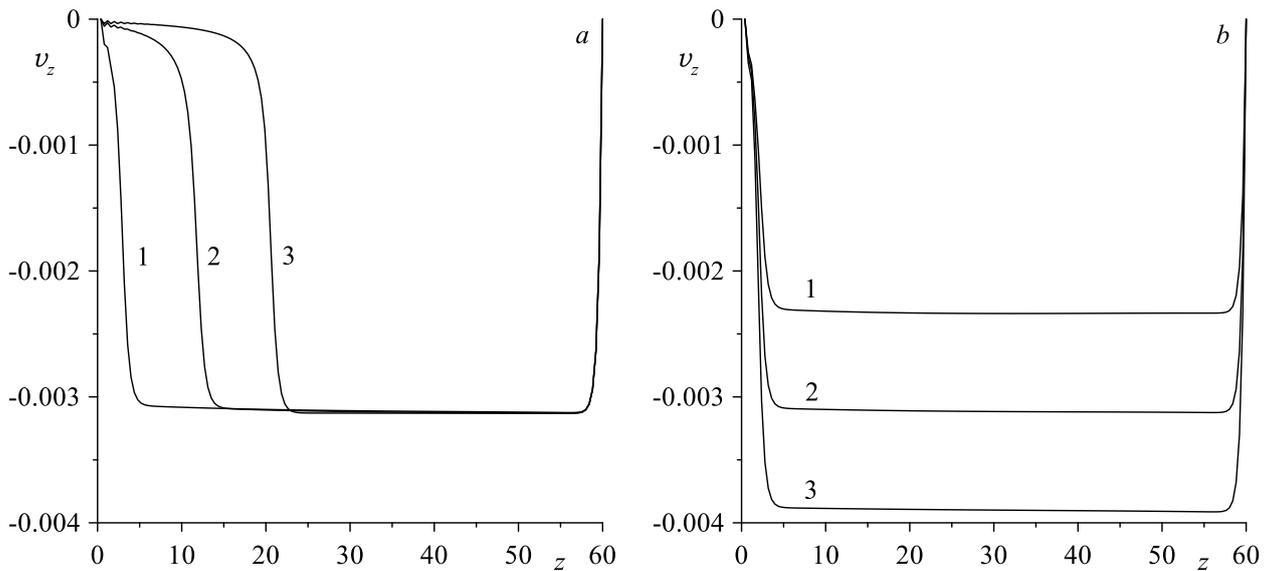


Рис. 3.15. Продольная компонента скорости на поверхности капилляра. Кривые 1 – 3 (a) соответствуют $k_- = 4 \cdot 10^{-3}$, $k_- = 4 \cdot 10^{-4}$, $k_- = 4 \cdot 10^{-5}$; b) кривые 1 – 3 соответствуют $Ma_T = 0.6$, $Ma_T = 0.8$, $Ma_T = 1.0$

Изучение радиального распределения концентрации показало, что в процессе разделения появляется градиент, направленный к центру капилляра и уменьшающийся с высотой (рис. 3.14b), что качественно согласуется с опытом [145]. Как показали расчеты, процесс установления полей

завихренности и функции тока протекает гораздо быстрее, чем разделение смеси на компоненты. Характерные профили продольной компоненты скорости в установившемся режиме показаны на рис. 3.15. При использовании набора параметров, соответствующих представленным ранее рисункам, на поверхности устанавливается практически однородный профиль скорости. Сильные нелинейности проявляются только вблизи торцов капилляра и вызваны как условиями непроницаемости на торцах, так и большим ростом поверхностной концентрации вблизи нижней границы. Так, из рис. 3.15*a* видно, что уменьшение параметра десорбции k_+ заметно увеличивает размеры участка, на котором происходит сильное торможение поверхностного слоя. При ослаблении десорбционного процесса в нижней части капилляра скапливается большее количество примеси, и за счет упругих свойств поверхностного слоя имеет место все более сильный эффект торможения.

На величину скорости в первую очередь влияет тепловое число Марангони Ma_T . Увеличение этого параметра приводит к росту скорости переноса компонентов вдоль поверхности (рис. 3.15*b*).

При нахождении в рабочем пространстве печи более длинного образца в вертикальном положении разность температур на торцах увеличивается. Поэтому в расчетах тепловое число Рэлея Ra_T и число Марангони Ma_T , в которые входит характерная разность температур Θ , увеличивались пропорционально длине капилляра. Результаты численного моделирования для трех значений длины капилляра представлены на рис. 3.16. Видно, что с ростом длины капилляра разделение на компоненты становится более сильным. Это согласуется с экспериментальной работой [113], в которой были продемонстрированы аналогичные “концентрационные вилки” для разных длин капилляра.

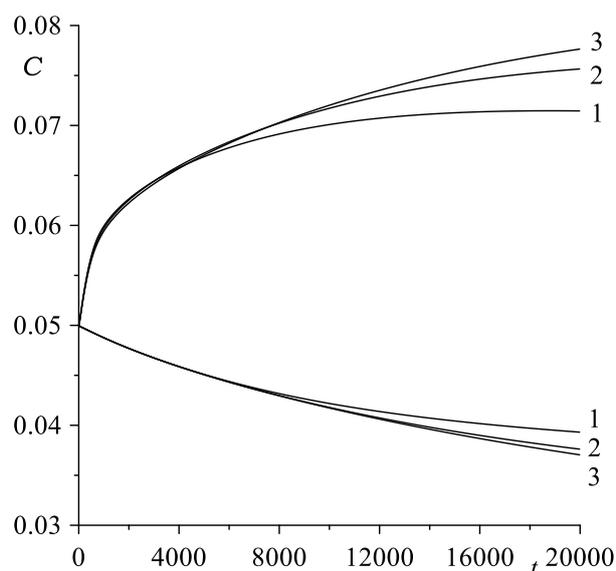


Рис. 3.16. Максимальное и минимальное значения поля объемной концентрации в зависимости от времени для капилляров разной высоты. Кривые 1 – 3 соответствуют $H = 30, 40, 55$

В качестве заключения, к которому можно прийти по итогам численного моделирования процесса разделения смеси в плоском и цилиндрическом капиллярах, является подтверждение исходной гипотезы о том, что природа разделения не может быть диффузионной. Достоверность экспериментальных данных и их статистическая устойчивость указывают на наличие регулярной термодинамической силы, которая управляет процессом разделения. Причиной возникновения этой термодинамической силы является неоднородность поверхностной энергии на границе раздела расплав-твердая граница.

3.4 Двухкомпонентная смесь с легким поверхностно-активным компонентом в цилиндрическом канале

3.4.1 Изменение плотности поверхностно-активного вещества в системе уравнений межфазной конвекции

Задача в 3.3.1 описывает поведение бинарной смеси, в которой поверхностно-активным является тяжелый компонент смеси. Однако, есть примеры [146], когда смесь при разделении ведет себя нетипично и даже в некотором смысле неожиданно с точки зрения теории конвективной устойчивости. Подобное аномальное поведение свойственно эвтектическому расплаву Al – Si (алюминий, кремний). Любопытно, что в твердом состоянии плотность алюминия больше, чем плотность кремния ($\rho_{Al} = 2.69 \text{ г/см}^3$, $\rho_{Si} = 2.33 \text{ г/см}^3$). Однако при увеличении температуры тот факт, что атомный вес кремния больше, чем у алюминия, все же дает о себе знать, и в жидком состоянии плотность кремния становится больше, чем у алюминия ($\rho_{Al} = 2.3 \text{ г/см}^3$ при $T = 950 \text{ }^\circ\text{C}$, $\rho_{Si} = 2.33 \text{ г/см}^3$ при $T = 1450 \text{ }^\circ\text{C}$).

Единственное, изменение, которое необходимо сделать в задаче 3.3.1 при рассмотрении такого эффекта – это сделать поверхностно-активным легкий компонент [18] и заменить знак в концентрационном слагаемом уравнения Навье – Стокса (3.18):

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{1}{Pr} (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \Delta \mathbf{v} + (Ra_T T + Ra_C C) \boldsymbol{\gamma},$$

что описывает рассматриваемую поверхностно-активную примесь как легкую составляющую. Как следствие, соответствующее изменение знака при концентрационном числе Рэлея произойдет и в конечном уравнении:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{1}{r Pr} \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial \varphi}{\partial r} - \frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial \varphi}{\partial z} - \frac{\varphi}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) = \Delta \varphi - \frac{1}{r^3} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - Ra_T \frac{\partial T}{\partial r} - Ra_C \frac{\partial C}{\partial r}.$$

Для простоты все безразмерные параметры будут иметь прежние значения. Метод численного решения описан в пункте 3.3.2.

3.4.2 Разделение смеси за счет поверхностной активности легкого компонента

За счет неоднородности температуры условие полного несмачивания на поверхности раздела расплав-алунд опять порождает тангенциальную термокапиллярную силу на вертикальной границе. Это приводит к генерации опускного течения легкого компонента вблизи стенки капилляра, что является весьма неожиданным для конвекции, когда легкая составляющая не всплывает, а тонет. Далее легкий компонент смеси накапливается в нижней части образца по причине его переноса в объем благодаря эффекту десорбции. В объеме примесь лишь частично переносится вверх, так как, во-первых, капилляр подогревается сверху, а, во-вторых, обладает большим гидродинамическим сопротивлением вследствие малой площади поперечного сечения.

Поля функции тока, температуры и концентрации (в долях) изображены на рис. 3.17 в один из моментов времени на этапе установления. Результаты расчета на рис. 3.17 приведены для следующих значений чисел Марангони и высоты канала: $Ma_T = 0.8$, $Ma_G = 0.4$, $H = 60$. Из рис. 3.17а видно, что легкий компонент накапливается внизу полости вблизи нижнего торца в полном соответствии с теоретическими предпосылками. Изолинии концентрации имеют конусообразный вид с максимумом при $r = 0$, что указывает на наличие слабого подъемного движения вдоль оси. Изолинии температуры наклонены похожим образом, но совсем незначительно и тоже отвечают увеличению температуры при приближении к оси канала. В отличие от плоской задачи в канале цилиндрической формы область поля функции тока, которая отвечает опускному движению, не является теперь симметричной по отношению к той части, которая отвечает подъемному движению. Расчеты показывают, что изолинии функции тока распределены заметно плотнее вблизи стенки капилляра (рис. 3.17b).

Из рис. 3.18а видно, что возникающее распределение в объеме весьма близко к экспоненциальному, т.е. зависимость напоминает барометрическое распределение.

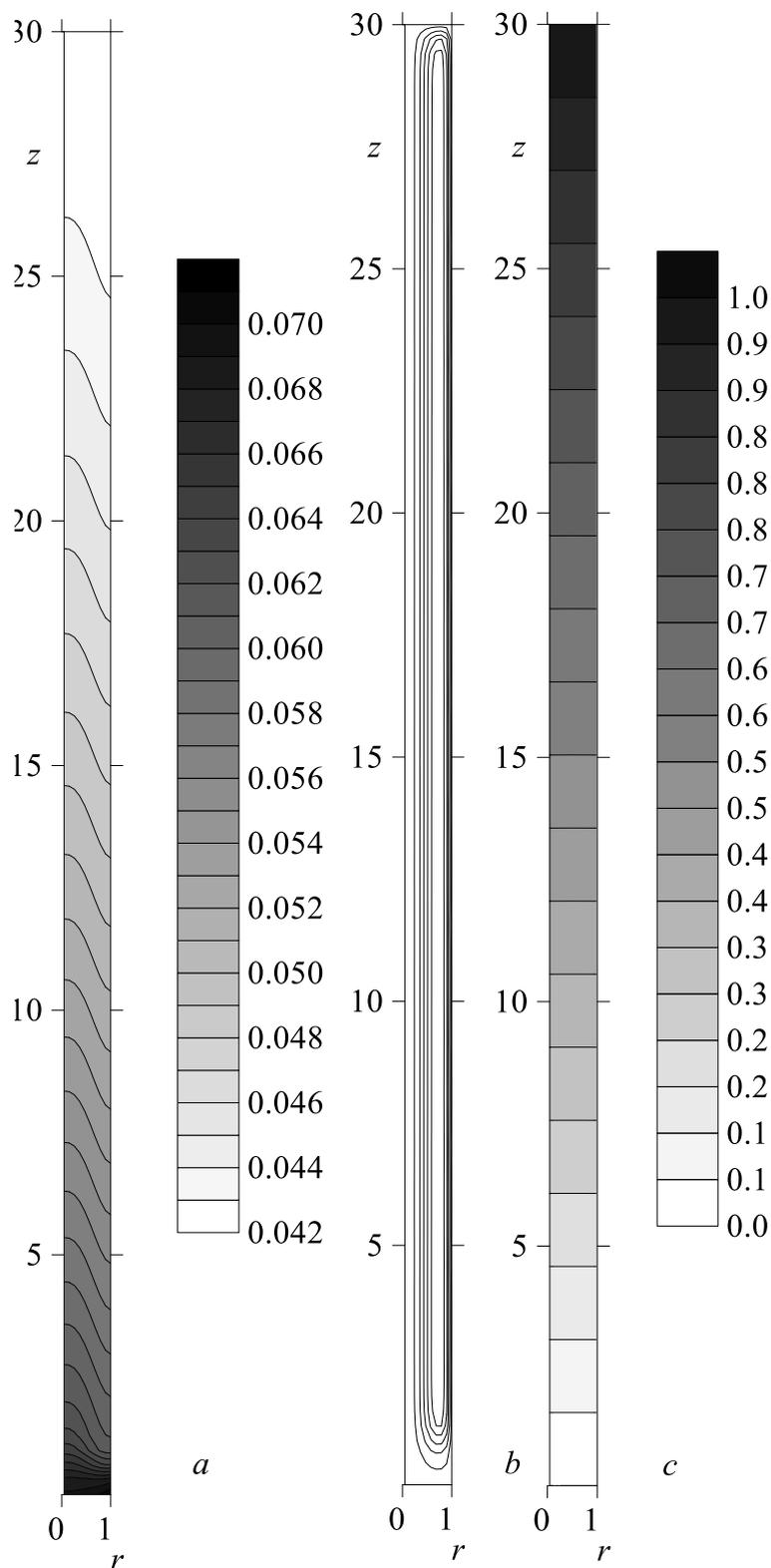


Рис. 3.17. Поле концентрации легкого компонента (*a*), функции тока (*b*) и температуры (*c*) в капилляре в момент времени $t = 10000$

Хотя на самом деле его природа совершенно иная. Следует обратить внимание на то, что качественно этот график очень хорошо согласуется с экспериментом. В частности, как и в опыте, при определенном соотношении параметров это распределение может вырождаться в практически линейную зависимость.

На рис. 3.18*b* изображен профиль поверхностной концентрации (в долях). Так как течение на поверхности является достаточно интенсивным, поверхностно-активный компонент активно сносится вниз капилляра, поэтому при определенных значениях теплового числа Марангони распределение поверхностной концентрации может принимать погранслойный характер вблизи торца.

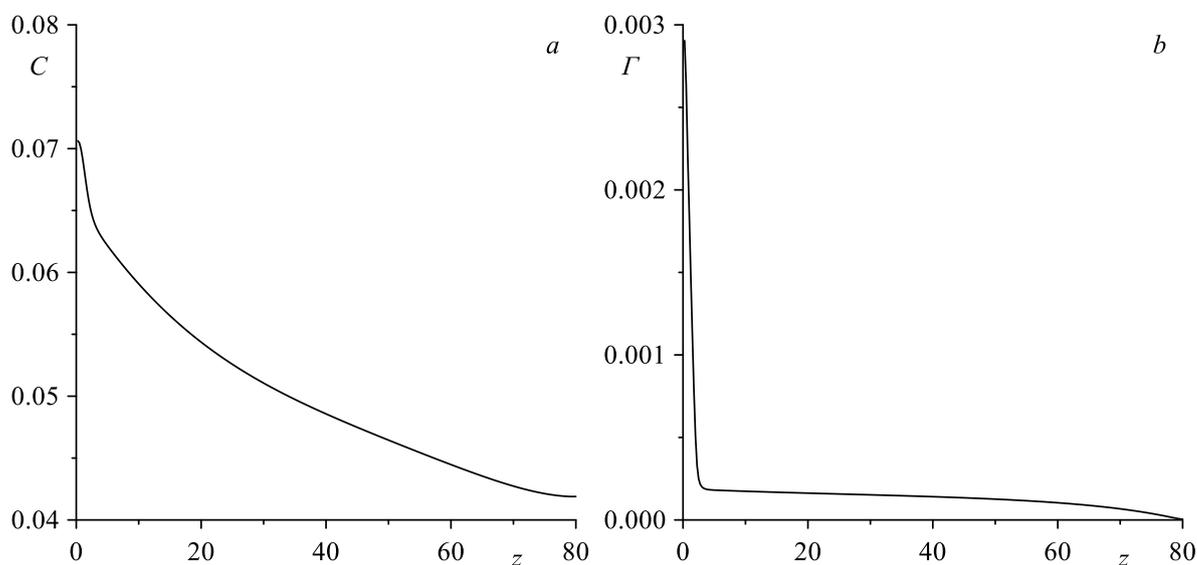


Рис. 3.18. Профиль объемной концентрации легкого компонента вдоль оси симметрии капилляра (*a*). Продольный профиль поверхностной концентрации легкого компонента (*b*)

Проведенные расчеты показывают, что установление течения в объеме происходит за очень короткое время (рис. 3.19*a*) по сравнению с продолжительностью процесса разделения изначально однородной смеси на компоненты. Этот эффект не является удивительным и согласуется со всеми на сегодняшний день имеющимися данными по намыванию примесей конвективными потоками [135,136].

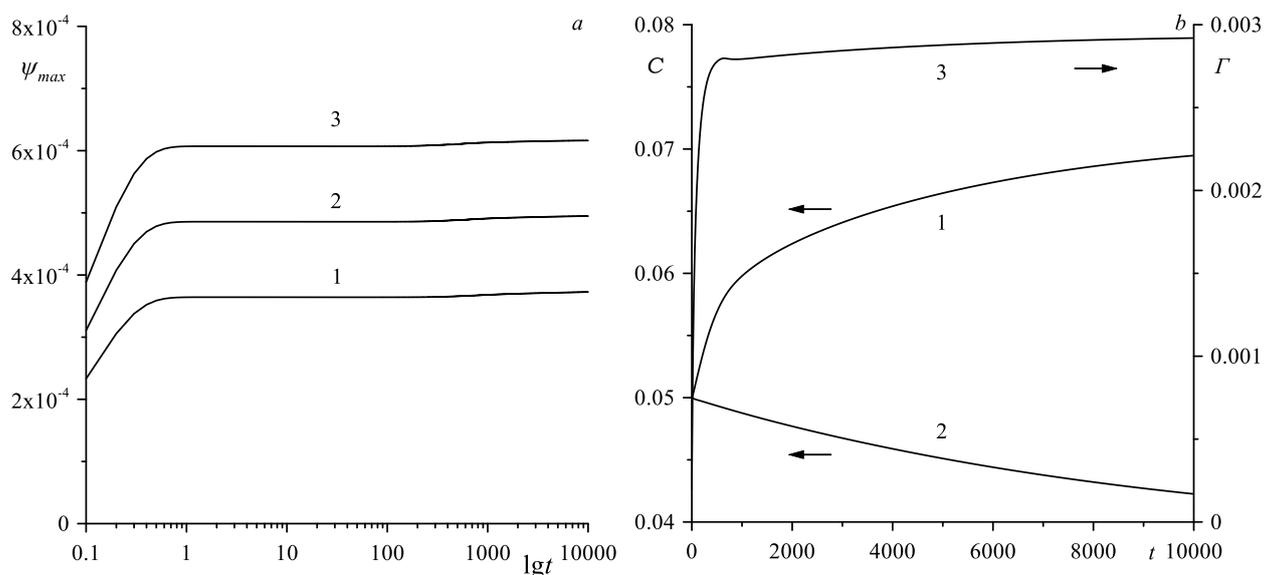


Рис. 3.19. Максимум функции тока в зависимости от времени (a); номера кривых 1 – 3 соответствуют $Ma_T = 0.6, 0.8, 1.0$; Максимальное (1) и минимальное (2) значения объемной концентрации и максимум поверхностной концентрации (3) в зависимости от времени (b)

В ходе численного моделирования разделение первоначально однородной смеси металлов на компоненты происходит за время, сравнимое с экспериментальным.

Так, из рис. 3.19b видно, что перепад концентрации в 40 % достигается за 10000 безразмерных временных единиц, что соответствует при переходе к размерным единицам приблизительно 2.5 ч. При этом фиксируется постепенный выход системы на стадию насыщения. Кривая 1 на рис. 3.19b отвечает максимуму объемной концентрации легкого компонента внизу капилляра, кривая 2 – минимуму в верхней части образца. Полученная концентрационная вилка неплохо согласуется с экспериментальной. Очевидно, что в системе реализуется потенциально неустойчивая конфигурация, когда легкий компонент постепенно аккумулируется в нижней части капилляра. Однако помимо концентрационного механизма неустойчивости не следует забывать о наличии подогрева сверху конвективной системы. Подогрев сверху и диффузия, наоборот, делают состояние конвективной системы более устойчивым.

Скорость движения даже на поверхности образца очень мала (рис. 3.19a), поэтому по мере стекания вниз легкий компонент сразу приобретает температуру границ на той высоте, на которой находится. Иными словами, в ходе опускного движения смесь быстро приходит в состояние теплового равновесия с внешней границей. В результате возвратное движение в верхнюю часть канала вдоль оси симметрии является следствием напорного поверхностного течения. Расплав считается несжимаемой жидкостью, поэтому расход в поперечном сечении на любой высоте должен быть равен нулю. Иными словами, оказывается, что термокапиллярный и адсорбционно-десорбционный механизмы создают опускное течение на поверхности, которое в состоянии привести к крупномасштабному продольному перераспределению компонентов расплава.

3.5 Наклонный плоский слой

3.5.1 Постановка задачи и основные уравнения

Для общности рассуждений рассмотрим плоский наклонный слой жидкости конечной длины L . Слой наклонен к вертикали под углом α . Ось y направим вдоль слоя, а ось x пусть направлена перпендикулярно ему (рис. 3.20). В этой системе координат единичный вектор γ , ориентированный вертикально вверх, имеет координаты $\gamma(-\sin \alpha, \cos \alpha, 0)$. Слой нагревается сверху равномерно так, что распределение температуры линейно и соответствует постоянному вертикальному градиенту температуры, а именно $\nabla T = A\gamma$ (A – величина градиента температуры). По-прежнему для простоты будем считать, что на боковых длинных гранях справедливо условие полного несмачивания. В этом случае границы рассматриваются как свободные, и вдоль них действуют термокапиллярная и концентрационно-капиллярная силы [17,25].

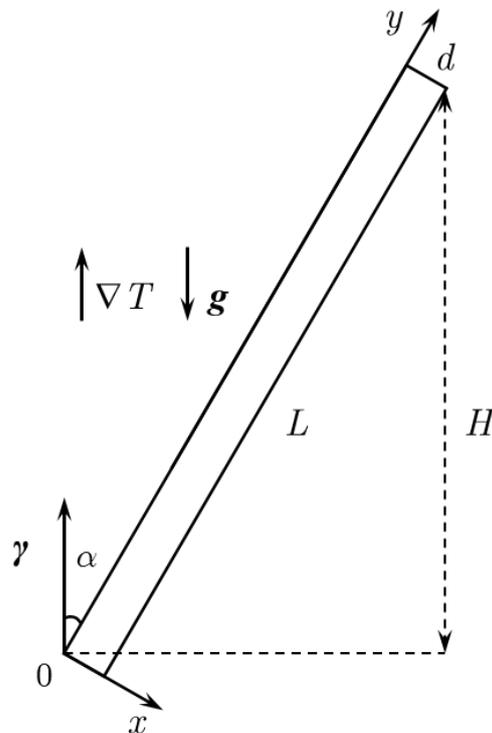


Рис. 3.20. Геометрия задачи

Для математического моделирования конвективного течения бинарной смеси воспользуемся уравнениями (3.1) – (3.4).

Торцы канала считаются твердыми, и на них для простоты ставится условие прилипания, а также условие отсутствия потока вещества через границу. Длинные стороны наклонного слоя представляют собой в определенном смысле свободную поверхность, и на них ставится условие непротекания. Граничное условие для концентрации на несмачиваемых поверхностях выводится из закона сохранения массы с учетом всех возможных потоков вещества. Принимая во внимание явления адсорбции и десорбции, запишем связь между объемной и поверхностной концентрациями на несмачиваемых границах в следующем виде:

$$x = 0, d: -D \frac{\partial C}{\partial x} = \mp k_A C \pm k_D \Gamma.$$

Как и ранее, поверхностное натяжение зависит от температуры и концентрации по линейному закону: $\sigma = \sigma_0 - \sigma_T T - \sigma_\Gamma \Gamma$; где σ_T и σ_Γ – коэффициенты зависимости поверхностного натяжения от температуры и концентрации соответственно. Поэтому граничные условия для касательных напряжений на вертикальных свободных границах записываются в следующей форме:

$$x = 0, d: \eta \frac{\partial v_y}{\partial x} = \pm \sigma_T \frac{\partial T}{\partial y} \pm \sigma_\Gamma \frac{\partial \Gamma}{\partial y},$$

Граничные условия для температуры, учитывающие наклон капилляра, задаются линейными распределениями вида:

$$x = 0: T = \frac{\Theta}{L}(y \cos \alpha + d \sin \alpha), \quad x = d: T = \frac{\Theta}{L} y \cos \alpha$$

$$y = 0: T = \frac{\Theta}{L}(d - x) \sin \alpha, \quad y = L: T = \frac{\Theta}{L}((d - x) \sin \alpha + L \cos \alpha)$$

В безразмерной форме уравнения (3.1) – (3.4) принимают вид:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}} (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \Delta \mathbf{v} + (\text{Ra}_T T - \text{Ra}_C C) \boldsymbol{\gamma}, \quad \text{div} \mathbf{v} = 0$$

$$\begin{aligned} \text{Pr} \frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)T &= \Delta T, \quad \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}}(\mathbf{v}\nabla)C = \frac{1}{\text{Sc}}\Delta C \\ \frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}}\nabla^s(\mathbf{v}\Gamma) &= \frac{1}{\text{Sc}_s}\Delta^s\Gamma + k_+C - k_-\Gamma \\ \text{Ra}_T &= \frac{g\beta_T\Theta d^3}{\nu\chi}, \quad \text{Ra}_C = \frac{g\beta_C C_0 d^3}{\nu\chi}, \quad \text{Pr} = \frac{\nu}{\chi}, \quad \text{Sc} = \frac{\nu}{D}, \quad \text{Sc}_s = \frac{\nu}{D_s}, \\ k_+ &= \frac{k_A d}{\nu}, \quad k_- = \frac{k_D d^2}{\nu}. \end{aligned}$$

Здесь Ra_T , Pr , Sc – числа Рэлея, Прандтля и Шмидта; Sc_s – поверхностное число Шмидта, Θ – перепад температуры вдоль вертикали на расстоянии H . Параметры k_+ и k_- имеют смысл безразмерных коэффициентов адсорбции и десорбции. Единицы измерения расстояния, объемной и поверхностной концентрации, времени, скорости, температуры и давления выбираются следующим образом: d , C_0 , dC_0 , d^2/ν , χ/d , Θ , $\rho\nu\chi/d^2$.

Фактически задача опять решалась двухполевым методом в терминах функции тока $\psi(x,y,t)$, функции $\varphi(x,y,t)$, которая совпадает с точностью до знака с завихренностью, и температуры $T(x,y,t)$. В результате система уравнений и граничные условия окончательно записываются в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) &= \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} - \\ &- \text{Ra}_T \left(\frac{\partial T}{\partial x} \cos \alpha - \frac{\partial T}{\partial y} \sin \alpha \right) + \text{Ra}_C \left(\frac{\partial C}{\partial x} \cos \alpha - \frac{\partial C}{\partial y} \sin \alpha \right), \\ \text{Pr} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial y} &= \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}, \quad \varphi = \Delta \psi, \\ \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial y} \right) &= \frac{1}{\text{Sc}} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right), \\ \frac{\partial \Gamma}{\partial t} - \frac{1}{\text{Pr}} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \Gamma \right) &= \frac{1}{\text{Sc}_s} \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial y^2} + k_+ C - k_- \Gamma, \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}. \\ x = 0, 1: \quad -\frac{1}{\text{Sc}} \frac{\partial C}{\partial x} &= \mp k_+ C \pm k_- \Gamma, \quad y = 0, l: \quad \frac{\partial C}{\partial y} = 0. \end{aligned}$$

При этом уравнение непрерывности удовлетворяется тождественно. После обезразмеривания граничное условие на касательные напряжения представляется в форме:

$$x = 0, 1: \varphi = \mp \text{Ma}_T \frac{\partial T}{\partial y} \mp \text{Ma}_C \frac{\partial C}{\partial y},$$

где $\text{Ma}_T = \sigma_T \theta d / \eta \chi$, $\text{Ma}_C = \sigma_C C_0 d^2 / \eta \chi$ – тепловое и концентрационное числа Марангони, соответственно. Граничные условия для температуры в безразмерном виде записываются окончательно следующим образом:

$$\begin{aligned} x = 0: T &= \frac{y \cos \alpha + \sin \alpha}{l}, & x = 1: T &= \frac{y \cos \alpha}{l}, \\ y = 0: T &= \frac{1-x}{l} \sin \alpha, & y = l: T &= \frac{1-x}{l} \sin \alpha + \cos \alpha, \end{aligned}$$

где l – безразмерная длина канала. В ходе расчетов начальными условиями служили невозмущенные поля функции тока ($\psi = 0$), завихренности ($\varphi = 0$), и объемной концентрации ($C = 0.05$). Как показывают расчеты, поверхностная концентрация довольно быстро (в главном порядке точности) выходит на установившееся значение вне зависимости от начального условия. Далее имеется медленный дрейф за счет взаимодействия поверхности с объемом. Этот тренд напрямую коррелирует с медленным накоплением разности концентраций в объеме между торцами канала и определяется уже диффузионно-конвективным временем. В результате выбор начального значения для поверхностной концентрации производился из следующих соображений: а именно, в опыте расплав перед заливкой в капилляры всегда тщательно перемешивался. Поэтому на поверхности в начальный момент времени в ходе заливки всегда присутствует определенный процент примеси. Дальнейший выход на установившееся значение гидродинамическая система осуществляет сама. Этот самосогласованный процесс зависит от соотношения действующих механизмов: адсорбции, десорбции, диффузии, интенсивности конвективного движения, термокапиллярных и концентрационно-капиллярных сил. Поэтому в расчетах выбиралось малое,

но ненулевое значение для поверхностной концентрации, конкретная величина которой оказывается не столь важной. Для приведенных ниже результатов расчета начальное значение поверхностной концентрации принималось равным $\Gamma = 4 \cdot 10^{-3}$. Возмущения в поле температуры внутри расчетной области в начальный момент времени не вносились ($T = 0$), однако на поверхности задавалось ее линейное распределение так, чтобы градиент был всегда направлен строго вертикально вверх и соответствовал нагреву сверху.

3.5.2 Описание расчетной процедуры и выбор параметров

Окончательно система дифференциальных уравнений совместно с описанными краевыми условиями решалась численно методом конечных разностей в соответствии с явной схемой решения уравнений в частных производных, основанной на двухполевой методике [131]. При аппроксимации производных по времени и производных по координатам использовались, соответственно, односторонние и центральные разности. Шаг по времени выбирался из соображений устойчивости численной процедуры. Значения вихря скорости на узких торцах слоя вычислялись по формуле Тома [134]. При решении уравнения Пуассона для функции тока использовался метод последовательной верхней релаксации [131]. В ходе расчетов по времени применялась процедура установления. При проведении численного моделирования осуществлялась периодическая запись искомых полей концентрации, завихренности, функции тока и температуры на диск, что позволяло визуализировать структуру полей в каждый момент времени. Для повышения точности и, как следствие, устойчивости счета в граничном условии на поток вещества, а также в нелинейном слагаемом уравнения для поверхностной концентрации производные полей функции тока и концентрации находились при помощи многоточечных аппроксимационных формул. В расчетах с фиксированными размерами слоя по координатам x и y

использовалась рабочая сетка 21:311. В данном случае длина канала варьировалась, но всегда бралась много больше толщины и менялась в пределах $l = 30 \div 100$. В серии расчетов с переменной длиной слоя, число узлов в продольном направлении увеличивалось пропорционально его длине.

Чтобы хотя бы приближенно соответствовать реальным условиям эксперимента при выборе критериев подобия (2.12) использовались следующие значения материальных параметров: $\beta_T = 3 \cdot 10^{-4}$ 1/К, $\nu = 3 \cdot 10^{-7}$ м²/с, $\chi = 2 \cdot 10^{-5}$ м²/с, $d = 10^{-3}$ м, $\eta = 2 \cdot 10^{-3}$ Па·с, $D = 10^{-9}$ м²/с. Для характерной разности температур принималось ограничение сверху $\Theta < 1$ К. Это дает весьма малые значения управляющих параметров задачи: чисел Рэлея (Ra_T , Ra_C) и Марангони (Ma_T , Ma_G). Однако расчеты показывают, что этого вполне достаточно, чтобы привести к наблюдаемому в опытах эффекту разделения. В случае наклонного капилляра подавляющая часть вычислений проводилась для следующих значений управляющих параметров: $Ra_T = 0.0015$, $Ra_C = 0.005$, $k_+ = 10^{-5}$, $k_- = 8 \cdot 10^{-3}$, $Sc = 300$, $Sc_S = 180$, $Ma_T = 1$, $Ma_G = 0.8$, $Pr = 0.05$.

3.5.3 Результаты расчетов

При проведении численного моделирования в предельном случае вертикального слоя ($\alpha = 0^\circ$) были получены результаты, качественно и количественно согласующиеся с экспериментами [111,113] и данными численного моделирования [12,15]. В первую очередь тестовое сравнение проводилось с результатами работы [12], так как именно в ней рассматривался плоский вертикальный слой. На рис. 3.21 представлены поля концентрации, функции тока и температуры для частного случая вертикального слоя при $l = 30$. Расчеты продолжались до момента времени $t = 6000$ безразмерных временных единиц, что примерно соответствовало 2.5 ч. Отметим, что изолинии построены по количеству узлов в поперечном и

продольном направлениях, что позволяет лучше визуализировать поля, так как реальные пропорции отвечают слишком узким каналам.

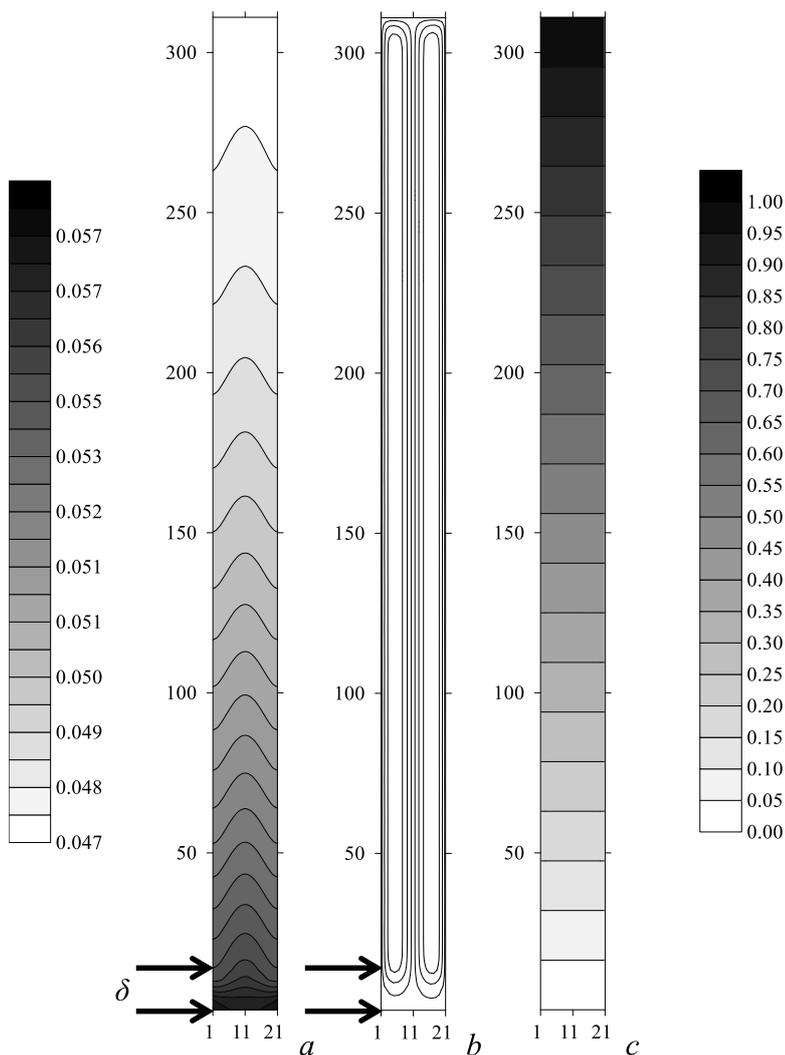


Рис. 3.21. Поля концентрации (*a*), функции тока (*b*) и температуры (*c*): $\alpha = 0^\circ$, δ – толщина застойной зоны

Видно, что наличие градиента температуры, направленного вдоль вертикальных стенок, приводит к тому, что вследствие термокапиллярного эффекта на несмачиваемых поверхностях действительно генерируется интенсивное опускное движение. В свою очередь в объеме капилляра устанавливается слабое возвратное течение. Термодинамическая сила на поверхности перемещает тяжелый поверхностно-активный компонент смеси в нижнюю часть капилляра.

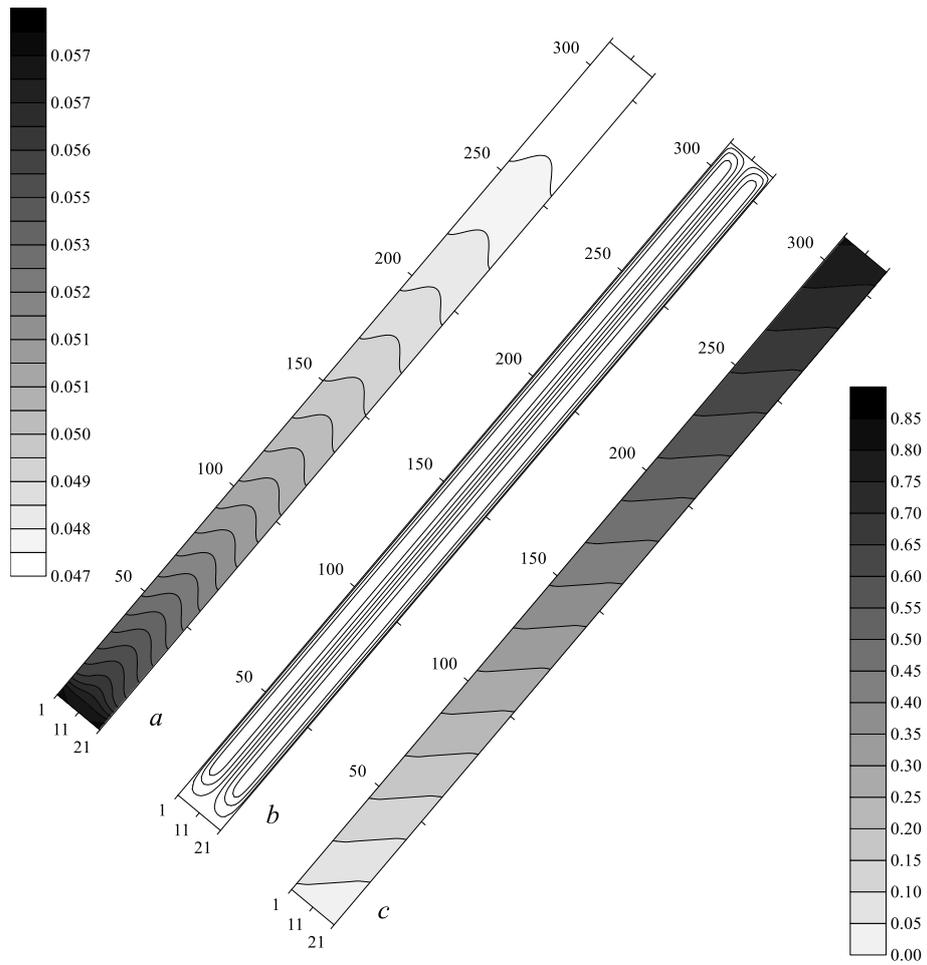


Рис. 3.22. Поля концентрации (a), функции тока (b) и температуры (c): $\alpha = 40^\circ$

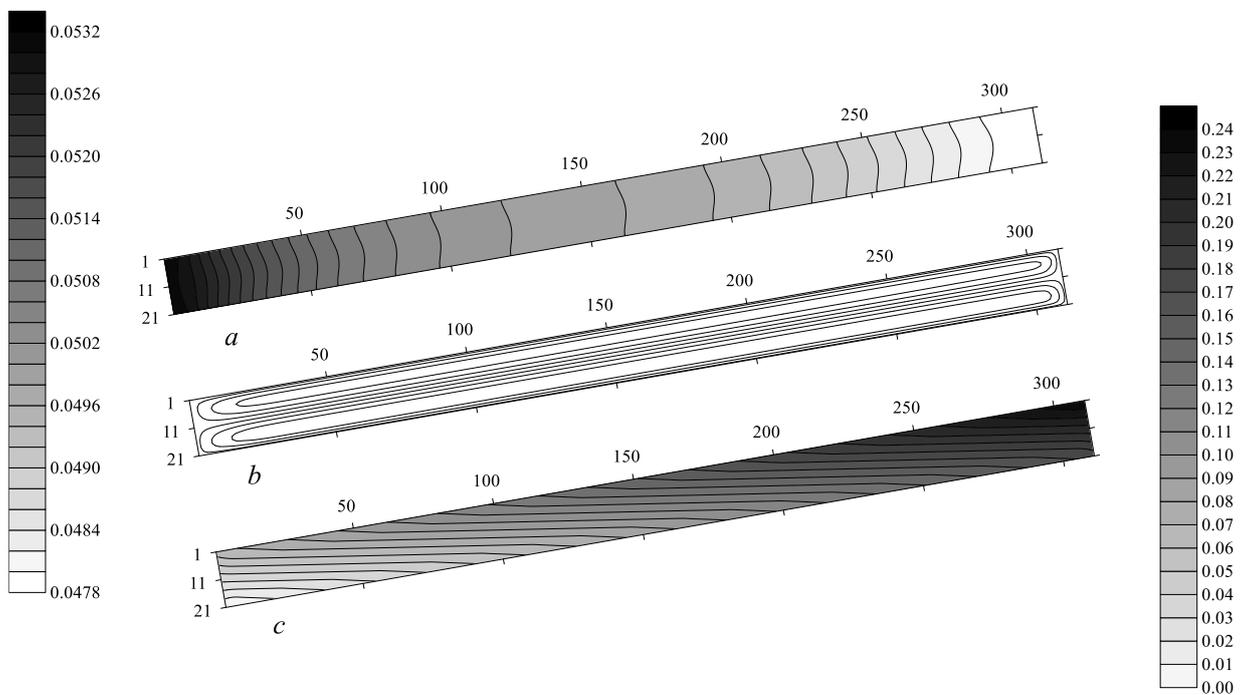


Рис. 3.23. Поля концентрации (a), функции тока (b) и температуры (c): $\alpha = 80^\circ$

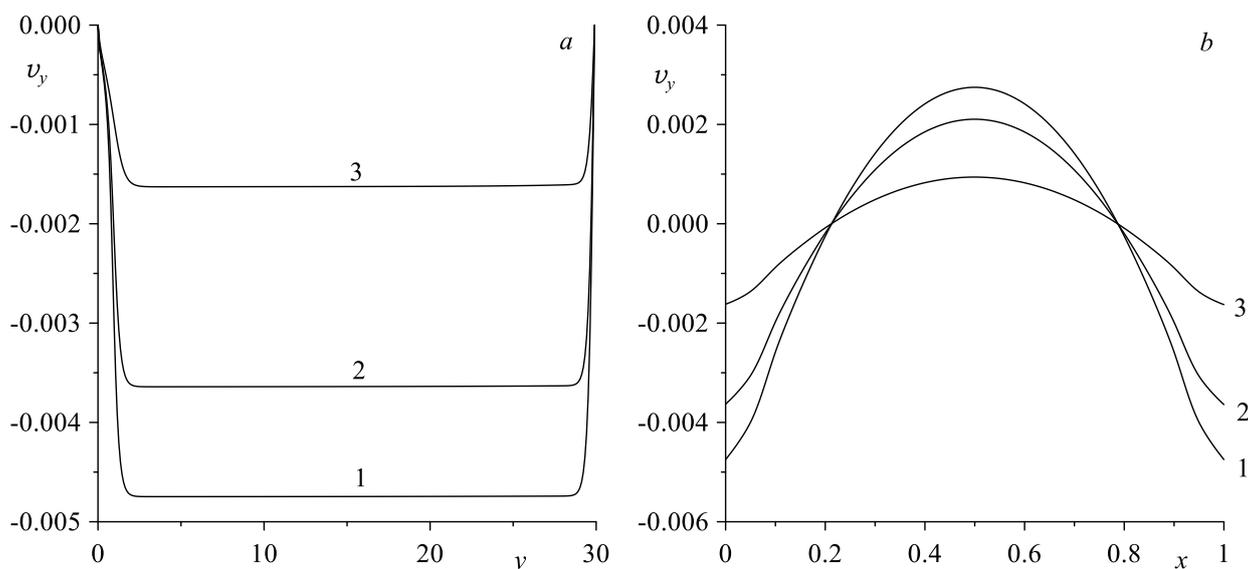


Рис. 3.24. Распределение компоненты скорости v_y вдоль нижней длинной границы слоя (a) и распределение v_y в поперечном сечении слоя (b) на расстоянии $1/6$ длины слоя от нижнего торца: $\alpha = 0^\circ, 40^\circ, 70^\circ$ (1 – 3)

Это приводит к тому, что в нижней части слоя на границах формируется избыток тяжелого компонента, в результате чего “включается” концентрационно-капиллярный механизм, который начинает под тормаживать течение на поверхности. Поскольку градиент температуры вдоль свободной поверхности не меняется с течением времени, термокапиллярный эффект начинает работать сразу при помещении образца в печь. В то же время концентрационно-капиллярный эффект изначально отсутствует, но его влияние усиливается с ростом градиента концентрации по мере установления течения. Далее, вследствие заложенного в модель эффекта десорбции, тяжелый компонент в нижней части капилляра из-за избыточности концентрации частично возвращается обратно в объем. После этого он подхватывается подъемным течением в центре капилляра и избирательно переносится в его верхнюю часть, где за счет эффекта адсорбции, снова выталкивается на поверхность. Селективность переноса в объеме заключается в том, что течение в первую очередь подхватывает элементы жидкости с меньшей концентрацией, так как на них действует наибольшая подъемная сила. Из элементов жидкости, наименее обогащенных

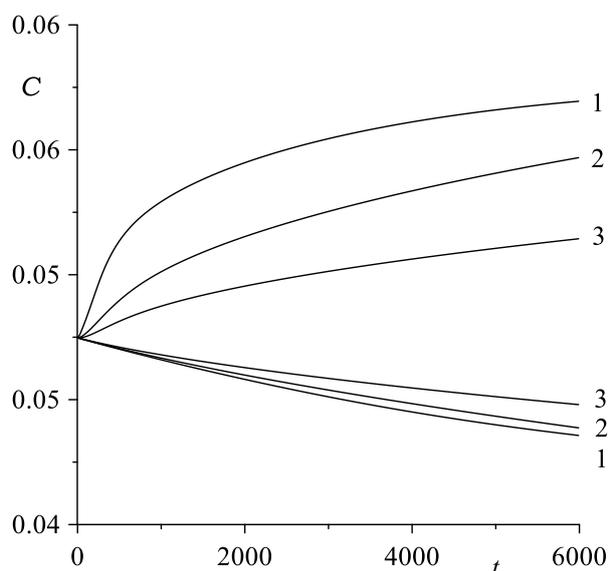
тяжелым компонентом, формируется струйное течение вверх. В то же время из элементов жидкости, насыщенных тяжелым компонентом, вблизи нижнего торца постепенно формируется застойная, устойчиво стратифицированная зона толщиной δ , которую можно увидеть на рис. 3.21 (*a,b*). В частности, из рис. 3.21 (*a*) видно, что в ходе установления вдоль продольной координаты действительно формируется гладкое распределение компонентов смеси. Можно заметить, что за это время на торцах капилляра успевает накопиться значительная разность концентраций тяжелого компонента, величина которой в относительных единицах составляет примерно 18 %.

Поля концентрации, функции тока и температуры для двух разных углов наклона слоя приведены на рис. 3.22 и рис. 3.23 для той же длины $l = 30$. Так как термокапиллярная сила является превалирующей при генерации течения, сила тяжести практически не нарушает “лево-правую” симметрию поля объемной концентрации в поперечном сечении слоя, несмотря на то, что он наклонен. Этот результат подтверждается опытом. В экспериментах [147] с наклонным капилляром нигде не упоминается, что регистрировалась какая-то регулярная заметно выраженная аксиальная асимметрия у исследуемых образцов. Если бы причиной продольного разделения бинарных расплавов металлов было гравитационное оседание, как это предполагалось в [147], то этот эффект обязательно бы проявился. Тяжелый компонент всегда бы накапливался в нижней полуповерхности наклонного цилиндрического капилляра, что, несомненно, регистрировалось бы в опыте.

С ростом угла наклона движение вдоль длинных границ слоя, вызываемое термокапиллярной силой, замедляется за счет уменьшения разности температур между торцами слоя (рис. 3.24), т.к. перепад температур на высоте H становится все меньше. Почти горизонтальные изотермы, представленные на рис. 3.22, 3.23, согласуются с тем, что возвратное объемное течение тоже ослабевает (рис. 3.24*b*). В результате при

значительном увеличении угла наклона эффект разделения смеси на компоненты становится слабее (рис. 3.25) и в пределе $\alpha = 90^\circ$, как это наблюдается в эксперименте, полностью пропадает.

Следует проанализировать еще одну любопытную особенность эксперимента [147]. Вне зависимости от угла наклона образца время выдержки в печи всегда было одинаковым. В результате при $\alpha = 0^\circ$ расчетного времени $t = 6000$ было достаточно для выхода системы на установившийся режим. Однако уже при $\alpha = 40^\circ$ за это время система не успевает выйти на стационарное распределение, что отражается на продольных профилях концентрации (рис. 3.26a). Только если продолжить расчеты дальше и сильно увеличить время выдержки, то немонотонность у зависимости концентрации от продольной координаты постепенно исчезает, и распределение на больших временах приближается к экспоненциальному. С наклоном разница между временем выхода полей температуры и скорости на стационар по сравнению с временем установления поля концентрации в виде монотонно убывающего с высотой экспоненциального распределения становится значительно больше.



Фиг. 3.25. Максимальные и минимальные значения поля объемной концентрации:
 $\alpha = 0^\circ, 70^\circ, 80^\circ$ (1 – 3)

На фрагменте фиг. 3.26*b* изображены распределения поверхностной концентрации для разных углов наклона. Видно, что зависимости $\Gamma(y)$ качественно повторяют продольные распределения объемной концентрации. С ростом координаты y поверхностная концентрация уменьшается. Если принять во внимание, что по оси y используется логарифмическая шкала, то можно увидеть, что зависимость $\Gamma(y)$ напоминает барометрическое распределение для объемной концентрации (рис. 3.26*a*).

Увеличение угла наклона существенно усложняет процесс разделения на компоненты, поскольку в капилляре все же появляется слабовыраженное нарушение симметрии распределения в поперечном сечении, которое не исчезает с течением времени. Для количественного описания эффекта нарушения симметрии был введен параметр q :

$$q = \frac{|\langle C_1 \rangle - \langle C_2 \rangle|}{\langle C_1 \rangle}$$

где $\langle C_1 \rangle$ и $\langle C_2 \rangle$ – мгновенные средние значения концентрации на двух боковых поверхностях в момент выхода из расчетной процедуры.

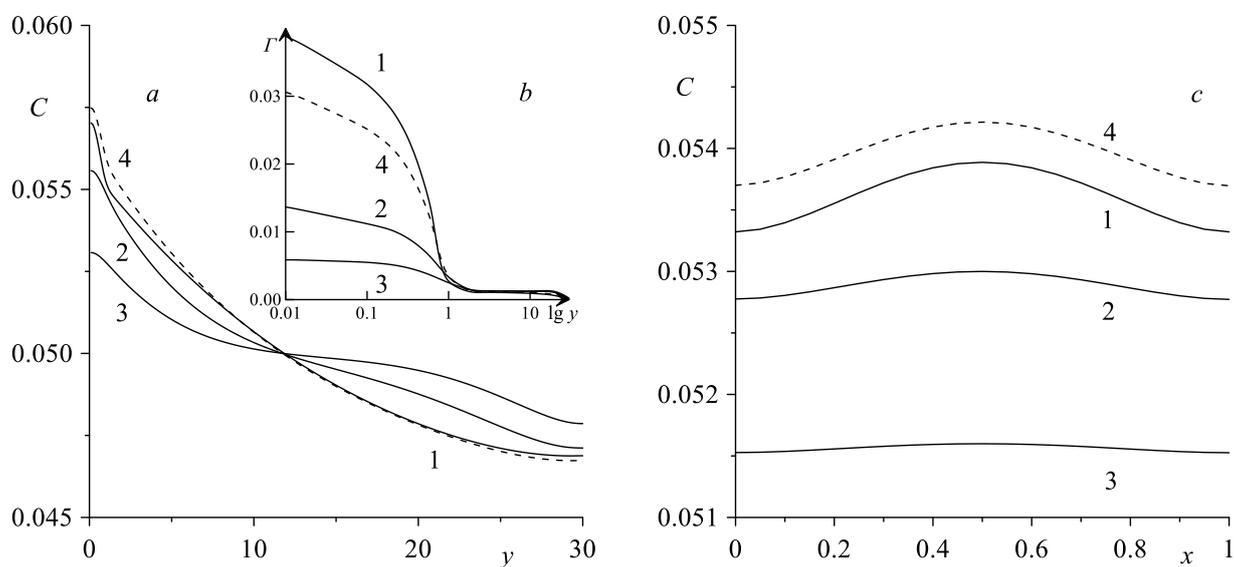


Рис. 3.26. Продольные (а) и поперечные (с) профили концентрации; на фрагменте (b) представлено распределение поверхностной концентрации; $\alpha = 0^\circ, 70^\circ, 80^\circ$ (1 – 3), 40° (4)

Значения параметра q в зависимости от угла наклона представлены на рис. 3.27а. В предельных случаях $\alpha = 0^\circ$ и $\alpha = 90^\circ$ все поперечные распределения симметричны, поэтому $q = 0$. Для углов наклона α , отличных от 0° и 90° , в значениях концентрации на левой и правой границах начинает наблюдаться нарушение симметрии, в результате чего параметр порядка становится не равным нулю ($q > 0$). Малые значения параметра подтверждают, что отклонения от симметричного распределения в наклонном слое являются крайне незначительными и визуально по изолиниям полей не фиксируются.

Расчеты показывают, что максимальное значение поперечного перепада концентраций достигается при угле наклона приблизительно равном $\alpha = 50^\circ$ (рис. 3.26с). Как видно из определения безразмерных параметров, уменьшение перепада температуры Θ должно приводить к уменьшению тепловых чисел Рэлея и Марангони Ra_T и Ma_T . В результате эффект разделения в продольном сечении должен ослабевать. Значение угла наклона α косвенно определяет величину перепада температуры вдоль несмачиваемых поверхностей слоя, и поэтому его изменение должно быть равносильно изменению тепловых чисел Рэлея и Марангони. Таким образом, можно ожидать, что при фиксированном времени выдержки случай $\alpha = 0^\circ$ должен соответствовать максимальному значению ΔC , а увеличение угла наклона должно приводить к монотонному уменьшению разности концентраций на торцах. В предельном случае $\alpha = 90^\circ$ температура вдоль несмачиваемых поверхностей будет постоянной и эффекта продольного разделения смеси на компоненты не будет. Иными словами на первый взгляд кажется, что зависимость $\Delta C(\alpha)$ должна иметь монотонно убывающий характер. Однако, как показывают расчеты, при увеличении угла наклона сначала наблюдается небольшое усиление эффекта разделения (рис. 3.27b, кривая 1). При угле $\alpha \approx 40^\circ$ разность концентраций ΔC достигает максимума и только затем довольно быстро убывает до нуля. Причиной подобного поведения является специфическая конкуренция архимедовой и

термокапиллярной сил, адсорбции, десорбции и диффузии. При больших углах наклона ($\alpha \rightarrow 90^\circ$) интенсивность движения становится настолько малой, что диффузия размазывает все неоднородности концентрации. В другом предельном случае $\alpha = 0^\circ$ или малых углах наклона течение максимально усиливается, что приводит теперь уже к конвективному размыванию неоднородности концентрационного поля. Одновременное действие и конкуренция перечисленных механизмов переноса приводят к тому, что наиболее оптимальным с точки зрения аккумуляции поверхностно-активного компонента вблизи нижнего торца полости, является слой, наклоненный под углом $\alpha \approx 40^\circ$ к вертикали. На рис. 3.26с изображены профили концентрации в поперечном разрезе в точке с координатой $y = 4$. Видно, что при $\alpha \approx 40^\circ$ (линия 4) наибольшее значение имеет не только концентрация тяжелого компонента в каждой точке x , но и степень неоднородности в поперечном сечении тоже наиболее ярко выражена для этого угла. Данный эффект был впервые обнаружен экспериментально в [147].

Однако экспериментальное исследование влияния угла наклона на перепад концентрации, проведенное в этой работе, было осложнено существенной особенностью. По мере увеличения угла наклона, длина капилляра в опытах увеличивалась так, чтобы торцы оставались на одной высоте: $H = L \cos \alpha = \text{const}$. Не будем комментировать причины данной постановки эксперимента. Отметим лишь, что техническая сложность, связанная с необходимостью использования капилляров разной длины, обусловила в результате небольшое число экспериментальных точек (рис. 3.27b). Однако их надежность и наличие максимума в промежуточной области углов наклона не вызывают сомнения.

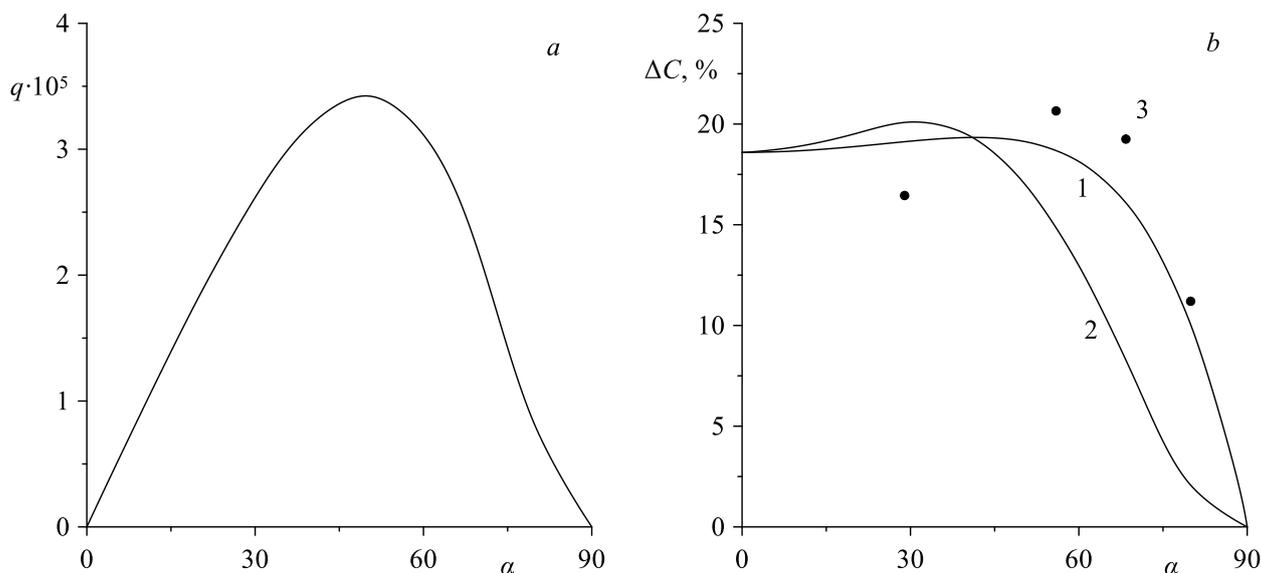


Рис. 3.27. Зависимости параметра порядка (a) и перепада концентрации на торцах (b) от угла наклона: 1 – капилляр с постоянной длиной, 2 – капилляр с переменной длиной, 3 – пересчитанные результаты эксперимента [147]

Для выяснения того, какую роль при разделении смеси на компоненты играет эффект одновременного увеличения угла наклона слоя и длины капилляра, было проведено дополнительное численное моделирование. В ходе расчетов по мере роста угла наклона длина капилляра увеличивалась так, чтобы торцы оставались всегда на одной высоте. Результаты расчета приведены на рис. 3.27b, кривая 2. Видно, что эффект разделения становится еще более выраженным. Максимум теперь соответствует углу наклона $\alpha \approx 30^\circ$. Для капилляра с постоянной длиной в точке максимума увеличение перепада концентрации составляет 4% по отношению к значению ΔC при $\alpha = 0^\circ$, в то время как для капилляра с переменной длиной разность концентраций на торцах увеличивается до 8%, что представляет собой результат, более сопоставимый с экспериментом. Таким образом, учет изменения длины капилляра при варьировании угла наклона, т.е. более приближенное к условиям эксперимента моделирование, дает более адекватный прирост к перепаду концентрации на торцах.

3.6 Стеkanie тяжелого поверхностно-активного компонента по затравочному стержню в тигле

3.6.1 Постановка и геометрия задачи

Рассмотрим прямоугольный тигель, заполненный двухкомпонентным металлическим расплавом [30]. В качестве рабочей выбрана смесь Pb-Sn. Алундовый стержень с неоднородным продольным распределением температуры погружен в расплав в вертикальном положении в центре тигля. В силу симметрии задачи будет исследоваться только правая половина данной системы (рис. 3.28).

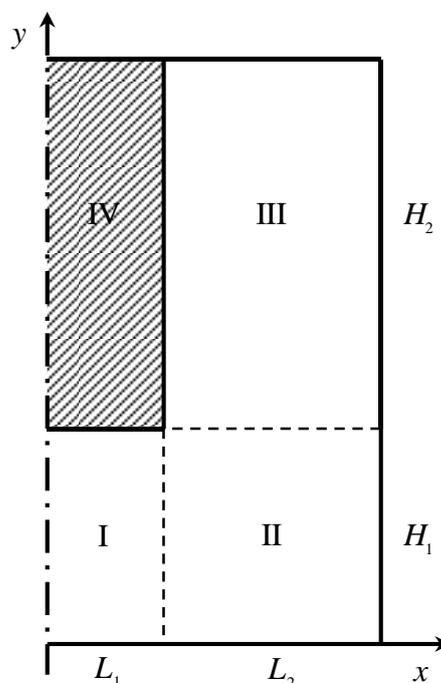


Рис. 3.28 Геометрия задачи и система координат; номера вычислительных областей отмечены римскими цифрами I - III. Штриховые линии – границы между вычислительными областями в численной процедуре; IV – твердый стержень с несмачиваемыми границами. Штрихпунктирная линия – ось симметрии

Для математического моделирования термоконцентрационного течения бинарной смеси в рассматриваемой полости опять воспользуемся исходной системой уравнений межфазной конвекции для несжимаемой жидкости (3.1) – (3.4). При обезразмеривании этих уравнений в качестве расстояния,

времени, скорости, температуры, давления, объемной и поверхностной концентрации выберем следующие единицы измерения: L_1 , L_1^2/ν , χ/L_1 , Θ , $\rho\nu\chi/L_1^2$, C_0 , L_1C_0 . Здесь L_1 – полутолщина стержня. Таким образом, в задаче появляется следующий набор управляющих параметров:

$$\text{Ra}_T = \frac{g\beta_T\Theta L_1^3}{\nu\chi}, \quad \text{Ra}_C = \frac{g\beta_C C_0 L_1^3}{\nu\chi}, \quad \text{Pr} = \frac{\nu}{\chi}, \quad \text{Sc} = \frac{\nu}{D}, \quad \text{Sc}_s = \frac{\nu}{D_s},$$

$$k_+ = \frac{k_A L_1}{\nu}, \quad k_- = \frac{k_D L_1^2}{\nu}.$$

Пусть аналогично предыдущим задачам, поверхностное натяжение на затравочном стержне линейно зависит от температуры и поверхностной концентрации: $\sigma = \sigma_0 - \sigma_T T - \sigma_\Gamma \Gamma$. В таком случае баланс касательных напряжений на несмачиваемой границе алуновдого стержня будет записан следующим образом:

$$0 \leq x \leq L_1, \quad y = H_1: \quad \frac{\partial v_x}{\partial y} = -\text{Ma}_T \frac{\partial T}{\partial x} - \text{Ma}_\Gamma \frac{\partial \Gamma}{\partial x},$$

$$x = L_1, \quad H_1 \leq y \leq H: \quad \frac{\partial v_y}{\partial x} = \text{Ma}_T \frac{\partial T}{\partial y} + \text{Ma}_\Gamma \frac{\partial \Gamma}{\partial y},$$

где $H = H_1 + H_2$, Ma_T , Ma_Γ – термо- и концентрационно-капиллярные числа Марангони:

$$\text{Ma}_T = \sigma_T \frac{\Theta L_1}{\eta\chi}, \quad \text{Ma}_\Gamma = \sigma_\Gamma \frac{C_0 L_1^2}{\eta\chi}.$$

Также, в данной задаче произведен учет взаимодействия поверхностной и объемной фаз:

$$0 \leq x \leq L_1, \quad y = H_1: \quad -\frac{1}{\text{Sc}} \frac{\partial C}{\partial y} = k_+ C - k_- \Gamma, \quad (3.29)$$

$$x = L_1, \quad H_1 \leq y \leq H: \quad -\frac{1}{\text{Sc}} \frac{\partial C}{\partial x} = -k_+ C + k_- \Gamma. \quad (3.30)$$

Граничные условия на оси симметрии и на твердых стенках тигля брались следующим образом:

$$x = 0, \quad 0 \leq y \leq H_1: \quad \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x} = \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial x} = 0,$$

$$\begin{aligned}
0 \leq x \leq L, y = 0: \quad \mathbf{v} = T = \frac{\partial C}{\partial y} = 0, \\
L_1 \leq x \leq L, y = H: \quad \mathbf{v} = \frac{\partial C}{\partial y} = 0, \quad T = 1 - \frac{x - L_1}{L_2}, \\
x = L, 0 \leq y \leq H: \quad \mathbf{v} = T = \frac{\partial C}{\partial x} = 0.
\end{aligned} \tag{3.31}$$

Здесь $L = L_1 + L_2$. Следует отметить, что для простоты распределение температуры на верхней твердой стенке предполагается линейным, т.к. данная термодинамическая величина должна непрерывно меняться между стержнем и тиглем. На границе стержня с учетом угловой точки задавалось гладкое распределение температуры:

$$T = b \sqrt{\frac{\xi^2}{a^2} + c}, \quad b = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{L_1 + H_2}{a^2}\right)^2 + c}}, \tag{3.32}$$

где a, b и c – подгоночные параметры ($a = 10, c = 1$); ξ – координата вдоль поверхности стержня:

$$\xi = \begin{cases} x: & 0 \leq x \leq L_1, \quad y = H_1, \\ L_1 + y - H_1: & x = L_1, \quad H_1 \leq y \leq H. \end{cases}$$

Данная задача решалась в терминах функции тока ψ и завихренности φ , которые связаны с компонентами скорости следующим образом: $v_x = \partial \Psi / \partial y$, $v_y = -\partial \Psi / \partial x$,

$$\varphi = \frac{\partial v_x}{\partial y} - \frac{\partial v_y}{\partial x} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2}.$$

Конечная форма дифференциальных уравнений и граничных условий будет:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} - \text{Ra}_r \frac{\partial T}{\partial x} + \text{Ra}_c \frac{\partial C}{\partial x}, \tag{3.33}$$

$$\text{Pr} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}, \tag{3.34}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial y} \right) = \frac{1}{\text{Sc}} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right), \tag{3.35}$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} - \frac{1}{\text{Pr}} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \zeta} \Gamma \right) = \frac{1}{\text{Sc}_s} \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial \xi^2} + k_+ C - k_- \Gamma, \quad (3.36)$$

где ζ – координата, поперечная поверхности стержня:

$$\zeta = \begin{cases} x: & H_1 \leq y \leq H, \\ y: & 0 \leq x \leq L_1. \end{cases}$$

Введение завихренности позволяет переформулировать граничные условия для касательных напряжений на поверхности стержня:

$$\begin{aligned} 0 \leq x \leq L_1, y = H_1: & \quad \varphi = -\text{Ma}_T \frac{\partial T}{\partial x} - \text{Ma}_\Gamma \frac{\partial \Gamma}{\partial x}, \\ x = L_1, H_1 \leq y \leq H: & \quad \varphi = \text{Ma}_T \frac{\partial T}{\partial y} + \text{Ma}_\Gamma \frac{\partial \Gamma}{\partial y}. \end{aligned}$$

3.6.2 Описание численной процедуры

Прямое численное моделирование выполнялось на суперкомпьютере “ПГНИУ – Кеплер” Пермского государственного национального исследовательского университета. Компьютерный код учитывал разбиение расчетной области на части и был написан на языке программирования Fortran-90. Во время вычислений использовался двухполевой метод в сочетании с явной схемой. Величина шага по времени выбиралась из соображений устойчивости численной процедуры. Для нахождения функции тока на каждом шаге по времени, т.е. при решении уравнения Пуассона использовался метод последовательной верхней релаксации. В процессе решения эволюционной задачи для вихря, температуры и концентрации использовался метод установления.

Следует отметить, что вычислительная область теперь имеет сложную форму. Для численной реализации она была разделена на 3 области (рис. 3.28) так, чтобы каждая из них имела прямоугольную форму со сторонами $L_1:H_1$, $L_2:H_1$ и $L_2:H_2$. Безразмерные значения данных сторон были: $L_1 = 1$, $L_2 =$

$H_1 = 2$, $H_2 = 6$. Таким образом, области I и III представляют собой прямоугольники, область II является квадратной.

На границах вычислительных областей должны быть гладкими решения для всех переменных. Это достигалось путем введения дополнительных внутренних граничных условий. Во-первых, компоненты скорости должны быть непрерывны как вдоль вертикальной границы I – II, так и вдоль горизонтальной границы II – III:

$$x = L_1: \quad v_x^I = v_x^{II}, \quad v_y^I = v_y^{II},$$

$$y = H_1: \quad v_x^{II} = v_x^{III}, \quad v_y^{II} = v_y^{III}.$$

Эти условия приводят к равенству соответствующих производных от функции тока и, как следствие, к равенству значений завихренностей:

$$\text{I – II:} \quad \frac{\partial \psi^I}{\partial x} = \frac{\partial \psi^{II}}{\partial x}, \quad \frac{\partial \psi^I}{\partial y} = \frac{\partial \psi^{II}}{\partial y}, \quad \varphi^I = \varphi^{II}, \quad (3.37)$$

$$\text{II – III:} \quad \frac{\partial \psi^{II}}{\partial x} = \frac{\partial \psi^{III}}{\partial x}, \quad \frac{\partial \psi^{II}}{\partial y} = \frac{\partial \psi^{III}}{\partial y}, \quad \varphi^{II} = \varphi^{III}. \quad (3.38)$$

Условие непрерывности необходимо использовать для полей температуры и объемной концентрации на данных границах. Помимо этого, непрерывными должны быть поперечные компоненты тепловых и концентрационных потоков:

$$\text{I – II:} \quad T^I = T^{II}, \quad C^I = C^{II}, \quad \frac{\partial T^I}{\partial x} = \frac{\partial T^{II}}{\partial x}, \quad \frac{\partial C^I}{\partial x} = \frac{\partial C^{II}}{\partial x}, \quad (3.39)$$

$$\text{II – III:} \quad T^{II} = T^{III}, \quad C^{II} = C^{III}, \quad \frac{\partial T^{II}}{\partial y} = \frac{\partial T^{III}}{\partial y}, \quad \frac{\partial C^{II}}{\partial y} = \frac{\partial C^{III}}{\partial y}. \quad (3.40)$$

Поле поверхностной концентрации $\Gamma(\xi)$ в процессе решения также было разделено на области I и III. В угловой точке $\xi = 1$ использовались аналогичные условия:

$$\text{I – III:} \quad \Gamma^I = \Gamma^{III}, \quad \frac{\partial \Gamma^I}{\partial \xi} = \frac{\partial \Gamma^{III}}{\partial \xi}.$$

Для улучшения точности и повышения устойчивости численной схемы производные от поля объемной концентрации в граничных условиях (3.29), (3.30), а также производные от функции тока в нелинейном слагаемом уравнения (3.36) вычислялись при помощи пятиточечной аппроксимации. В условиях (3.37), (3.38) для φ и (3.39), (3.40) для T и C использовалась четырехточечная полиномиальная интерполяция.

Значения управляющих параметров были фиксированными: $Ra_C = 0.05$, $Pr = 0.045$, $Sc = 300$, $Sc_s = 180$, $k_+ = 0.005$, $k_- = 5$, $Ma_T = 8$, $Ma_\Gamma = 10^{-3}$. При этом в решении анализировались два различных конвективных режима при $Ra_T = 0.005$, 1.5. В качестве начальных условий использовались невозмущенные поля функции тока ($\psi = 0$), завихренности ($\varphi = 0$), объемной ($C = 1$) и поверхностной концентраций ($\Gamma = 4 \cdot 10^{-4}$). Поле температуры внутри тигля также было невозмущенным ($T = 0$), однако вдоль стержня поддерживалось распределение (3.32). На верхней границе тигля распределение температуры было линейным.

Из-за реалистичного значения числа Прандтля, соответствующего жидким металлам, нелинейное слагаемое в уравнении (3.36) оказывает существенный вклад на формирование течения. В окрестности угловой точки $\xi = 1$ решение этого уравнение может давать существенную ошибку. В первую очередь она связана с величиной скорости на поверхности стержня, которая вычисляется через поле функции тока в объеме полости. В областях со сложной геометрией, а именно, в тех случаях, когда существуют угловые точки, профиль скорости на поверхности может быть не совсем гладким, так как производная от функции тока сильно меняется в окрестности угловой точки. Для минимизации данной ошибки профиль поверхностной скорости был линеаризован на интервале $0 < \xi < 2$. Конечные профили поверхностной концентрации в каждый момент времени вычислялись после процедуры осреднения в окрестности угловой точки.

Для того, чтобы убедиться в сходимости численной схемы, она тестировалась на разных вычислительных сетках. В процессе расчетов производилось сравнение относительных ошибок для кинетической энергии ΔE и для максимума функции тока $\Delta\psi_{max}$ при различных значениях общего числа узлов $N = N_1N_2 + N_2N_2 + N_2N_3$. Здесь N_1 , N_2 и N_3 – количество узлов вдоль стенок с длинами L_1 , L_2 (H_1) и H_2 , соответственно. Результаты произведенных тестов демонстрируют хорошую сходимость. Количественные данные результатов сходимости представлены в таблице (3.3) и графически на рис. (3.29).

Таблица 3.3. Сходимость метода

	N_1	N_2	N_3	N	$\Delta E, \%$	$\Delta\psi_{max}, \%$
1	19	57	59	7695		
2	21	63	65	9387	$\Delta E_{12} = 5.982$	$\Delta\psi_{12} = 2.275$
3	23	69	71	11247	$\Delta E_{23} = 2.456$	$\Delta\psi_{23} = 0.493$
4	25	75	77	13275	$\Delta E_{34} = 0.568$	$\Delta\psi_{34} = 0.014$
5	27	79	81	14773	$\Delta E_{45} = 0.415$	$\Delta\psi_{45} = 0.008$
6	29	87	91	18009	$\Delta E_{56} = 0.362$	$\Delta\psi_{56} = 0.009$

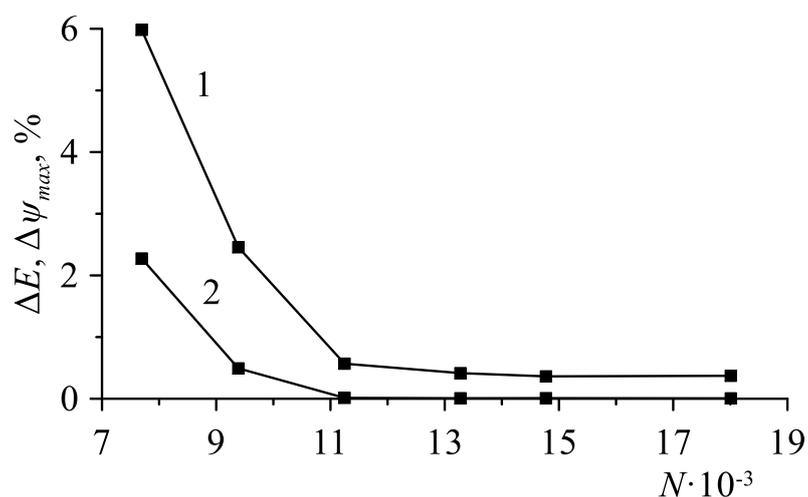


Рис. 3.29 Относительная разность кинетической энергии (% , ломаная линия 1) и максимума функции тока (% , ломаная линия 2) для сеток с разным количеством вычислительных узлов

Исходя из этих данных, для вычислительных областей I, II и III в расчетах использовались следующие сетки: 25:75, 75:75 и 75:77.

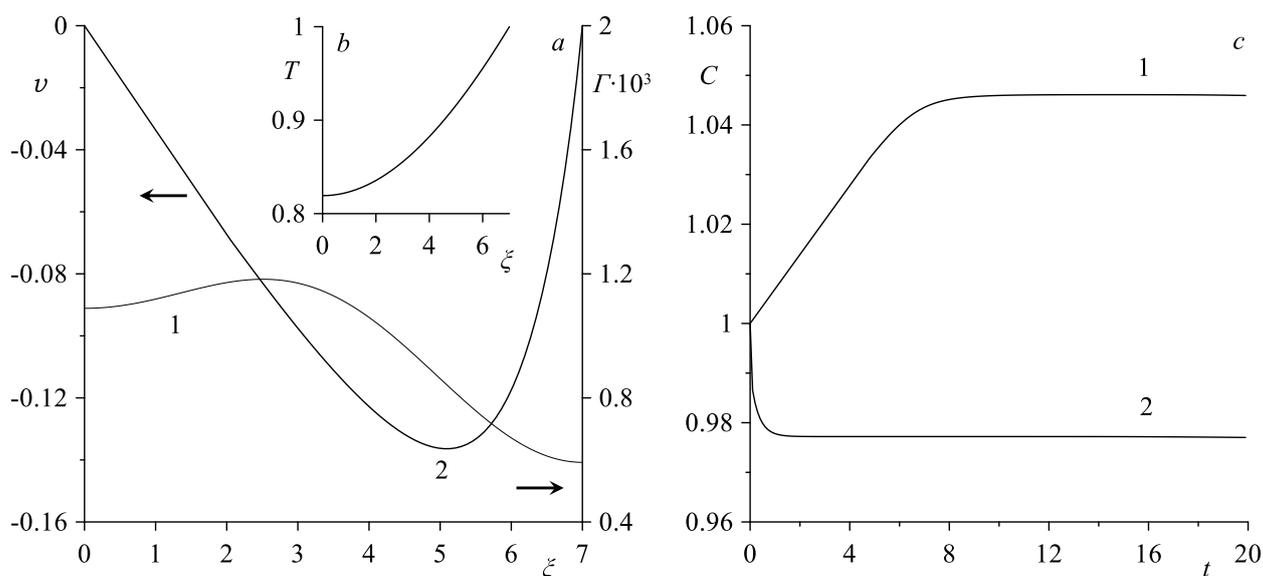


Рис. 3.30 *a*) Профиль температуры вдоль стержня; *b*) профили поверхностной концентрации (1) и скорости (2) вдоль стержня; *c*) временная эволюция концентрации тяжелого компонента смеси вблизи нижней границы (1) и в верхней части (2) тигля

3.6.3 Обсуждение результатов

Условия нагрева в тигле должны давать состояние, отличное от механического равновесия, но близкое к нему, поскольку верхняя часть стержня горячее, чем окружающая жидкость. Другими словами, в данной геометрии не ожидается интенсивная тепловая конвекция. С другой стороны, стенки тигля являются изотермичными и напротив стержня сверху полости они будут слегка холоднее, чем стержень. Такое распределение температуры приводит к образованию конвективной неустойчивости вблизи стержня. В то же время, граничные условия несмачивания и неоднородности поверхностного натяжения создают поверхностную силу, которая смещает жидкость продольно границе стержня в сторону холодного торца, и по идее она должна закручивать поток в другую сторону.

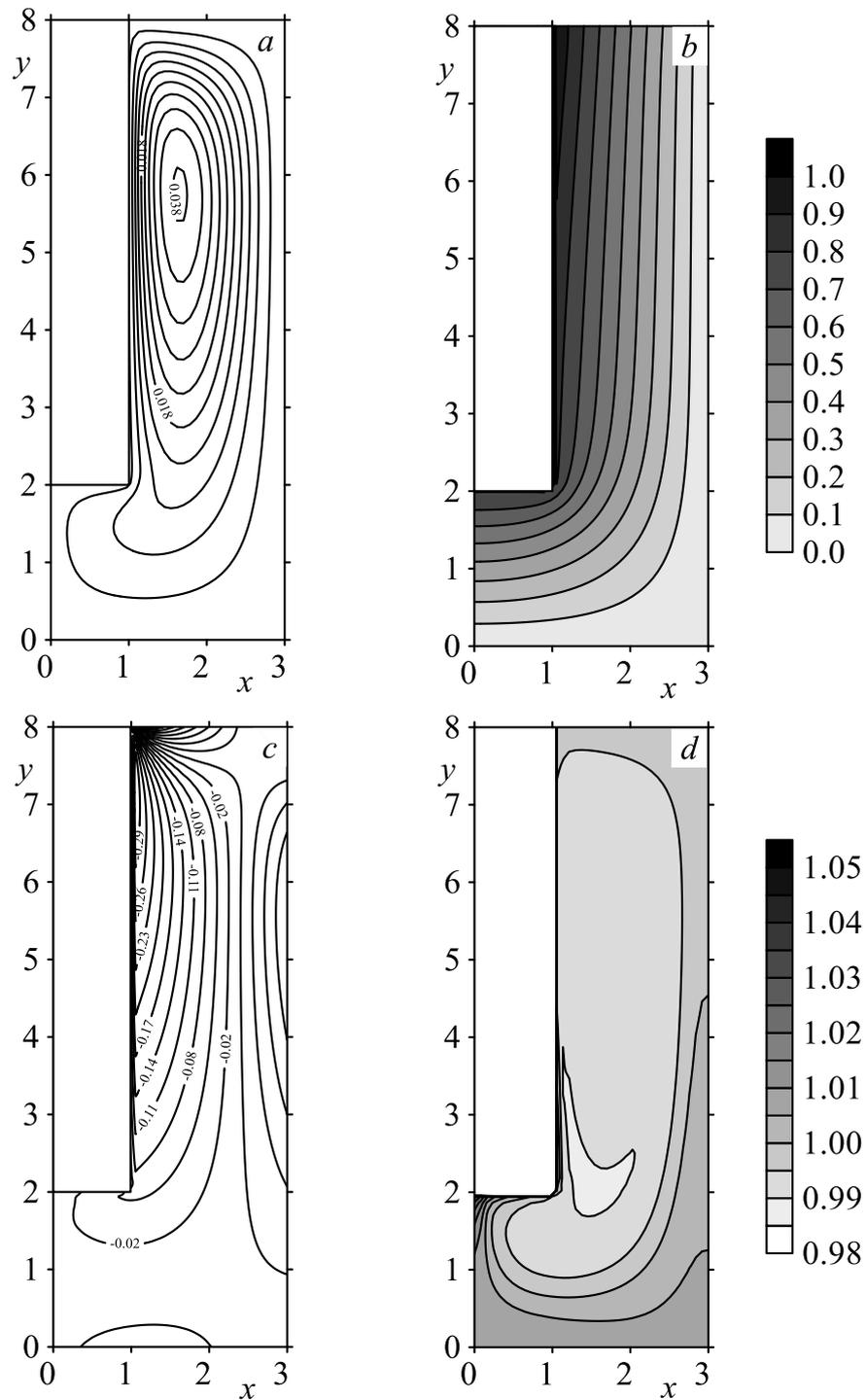


Рис. 3.31 Поля функции тока (*a*), температуры (*b*), завихренности (*c*), концентрации тяжелого компонента (*d*), $Ra_T = 0.005$

Из-за линейного профиля температуры (3.31) на верхней границе тигля и неоднородного распределения температуры (3.32) вдоль поверхности стержня (рис. 3.30) при образовании результирующего течения конкурируют гравитационная конвекция, направленная по часовой стрелке, и

термокапиллярная конвекция, приводящая жидкость в движение против часовой стрелки. На рис. 3.31 представлены изолинии функции тока, завихренности, температуры и концентрации тяжелого компонента. Поля функции тока и завихренности демонстрируют устойчивое течение с максимальным значением скорости вблизи стержня. В данном случае термокапиллярный механизм превосходит термогравитационный, и мы видим вращение расплава против часовой стрелки. Однако увеличение числа Рэлея может привести к дроблению этого крупномасштабного движения и появлению двух противовихрей в верхнем левом углу и нижней части полости (рис. 3.32). При умеренных значениях числа Рэлея в достаточно широком интервале эти вихри тоже стационарны.

Процесс разделения смеси и накопление тяжелого компонента на дне тигля продемонстрированы на рисунках 3.30*a*, 3.30*c* и 3.31*d*. Сепарация примеси объясняется комбинацией тех же механизмов, как и в капилляре. Генерация опускного конвективного течения жидкости вдоль поверхности стержня происходит из-за условия несмачивания, а также термокапиллярного эффекта, как следствия постоянного неоднородного распределения температуры на затравочном стержне. Благодаря данному течению тяжелый компонент поверхностной концентрации перемещается против координаты ζ , т.е. в отрицательном направлении оси y в области III и затем в отрицательном направлении оси x в области I. Этот процесс способствует накоплению тяжелого компонента на поверхности в окрестности точки $\zeta = 0$ и приводит к его интенсивной десорбции в объем. Затем конвективное течение в объеме переносит тяжелый компонент к нижней стенке тигля в области I и далее – в область II. После накопления вблизи дна полости, тяжелый компонент частично переносится объемным течением вверх. С другой стороны, вблизи точки $\zeta = 7$, имеется зона, обедненная поверхностной концентрацией. Это приводит к противоположному эффекту адсорбции из объема в верхней части области III. Более того, образуемый градиент поверхностной

концентрации приводит к стабилизации термокапиллярного течения вследствие концентрационно-капиллярного эффекта.

Таким образом, благодаря данной циркуляции примеси имеется видимый рост объемной концентрации тяжелого компонента вблизи нижней стенки тигля и ее уменьшение вблизи верхней стенки, что свидетельствует о частичном расслоении смеси. Вычисления по времени проводились до 50 безразмерных единиц, что примерно соответствует 0.5 – 1 ч реального времени. Как видно, этого достаточно для формирования стационарных профилей скорости и концентрации на поверхности стержня (рис. 3.30а). Как можно заметить, жидкость испытывает наибольшее ускорение в наиболее обедненной части поверхности, поэтому после адсорбции тяжелый компонент смеси незамедлительно начинает перемещаться в направлении торца (к точке $\zeta = 0$), где начинается его монотонное накопление. Как следствие, наиболее интенсивная десорбция происходит на торце стержня при $\zeta < 1$.

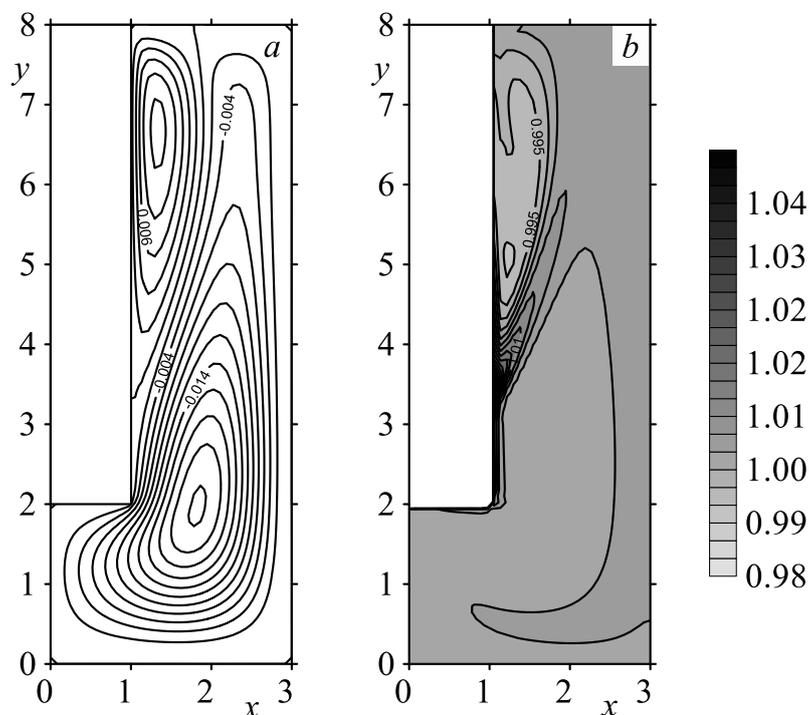


Рис. 3.32 Поля функции тока (а) и тяжелого компонента концентрации (b), $Ra_T = 1.5$

Как уже отмечалось, увеличение числа Рэлея может существенно изменить направление вращения в области III (рис. 3.32a). В данном случае вдоль стержня сохраняется вытянутый термокапиллярный вихрь, однако его доминированию под стержнем и в объеме тигля препятствует вихрь с противоположной закруткой, который появляется у правой стенки вследствие развития гравитационной конвекции. Это течение вымывает с торца примесь, поднимая его насколько можно вверх. В середине стержня происходит отрыв потока, и поле концентрации тяжелого компонента приобретает форму “концентрационного языка” (рис 3.32b).

Таким образом, для наиболее эффективного разделения смеси значения управляющих параметров в данной задаче следует выбирать таким образом, чтобы в системе проявлялся сильный термокапиллярный эффект. Малые числа Рэлея являются предпочтительными. Исходя из распределения объемной концентрации в требуемом режиме (рис. 3.31), конечная разность между максимальным и минимальным значениями концентрации тяжелого компонента примерно равна 6 %. Следует отметить, что поле концентрации характеризуется ярко выраженным средним градиентом, направленным вертикально вниз. Изолинии концентрации почти горизонтальны в нижней части тигля. Все это демонстрирует явное накопление тяжелого компонента у дна. Характерная “концентрационная вилка” показана на рис. 3.30c. Значения концентрации брались в двух точках: под стержнем ($x = 0, y = 1.8$) и в верхней части тигля ($x = 1.5, y = 3.0$). Профили скорости и концентрации на поверхности, также как и поля функции тока и температуры в объеме, становятся почти стационарными за достаточно короткий промежуток времени. С другой стороны, концентрационные времена такой системы гораздо больше, и можно заметить продолжающееся слабое разделение смеси даже на больших временах.

Касательные напряжения течения, сгенерированные поверхностной силой, могут в принципе привести к появлению концентрационного

пограничного слоя вблизи стержня. В то же время, в реальности величина этой силы достаточно мала, и при умеренных значениях управляющих параметров она приводит лишь к чрезвычайно медленному переносу поверхностно-активного компонента. Иными словами, свидетельств наличия ярко выраженного пограничного слоя в полях скорости, температуры или концентрации при данных условиях нет. Для проверки этого важного положения были проанализированы сечения поля концентрации в зависимости от поперечной координаты x для двух значений числа Рэлея (рис. 3.33). Указанные профили соответствуют высотам, на которых имеются наибольшие градиенты концентраций. Как видно из рисунка, пограничные слои вычислялись с достаточным разрешением во всех случаях.

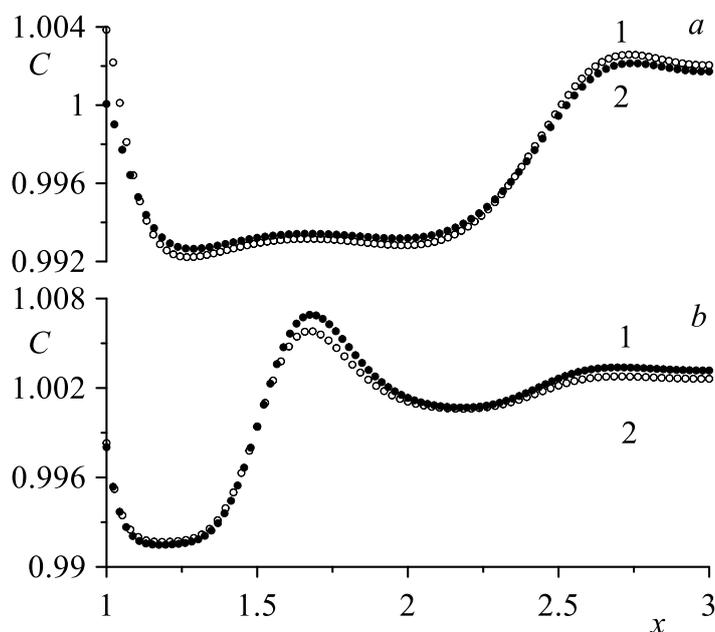


Рис. 3.33 Профили объемной концентрации при $Ra_T = 0.005, y = 2.3$ (a) и $Ra_T = 1.5, y = 5$ (b) в расчетах на различных сетках: 1 – 29:87:91, 2 – 25:75:77

Этот вывод соответствует независимой оценке безразмерной толщины пограничного слоя, которую можно выполнить по следующей формуле [148]:

$$\delta \sim \frac{1}{\sqrt{ReSc}} = \sqrt{\frac{D}{UL_1}},$$

где Re, Sc – числа Рейнольдса и Шмидта, D – коэффициент диффузии, U –

характерная скорость, которая оценивалась из результатов численного моделирования при переводе в размерные единицы как $U \sim 4.5 \cdot 10^{-5}$ м/с. Это значение дает $\delta \approx 0.26$ (в безразмерных величинах), из чего можно заключить, что в наших расчетах на пограничный слой приходится примерно 10 вычислительных узлов.

Глава 4. Термокапиллярная и термоконцентрационная конвекция в прямоугольном контейнере при наличии сурфактанта на свободной поверхности

4.1 Динамика пленки нерастворимого сурфактанта

4.1.1 Постановка задачи

В качестве еще одного интересного примера гидродинамической системы с зависимостью параметров от локальных характеристик среды рассмотрим поведение нерастворимого сурфактанта на свободной поверхности воды, заполняющей ячейку Хеле – Шоу [32]. В эксперименте роль сурфактанта играла олеиновая кислота. Геометрические параметры данной полости удовлетворяют следующему условию: $H, L \gg 2d$ (H – высота, L – длина, $2d$ – толщина полости). Со стороны верхней грани на систему действует тепловой поток, линейно зависящий от координаты x (рис. 4.1), как в эксперименте [69]. Данное условие приводит к появлению градиента температуры на свободной поверхности, вследствие чего может возникнуть крупномасштабная тепловая конвекция в объеме.

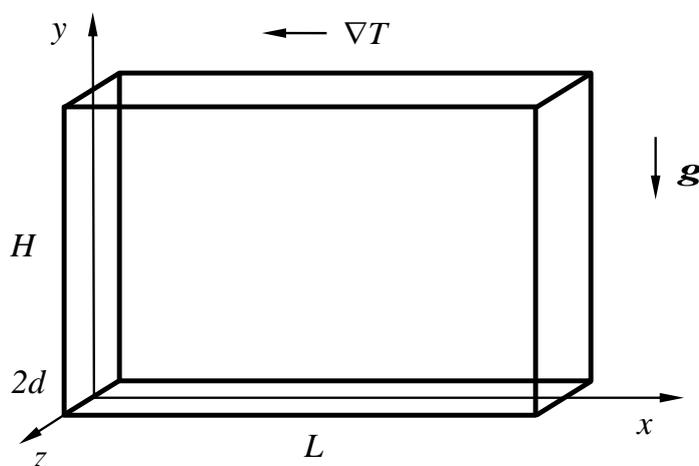


Рис. 4.1. Геометрия задачи. Система координат

Теоретическое исследование выполнялось путем решения в объеме уравнений тепловой конвекции в приближении Буссинеска [4]:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \Delta \mathbf{v} + g \beta T \boldsymbol{\gamma}, \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) T = \chi \Delta T, \quad \operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad (4.2)$$

где \mathbf{v} , p , T – поля скорости, давления и температуры, β – коэффициент температурного увеличения плотности, χ , ν – температуропроводность и кинематическая вязкость, g – величина ускорения свободного падения, $\boldsymbol{\gamma}$ – единичный вектор, направленный вертикально вверх.

Распределение концентрации нерастворимого сурфактанта в зависимости от времени описывалось уравнением:

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \nabla^s (\mathbf{v} \Gamma) = D_s \Delta^s \Gamma, \quad (4.3)$$

где Γ – поле поверхностной концентрации тяжелой компоненты смеси; D_s – коэффициент поверхностной диффузии. Индекс s у операторов обозначает дифференцирование по координатам свободной поверхности.

В настоящей постановке, аналогично задаче из раздела 3.2, рассматривалась как температурная, так и концентрационная неоднородность поверхностного натяжения: $\sigma = \sigma_0 - \sigma_T T - \sigma_\Gamma \Gamma$. Здесь σ_0 – равновесное значение коэффициента поверхностного натяжения, σ_T , σ_Γ – параметры, описывающие связь поверхностного натяжения с температурой и концентрацией. Таким образом, баланс касательных напряжений будет записан следующим образом:

$$x = H: \quad \eta \frac{\partial v_x}{\partial y} = -\sigma_T \frac{\partial T}{\partial x} - \sigma_\Gamma \frac{\partial \Gamma}{\partial x}. \quad (4.4)$$

Помимо всего прочего, как показывают эксперименты, данное граничное условие необходимо расширить для того, чтобы учесть фазовый переход сурфактанта из газового состояния в жидкорасширенное:

$$x = H: \quad \eta \frac{\partial v_x}{\partial y} = -\sigma_T \frac{\partial T}{\partial x} - \sigma_{\Gamma} f(\Gamma) \frac{\partial \Gamma}{\partial x}, \quad (4.5)$$

$$f(\Gamma) = 1 + k \left(1 + \operatorname{erf} \left(\delta \left(\frac{\Gamma}{\Gamma^*} - 1 \right) \right) \right).$$

Величина Γ^* определяет значение поверхностной концентрации, при котором совершается фазовый переход. Параметр δ определяет ширину зоны, в которой происходит фазовый переход. На границе полости ставится условие непроницаемости, поэтому

$$x = 0, L: \quad \frac{\partial \Gamma}{\partial x} = 0.$$

В то же время, граничные условия для скорости и температуры имеют вид:

$$\begin{aligned} x = 0, L, \quad y = 0: \quad T = 0, \quad \mathbf{v} = 0, \\ y = H: \quad \kappa \frac{\partial T}{\partial y} = A \left(1 - \frac{x}{L} \right). \end{aligned} \quad (4.6)$$

Здесь κ – коэффициент теплопроводности, A – эмпирический коэффициент с размерностью теплового потока. Модельное условие (4.6) описывает линейное распределение теплового потока на свободной поверхности, что наиболее подходит реализации нагрева в эксперименте.

Описанная задача была переформулирована в терминах безразмерных переменных. За единицу измерения расстояния, времени, скорости, температуры, давления и поверхностной концентрации брались следующие величины: d , d^2/ν , χ/d , Θ , $\rho\nu\chi/d^2$, Γ^* . Здесь Θ – характерная разность температур на верхней горизонтальной границе, при которой появляется участок поверхности, свободный от сурфактанта при начальной поверхностной концентрации $\Gamma_0 = 0.1$.

Система уравнений и граничные условия в безразмерной форме будут иметь следующий вид:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{1}{\operatorname{Pr}} (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \Delta \mathbf{v} + \operatorname{Ra} T \mathbf{y}, \quad (4.7)$$

$$\text{Pr} \frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) T = \Delta T, \quad \text{div} \mathbf{v} = 0, \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}} \nabla^s (\mathbf{v} \Gamma) = \frac{1}{\text{Sc}_s} \Delta^s \Gamma, \quad (4.9)$$

$$x = 0, l, \quad y = 0: \quad T = 0, \quad \mathbf{v} = 0,$$

$$y = h: \quad \frac{\partial T}{\partial y} = a \left(1 - \frac{x}{l} \right). \quad (4.10)$$

$$x = 0, l: \quad \frac{\partial \Gamma}{\partial x} = 0.$$

где l, h – безразмерные длина и высота полости,

$$\text{Ra} = \frac{g\beta\Theta d^3}{\nu\chi}, \quad \text{Pr} = \frac{\nu}{\chi}, \quad \text{Sc}_s = \frac{\nu}{D_s}, \quad a = \frac{dA}{\kappa\Theta}.$$

Здесь Ra и Pr – числа Рэлея и Прандтля, Sc_s – поверхностное число Шмидта, a – безразмерный параметр теплоотдачи. Помимо этого, геометрия задачи позволяет использовать приближение плоских траекторий с введением функции тока $v_x = \partial\Psi/\partial y$, $v_y = -\partial\Psi/\partial x$. Решение системы уравнений будем искать в виде

$$\Psi = \psi(x, y, t) \cos\left(\frac{\pi z}{2}\right), \quad T = \theta(x, y, t) \left(1 + \frac{2a}{\pi} \cos\left(\frac{\pi z}{2}\right) \right), \quad \Gamma = \Gamma(x, t). \quad (4.11)$$

Подстановка разложений (4.11) в систему уравнений (4.7) – (4.9) и дальнейшее осреднение по поперечной координате z преобразует систему уравнений к конечному виду в приближении Хеле – Шоу:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{8}{3\pi \text{Pr}} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) &= \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} - \frac{\pi^2}{4} \varphi - \text{Ra} \frac{\partial \theta}{\partial x}, \\ \text{Pr} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{8}{3\pi} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \theta}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) &= \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} - \frac{\pi^2}{4} \theta, \quad \varphi = \Delta \psi, \\ \frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \frac{2}{\pi \text{Pr}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \Gamma \right) &= \frac{1}{\text{Sc}_s} \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial x^2}, \end{aligned}$$

где φ – завихренность. Граничное условие (4.5) в терминах конечных переменных будет таким:

$$x = H : \quad \varphi = -\text{Ma}_T \frac{\partial \Gamma}{\partial x} - \text{Ma}_\Gamma \tilde{f}(\Gamma) \frac{\partial \Gamma}{\partial x},$$

$$\tilde{f}(\Gamma) = 1 + k(1 + \text{erf}(\delta(\Gamma - 1))),$$

где Ma_T , Ma_Γ – тепловое и концентрационное числа Марангони:

$$\text{Ma}_T = \frac{\sigma_T \Theta d}{\eta \chi}, \quad \text{Ma}_\Gamma = \frac{\sigma_\Gamma \Gamma^* d}{\eta \chi}.$$

Для дальнейшего анализа получаемых результатов удобно ввести дополнительный параметр, а именно – параметр упругости:

$$E = \frac{\text{Ma}_\Gamma}{\text{Ma}_T} = \frac{\sigma_\Gamma \Gamma^*}{\sigma_T \Theta}.$$

Известно, что олеиновая кислота, используемая в эксперименте, характеризуется значением $\Gamma^* = 0.38$. В условии (4.10) значение нормировочного множителя выбиралось для согласованности результатов численного моделирования с экспериментальными данными. Для трех начальных значений безразмерной поверхностной концентрации $\Gamma_0 = 0.1, 0.2, 0.3$ значения безразмерного теплового потока были $a = 0.011, 0.02, 0.038$. В граничном условии (4.5) значения параметров выбирались следующими: $k = 5, \delta = 20$. Следует отметить, что для олеиновой кислоты значение k должно быть несколько больше, однако оно не было увеличено из соображений устойчивости численной схемы.

4.1.2 Описание численной процедуры

Данная эволюционная задача решалась численно при помощи метода конечных разностей с использованием уже описанной выше двухполевой методики [131]. Двумерный компьютерный код был написан на языке Fortran-90. При аппроксимации производных по времени и производных по координатам использовалась прямоугольная равномерная по осям сетка [132]. Шаг по времени выбирался из соображений устойчивости численной

процедуры. При решении уравнения Пуассона для функции тока в каждый момент времени применялся метод простых итераций [133].

Таблица 4.1. Оценка сходимости метода

	N_1	N_2	$\Delta E, \%$	$\Delta\psi_{max}, \%$
1	101	63	-	-
2	151	95	$\Delta E_{12} = 24.32$	$\Delta\psi_{12} = 11.21$
3	201	127	$\Delta E_{23} = 13.37$	$\Delta\psi_{23} = 4.95$
4	251	161	$\Delta E_{34} = 8.36$	$\Delta\psi_{34} = 3.38$
5	301	191	$\Delta E_{45} = 6.14$	$\Delta\psi_{45} = 3.23$

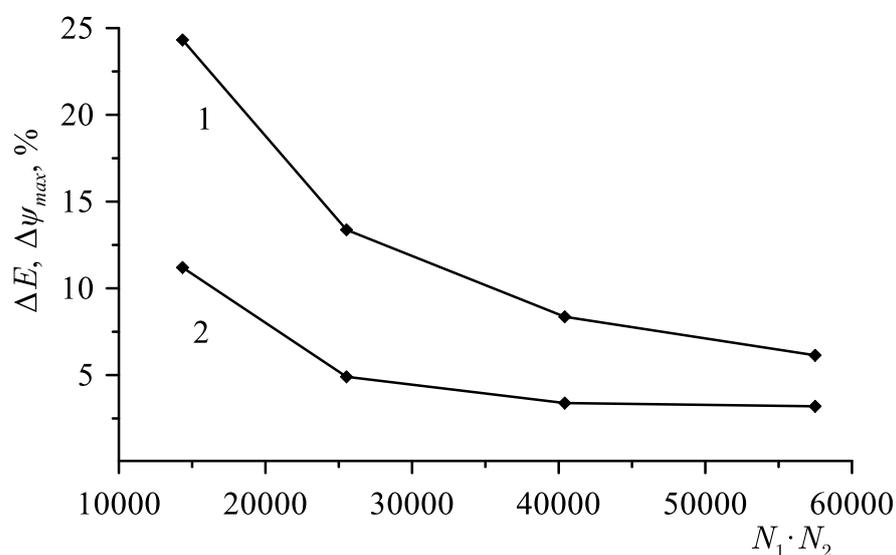


Рис. 4.2. Относительная разность кинетических энергий (% , ломаная линия 1) и максимума функций тока (% , ломаная линия 2) для сеток с разным количеством вычислительных узлов

В ходе расчетов использовался метод установления. Вычислительная сетка разбивалась на 251 узел по горизонтали и 169 узлов по вертикали. Безразмерные значения сторон полости были равны $l = 12, h = 5$ и с хорошей точностью соответствовали эксперименту. Анализ сходимости метода проводился путем сравнения отклонений максимальных значений функции тока и кинетической энергии (таблица 4.1, рис. 4.2).

Начальными условиями служили невозмущенные поля функции тока ($\psi = 0$) и завихренности ($\varphi = 0$). В качестве начального значения поверхностной

концентрации выбиралось однородное распределение с разным заполнением поверхности: $\Gamma_0 = 0.1, 0.2, 0.3$. Поле температуры в объеме полости в начальный момент времени также было невозмущенным ($\theta = 0$), однако на поверхности она определялась из граничного условия (4.10).

Следует отметить, что данное условие может вносить большую ошибку в решение, а именно, для разных плотностей вычислительных сеток значение температуры, и, как следствие, значение вихря на межфазной границе могло сильно варьироваться, изменяя вслед за собой положение точки стагнации. Для минимизации этой ошибки производная в данном граничном условии вычислялась при помощи пятиточечная аппроксимации (см. раздел 3.1.3).

Значения параметра упругости изменялись в диапазоне от 0 до 1 путем изменения теплового числа Марангони Ma_T . Остальные параметры были фиксированными: $Ra = 600, Pr = 7, Sc_S = 1000, Ma_T = 1000$.

4.1.3 Обсуждение результатов

Результаты численного моделирования двух предельных случаев ($E > 1$ и $E = 0$) представлены на рис. 4.2. В первом случае (рис. 4.2a) термокапиллярный эффект не вносит существенного вклада в развитие течения на поверхности поэтому распределение сурфактанта практически не меняется по отношению к начальному условию: поверхность остается полностью закрытой квазитвердой пленкой. При этом в объеме возникает слабое течение за счет неоднородного нагрева сверху.

Второй случай (рис. 4.2b) соответствует сильному термокапиллярному эффекту, который генерирует интенсивное течение на поверхности и полностью вытесняет сурфактант к правой твердой границе полости. Поверхность в данном случае становится полностью очищенной, а в объеме ячейки возникает сильное течение.

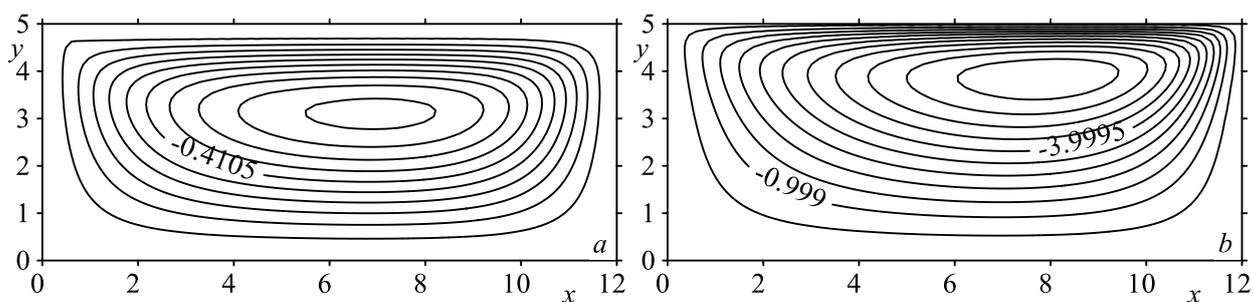


Рис. 4.2. Поля функции тока для предельных случаев $E = 1.1$ (a) и $E = 0$ (b)

Наиболее интересными для изучения являются промежуточные значения параметра упругости $0 < E < 1$, при которых только начинается вытеснение сурфактанта и на поверхности появляются два участка: свободный и закрытый пленкой. Эти участки отделяются точкой стагнации. Поля функции тока и температуры, соответствующие различным значениям E представлены на рис. 4.3 [32].

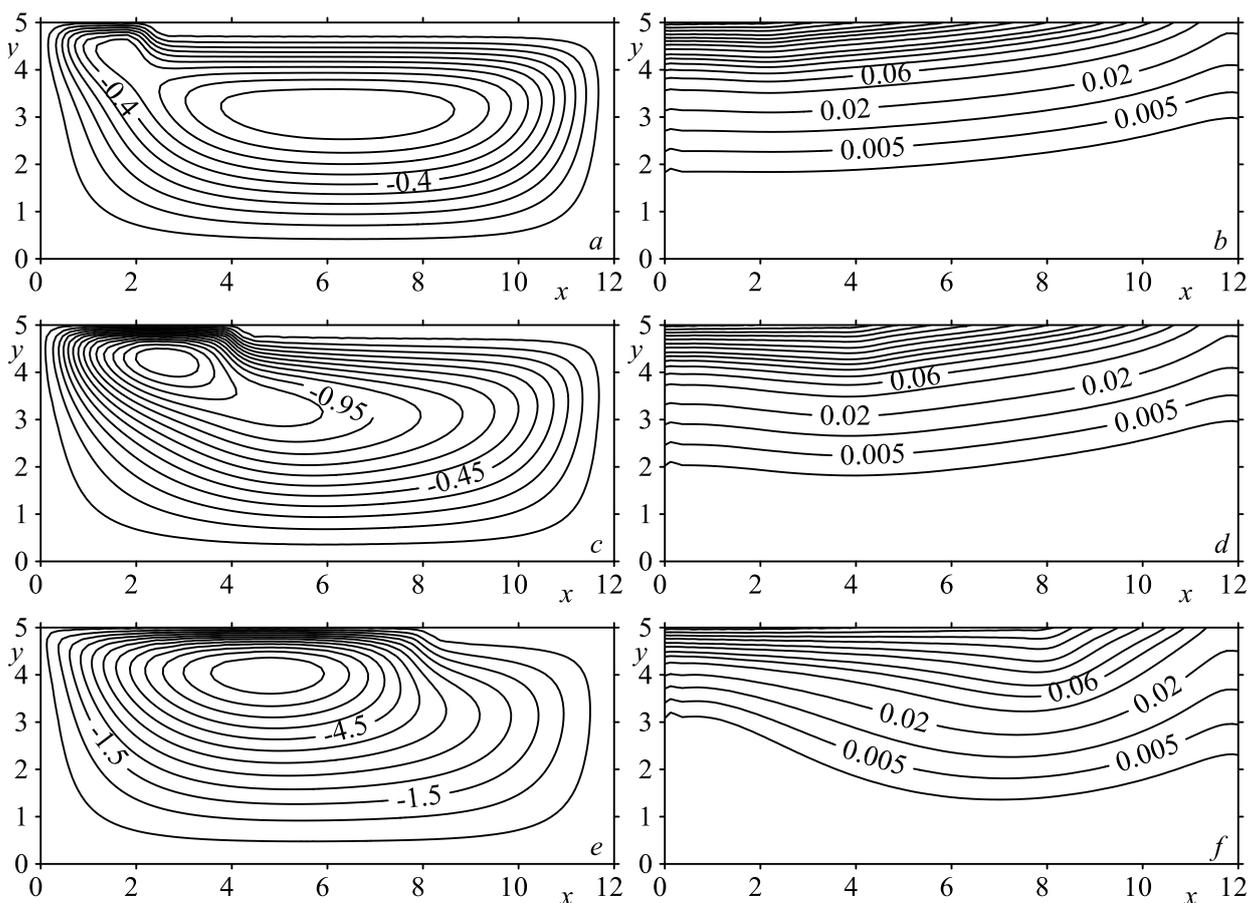


Рис. 4.3. Поля функции тока (a, c, e) и температуры (b, d, f). Верхний ряд: $E = 0.8$, средний – $E = 0.6$, нижний – $E = 0.2$

Уменьшение параметра упругости с ростом теплового числа Марангони Ma_T приводит к смещению точки стагнации в правую, более холодную, часть поверхности. Это смещение сильно меняет профили поверхностной концентрации (рис. 4.4a).

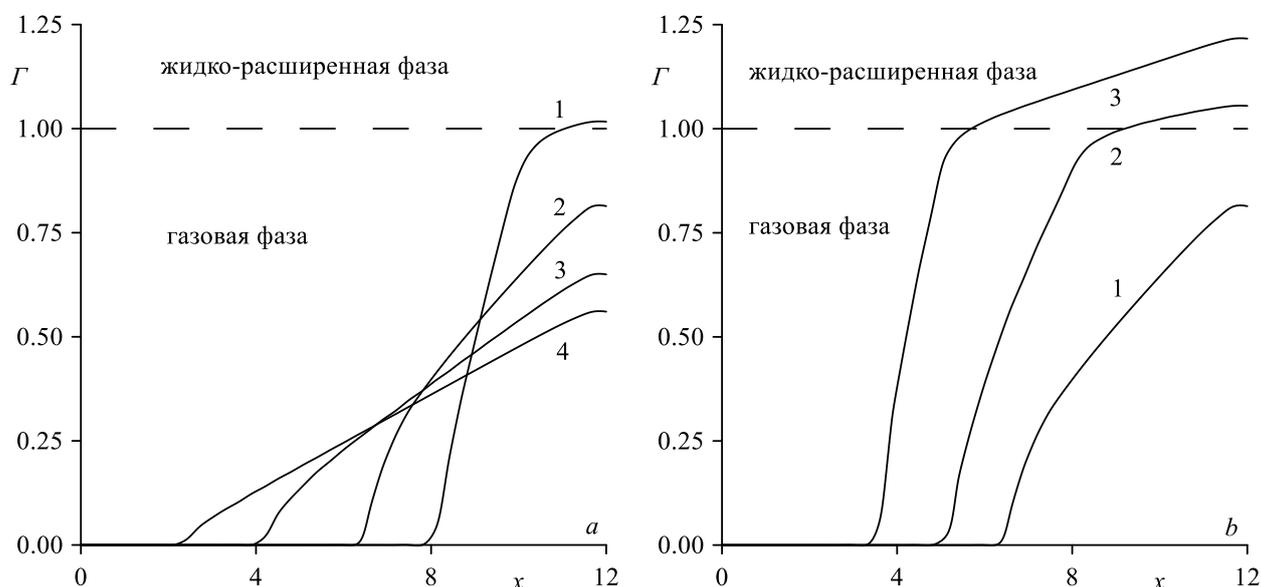


Рис. 4.4. Профили сурфактанта при фиксированном начальном значении поверхностной концентрации $\Gamma_0 = 0.1$, но для различных значений параметра упругости E : 1 – 0.1, 2 – 0.4, 3 – 0.6, 4 – 0.8 (a); профили сурфактанта при фиксированном параметре упругости $E = 0.4$, но для трех значений начальной концентрации сурфактанта Γ_0 : 0.1, 0.2, 0.3 (b)

В левой части профиля значение поверхностной концентрации равно нулю, что означает полное вытеснение сурфактанта термокапиллярным течением. Далее, после точки стагнации, значение поверхностной концентрации резко начинает увеличиваться, т.е. на поверхности появляется квазитвердая пленка. С увеличением E растет максимальное значение поверхностной концентрации. По достижении определенного значения параметра упругости, концентрация сурфактанта становится больше, чем Γ^* , что приводит к фазовому переходу “газовое состояние – жидкорасширенное состояние”. Об этом свидетельствует изменение наклона профиля в правой части. Данный наклон определяется значением параметра k в условии (4.5).

Влияние начальной поверхностной концентрации на профиль

сурфактанта и положение точки стагнации при фиксированном E демонстрируется на рис. 4*b*. Видно, что при увеличении Γ_0 значение параметра упругости, при котором происходит фазовый переход, увеличивается. Другими словами, при росте Ma_T концентрация сурфактанта быстрее достигает точки, в которой происходит фазовый переход, если изначально поверхность является более насыщенной. Так, при $\Gamma_0 = 0.1$ даже при больших E почти весь профиль находится в газовом состоянии. Но уже при $\Gamma_0 = 0.3$ достаточно небольших перепадов температур, чтобы произвести фазовый переход. Как будет показано далее, учет данного эффекта оказывает сильное влияние на положение точки стагнации.

Аналогичную тенденцию имеют профили скорости и температуры на поверхности (рис. 4.5). На свободном участке поверхности (левая часть профиля) значение скорости достигает максимального значения, далее, по прошествии точки стагнации (правая часть профиля), оно устремляется к нулю из-за сильного концентрационно-капиллярного механизма. Также, разделение поверхности на две области видно из профиля температуры, который состоит из двух линейных участков, разделяемых точкой стагнации.

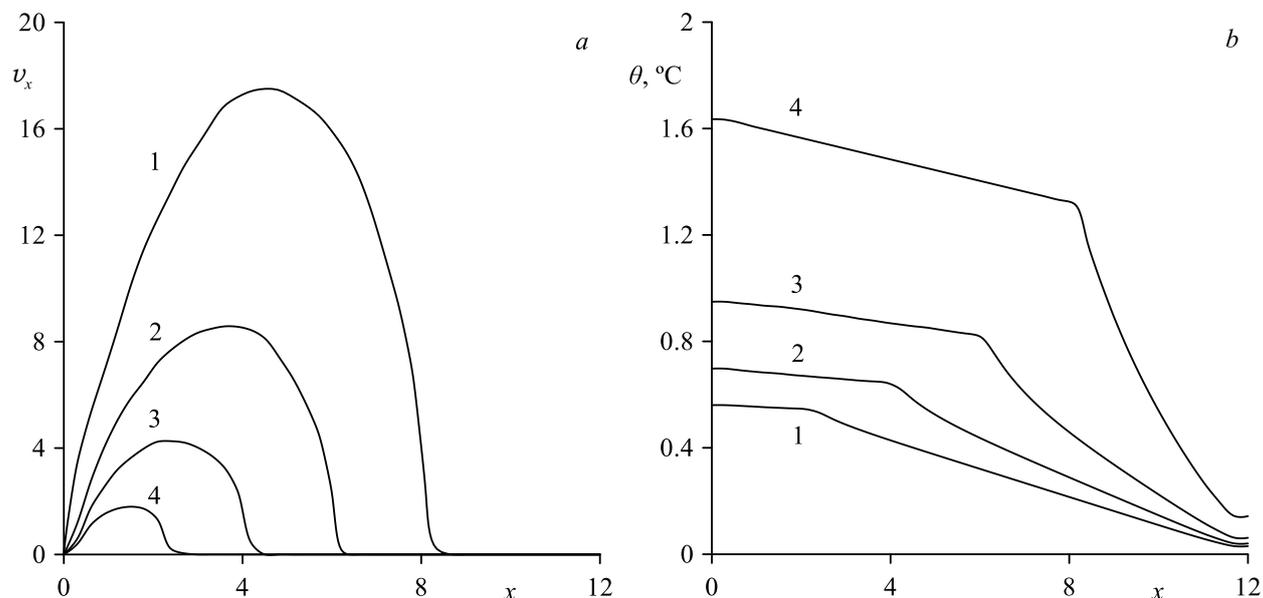


Рис. 4.5. Профили скорости (а) и температуры (б) на поверхности при фиксированной начальной концентрации $\Gamma_0 = 0.1$. 1 – $E = 0.2$, 2 – $E = 0.4$, 3 – $E = 0.6$, 4 – $E = 0.8$

Положение точки стагнации в зависимости от параметра упругости представлено на рис. 4.6. В отличие от аналитических зависимостей, полученных в [68], имеется хорошее согласие численных результатов с данными эксперимента. Для малых начальных значений поверхностной концентрации (кривая 1) имеется практически линейная зависимость между положением точки стагнации и параметром упругости (при $E > 0.5$). С другой стороны, как и в эксперименте, при $E < 0.5$ имеется сильное отклонение от линейного закона, поскольку сурфактант совершает фазовый переход и частично переходит в жидкорасширенное состояние, характеризующееся меньшей способностью к сжатию, чем газовое. Это приводит к увеличению сопротивления пленки и торможению продвижения точки стагнации. Тем не менее, при $E \rightarrow 0$ сильное термокапиллярное течение полностью сжимает пленку сурфактанта у правой стенки полости. Увеличение начального значения поверхностной концентрации приводит к более раннему появлению жидкорасширенной фазы (кривые 2 и 3). В этих случаях область параметров, в которой сосуществуют газовая и жидкорасширенная фаза увеличивается, и отклонение от линейного закона происходит при больших значениях E .

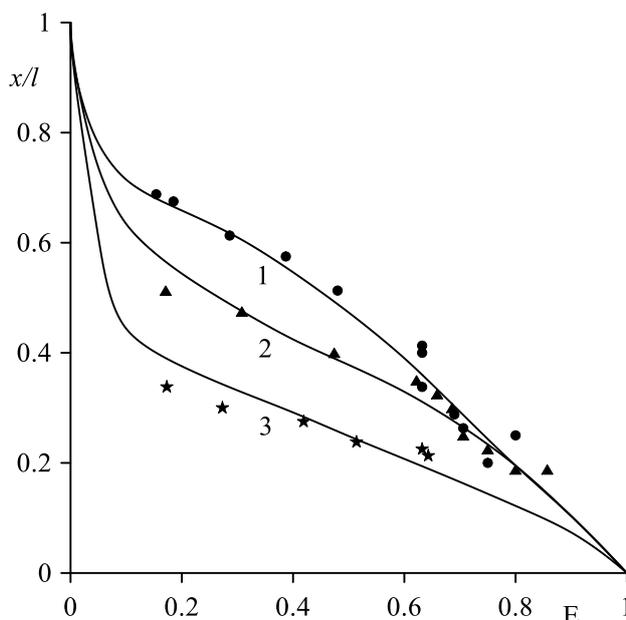


Рис. 4.6. Влияние параметра упругости на ширину свободного участка поверхности. Круги, треугольники и звезды соответствуют данным экспериментов [13,32]: 1 – $\Gamma_0 = 0.1$, 2 – $\Gamma_0 = 0.2$, 3 – $\Gamma_0 = 0.3$

4.2 Случай растворимого сурфактанта на свободной поверхности

4.2.1 Учет растворимости поверхностно-активного вещества

Рассмотрим более общую задачу, в которой двухкомпонентная смесь равномерно распределена по объему, а также покрывает свободную поверхность жидкости, заполняющей ячейку Хеле – Шоу (рис. 4.1). При этом тяжелый компонент данной смеси является поверхностно активным и может проникать из поверхностной фазы в объемную и наоборот, т.е. является растворимым. По аналогии с разделом 4.1 имеется постоянный неоднородный нагрев сверху, отвечающий линейной зависимости теплового потока от продольной координаты.

Движение жидкости, поведение сурфактанта в объеме и теплоперенос можно описать стандартными уравнениями (3.1) – (3.3). В свою очередь, перенос растворимого сурфактанта вдоль свободной поверхности будет подчиняться более общему уравнению переноса примеси, которое использовалось в главе 3:

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \nabla^s (\mathbf{v}\Gamma) = D_s \Delta^s \Gamma + k_A C \left(1 - \frac{\Gamma}{\Gamma_\infty} \right) - k_D \Gamma .$$

Единственным отличием будет учет насыщения поверхности сурфактантом в слагаемом, отвечающим за адсорбционный поток в уравнении поверхностной концентрации. Соответственно, Γ_∞ – предельное значение поверхностной концентрации.

В дополнение к граничным условиям, сформулированным в разделе 4.1.1, в данной постановке будут условия непроницаемости:

$$x = 0, L, \quad y = 0: \quad \frac{\partial C}{\partial n} = 0,$$

а также закон сохранения при переносе тяжелого компонента из объемной фазы в поверхностную, и наоборот:

$$y = H: \quad -\frac{1}{Sc} \frac{\partial C}{\partial y} = k_A C \left(1 - \frac{\Gamma}{\Gamma_\infty}\right) - k_D \Gamma.$$

В разделе 4.1 концентрация сурфактанта изменялась не очень сильно, поэтому для описания его состояния достаточно было использовать изотерму Гиббса (4.4), с возможностью фазового перехода “газообразное состояние – жидкорасширенное состояние” (4.5). В пределах одной фазы такая изотерма устанавливает линейный характер зависимости поверхностного натяжения от температуры и концентрации. В настоящей постановке предполагается, что растворимое поверхностно-активное вещество не испытывает фазовый переход, однако значение поверхностной концентрации, вообще говоря, может быть достаточно большим, поэтому состояние сурфактанта определялось более общей изотермой адсорбции Ленгмюра [99]:

$$\sigma = \sigma_0 + RT\Gamma_\infty \ln\left(1 - \frac{\Gamma}{\Gamma_\infty}\right).$$

Здесь R – универсальная газовая постоянная.

Таким образом, баланс касательных напряжений будет записан в виде:

$$x = H: \quad \eta \frac{\partial v_x}{\partial y} = R\Gamma_\infty \ln\left(1 - \frac{\Gamma}{\Gamma_\infty}\right) \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{T}{1 - \frac{\Gamma}{\Gamma_\infty}} \frac{\partial \Gamma}{\partial x}. \quad (4.12)$$

Решение данной задачи проводилось в безразмерных переменных. За единицы измерения расстояния, времени, скорости, температуры, давления, объемной и поверхностной концентрации были приняты следующие величины: d , d^2/ν , χ/d , Θ , $\rho\nu\chi/d^2$, C_0 , Γ_∞ . Здесь C_0 – начальное значение концентрации сурфактанта в объеме.

В безразмерном виде система уравнений и граничные условия будут

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{1}{Pr} (\mathbf{v}\nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \Delta \mathbf{v} + (Ra_T T - Ra_C C) \boldsymbol{\gamma},$$

$$Pr \frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla) T = \Delta T,$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}}(\mathbf{v}\nabla)C = \frac{1}{\text{Sc}}\Delta C,$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}}\nabla^s(\mathbf{v}\Gamma) = \frac{1}{\text{Sc}_s}\Delta^s\Gamma + k_+C(1-\Gamma) - k_-\Gamma,$$

где

$$\text{Ra}_T = \frac{g\beta_T\Theta d^3}{\nu\chi}, \quad \text{Ra}_C = \frac{g\beta_C C_0 d^3}{\nu\chi}, \quad \text{Pr} = \frac{\nu}{\chi}, \quad \text{Sc} = \frac{\nu}{D}, \quad \text{Sc}_s = \frac{\nu}{D_s},$$

$$k_+ = \frac{k_A C_0 d^2}{\Gamma_\infty \nu}, \quad k_- = \frac{k_D d^2}{\nu}.$$

$$x = 0, L, y = 0: \quad T = 0, \quad \mathbf{v} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial n} = 0,$$

$$x = 0, L: \quad \frac{\partial \Gamma}{\partial x} = 0,$$

$$y = H: \quad \frac{\partial T}{\partial y} = a(1-x), \quad \frac{\partial C}{\partial y} = \text{Sc}k(k_+C(1-\Gamma) - k_-\Gamma),$$

где $k = \Gamma_\infty/dC_0$.

Задача решалась в терминах функции тока и завихренности, которые вводились стандартным для данной главы образом. В приближении Хеле – Шоу функция тока и поле температуры аппроксимировались так:

$$\Psi = \psi(x, y, t) \cos\left(\frac{\pi z}{2}\right), \quad T = \theta(x, y, t) \left(1 + \frac{2a}{\pi} \cos\left(\frac{\pi z}{2}\right)\right).$$

После осреднения по поперечной координате система уравнений принимает окончательный вид:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{8}{3\pi \text{Pr}} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} - \frac{\pi^2}{4} \varphi - \text{Ra}_T \frac{\partial \theta}{\partial x} + \text{Ra}_C \frac{\partial C}{\partial x},$$

$$\text{Pr} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{8}{3\pi} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \theta}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) = \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} - \frac{\pi^2}{4} \theta, \quad \varphi = \Delta \psi,$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{8}{3\pi \text{Pr}} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial y} \right) = \frac{1}{\text{Sc}} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right),$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \frac{2}{\pi \text{Pr}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \Gamma \right) = \frac{1}{\text{Sc}_s} \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial x^2} + k_+C(1-\Gamma) - k_-\Gamma.$$

Условие (4.12) также переписывается:

$$\varphi = \text{Ma} \left(\ln(1 - \Gamma) \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{T}{1 - \Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial x} \right),$$

где Ma – число Марангони:

$$\text{Ma} = \frac{R\Gamma_{\infty}\Theta d}{\chi\eta}.$$

Для решения поставленной задачи использовался метод конечных разностей, реализованный на языке программирования Fortran-90. Особенности численной процедуры описаны в разделе 4.1.2. Выполнение численной процедуры происходило с технологией распараллеливания OpenMP, что позволило увеличить производительность на 20 %.

При соотношении сторон ячейки $L/H = 12/5$ использовалась сетка 251:169. В качестве рабочей жидкости была выбрана двухкомпонентная смесь с тяжелым поверхностно-активным компонентом, значения параметров которого, за исключением плотности, совпадают с параметрами гексанола. В качестве легкого компонента в смеси выступает вода. Начальными условиями служили невозмущенные поля функции тока ($\Psi = 0$), завихренности ($\varphi = 0$), объемной ($C = 1$) и поверхностной ($\Gamma = 0.2$) концентрации. Поле температуры в объеме также было невозмущенным ($T = 0$), однако вдоль поверхности поддерживалось постоянное распределение в виде линейной зависимости теплового потока от координаты поверхности. Безразмерные параметры имели следующие значения: $\text{Ra}_T = 600$, $\text{Ra}_C = 1000$, $\text{Ma} = 1000$, $a = 0.011$, $k = 0.002$, $k_+ = 0.0017$, $k_- = 0.013$, $\text{Sc} = 1500$, $\text{Sc}_S = 150$, $\text{Pr} = 7$.

4.2.2 Обсуждение результатов

Результаты расчетов показали, что к безразмерному моменту времени $t = 1000$, что соответствует примерно 40 с, данная система выходит на стационар, которому соответствуют установившиеся поля функции тока и

концентрации (рис. 4.7), а также профили концентрации, скорости и температуры вдоль поверхности (рис. 4.8-4.9). Несмотря на то, что к этому моменту времени все характеристики данной системы не меняются, вдоль межфазной поверхности постоянно происходит интенсивный перенос сурфактанта за счет приложенного перепада температуры. Направление переноса совпадает направлением термокапиллярного течения, а именно, против градиента температуры. С течением времени сурфактант накапливается вблизи холодной стенки полости, вследствие чего возникают условия для возникновения десорбционного потока, т.е. переноса сурфактанта в объем ячейки. Там он увлекается объемным течением и переносится вдоль всей ячейки к горячей области поверхности, которая, в отличие от холодной, является обедненной. За счет адсорбции ПАВ переносится на поверхность, где снова подхватывается термокапиллярным течением.

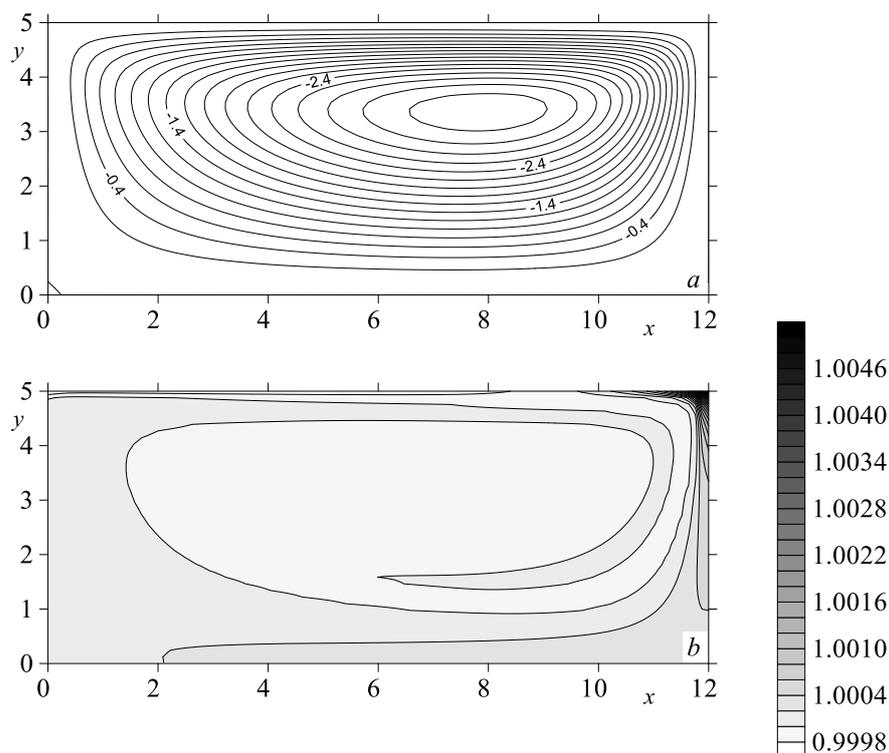


Рис. 4.7. Поля функции тока (a) и объемной концентрации (b)

Отдельно следует отметить, что режимы течений и соответствующие поля концентрации могут сильно отличаться в зависимости от выбранного поверхностно-активного вещества. В рассмотренном случае тяжелого сурфактанта может возникнуть ситуация, в которой в центре полости образуется “концентрационный язык” нейтральной плавучести (рис. 4.7*b*). Его возникновение связано с некоторым охлаждением ПАВ после проникновения в объем и дальнейшим движением вдоль холодной стенки в нижнюю часть ячейки. При течениях с умеренными скоростями сурфактант при достижении средней высоты полости будет иметь плотность сравнимую с плотностью окружающей жидкости, что позволит ему двигаться дальше не в сторону нижней стенки, а вдоль горизонтальной оси x (рис. 4.1). При этом данное движение будет гораздо медленнее, чем то, что формируется на межфазной поверхности, из-за чего происходит постепенное накопление тяжелой примеси в правой части ячейки. Тем не менее, движение примеси вдоль сформированного “языка” будет продолжаться. Рано или поздно концентрационный язык достигнет вертикальной левой стенки и будет двигаться с объемным течением в сторону межфазной поверхности, где происходит адсорбция тяжелого компонента в поверхностный слой.

Из получающегося профиля сурфактанта (рис. 4.8*a*) и его сопоставления с полем объемной концентрации (рис. 4.7*b*) следует отметить, что бо́льшая часть поверхности является обедненной. Соответственно, как под ней, так и под обогащенной областью возникают достаточно интенсивные концентрационные потоки, которые могут приводить к появлению концентрационного пограничного слоя, толщину которого можно оценить тем же способом, что использовался в разделе 3.6.3 [148]:

$$\delta \sim \frac{1}{\sqrt{\text{ReSc}}} = \sqrt{\frac{D}{Ud}},$$

Характерная скорость, которая оценивалась как $U \sim 6 \cdot 10^{-5}$ м/с, дает безразмерное значение $\delta \approx 0.30$, из чего можно заключить, что на

пограничный слой приходится примерно 12 вычислительных узлов.

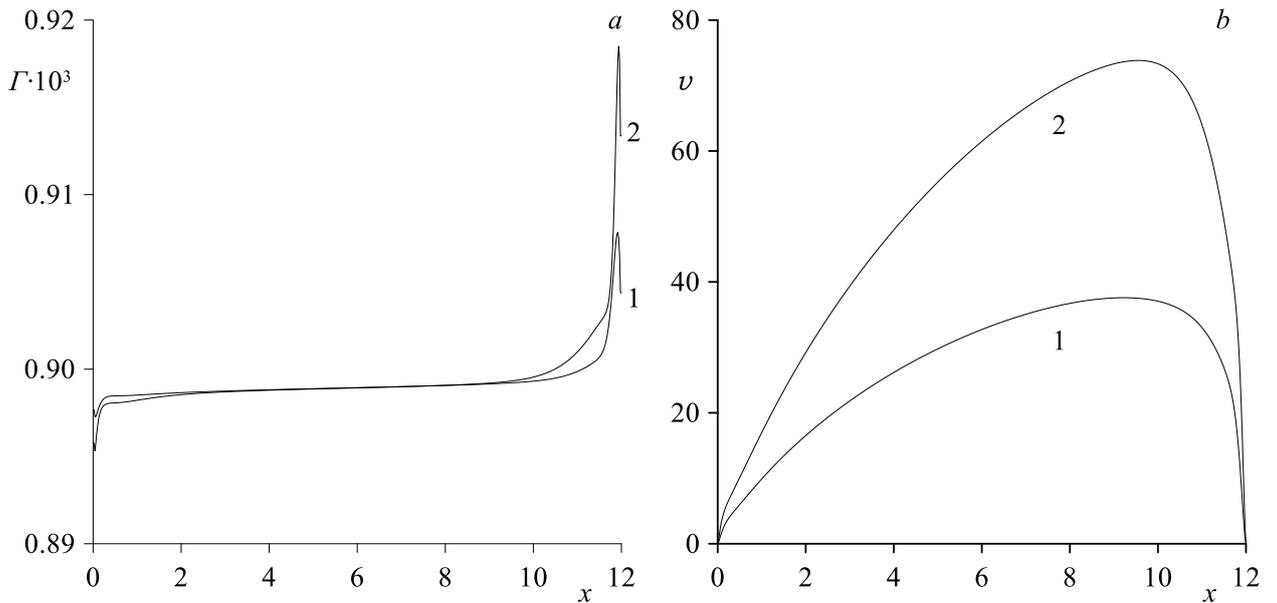


Рис. 4.8. Профили концентрации (a) и скорости (b) вдоль межфазной поверхности:
1 – $Ma = 100$, $Ma_T = 300$, 2 – $Ma = 1000$, $Ma_T = 1000$

Поскольку данная постановка является общим случаем задачи в разделе 4.1, на поверхности может возникнуть аналог точки стагнации, в которой профили поверхностной концентрации, скорости и температуры будут испытывать излом. Однако, многообразие поверхностно-активных веществ и их свойств приводит к тому, что получаемые режимы течения могут сильно отличаться друг от друга при малейших изменениях рабочей смеси. В данном случае результаты численного моделирования показали, что на границе раздела выбранный сурфактант ведет себя во многом аналогично олеиновой кислоте при малых параметрах упругости. Отличие заключается в том, что в обедненную область поверхности постоянно адсорбируется ПАВ из объема, чего не было в случае нерастворимого сурфактанта. Из-за этого не формируются явно выраженные точки стагнации, поскольку поверхность никогда не становится полностью “чистой” (рис. 4.8a). Несмотря на это, ПАВ не образует квазитвердую пленку, на которой компоненты скорости стремятся к нулю, как это было в случае нерастворимого сурфактанта при

больших E . Наоборот, вдоль всей поверхности имеется достаточно интенсивный перенос (рис. 4.8b).

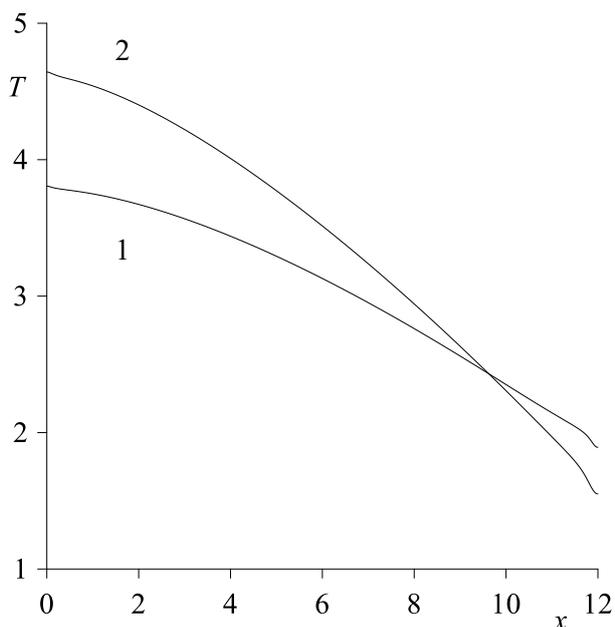


Рис. 4.9. Распределение температуры на межфазной поверхности: 1 – $Ma = 100$, $Ma_T = 300$, 2 – $Ma = 1000$, $Ma_T = 1000$

При этом, как и следует ожидать в случае отсутствия полностью “открытой” части поверхности, профиль температуры (рис. 4.9) остается практически линейным без изломов.

Заключение

Итоги выполненного исследования

Получено теоретическое объяснение проблемы формирования стационарных конвективных течений в ячейке Хеле – Шоу при равномерном подогреве снизу. По результатам аналитических расчетов и данных численного моделирования было определено, что включение в математическую модель факторов температурной неоднородности вязкости в объеме и конечной теплопроводности широких вертикальных граней является обязательным, если ставится задача получения адекватного сценария наблюдавшегося ранее в эксперименте усложнения течений сильновязких жидкостей. Установлено, что варьирование теплопроводности узких вертикальных граней обеспечивает стабилизацию определенных режимов, в результате чего в модельных расчетах становится возможным как прямой, так и обратный переход «одновихревой стационарный – двухвихревой режимы». При этом на карте течений будет существовать гистерезисная область, в которой навязанными начальными условиями будет определяться не только количество вихрей в течении, но и конечная их закрутка. Неоднородность вязкости приводит к нарушению симметрии течения «верх – низ», в результате чего при прямом переходе вытеснять основное течение будет именно нижний угловой вихрь, рост которого приводит к подъемному движению вдоль боковых граней, что согласуется с опытом.

Разработана теоретическая модель, позволяющая объяснить перераспределение компонентов эвтектических расплавов металлов при их взаимодействии с неоднородно нагретыми поверхностями стенок капилляров из алунда или кварцевого стекла. В ее основе лежит допущение полной несмачиваемости данных поверхностей, за счет чего на них в ходе выдержки в печи могут возникать термо- и концентрационно-капиллярные силы,

которые в совокупности с механизмами адсорбции-десорбции могут привести к сравнительно быстрому продольному разделению изначально однородной смеси на компоненты. Данная модель была испытана для случаев как вертикально ориентированного, так и наклонного тонкого капилляра. Результаты численного моделирования продемонстрировали хорошее согласие с известными на данный момент экспериментальными данными, а именно, временем разделения смеси, конечной формой профилей концентрации в продольном и поперечном сечении капилляра, а также величиной разделения смеси и влиянием на нее угла наклона капилляра. Помимо этого, предложенная модель объясняет механизм аномального разделения смеси Al-Si, когда более тяжелый компонент накапливается не в нижней, а в верхней части капилляра.

Предложенная теоретическая модель позволила рассмотреть обратную технологическую задачу, в которой неоднородно нагретый рабочий стержень из алунда погружается в однородный двухкомпонентный эвтектический расплав металлов. Здесь возникают условия, при которых работают те же механизмы, что и в уже описанных условиях при разделении смесей в тонких капиллярах. Это позволяет предсказать эффект накопления тяжелого компонента смеси вблизи дна тигля, содержащего расплав.

Численно исследовано поведение пленки нерастворимого сурфактанта на свободной поверхности жидкости, заполняющей ячейку Хеле – Шоу, в случае неоднородного нагрева сверху. Определены условия, при которых на поверхности возникает точка стагнации, разделяющая свободный участок поверхности от области, покрытой пленкой сурфактанта. Для этого был введен параметр упругости пленки ПАВ. В ходе численного моделирования учитывалась возможность присутствия пленки как в газообразном, так и в жидкорасширенном состоянии. При увеличении интенсивности нагрева термокапиллярное течение на свободном участке сильнее сжимает пленку, вследствие чего происходит фазовый переход в поверхностном

молекулярном слое. Это позволило получить результаты, согласующиеся с экспериментальными данными, в которых положение точки стагнации в зависимости от параметра упругости перестает подчиняться линейному закону при возникновении жидкорасширенного состояния в пленке.

Помимо этого, было рассмотрено поведение пленки растворимого сурфактанта на поверхности жидкости-носителя при включении механизмов адсорбции-десорбции. Определены условия, при которых нагретое поверхностно-активное вещество проникает в объемную фазу и, двигаясь по потоку жидкости вдоль стенки ячейки, находит в объеме область нейтральной плавучести, после чего перемещается в горизонтальном направлении, пока не достигнет противоположной стенки и, двигаясь вместе с основным течением в сторону поверхности, не адсорбируется на ней. При этом сама поверхность, в отличие от случая с нерастворимым сурфактантом, не очищается термокапиллярным течением полностью.

Рекомендации, перспективы дальнейшей разработки темы

Перспективы исследований, результаты которых представлены в диссертационной работе, могут быть связаны с решением прикладных задач, в которых

- 1) возможно образование конвективных течений жидкостей с ярко выраженной зависимостью вязкости от температуры;
- 2) возникает перераспределение компонентов бинарных металлических расплавов вследствие неоднородностей поверхностного натяжения;
- 3) необходима очистка свободной поверхности жидкости, на которой расположена пленка сурфактанта.

Список литературы

1. Кербер М.Л., Виноградов В.М., Головкин Г.С. Полимерные композиционные материалы: свойства, структура, технологии. СПб.: Профессия, 2008. 536 с.
2. Дерягин Б.В., Чураев Н.В., Муллер В.М. Поверхностные силы. М.: Наука, 1985. 400 с.
3. Русанов А.И., Левичев С.А., Жаров В.Т. Поверхностное разделение веществ. Теория и методы. Ленинград: Химия. Ленинградское отделение, 1981. 184 с.
4. Гершуни Г.З. Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.
5. Шапошников И.Г. К теории конвективных явлений в бинарной смеси // ПММ. 1953. Vol. 17, № 5. С. 604–606.
6. Братухин Ю.К., Макаров С.О. Гидродинамическая устойчивость межфазных поверхностей. Пермь: Изд-во ПГУ, 2005. 240 с.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Том 6. Гидродинамика. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. 732 с.
8. Гаврилов К.А., Демин В.А., Петухов М.И. К вопросу о перестройке конвективных режимов в ячейке Хеле – Шоу с широкими гранями произвольной теплопроводности. Матер. рег. научно-практической конф. молодых ученых “Физика для Пермского края”, Вып. 8, Пермь, Россия, 2015. С. 77–80.
9. Гаврилов К.А., Демин В.А., Петухов М.И. Производство энтропии стационарными конвективными режимами в ячейке Хеле – Шоу. “Пермские гидродинамические научные чтения”. Тез. докл., Пермь, Россия, 2015. С. 19.
10. Демин В.А., Петухов М.И. О влиянии зависимости вязкости от температуры на стационарные конвективные течения в ячейке Хеле – Шоу // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика».

2017. Vol. 9, № 2. С. 47–54.
11. Demin V.A., Mizev A.I., Petukhov M.I. Division of binary metal melts in a thin capillary. 12-th International Conference “Two-Phase Systems for Space and Ground Applications”. Abstr., Novosibirsk, Russia, 2017. pp. 113–114.
 12. Демин В.А., Петухов М.И. Крупномасштабный перенос компонентов металлических расплавов в тонких капиллярах // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2017. № 48. pp. 57–69.
 13. Shmyrov A., Mizev A., Demin V., Petukhov M., Bratsun D. On the extent of surface stagnation produced jointly by insoluble surfactant and thermocapillary flow // Adv. Colloid Interface Sci. 2018. Vol. 255. pp. 10–17.
 14. Аитова Е.В., Брацун Д.А., Демин В.А., Петухов М.И. Об области стагнации на поверхности жидкости поддерживаемой термокапиллярной конвекцией в присутствии нерастворимого сурфактанта: точные решения и численное моделирование. “VI Всероссийская конференция с участием зарубежных ученых”. Тез. докл. Барнаул. Россия, 2017. С. 5.
 15. Demin V.A., Mizev A.I., Petukhov M.I. On Thermocapillary Mechanism of Spatial Separation of Metal Melts // Microgravity Sci. Technol. 2018. Vol. 30, No 1–2. pp. 69-76.
 16. Брацун Д.А., Демин В.А., Мизев А.И., Петухов М.И., Шмыров А.В. Динамика пленки нерастворимого сурфактанта и взаимодействие с объемным течением в ячейке Хеле – Шоу. “Нелинейные задачи теории гидродинамической устойчивости и турбулентность”. Тез. докл. Звенигород. Россия, 2018. С. 25.
 17. Демин В.А., Мизев А.И., Петухов М.И., Углев Н.П. Об особенностях массопереноса в бинарных металлических расплавах вблизи плохо смачиваемых поверхностей. “Нелинейные задачи теории

- гидродинамической устойчивости и турбулентность”. Тез. докл. Звенигород. Россия, 2018. С. 38.
18. Демин В.А., Мизев А.И., Петухов М.И., Шмыров А.В. О необычном поведении расплава Al-Si в тонких капиллярах // Вестник Пермского университета. Сер. Физика. 2018. № 1. С. 26–35.
 19. Demin V.A., Mizev A.I., Petukhov M.I., Shmyrov A.V. On longitudinal separation of a binary metal melt in an inclined thin capillary. “Russian Conference on Magnetohydrodynamics”. Abstr., Perm, Russia, 2018. P. 33.
 20. Гаврилов К.А., Демин В.А., Петухов М.И. О влиянии зависимости вязкости от температуры на конвективные течения в ячейке Хеле – Шоу. Матер. рег. научно-практической конф. молодых ученых “Физика для Пермского края”, Вып. 9, Пермь, Россия, 2016. С. 116–119.
 21. Демин В.А., Мизев А.И., Петухов М.И. Сепарация бинарных сплавов в тонких капиллярах // Вычислительная механика сплошных сред. 2018. Vol. 11, № 1. С. 125–136. (Demin V.A., Mizev A.I., Petukhov M.I. Separation of binary alloys in thin capillaries // Journal of Applied Mechanics and Technical Physics, 2019, Vol. 60, No. 7, pp. 1184-1196.)
 22. Демин В.А., Мизев А.И., Петухов М.И., Углев Н.П., Шмыров А.В. Пространственная локализация компонентов в металлических расплавах. “Пермские гидродинамические научные чтения”. Сб. материалов. Пермь. Россия, 2018. С. 119–121.
 23. Демин В.А., Мизев А.И., Петухов М.И., Шмыров А.В. Локализация компонентов металлических расплавов в тигле. “Всероссийская конференция по математике и механике”. Тез. докл. Томск. Россия, 2018. С. 123.
 24. Брацун Д.А., Демин В.А., Мизев А.И., Петухов М.И., Шмыров А.В. Динамика нерастворимого сурфактанта в ячейке Хеле – Шоу при неоднородном нагреве сверху. “Всероссийская конференция по математике и механике”. Тез. докл. Томск. Россия, 2018. С. 126.

25. Демин В.А., Мизев А.И., Петухов М.И., Шмыров А.В. Разделение легкоплавких металлических расплавов в тонком наклонном капилляре // Известия РАН. МЖГ. 2019. № 1. С. 3–16. (Demin V.A., Mizev A.I., Petukhov M.I., Shmyrov A.V. Separation of Low-Melting Metal Melts in a Thin Inclined Capillary // Fluid dynamics. 2019, Vol. 54, No. 1, pp. 1184-1196.)
26. Брацун Д.А., Демин В.А., Мизев А.И., Петухов М.И., Шмыров А.В. Термокапиллярная конвекция в ячейке Хеле – Шоу при наличии на свободной поверхности растворимого сурфактанта. “XXI Зимняя школа по механике сплошных сред”. Тез. докл., Пермь, Россия, 2019. С. 58.
27. Демин В.А., Мизев А.И., Петухов М.И. О разделении эвтектических расплавов металлов в тигле. “XXI Зимняя школа по механике сплошных сред”. Тез. докл., Пермь, Россия, 2019. С. 93.
28. Шмыров А.В., Мизев А.И., Брацун Д.А., Демин В.А., Петухов М.И. Фазовые переходы в слое ПАВ под действием термокапиллярного эффекта. XII Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики, сб. материалов. Уфа, Россия, 2019. С. 92.
29. Демин В.А., Петухов М.И., Мизев А.И., Шмыров А.В. Транспорт компонентов бинарных жидких металлов в тонких каналах. XII Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики, сб. материалов. Уфа, Россия, 2019. С. 134.
30. Demin V.A., Mizev A.I., Petukhov M.I., Shmyrov A.V. Localization of melt components in a crucible as a result of inserting anisothermic rod with non-wettable boundaries // Microgravity Sci. Technol. 2020. Vol. 32. pp. 89–97.
31. Петухов М.И. Теоретическое исследование нелинейных конвективных режимов в ячейке Хеле – Шоу. Материалы Всерос. научного форума “Наука будущего – наука молодых”. Казань, Россия, 2016. С. 337–339.
32. Shmyrov A.V., Mizev A.I., Demin V.A., Petukhov M.I., Bratsun D.A. Phase

- transitions on partially contaminated surface under the influence of thermocapillary flow // *J. Fluid Mech.* 2019. Vol. 877. pp. 495–533.
33. Брацун Д.А., Демин В.А., Мизев А.И., Петухов М.И., Шмыров А.В. Численное моделирование термокапиллярной конвекции при наличии нерастворимого сурфактанта. Материалы международного симпозиума “Неравновесные процессы в сплошных средах”. Пермь, Россия, 2017. С. 74–76.
 34. Демин В.А., Мизев А.И., Петухов М.И. О термокапиллярном механизме пространственного разделения металлических расплавов. Материалы международного симпозиума “Неравновесные процессы в сплошных средах”. Пермь, Россия, 2017. С. 149–151.
 35. Петухов М.И., Демин В.А., Мизев А.И. О перераспределении компонентов металлических расплавов в тонких капиллярах. “Пермские гидродинамические научные чтения”. Тез. докл., Пермь, Россия. 2016. С. 83.
 36. Демин В.А., Мизев А.И., Петухов М.И. О разделении металлических расплавов в тонких капиллярах. “XX Зимняя школа по механике сплошных сред”. Тез. докл., Пермь, Россия. 2017. С. 111.
 37. Путин Г.Ф., Ткачева Е.А. Экспериментальное исследование надкритических конвективных движений в ячейке Хеле – Шоу // *Известия АН СССР. МЖГ.* 1979. № 1. С. 3–8.
 38. Любимов Д.В., Путин Г.Ф., Чернатынский В.И. Конвекция в ячейке Хеле – Шоу при подогреве снизу // *Сб. Гидродинамика.* 1977. № 10. С. 3–14.
 39. Lorenz E. Deterministic nonperiodic flow // *J. Atmos. Sci.* 1963. Vol. 20. pp. 130–141.
 40. Демин В.А. Платонова А.Н. Влияние теплопроводности границ на вибрационную конвекцию в ячейке Хеле - Шоу // *Вестник Пермского университета. Сер. Физика.* 2006. № 1. С. 9–14.

41. Shevtsova V.M., Ryzhkov I.I., Melnikov D.E., Gaponenko Y.A., Mialdun A. Experimental and theoretical study of vibration-induced thermal convection in low gravity // *J. Fluid Mech.* 2010. Vol. 648. pp. 53–82.
42. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М., Непомнящий А.А. Устойчивость конвективных течений. М.: Наука, 1989. 320 с.
43. Babushkin I.A., Demin V.A., Anferov D.V. Experimental and theoretical investigation of transitional convective flows in Hele – Shaw cell // *Proceeding Int. Conf. "Advanced Probl. Therm. Convect.* 2004. pp. 173–178.
44. Гаврилов К.А., Демин В.А., Путин Г.Ф. Конвективные когерентные структуры в ячейке Хеле – Шоу // *Письма в ЖТФ.* 2010. Т. 36, № 6. С. 68–74.
45. Гаврилов К.А., Демин В.А., Петухов М.И. К вопросу о подобии пульсационных режимов в ячейке Хеле - Шоу // *Вестник Пермского университета. Сер. Физика.* 2014. № 1. С. 57–63.
46. Бабушкин И.А., Демин В.А., Глазкин И.В., Платонова А.Н., Путин Г.Ф. Об изменчивости одного типичного течения в ячейке Хеле – Шоу // *Изв. РАН. МЖГ.* 2009. № 5. С. 3–14.
47. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: Наука, 1972. 721 с.
48. Липштейн Р.А., Шахнович М.И. Трансформаторное масло. М.: Энергия, 1964. 319 с.
49. Астанина М.С., Шеремет М.А. Моделирование термогравитационной конвекции с переменной вязкостью в замкнутой полости с локальным источником энергии // *Вестник Пермского университета. Сер. Физика.* 2015. № 3. С. 52–58.
50. Bratsun D.A., Kostarev K.G., Mizev A.I., Mosheva E.A. Concentration-dependent diffusion instability in reactive miscible fluids // *Phys. Rev. E.* 2015. Vol. 92. P. 011003.
51. Аитова Е.В., Брацун Д.А., Костарев К.Г., Мизев А.И., Мошева Е.А.

- Конвективная неустойчивость в двухслойной системе реагирующих жидкостей с диффузией, зависящей от концентрации компонентов // Вчислительная механика сплошных сред. 2015. Т. 8, № 4. С. 345–358.
52. Балдина Н.О., Демин В.А. Тепловая конвекция в горизонтальном слое жидкости при наличии зависимости температуропроводности от температуры // Вестник Пермского университета. Сер. Физика. 2015. № 3. С. 5–12.
 53. Tippelskirch H. Über Konvektionszellen, insbesondere im flüssigen Schwefel // Beiträge zur Phys. der Atmosphäre. 1956. Vol. 29. pp. 37–54.
 54. Palm E. On the tendency towards hexagonal cells in steady convection // J. Fluid Mech. 1960. Vol. 8. pp. 183–192.
 55. Palm E., Ojann H. Contribution to the theory of cellular thermal convection // J. Fluid Mech. 1964. Vol. 13. pp. 353–365.
 56. Busse F. The stability of finite amplitude cellular convection and its relation to an extremum principle // J. Fluid Mech. 1967. Vol. 30. pp. 625–649.
 57. Block M. Surface tension as the cause of Benard cells and surface deformation in a liquid film // Nature. 1956. Vol. 178. pp. 650–651.
 58. Pearson J. On convection cells induced by surface tension // J. Fluid Mech. 1958. Vol. 4. pp. 489–500.
 59. Koschmieder E.L., Biggerstaff M.I. Onset of surface-tension-driven Benard convection // J. Fluid Mech. 1986. Vol. 167. pp. 49–64.
 60. Koschmieder E.L. On convection under the air surface // J. Fluid Mech. 1967. Vol. 30. pp. 9–15.
 61. Koschmieder E.L. The wavelength of supercritical surface-tension-driven Benard convection // Eur. J. Mech. 1991. Vol. 10, No 2. pp. 233–237.
 62. Nield D. Surface tension and buoyancy effect in cellular convection // J. Fluid Mech. 1964. Vol. 19. pp. 341–352.
 63. Гетлинг А.В. Формирование пространственных структур конвекции Рэлея – Бенара // Успехи физических наук. 1991. Т. 161, № 9. С. 1–80.

64. Гетлинг А.В. Конвекция Рэлея – Бенара. Структуры и динамика. М.: Эдиториал УРСС, 1999. 248 с.
65. Birikh R.V. Thermocapillary convection in a horizontal layer of liquid // J. Appl. Mech. Tech. Phys. 1966. Vol. 7. pp. 43–44.
66. Sen A., Davis S. Steady thermocapillary flows in two-dimensional slots // J. Fluid Mech. 1982. Vol. 121. pp. 163–186.
67. Homsy G.M., Meiburg E. The effect of surface contamination on thermocapillary flow in a two-dimensional slot // J. Fluid Mech. 1984. Vol. 139. pp. 443–459.
68. Bradley Carpenter, Homsy G.M. The effect of surface contamination on thermocapillary flow in a two-dimensional slot. Part 2. Partially contaminated interfaces // J. Fluid Mech. 1985. Vol. 155. pp. 429–439.
69. Мизев А.И., Шмыров А.В. Влияние нерастворимого сурфактанта на развитие термокапиллярной конвекции // Конвективные течения... 2013. № 6. С. 217–230.
70. Shmyrova A.I., Shmyrov A.V. Instability of a homogeneous flow from a lumped source in the presence of special boundary conditions on a free surface // EPJ Web Conf. 2019. Vol. 213. pp. 1–7.
71. Бушуева К.А., Денисова М.О., Зуев А.Л., Костарев К.Г. Возникновение течения у поверхности пузырьков и капель в градиентном растворе поверхностно-активной жидкости // Коллоидный журнал. 2008. Т. 70, № 4. С. 457–463.
72. Mizev A.I., Denisova M.O., Kostarev K.G., Birikh R.V., Viviani A. Threshold onset of Marangoni convection in narrow channels // Eur. Phys. J. Spec. Top. 2011. Vol. 192. pp. 163–173.
73. Mizev A.I. Experimental investigation of thermocapillary convection induced by a local temperature inhomogeneity near the liquid surface. 1. Solid source of heat // J. Appl. Mech. Tech. Phys. 2004. Vol. 45, No 4. pp. 486–497.

74. Mizev A.I. Experimental investigation of thermocapillary convection induced by a local temperature inhomogeneity near the liquid surface. 2. Radiation-induced source of heat // *J. Appl. Mech. Tech. Phys.* 2004. Vol. 45, No 5. pp. 699–704.
75. Капица П.Л., Капица С.П. Волновое течение тонких слоев вязкой жидкости // *ЖЭТФ.* 1949. Т. 19, № 2. С. 105–120.
76. Цвелодуб О.Ю. Волновые режимы на пленке обобщенной ньютоновской жидкости, стекающей по вертикальной плоскости // *Изв. РАН, МЖГ.* 2007. № 4. С. 3–15.
77. Буря А.Г., Шкадов В.Я. Устойчивость пленки жидкости, стекающей по колеблющейся наклонной поверхности // *Изв. РАН, МЖГ.* 2001. № 5. С. 3–13.
78. Веларде М.Г., Шкадов В.Я., Шкадова В.П. Устойчивость стекающей пленки жидкости с неравновесным адсорбированным подслоем растворимого поверхностно-активного вещества // *Изв. РАН, МЖГ.* 2003. № 5. С. 20–35.
79. Preisser F., Schwabe D., Scharmann A. Steady and oscillatory thermocapillary convection in liquid columns with free cylindrical surface // *J. Fluid Mech.* 1983. Vol. 126. pp. 545–567.
80. Schwabe D., Mizev A.I., Udhayasankar M. Formation of dynamic particle accumulation structures in oscillatory thermocapillary flow in liquid bridges // *Phys. Fluids.* 2007. Vol. 19, No 7. P. 071102.
81. Mialdun A, Shevtsova V. Influence of interfacial heat exchange on the flow organization in liquid bridge // *Microgravity Sci. Technol.* 2006. Vol. 18. pp. 146–149.
82. Shevtsova V.M., Melnikov D.E., Legros J.-C. Three-dimensional simulations of hydrodynamic instability in liquid bridges: influence of temperature-dependent viscosity // *Phys. Fluids.* 2001. Vol. 13. pp. 2851–2865.
83. Ryzhkov I.I., Shevtsova V.M. Thermocapillary instabilities in liquid columns

- under co- and counter-current gas flows // *Int. J. Heat Mass Transf.* 2012. Vol. 55, No 4. pp. 1236–1245.
84. Ryzhkov I.I., Shevtsova V.M. Convective stability of multicomponent fluids in the thermogravitational column // *Phys. Rev. E.* 2009. Vol. 79. P. 026308.
85. Бекежанова В.Б., Гончарова О.Н. О подходах к решению задачи о деформации межфазной границы в двухслойной системе с испарением // *Известия Алтайского государственного университета. Математика и механика.* 2018. № 1. С. 69–74.
86. Bekezhanova V.B., Goncharova O.N., Ivanova N.A., Klyuev D.S. Instability of a two-layer system with deformable interfaces under laser beam heating // *J. Sib. Fed. Univ. Math. Phys.* 2019. No 12. pp. 543–550.
87. Lyulin Yu.V., Spesivtsev S.E., Marchuk I.V., Kabov O.A. Study of dynamics of thin liquid layer breakdown under conditions of spot heating and formation of a droplet cluster // *Thermophys. Aeromechanics.* 2017. Vol. 24, No 6. pp. 949–952.
88. Gatapova E.Ya., Graur I.A., Kabov O.A., Aniskin V.M., Filipenko M.A., Sharipov F., Tadrist L. The temperature jump at water – air interface during evaporation // *Int. J. Heat Mass Transf.* 2017. Vol. 104. pp. 800–812.
89. Kabova Yu.O., Alexeev A., Gambaryan-Roisman T., Stephan P. Thermocapillarity-induced vortices and liquid film dynamics on structured heated walls // *J. Non-Equilibrium Thermodyn.* 2005. Vol. 30. pp. 225–241.
90. Ajaev V.S., Gatapova E.Ya., Kabov O.A. Stability and break-up of thin liquid films on patterned and structured surfaces // *Adv. Colloid Interface Sci.* 2015. Vol. 228. pp. 92–104.
91. M Kim., Kostarev K., Pisarevskaya N., Viviani A. Terrestrial simulation of drop saturation by a surfactant under microgravity conditions // *Eur. Phys. J. Spec. Top.* 2011. Vol. 192. pp. 185–194.
92. Костарев К.Г., Луцик А.И., Шмыров А.В. Конвекция Марангони при диффузии ПАВ из капли // *Вестник Нижегородского университета им.*

- Н.И. Лобачевского. Механика жидкости и газа. 2011. № 4. С. 877–879.
93. Cuenot B., Magnaudet J., Spennato B. The effects of slightly soluble surfactants on the flow around a spherical bubble // *J. Fluid Mech.* 1997. Vol. 339. pp. 25–53.
 94. Palaparthi R., Papageorgiou D.T., Maldarelli C. Theory and experiments on stagnant cap regime in the motion of spherical surfactant-laden bubbles // *J. Fluid Mech.* 2006. Vol. 559. pp. 1–44.
 95. Mucic N., Javadi A., Kovalchuk N.M., Aksenenko E.V., Miller R. Dynamics of interfacial layers—Experimental feasibilities of adsorption kinetics and dilational rheology // *Adv. Colloid Interface Sci.* 2011. Vol. 168, No 1–2. pp. 167–178.
 96. Chang C.H., Franses E.I. Adsorption dynamics of surfactants at the air/water interface: a critical review of mathematical models, data, and mechanisms // *Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp.* 1995. Vol. 100. pp. 1–45.
 97. Ролдугин В.И. Физикохимия поверхности. Долгопрудный: Издательский дом "Интеллект", 2011. 568 с.
 98. Адамсон А. Физическая химия поверхностей. М.: Мир, 1979. 568 с.
 99. Langmuir I. The adsorption of gases on plane surfaces of glass, mica and platinum // *J. Am. Chem. Soc.* 1918. Vol. 40. pp. 1361–1403.
 100. Frumkin A. Die Kapillarkurve der höheren Fettsäuren und die Zustandsgleichung der Oberflächenschicht // *Zeitschrift für Phys. Chemie.* 1925. Vol. 116. pp. 466–484.
 101. Парфит Г., Рочестер К. Адсорбция из растворов на поверхности твердых тел. М.: Мир, 1986. 488 с.
 102. Lajtar L., Narkiewicz-Michalek J., Rudzinski W. A New Theoretical Approach to Adsorption of Ionic Surfactants at Water/Oxide Interfaces: Effects of Oxide Surface Heterogeneity // *Langmuir.* 1993. Vol. 9. pp. 3174–3190.
 103. Lajtar L., Narkiewicz-Michalek J., Rudzinski W. A New Theoretical

- Approach to Adsorption of Ionic Surfactants at Water/Oxide Interfaces: Studies of the Mechanism of Cationic Surfactant Adsorption // *Langmuir*. 1994. Vol. 10. pp. 3754–3764.
104. Хайрулин Р.А., Станкус С.В., Абдуллаев Р.Н. Плотность и тепловое расширение жидких сплавов системы Na–Pb с малым содержанием свинца // *Теплофизика и аэромеханика*. 2013. Vol. 20, № 2. С. 225–228.
105. Гузачев М.А., Константинова Н.Ю., Попель П.С., Мозговой А.Г. Температурные зависимости кинематической вязкости жидких висмута, свинца и их взаимных растворов // *Теплофизика и аэромеханика*. 2011. Vol. 18, № 3. С. 485–491.
106. Alchagirov B.B., Kurshev O.I., Taova T.M. Surface tension of tin and its alloys with lead // *Russ. J. Phys. Chem. A*. 2007. Vol. 81. pp. 1281–1284.
107. Howie F.H., Hondros E.D. The surface tension of tin-lead alloys in contact with fluxes // *J. Mater. Sci*. 1982. Vol. 17. pp. 1434–1440.
108. Савченко И.В. Экспериментальное исследование теплопроводности и температуропроводности расплавов легкоплавких металлов и сплавов методом лазерной вспышки: автореф. дис. на соиск. уч. степ. к.ф.-м.н. Новосибирск: Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, 2011. 20 с.
109. Курочкин А.Р., Попель П.С., Ягодин Д.А., Борисенко А.В. Объемные свойства расплавов медь-алюминий при температурах до 1400 °С // *Теплофизика и аэромеханика*. 2013. Т. 20, № 4. С. 417–426.
110. Хайрулин Р.А., Станкус С.В., Кошелева А.С. Взаимная диффузия в расплавах олово-свинец эвтектического и околоэвтектического составов // *Теплофизика высоких температур*. 2008. Т. 46, № 2. pp. 239–245.
111. Гаврилин И.В., Фролова Т.Б., Захаров В.П. О ликвации в жидких эвтектических расплавах // *Изв. АН СССР. Металлы*. 1984. № 3. С. 191–193.
112. Гаврилин И.В. Распределение углерода в жидком чугуна // *Литейное*

- производство. 1982. № 4. С. 2–4.
113. Гаврилин И.В. Седиментационный эксперимент при изучении жидких сплавов // Изв. АН СССР. Металлы. 1985. № 2. С. 66–73.
114. Демин В.А., Петухов М.И. К вопросу о механизме крупномасштабного переноса компонентов металлических расплавов в неоднородно нагретых тонких капиллярах // Вестник Пермского университета. Сер. Физика. 2016. № 3. С. 65–71.
115. Де Жен П.Ж. Смачивание: статистика и динамика // Успехи физических наук. 1987. Т. 151, № 4. С. 619–681.
116. Voinovich L.B. Boundary layers and surface forces in pure nonaqueous liquids // Curr. Opin. Colloid Interface Sci. 2019. Vol. 44. pp. 85–93.
117. Emelyanenko A.M., Voinovich L.B., Emelyanenko K.A. Anisotropic Spreading Along the Textured Surfaces with Isotropic Wetting // Int. Journ. Wettability Sci. Technol. 2018. Vol. 1. pp. 47–62.
118. Mongruel A., Chastel T., Asmolov E.S., Vinogradova O.I. Effective hydrodynamic boundary conditions for microtextured surfaces // Phys. Rev. E. 2013. Vol. 87. P. 011002.
119. Zhou J., Smiatek J., Asmolov E.S., Vinogradova O.I., Schmid F. Application of Tunable-Slip Boundary Conditions in Particle-Based Simulations // High Perform. Comput. Sci. Eng. 2015. pp. 19–30.
120. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Том 5. Статистическая физика. Часть 1. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. 616 с.
121. Хилл Т.Л. Статистическая механика. Принципы и избранные приложения. М.: Изд-во Иностранной лит-ры, 1960. 485 с.
122. Майер Дж., Гепперт-Майер М. Статистическая механика. М.: Мир, 1980. 544 с.
123. Jaynes E.T. The Minimum Entropy Production Principle // Annu. Rev. Phys. Chem. 1980. Vol. 31. pp. 579–601.
124. Attard P. Optimising Principle for Non-Equilibrium Phase Transitions and

- Pattern Formation with Results for Heat Convection // Arxiv, 2012. pp. 1–25.
125. Županović P., Juretić D., Botrić S. Kirchhoff's loop law and the maximum entropy production principle // Phys. Rev. E. 2004. Vol. 70. P. 056108.
 126. Attard P. Statistical mechanical theory for the structure of steady state systems: Application to a Lennard-Jones fluid with applied temperature gradient // J. Chem. Phys. 2004. Vol. 121, No 15. pp. 7076–7085.
 127. Attard P. Non-equilibrium Thermodynamics and Statistical Mechanics: Foundations and Applications. Oxford University Press, 2012. 480 p.
 128. Бабушкин И.А., Демин В.А. Экспериментальное и теоретическое исследование переходных конвективных режимов в ячейке Хеле – Шоу // Изв. РАН, МЖГ. 2006. № 3. С. 3–9.
 129. Bergman T.L., Lavine A.S., Incropera F.P., Dewitt D.P. Fundamentals of Heat and Mass Transfer. W&S. US, 2011. 1076 p.
 130. Сорокин В.С. Вариационный метод в теории конвекции // ПММ. 1953. Т. 17, № 1. С. 39–51.
 131. Тарунин Е.Л. Вычислительный эксперимент в задачах свободной конвекции. Иркутск: Изд-во Иркутского ун-та, 1990. 225 с.
 132. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1977. 657 с.
 133. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980. 616 с.
 134. Том А., Эйплт К. Числовые расчеты полей в технике и физике. М.: Энергия, 1964. 208 с.
 135. Костарев К.Г., Пшеничников А.Ф. Влияние свободной конвекции на термодиффузию в жидкой смеси, заполняющей наклонную прямоугольную полость // Прикладная механика и техническая физика. 1986. № 5. С. 73–76.
 136. Демин В.А. Конвективные сепараторы // Прикладная физика. 2013. № 4. С. 60–67.
 137. Birikh R.V., Briskman V.A., Velarde M., Legros J.-C. Liquid Interfacial Systems: Oscillations and Instability. CRC Press, 2003. 392 p.

138. Бирих Р.В. Устойчивость однородной нестационарной диффузии ПАВ через плоскую границу раздела жидкостей // Вестник Пермского университета. Сер. Физика. 2016. № 1. С. 64–70.
139. Slavtchev S., Hennenberg M., Legros J.-C., Lebon G. Stationary Solutal Marangoni Instability in a Two-Layer System // J. Colloid Interface Sci. 1998. Vol. 203, No 2. pp. 354–368.
140. Полянин А.Д. Справочник. Линейные уравнения математической физики. М.: Изд. фирма «Физико-математическая литература», 2001. 576 с.
141. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Издательство Московского университета, 1999. 799 с.
142. Fisher H.J., Phillips A. Viscosity and density of liquid lead-tin and antimony-cadmium alloys // JOM. 1954. Vol. 200. pp. 1060–1070.
143. Cusco L., Monaghan B.J. Development of a UK national standard for the thermal properties of molten materials: thermal diffusivity of molten copper // High Temp. – High Press. 2002. Vol. 34. pp. 281–289.
144. Андронов В.Н., Чекин Б.В., Нестеренко С.В. Жидкие металлы и шлаки. М.: Металлургия, 1977. 128 с.
145. Углев Н.П., Дубровина Е.И. Радиальное распределение компонентов при расслоении металлических расплавов в капиллярах // Вестник ПНИПУ. Сер. Химическая технология и биотехнология. 2015. № 1. С. 50–59.
146. Gavrilin I.V., Uglev N.P. Mathematical model of a stratification of metal melts in capillaries // J. Phys. Conf. Ser. 2008. Vol. 98. P. 022013.
147. Углев Н.П. Механизм частичного расслоения металлических расплавов в капиллярах // Межвуз. сб. науч. тр. Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2013. № 5. С. 343–352.
148. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. М.: Наука, 1974. 712 с.