

МЕХАНИЗМЫ И УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА СУБСТАНЦИЙ

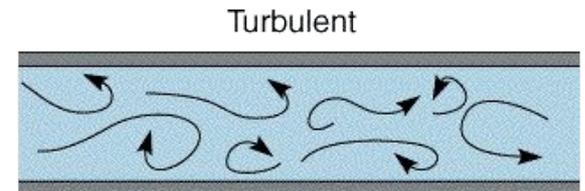
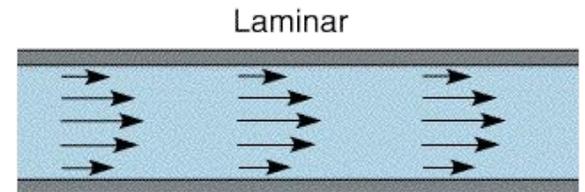


- Основной характеристикой переноса субстанций является поток – количество субстанции которое переносится за единицу времени через единицу поверхности.

\vec{j}	масса кг/(м ² с) кмоль/(м ² с)	энергия Дж/(м ² с) ~ Вт/м ²	импульс (кг м/с)/(м ² с) ~ Н/м ²
-----------	--	--	---

Различают три механизма переноса:

1. Молекулярный
2. Конвективный
3. Турбулентный



Конвективный перенос субстанции



Конвективный механизм переноса субстанции обусловлен движением макроскопических объемов среды как целого. Движение макроскопических объемов среды приводит к переносу массы, импульса и энергии единичного объема

$$\vec{j}_A = \rho_A \vec{W}$$

ПОТОК МАССЫ

$$\vec{q} = \rho E \vec{W}$$

ПОТОК ЭНЕРГИИ

$$E = U + E_k + E_\pi$$

$$\tau_{xx} = \rho W_x w_x$$

ПОТОК ИМПУЛЬСА

$$\tau_{yx} = \rho W_y w_x$$

Молекулярный перенос субстанции



Переноса субстанции обусловлен тепловым движением молекул или иных микроскопических частиц (ионов в электролитах и кристаллах, электронов в металлах).

$$\bar{E}_k^m = \frac{m_m \bar{W}_m^2}{2} = \frac{3}{2} kT$$

$$O_2 \quad T = 273 \text{ K}$$

$$\bar{W}_m = 461 \text{ м/с} = 1660 \text{ км/ч}$$

Молекулярный перенос субстанции (Теплопроводность)



Закон теплопроводности, был впервые сформулирован Жаном-Батистом Фурье в 1811 г

Перенос тепла (закон Фурье)

$$\vec{q} = -\lambda \vec{\nabla} T = -a \vec{\nabla}(\rho c_p T)$$

$$\lambda = \lambda_k + \lambda_{\text{п}} + \lambda_c$$

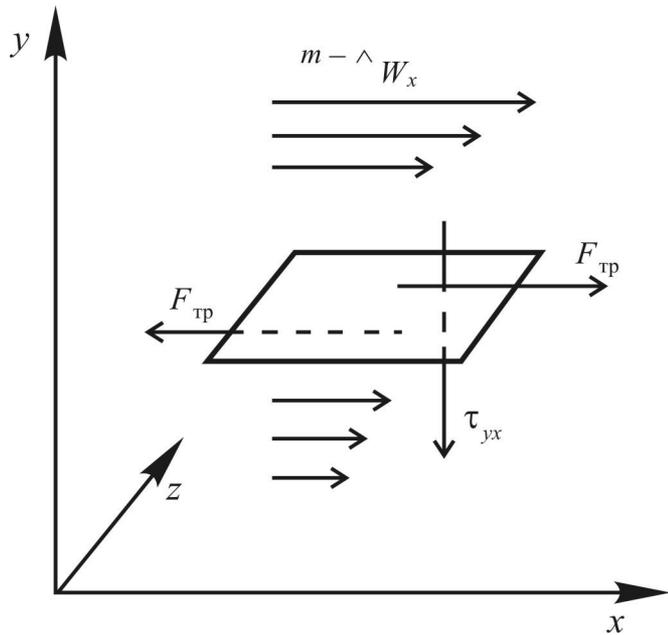
λ - коэффициент теплопроводности, Вт/мК.

a - коэффициент температуропроводности, м²/с.

для газов $\lambda \sim 10^{-2}$ Вт/(м К), для жидкостей $\lambda \sim 10^{-1}$ Вт/(м К), для металлов $\lambda \sim 10^2$ Вт/(м К).



Молекулярный перенос субстанции (Перенос импульса)



Закон вязкости Ньютона

$$\tau_{yx} = -\mu \frac{\partial w_x}{\partial y} = -\nu \frac{\partial(\rho w_x)}{\partial y}$$

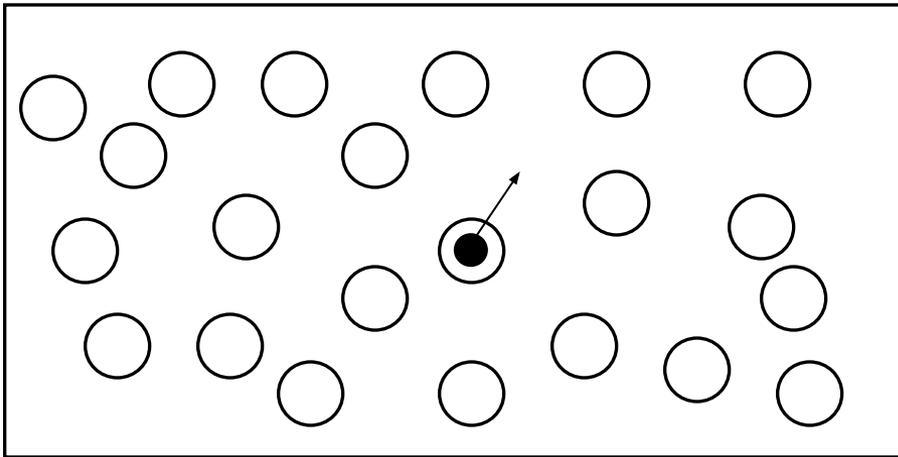
где μ [Па·с] и ν [м²/с] коэффициенты динамической и кинематической молекулярной вязкости соответственно

В газах $\mu \sim 10^{-5}$ Па·с, в жидкостях $\mu \sim 10^{-3}$ Па·с.

Молекулярный перенос субстанции (Диффузия)

Перенос массы

Поток меченых частиц в равновесных условиях



эйнштейновский коэффициент диффузии характеризует подвижность молекул

$$\vec{j}_i = -D_i \vec{\nabla} c_i$$

$$c_i [\text{моль/м}^3]$$

$$D_i = \overline{\Delta \ell_i^2} / 6 \Delta t$$

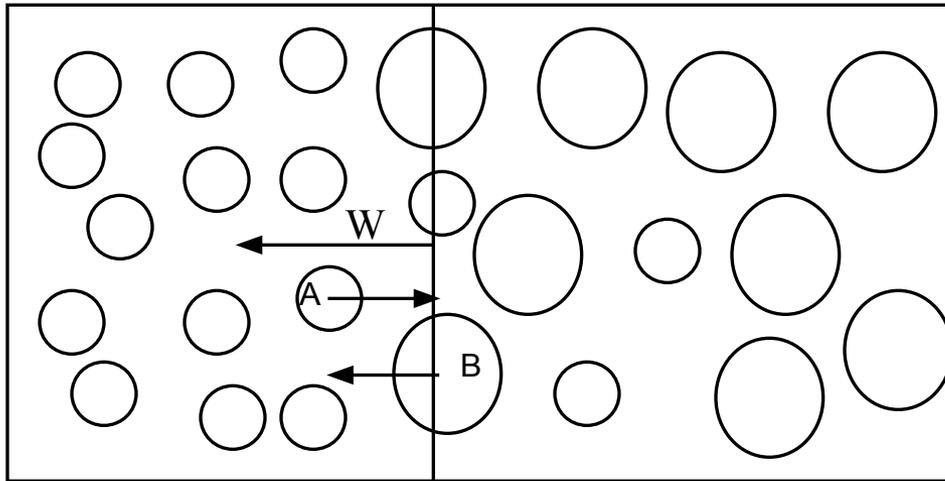
$$D_i = f(P, T, x)$$

Молекулярный перенос субстанции

Перенос массы



Поток массы в неравновесных условиях



$$\vec{j}_A = -D_A \frac{c_A}{RT} \vec{\nabla} \mu_A + c_A \vec{w}^K = c_A^K (\vec{w} + \vec{w}^D)$$

$$\vec{j}_B = -D_B \frac{c_B}{RT} \vec{\nabla} \mu_B + c_B \vec{w}^K = c_B^K (\vec{w} + \vec{w}^D)$$

$$D_A > D_B$$

$$c_A \vec{\nabla} \mu_A = -c_B \vec{\nabla} \mu_B$$

$$\vec{j} = \vec{j}_A + \vec{j}_B = c_A \vec{w}_A^D + c_B \vec{w}_B^D + c \vec{w}^K = c \vec{W}$$

$$\vec{W} = x_A \vec{w}_A^D + x_B \vec{w}_B^D + \vec{w}^K \quad \text{-среднемольная скорость}$$

$$\vec{j}_A^D = c_A (\vec{w}_A^D + \vec{w}^K - \vec{W}) = c_A [(1 - x_A) \vec{w}_A^D - x_B \vec{w}_B^D]$$

c [моль/м³]
 x [мол.дол.]

Среднемольная система координат – суммарный мольный поток вещества = 0



$$\vec{j}_A^D = c_A (\vec{w}_A^D + \vec{w}^K - \vec{W}) = c_A \left[(1 - x_A) \vec{w}_A^D - x_B \vec{w}_B^D \right] = \boxed{-\bar{D}_{AB} \frac{c_A}{RT} \vec{\nabla} \mu_A}$$

$$\vec{j}_B^D = -\bar{D}_{BA} \frac{c_B}{RT} \vec{\nabla} \mu_B$$

$$\vec{j}_A^D + \vec{j}_B^D = 0$$

$$\bar{D}_{AB} = x_B D_A + x_A D_B$$

$$\bar{D}_{BA} = \bar{D}_{AB}$$

$$\vec{j}_A^D = -\bar{D}_{AB} \frac{c_A}{RT} \frac{\partial \mu_A}{\partial x_A} \vec{\nabla} x_A = \boxed{-D_{AB} c \vec{\nabla} x_A = -D_{AB} \vec{\nabla} c_A}$$

- первый закон Фика

$$D_{AB} = \bar{D}_{AB} \left(1 + x_A \frac{\partial \ln(\gamma_A)}{\partial x_A} \right)$$

Другие системы координат

$$\vec{W}_M = X_A \vec{w}_A^D + X_B \vec{w}_B^D + \vec{w}^K \quad \text{-среднемассовая скорость} \quad X \text{ [масс.дол]}$$

$$\vec{W}_V = \phi_A \vec{w}_A^D + \phi_B \vec{w}_B^D + \vec{w}^K \quad \text{-среднеобъемная скорость} \quad \phi \text{ [объемн. дол]}$$

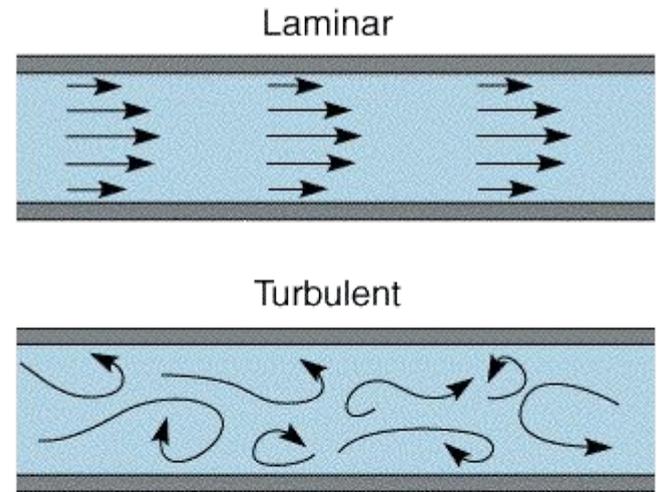
Турбулентный перенос субстанции



$$\vec{j}_A = -D \vec{\nabla} c$$

$$\vec{q} = -\lambda_T \vec{\nabla} T$$

$$\tau_{yx} = -\mu_T \frac{\partial w_x}{\partial y} = -\nu_T \rho \frac{\partial w_x}{\partial y}$$



Коэффициенты турбулентного переноса в отличие от молекулярного зависят главным образом от режима движения среды и в меньшей степени от ее свойств и параметров состояния

Уравнения переноса субстанций



Энергия

Масса

Импульс

Молекулярный механизм

$$\vec{q} = -a \vec{\nabla}(\rho c_p T)$$

$$\vec{j}_A^D = -D_{AB} \vec{\nabla} c_A$$

$$\tau_{yx} = -\nu \frac{\partial(\rho w_x)}{\partial y}$$

Конвективный механизм

$$\vec{q} = \rho E \vec{W}$$

$$\vec{j}_A = \rho_A \vec{W}$$

$$\tau_{yx} = \rho W_y w_x$$

Турбулентный механизм

$$\vec{q} = -\lambda_T \vec{\nabla} T$$

$$\vec{j}_A = -D \vec{\nabla} c$$

$$\tau_{yx} = -\nu_T \frac{\partial(\rho w_x)}{\partial y}$$

ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ



Законы сохранения это физические закономерности согласно которым значения некоторых физических величин должны оставаться постоянными в любых процессах

При анализе технологических процессов и расчете аппаратов используются законы сохранения **массы, импульса и энергии**

ЗАКОН СОХРАНЕНИЯ МАССЫ



Интегральная форма закона сохранения массы (уравнения материального баланса)

$$\Delta M = V \Delta \rho = M_{\text{ВХ}} - M_{\text{ВЫХ}}$$

$$\frac{dM}{dt} = V \frac{d\rho}{dt} = G_{\text{ВХ}} - G_{\text{ВЫХ}} \quad \text{Для непрерывных процессов}$$

$$\Delta M_i = V \Delta \rho_i = M_{i,\text{ВХ}} - M_{i,\text{ВЫХ}} \quad \text{Для компонента } i$$

$$\frac{dM_i}{dt} = V \frac{d\rho_i}{dt} = x_{i,\text{ВХ}} G_{\text{ВХ}} - x_{i,\text{ВЫХ}} G_{\text{ВЫХ}}$$

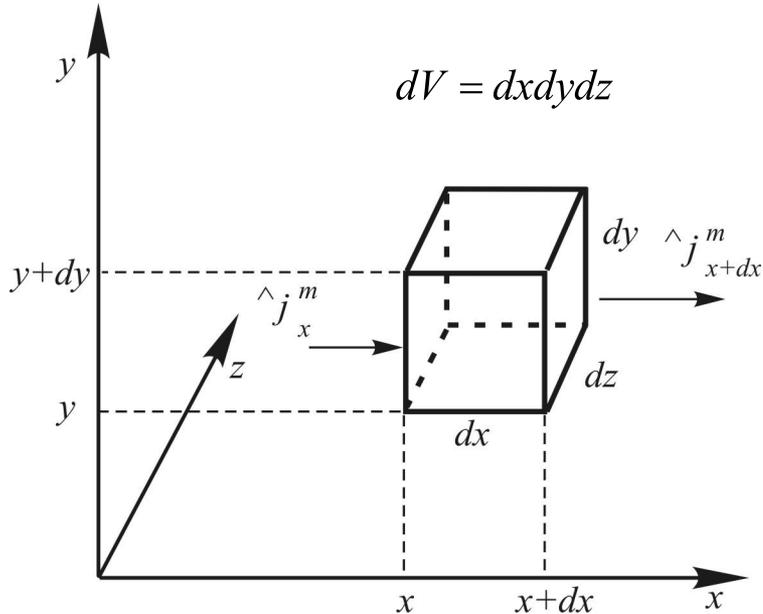
$$\frac{dM_i}{dt} = V \frac{d\rho_i}{dt} = x_{i,\text{ВХ}} G_{\text{ВХ}} - x_{i,\text{ВЫХ}} G_{\text{ВЫХ}} + r_i V \quad \text{При протекании хим. реакций}$$

$$\sum_{i=1}^n r_i = 0$$

Локальная форма закона сохранения массы (уравнение неразрывности)



$$\vec{j} = \rho \vec{W}$$



$$G_{x, \text{BX}} = j_x dy dz$$

$$G_{x, \text{БЫХ}} = j_{x+dx} dy dz = \left(j_x + \frac{\partial j_x}{\partial x} dx \right) dy dz$$

$$G_{x, \text{BX}} - G_{x, \text{БЫХ}} = \left(j_x - j_x - \frac{\partial j_x}{\partial x} dx \right) dy dz = -\frac{\partial j_x}{\partial x} dx dy dz$$

$$G_{y, \text{BX}} - G_{y, \text{БЫХ}} = -\frac{\partial j_y}{\partial y} dx dy dz$$

$$G_{z, \text{BX}} - G_{z, \text{БЫХ}} = -\frac{\partial j_z}{\partial z} dx dy dz$$

$$G_{\text{BX}} - G_{\text{БЫХ}} = -\left(\frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z} \right) dV = dV \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\text{div } \vec{j} = -\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{W})$$

Локальная форма закона сохранения массы (уравнение неразрывности)



$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{W}) = -\vec{W} \cdot (\vec{\nabla} \rho) - \rho \vec{\nabla} \cdot (\vec{W})$$

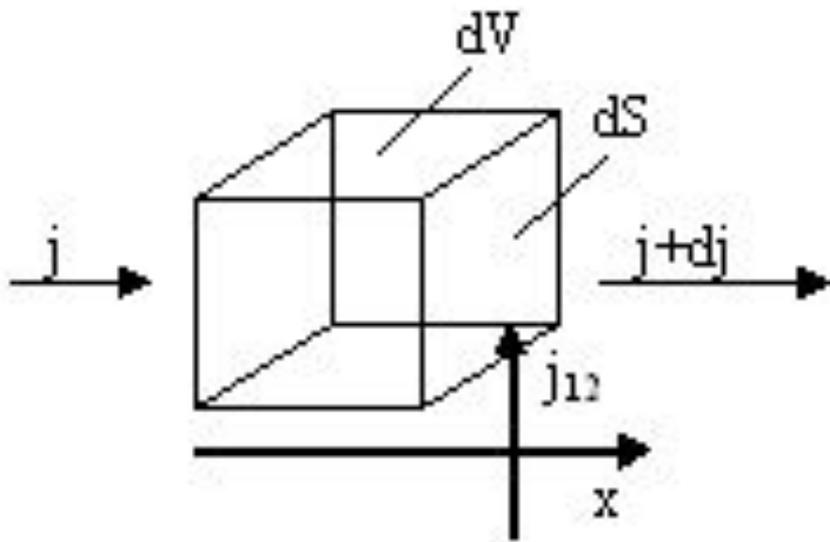
$$\rho = \text{const} \quad \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial w_z}{\partial z} = 0$$

$$\rho = f(\tau, x, y, z)$$

субстанциональная производная

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} &= \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial \rho}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial \rho}{\partial z} \frac{dz}{dt} = \\ &= \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial x} W_x + \frac{\partial \rho}{\partial y} W_y + \frac{\partial \rho}{\partial z} W_z = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{W} \cdot (\vec{\nabla} \rho) \end{aligned}$$

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \vec{\nabla} \cdot (\vec{W}) = 0$$



$$j_A dS - (j_A + dj_A) dS + j_{A12} dF - r_A dV = \frac{\partial c_A}{\partial \tau} dV$$

$$\frac{\partial c_A}{\partial \tau} + \frac{\partial j_A}{\partial x} = j_{A12} \frac{dF}{dV} - r$$

$$\frac{\partial c_A}{\partial \tau} + \nabla \cdot (\mathbf{j}_A) = R_A$$

$$\mathbf{j}_A = -\left(D_{AB} + D_A \right) \vec{\nabla} c + c \vec{w}$$

Дифференциальное уравнение конвективной диффузии

$$\frac{\partial c_A}{\partial \tau} + w_x \frac{\partial c_A}{\partial x} + w_y \frac{\partial c_A}{\partial y} + w_z \frac{\partial c_A}{\partial z} = (D_{AB} + D) \left(\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right) + R$$

$$\frac{dc_A}{d\tau} = (D_{AB} + D) \nabla^2 (c_A) + R$$

Решением этого уравнения является поле концентраций $c_A = f(\tau, x, y, z)$

НУЖНО ЗАДАТЬ

Условия однозначности:

$$c_A^0 = f(\tau_0, x, y, z) \quad \text{начальные условия}$$

$$c_{AP}^{GP} = f(\tau_{GP}, x, y, z) \quad \text{границные условия}$$

поле скоростей

$$\vec{w} = f(x, y, z)$$

Локальная форма закона сохранения массы
(уравнение неразрывности)



$$\frac{d(\rho m)}{d\tau} = 0$$

$$\frac{d(\rho dV)}{d\tau} = dV \frac{d(\rho)}{d\tau} + \rho \frac{d(dV)}{d\tau} = 0$$

$$\begin{aligned} \frac{d(dV)}{d\tau} &= \frac{d(dx dy dz)}{d\tau} = dw_x dy dz + dw_y dx dz + dw_z dx dy = \\ &= dV \left(\frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial w_z}{\partial z} \right) = dV \operatorname{div}(\vec{w}) \end{aligned}$$



$$\rho = f(\tau, x, y, z)$$

субстанциональная производная

$$\frac{d\rho}{d\tau} = \frac{\partial\rho}{\partial\tau} + w_x \frac{\partial\rho}{\partial x} + w_y \frac{\partial\rho}{\partial y} + w_z \frac{\partial\rho}{\partial z} = \frac{\partial\rho}{\partial\tau} + \vec{w} \nabla(\rho)$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial\tau} + \vec{w} \nabla(\rho) + \rho \operatorname{div}(\vec{w}) = 0$$

$$\rho = \text{const}$$

$$\frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial w_z}{\partial z} = 0$$