

УДК 519.63

Математическое моделирование процесса диффузии легкой компоненты бинарного газа*

Попов В.Н., Гермидер О.В.

Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова

Аннотация: В рамках кинетического подхода построено решение задачи о диффузии легкой компоненты бинарной смеси в канале с бесконечными параллельными стенками. Предполагается, что масса молекул легкой компоненты и их концентрация значительно меньше массы молекул и концентрации тяжелых компонентов. Изменение состояния легкой газовой компоненты описывается на основе модели БГК (Бхатнагар, Гросс, Крук) кинетического уравнения Больцмана. В качестве граничного условия на стенках канала используется модель диффузного отражения. Вычислен расход легкой компоненты на единицу ширины канала. Проведено сравнение с аналогичными результатами, представленными в открытых источниках.

Ключевые слова: бинарные смеси, кинетическое уравнение Больцмана, модельные кинетические уравнения, модели граничных условий.

1. Введение

В теории пограничного слоя часто встречается случай бинарного газа, когда масса молекулы одного из компонентов значительно меньше массы молекулы другого. Если парциальная плотность легкой составляющей существенно меньше тяжелой, то движением тяжелой составляющей можно пренебречь, считая ее неподвижной. В представленной работе в данном приближении решена задача о диффузии легкой компоненты бинарной газовой смеси относительно тяжелой в канале, стенки которого будем полагать лежащими в плоскостях $x' = \pm d'$ прямоугольной декартовой системы координат. Полагаем, что смесь состоит из газов a и b (соответственно легкая и тяжелая компонента) с концентрациями n_a и n_b и массовыми плотностями $\rho_a = m_a n_a$ и $\rho_b = m_b n_b$, где m_a и m_b – массы молекул газов a и b . Температуру газа считаем постоянной, равной T , а ось Oy' направим вдоль градиента концентрации легкой компоненты. Тогда БГК-уравнение для легкой компоненты записывается в виде [1]

$$v_x \frac{\partial f}{\partial x'} + v_y \frac{\partial f}{\partial y'} = \nu_a (f_{eq} - f) + \nu_{ab} (f_0 - f), \quad (1)$$

Здесь $f_{eq} = n(y') \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{3/2} \exp[-\beta(\mathbf{v} - \mathbf{u}(x'))^2]$ – локально равновесная функция распределения, $\mathbf{u}(x')$ – среднемассовая скорость легкой компоненты,

$$f_0 = n(y') \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{3/2} \exp(-\beta v^2),$$

ν_a – частота столкновений легких молекул между собой, ν_{ab} – частота столкновений

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-21-00381.

легких молекул с тяжелыми

$$\nu_{ab} = \nu_a \left(\frac{d_{ab}}{d_a} \right)^2 \sqrt{\frac{m_a + m_b}{2m_b} \frac{n_b}{n_a}}, \quad \nu_a = \frac{p_a}{\mu_a} \Omega(\omega_a, \alpha_a), \quad \Omega(\omega_a, \alpha_a) = \frac{5(\alpha_a + 1)(\alpha_a + 2)}{\alpha_a(7 - \omega_a)(5 - \omega_a)}.$$

Здесь, согласно [2] d_a и d_b – диаметры молекул компонент a и b , $d_{ab} = \frac{d_a + d_b}{2}$, μ_a и ω_a – коэффициент динамической вязкости и показатель температурной зависимости вязкости газа a . Для модели твердых сфер (VHS) $\alpha_a = 1$. Тогда

$$\Omega(\omega_a, 1) = \Omega(\omega_a) = \frac{30}{(7 - \omega_a)(5 - \omega_a)}.$$

В качестве модели граничного условия на стенках канала использована модель диффузного отражения.

2. Вычисление потока массы легкой компоненты бинарной смеси

Решение уравнения (1) с учетом сформулированного выше граничного условия на стенках канала после линейаризации относительно функции распределения молекул легкой компоненты получено методом элементарных решений (методом Кейза) [1] в виде ряда Неймана. Далее, исходя из статистического смысла построенного решения, получено выражение для расчета потока массы легкой компоненты газа J_M . Для примера вычислены значения J_M для смеси Не-Хе и относительной концентрации легкой компоненты $C = \frac{n_a}{n_a + n_b}$. Результаты приведены в таблице.

2d	0.01	0.1	0.5	1.0	2.0	5.0	10.0	100.0
$C = 0.01$								
$-J_M$	3.2245	1.9090	1.0756	0.7636	0.5013	0.2523	0.1380	0.0149
$C = 0.05$								
$-J_M$	3.3751	1.9146	1.0836	0.7720	0.5088	0.2571	0.1409	0.0152
$C = 0.1$								
$-J_M$	3.7317	1.9152	1.0929	0.7830	0.5187	0.2636	0.1448	0.0157
$-J_M$ [3]	2.8760	1.7652	1.0507	0.7717	0.5236	0.2707	0.1491	0.0162

При вычислении J_M полагали, что $m_b = 131.30$, $m_a = 4.0026$, $\frac{d_b}{d_a} = 2.226$, $d = \frac{2d'}{3} \beta^{1/2} \nu$. Как следует из приведенных расчетов, использованный в работе подход приводит к результатам, хорошо согласующимся с результатами, приведенными в статье [3].

3. Заключение

В работе построено решение задачи о диффузии легкой компоненты бинарной газовой смеси в длинном плоском канале с бесконечными параллельными стенками. Вычислен удельный расход легкой компоненты смеси в зависимости от ее концентрации и толщины канала. Проведено сравнение с данными, имеющимися в открытой печати.

Литература

1. Латышев А. В. Введение в кейсологию. Москва: Отдел теоретических проблем РАН, 1996. 237 с.
2. Подрыга В. О., Поляков С. В. Параллельная реализация многомасштабного подхода для расчета микротечений газа // Вычислительные методы и программирование. 2016. Т. 17, № 2. С. 147-165.
3. Siewert C. E., Valougeorgis D. The McCormack model: channel flow of a binary gas mixture driven by temperature, pressure and density gradients // European Journal of Mechanics B/Fluids. 2004. Vol. 23. P. 645-664.

MSC 93A30

Mathematical modeling of the diffusion process of a light component of a binary gas

V.N. Popov, O.V. Germider

Northern (Arctic) Federal University named after M.V. Lomonosov

Abstract: Abstract. A kinetic approach is used to solve the problem of diffusion of a light component of a binary mixture in a channel with infinite parallel walls. It is assumed that the mass of molecules of the light component and their concentration are significantly less than the mass of molecules and the concentration of heavy components. The change in the state of the light gas component is described based on the Bhatnagar, Gross, and Krook model of the kinetic Boltzmann equation. The diffuse reflection model is used as a boundary condition on the channel walls. The consumption of the light component per unit channel width is calculated. A comparison is made with similar results presented in open sources.

Keywords: binary mixtures, kinetic Boltzmann equation, model kinetic equations, models of boundary conditions.

References

1. Latyshev A. V. Vvedenie v keisologiyu [Introduction to Caseology]. Moscow: Otdel teoreticheskikh problem RAN [Department of Theoretical Problems RAS], 1996. 237 p. (in Russian)
2. Podryga V. O., Polyakov S. V. Parallelnaya realizatsiya mnogomasshtabnogo podkhoda dlya rascheta mikrotechenii gaza [Parallel implementation of multiscale approach for gas microflow calculations] // Vychislitelnye metody i programmirovaniye [Numerical Methods and Programming]. 2016. Vol. 17, no. 2. P. 147-165. (in Russian)
3. Siewert C. E., Valougeorgis D. The McCormack model: channel flow of a binary gas mixture driven by temperature, pressure and density gradients // European Journal of Mechanics B/Fluids. 2004. Vol. 23. P. 645-664.