

УДК 532.5; 532.72

DOI 10.17223/19988621/48/6

В.А. Демин, М.И. Петухов

**КРУПНОМАСШТАБНЫЙ ПЕРЕНОС КОМПОНЕНТОВ
МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ В ТОНКИХ КАПИЛЛЯРАХ¹**

Выполнено прямое численное моделирование термоконцентрационной конвекции бинарного металлического расплава, заключенного в тонком вертикально ориентированном капилляре при наличии на его боковой поверхности градиента температуры, направленного вертикально вверх. Особое внимание в ходе расчетов было уделено объяснению эффекта продольного разделения смеси на компоненты. Само явление достоверно воспроизводится в разных по постановке экспериментах, однако до сих пор не имеет теоретического обоснования. В предлагаемой модели сделана попытка учесть наиболее важные физические факторы, необходимые для того, чтобы воспроизвести в расчетах все основные эффекты, наблюдаемые в опыте. По результатам вычислительного эксперимента было подтверждено, что наличие продольных градиентов температуры и концентрации совместно с условием несмачивания на боковой поверхности создает опускное термокапиллярное течение, которые вкуче с эффектами адсорбции-десорбции влекут за собой образование объемной неоднородности концентрации компонентов смеси в капилляре.

Ключевые слова: *концентрационная конвекция, свободная поверхность, термо- и концентрационно-капиллярные эффекты, адсорбционно-десорбционные процессы.*

В настоящее время объяснение в рамках механики сплошных сред широкого спектра явлений, связанных с тепло- и массопереносом, часто требует учета такого фактора, как наличие у системы свободной поверхности. Упомянутые процессы возникают при решении множества задач, имеющих как фундаментальное, так и прикладное значение: с ними можно столкнуться в металлургии, при управлении химическими реакциями, в ходе промышленной очистки воды и т.д. Помимо определенных процессов, происходящих в объеме, важные специфические явления могут развиваться на поверхности рассматриваемой среды. Так как константы переноса на межфазных поверхностях имеют, как правило, существенно иные значения, а на самих поверхностях в силу определенных ограничений разыгрываются обособленные от объема явления, тонкие поверхностные слои часто приходится рассматривать как отдельную двумерную область, описываемую особыми уравнениями. Наука о совместном взаимосогласованном поведении подобных фаз (объема и поверхности) называется межфазной гидродинамикой [1]. Одним из явлений, для объяснения которого потребовалось привлечь идеи межфазной гидродинамики, оказался эффект перераспределения компонентов металлических расплавов в тонких капиллярах.

Впервые упомянутое явление было обнаружено и детально экспериментально описано в работе [2]. Тонкий алундовый капилляр, заполненный однородной

¹ Работа поддержана грантом РФФИ (№ 16-01-00662 а) «Особенности описания термокапиллярной конвекции в бинарных системах жидкостей с поверхностно-активной компонентой».

двухкомпонентной смесью жидких легкоплавких металлов (Sn–Pb, Cd–Bi или Al–Si) в вертикальном положении помещался в печь при температуре, когда оба компонента находились в расплавленном состоянии. Спустя время ~ 1 ч его вынимали и немедленно остужали, алундовое покрытие удалялось, после чего изучалось распределение компонентов сплава в продольном сечении. Многочисленные эксперименты показали, что одного часа выдержки в печи было вполне достаточно, чтобы продольное разделение смеси вышло на асимптотическое значение. Измерения давали достаточно большой перепад концентрации компонентов вдоль капилляра ($\sim 1\text{--}20\%$) с характерным нелинейным распределением, отвечающим уменьшению концентрации тяжелого компонента с высотой.

Следует отметить, что высота капилляров варьировалась от 40 до 220 мм, что на один-два порядка превышало их диаметр, который, в свою очередь, составлял от 0.8 до 1.2 мм. Наличие однородных, на первый взгляд, условий по температуре и отмеченное выше соотношение продольного и поперечного размеров капилляра позволило в работе [3] сделать предположение об отсутствии конвекции внутри капилляра, что привело к попытке объяснения данного эффекта при помощи гравитационного оседания. Для этого была решена задача о броуновском движении частиц, поведение которых описывалось с помощью уравнения Фоккера – Планка. При этом оседающие частицы представляли собой конгломераты атомов, которые образовывались в процессе ликвации. Однако оказалось, что полученное стационарное решение для предельного по времени случая не позволило удовлетворительно описать данное явление. 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 дальнейших экспериментов состав этих частиц, а также их радиус, который в задаче играл роль параметра, так и остались неопределенными. Последующая попытка оценить радиус этих частиц, используя данные рентгеноструктурного анализа, так и не дала положительного результата.

С другой стороны, известно, что процессы перераспределения компонентов жидких смесей в тонких слоях и каналах обладают множеством особенностей. В [4] была аналитически решена задача о влиянии термодиффузии на гравитационное оседание наночастиц в несущей жидкости, заполняющей тонкий вертикальный неоднородно нагретый канал. Точное аналитическое решение в виде рядов позволило проследить за эволюцией полей температуры и концентрации наночастиц для разных значений коэффициента термодиффузии. Показано, что полученное решение может быть положено в основу методики экспериментального измерения коэффициента термодиффузии для наножидкостей, что является весьма актуальной проблемой применительно к магнитным жидкостям, физические свойства которых могут сильно отличаться друг от друга ввиду разных способов изготовления подобных сред. Было установлено, что для размеров феррочастиц $\sim 10\text{--}20$ нм гравитационное оседание может привести к хотя бы сколько-то ощутимому эффекту только по прошествии времени $\sim 10^6$ с. Иными словами, седиментационные эффекты для наноразмерных частиц чрезвычайно слабы, а характерные времена оседания измеряются месяцами и даже годами. Напротив, учет конвективного механизма переноса в задаче [5] о самопроизвольном остывании и замерзании водного раствора Na_2SO_4 в тонком вертикальном канале позволил с учетом эффекта термодиффузии объяснить процесс крупномасштабного продольного перераспределения примеси вдоль канала в течение короткого времени ~ 10 мин, что было подтверждено прямыми экспериментальными измерениями. Таким образом, в самых разнообразных ситуациях, ко-

гда действуют те или иные физические механизмы переноса, быстрое крупномасштабное продольное разделение компонентов жидких смесей в тонких каналах имеет место только при наличии конвективного перераспределения.

Так, попытка объяснить результаты опытов [2] путем включения в модель термокапиллярного конвективного переноса была сделана в работе [6]. В ней рассматривался вертикальный капилляр, заполненный однородной двухкомпонентной смесью жидких металлов. Ранее в ходе опытов было замечено неожиданное поведение на границе раздела между расплавом и твердой алундовой поверхностью при организации крупномасштабного тепломассопереноса вдоль капилляра. Из анализа распределения компонентов в поперечном сечении вытекало заключение, что тяжелый компонент расплава сначала выдавливается на поверхность, затем «стекает», как по свободной поверхности вниз, и диффундирует обратно в массив. Очевидно, за подобным поведением в системе должна стоять соответствующая термодинамическая сила. В данном случае роль термодинамической силы может играть градиент температуры. Если специальным образом не контролировать распределение температуры в рабочей камере печи, то при перепаде 10–20 см по высоте вполне допустимо образование тепловой шапки с разницей по температуре порядка 1 К. Таким образом, вследствие естественных процессов теплообмена на вертикальных гранях капилляра во время выдержки в печи может устанавливаться градиент температуры, направленный вертикально вверх. Как дополнение, в силу специфики используемых в эксперименте материалов (легкоплавкие металлы в качестве рабочей жидкости и алундовые стенки капилляра), считается, что на вертикальных гранях справедливо условие полного несмачивания. На образованной таким образом вертикальной свободной поверхности имеет место температурная неоднородность поверхностного натяжения, которая приводит к генерации термокапиллярного течения. Помимо этого, учитывается механизм адсорбции-десорбции тяжелого компонента на свободной поверхности.

Численное решение полных нелинейных уравнений термоконцентрационной конвекции, как и ожидалось, приводило к появлению опускного течения на поверхности. Примесь, скапливающаяся в нижней части капилляра, из-за эффекта десорбции проникала в объем и, за счет подъемного течения в центре капилляра, конвективно переносилась вверх. В итоге создавалось характерное нелинейное распределение вдоль оси капилляра, которое гораздо лучше согласовывалось с экспериментом, нежели результаты работы [3]. Таким образом, был реализован крупномасштабный перенос компонентов смеси, приводящий к разности концентраций $\sim 1\text{--}5\%$ между торцами капилляра за относительно быстрое время (~ 10 мин). Эффект разделения на компоненты оказался не столь сильным, как ожидалось. Помимо этого, не все используемые параметры соответствовали жидким металлам ($Pr = 0.5$). Тем не менее в данной работе было убедительно показано, что при учете крупномасштабного конвективного переноса за счет температурной неоднородности поверхностного натяжения время разделения и продольный концентрационный профиль качественно совпадали с опытом.

С другой стороны, известно [7], что помимо зависимости поверхностного натяжения от температуры, в концентрационных задачах всегда присутствует не менее сильная связь поверхностного натяжения с неоднородностями концентрации поверхностного компонента, что способно оказывать существенное влияние на динамику исследуемой системы. Учет этого фактора позволяет сделать постановку задачи более физической и, как будет показано ниже, количественно дает результаты, более близкие к экспериментальным данным.

Постановка задачи

Рассмотрим вертикально ориентированный капилляр, полностью заполненный однородной двухкомпонентной смесью жидких металлов (рис. 1). На вертикальных границах капилляра поддерживается постоянный градиент температуры, направленный вертикально вверх, что соответствует подогреву сверху.

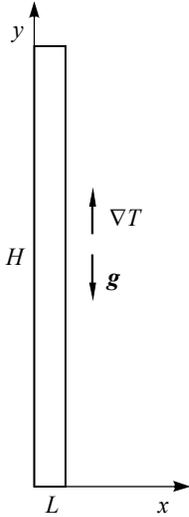


Рис. 1. Геометрия задачи.
Система координат
Fig. 1. Geometry of the
problem. Coordinate system

Для описания конвективных течений жидкой бинарной смеси воспользуемся системой гидродинамических уравнений в приближении Буссинеска [8]:

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

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)T = \chi\Delta T, \quad \text{div } \mathbf{v} = 0; \quad (2)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)C = D\Delta C, \quad (3)$$

где \mathbf{v} , p , T , C – соответственно поля скорости, давления, температуры и объемной концентрации тяжелого компонента смеси, β_T , β_C – коэффициенты температурного и концентрационного изменения плотности, ρ – плотность смеси, χ , ν , D – соответственно коэффициенты температуропроводности, кинематической вязкости и диффузии, g – величина ускорения свободного падения, $\boldsymbol{\gamma}$ – единичный вектор, направленный вертикально вверх.

На боковых свободных поверхностях концентрация описывалась отдельным уравнением, в котором были учтены эффекты адсорбции-десорбции [1, 9, 10]:

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \nabla^S(\mathbf{v}\Gamma) = D_S\Delta^S\Gamma + k_A C - k_D \Gamma, \quad (4)$$

где Γ – поверхностная концентрация, k_A , k_D – коэффициенты адсорбции и десорбции, D_S – коэффициент поверхностной диффузии. Индекс s над операторами означает дифференцирование по координатам поверхности. В качестве упрощения будем предполагать, что горизонтальные торцы капилляра являются твердыми и непроницаемыми для вещества. Таким образом, пусть на них выполняются условия прилипания и отсутствия потока вещества через границу:

$$y = 0, H: \mathbf{v} = 0, \quad \frac{\partial \Gamma}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial y} = 0, \quad T = 0, \quad \Theta. \quad (5)$$

На свободных вертикальных границах имеет место линейное распределение температуры. Кроме того необходимо учесть явления адсорбции-десорбции. Закон сохранения массы на поверхности с учетом всех возможных потоков вещества [7, 10, 11] позволяет связать объемную и поверхностную концентрацию следующими условиями:

$$x = 0, L: -D\frac{\partial C}{\partial x} = \mp k_A C \pm k_D \Gamma, \quad T = \Theta y/H, \quad (6)$$

Далее обезразмерим уравнения (1) – (4) и граничные условия (5) – (6), приняв за единицы измерения расстояния, времени, скорости, температуры, давления,

объемной и поверхностной концентрации следующие величины: L , L^2/ν , χ/L , Θ , $\rho\nu\chi/L^2$, $\Theta\beta_T/\beta_C$, $\Theta\beta_T L/\beta_C$. Здесь L – толщина канала, Θ – перепад температуры между торцами капилляра. После процедуры обезразмеривания уравнения и граничные условия записываются в следующей форме:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}}(\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v} = -\nabla P + \Delta \mathbf{v} + \text{Ra}(\vartheta - \Sigma)\boldsymbol{\gamma}; \quad (7)$$

$$\text{Pr} \frac{\partial \vartheta}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)\vartheta = \Delta \vartheta, \quad \text{div } \mathbf{v} = 0; \quad (8)$$

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}}(\mathbf{v}\nabla)\Sigma = \frac{1}{\text{Sc}}\Delta \Sigma; \quad (9)$$

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}}\nabla^s(\mathbf{v}\zeta) = \frac{1}{\text{Sc}_s}\Delta^s \zeta + k_+\Sigma - k_-\zeta; \quad (10)$$

$$x = 0, 1: v_x = 0, \quad -\frac{1}{\text{Sc}}\frac{\partial \Sigma}{\partial x} = \mp k_+\Sigma \pm k_-\zeta, \quad \vartheta = \frac{y}{h}; \quad (11)$$

$$y = 0, h: \mathbf{v} = 0, \quad \frac{\partial \zeta}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial \Sigma}{\partial y} = 0, \quad \vartheta = 0, 1, \quad (12)$$

где \mathbf{v} , P , ϑ , Σ , ζ – соответственно безразмерные поля скорости, давления, температуры, объемной и поверхностной концентрации тяжелого компонента. В граничных условиях h – безразмерная высота капилляра. Краевая задача (7) – (12) содержит следующий набор управляющих параметров:

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

Ra , Pr , Sc – числа Рэлея, Прандтля и Шмидта, Sc_s – поверхностное число Шмидта. Параметры k_+ , k_- имеют смысл безразмерных коэффициентов адсорбции и десорбции. Задача решалась в терминах функции тока ψ и скалярной функции φ , совпадающей с точностью до знака с завихренностью:

$$v_x = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v_y = -\frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad \varphi = \Delta_1 \psi, \quad \Delta_1 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}.$$

Таким образом, уравнения (7) – (10) окончательно преобразовывались к виду

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}}\left(\frac{\partial \psi}{\partial y}\frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x}\frac{\partial \varphi}{\partial y}\right) = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} - \text{Ra}\left(\frac{\partial \vartheta}{\partial x} - \frac{\partial \Sigma}{\partial x}\right);$$

$$\text{Pr} \frac{\partial \vartheta}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial y}\frac{\partial \vartheta}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x}\frac{\partial \vartheta}{\partial y} = \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial y^2};$$

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}}\left(\frac{\partial \psi}{\partial y}\frac{\partial \Sigma}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x}\frac{\partial \Sigma}{\partial y}\right) = \frac{1}{\text{Sc}}\left(\frac{\partial^2 \Sigma}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Sigma}{\partial y^2}\right);$$

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

Для учета термо- и концентрационно-капиллярного механизмов на свободных боковых границах зависимость поверхностного натяжения от температуры и поверхностной концентрации рассматривалась в линейном приближении:

$$\sigma = \sigma_0 - \sigma_T T - \sigma_\Gamma \Gamma. \quad (13)$$

Условие баланса касательных напряжений на границе дает следующие граничные условия:

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

где η – динамическая вязкость. После обезразмеривания эти граничные условия приводятся к виду

$$x = 0: \varphi = -\text{Ma}_T \frac{\partial \vartheta}{\partial y} - \text{Ma}_\Gamma \frac{\partial \zeta}{\partial y}, \quad x = 1: \varphi = \text{Ma}_T \frac{\partial \vartheta}{\partial y} + \text{Ma}_\Gamma \frac{\partial \zeta}{\partial y},$$

где Ma_T и Ma_Γ – температурное и концентрационное числа Марангони:

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

Описание численной процедуры

Описанная система уравнений решалась методом конечных разностей. Алгоритм был разработан в соответствии с явной схемой решения уравнений в частных производных и основан на двухполевой методике [12]. При аппроксимации производных по времени и производных по координатам использовались соответственно односторонние и центральные разности. Шаг по времени вычислялся в соответствии с устойчивостью счета по формуле $\Delta t = \min\{h_x^2, h_y^2\}/4\delta$, где h_x, h_y – шаги вдоль осей x и y , δ – эмпирический параметр больше единицы. При решении уравнения Пуассона для функции тока применялся метод простых итераций. В ходе расчетов использовался метод установления. Компьютерный код был реализован на языке программирования FORTRAN-90. Система уравнений решалась на суперкомпьютере «ПГУ–Тесла» Научно-образовательного центра Пермского государственного национального исследовательского университета «Параллельные и распределенные вычисления». При проведении численного моделирования осуществлялась периодическая запись искомым полей на диск, что позволяло анализировать структуру полей в каждый момент времени. Следует отметить, что для повышения точности и устойчивости счета в граничных условиях (11) на потоки вещества, а также в нелинейном слагаемом уравнения (10) для поверхностной концентрации производные полей функции тока и концентрации находились при помощи пятиточечной аппроксимации:

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

Здесь нижний индекс означает номер узла по мере удаления от границы, положение которой определяется индексом 0; h_x – шаг по координате x . Естественными 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 рас-

пределение так, чтобы градиент был направлен вверх. Предварительно, с целью контроля сходимости результатов, были выполнены расчеты на разных сетках. В таблице приведены значения относительной погрешности расчета (в процентах) в зависимости от общего числа узлов на этапе установления.

Таблица сходимости результатов

Номер строки	N_1 – число узлов по x	N_2 – число узлов по y	$N = N_1 \cdot N_2$ – общее число узлов	Относительная разность суммарных кинетических энергий, %	Относительная разность максимумов функции тока, %
1	23	369	8487	$\Delta_{12} = 2.893$	0.2021
2	21	311	6531	$\Delta_{23} = 3.578$	0.2210
3	19	265	5035	$\Delta_{34} = 4.538$	0.3204
4	17	229	3893	$\Delta_{45} = 5.946$	1.0239
5	15	199	2985	$\Delta_{56} = 8.153$	2.6181
6	13	177	2301	$\Delta_{67} = 11.92$	4.2931
7	11	161	1771		

Представленные табличные данные, визуализированные на рис. 2, демонстрируют удовлетворительную сходимость как по максимуму функции тока, так и суммарной кинетической энергии.

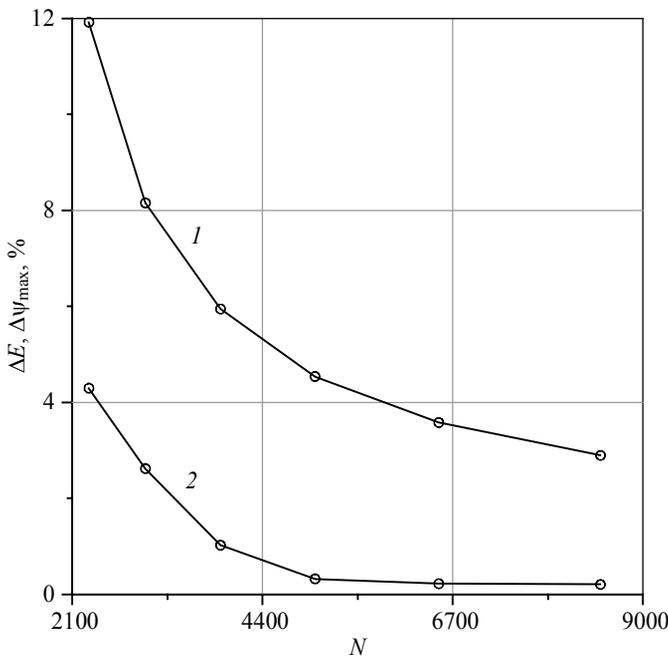


Рис. 2. Относительная погрешность для суммарной кинетической энергии (% , кр. 1) и максимума функции тока (% , кр. 2) в зависимости от общего числа узлов

Fig. 2. Relative error for the total kinetic energy (% , curve 1) and maximum stream function (% , curve 2) as functions of the number of mesh points

В результате в ходе численного моделирования использовалась рабочая сетка $21 \times 311 = 6531$, при этом высота канала бралась много больше толщины ($h = 30$). Расчеты проводились при некоторых фиксированных значениях параметров: $Ra = 0.005$, $Pr = 0.05$, $Sc = 300$, $Sc_S = 200$, $k_+ = 0.0001$, $k_- = 0.054$.

Обсуждение результатов

Численное моделирование с учетом более сложной зависимости коэффициента поверхностного натяжения от температуры и концентрации (13) показало, что в процессе разделения устанавливается достаточно сильный перепад концентрации компонентов ($\sim 20\%$), что значительно больше по величине, нежели в [6]. Этот результат гораздо лучше соотносится с экспериментом [2]. Характерные профили концентрации, функции тока и температуры представлены на рис. 3.

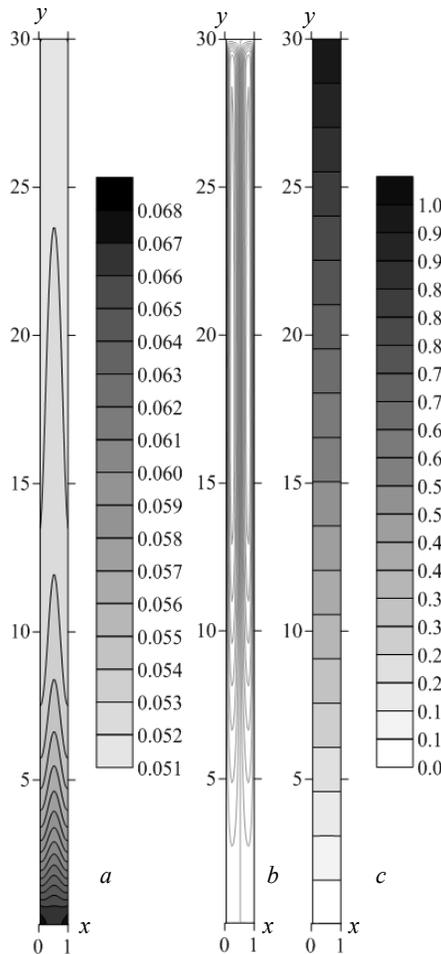


Рис. 3. Поля концентрации (a), функции тока (b) и температуры (c) при $Ma_T = 8$ и $Ma_\Gamma = 7$ в момент времени $t = 800$

Fig. 3. Fields of the (a) concentration, (b) stream function, and (c) temperature at $Ma_T = 8$ and $Ma_\Gamma = 7$ at the instant $t = 800$

Видно, что конвективный перенос порождается термокапиллярными силами и охватывает весь капилляр. Как и в эксперименте, наиболее сильные неоднородности концентрации формируются в нижней части капилляра, где накапливается тяжелый компонент смеси. Данный эффект объясняется тем, что опускное течение на поверхности относительно быстро перемещает примесь к нижнему торцу капилляра. Таким образом, именно профиль поверхностной концентрации, в конечном счете, формирует объемное распределение тяжелого компонента. При сравнении профилей поверхностной и объемной концентрации (рис. 4 и 5) можно увидеть их подобие. Особенно хорошо согласуется с экспериментом продольное распределение объемной концентрации, которое практически является экспоненциальным за исключением торцов капилляра.

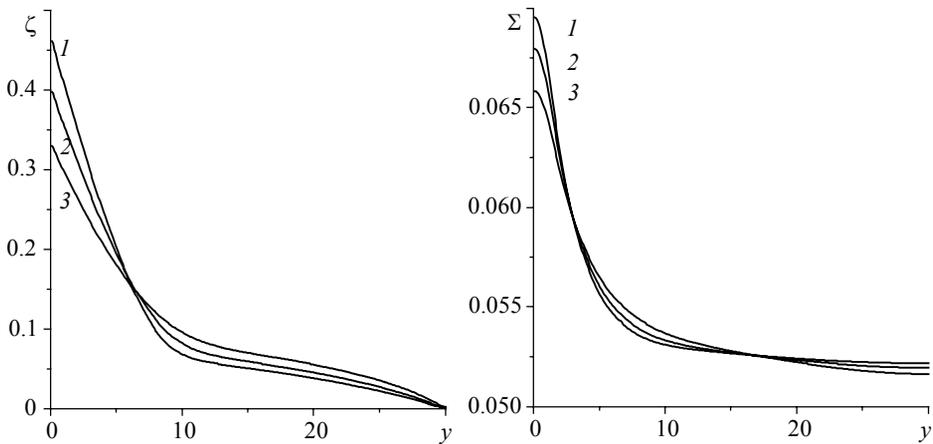


Рис. 4. Профили поверхностной (слева) и объемной (справа) концентрации при $Ma_T = 5$. Кр. 1–3 соответствуют $Ma_T = 10, 8, 6$

Fig. 4. Profiles of the surface and volume concentration (left and right side, respectively) at $Ma_T = 5$. Curves 1–3 correspond to $Ma_T = 10, 8,$ and 6

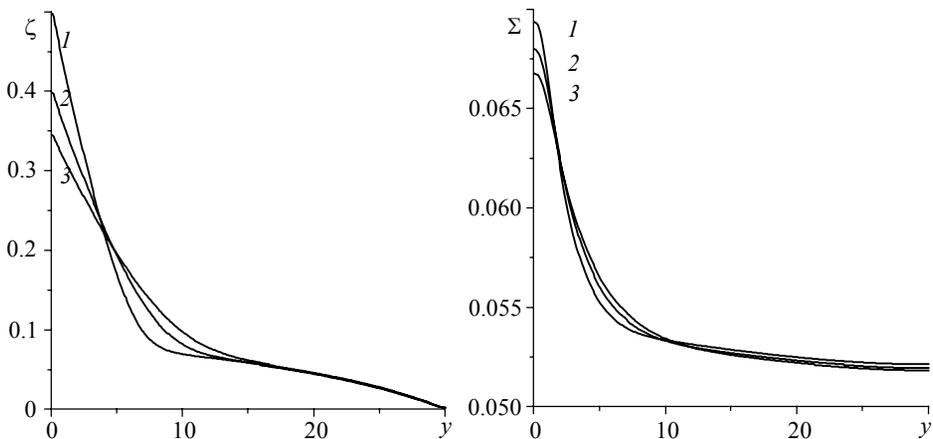


Рис. 5. Профили поверхностной (слева) и объемной (справа) концентрации при $Ma_T = 8$. Кр. 1–3 соответствуют $Ma_T = 3, 5, 7$

Fig. 5. Profiles of the surface and volume concentration (left and right side, respectively) at $Ma_T = 8$. Curves 1–3 correspond to $Ma_T = 3, 5,$ and 7

На рис. 4 – 6 продемонстрирована роль главных механизмов (термо- и концентрационно-капиллярного) в формировании профилей поверхностной и объемной концентрации, а также скорость движения поверхностного компонента. Видно, что рост теплового числа Марангони Ma_T (что соответствует усилению термокапиллярного механизма) приводит к увеличению перепада концентрации на торцах. В то время как увеличение концентрационного числа Марангони Ma_C (отвечает за концентрационно-капиллярный механизм) дает обратный эффект.

Аналогичное поведение отражается на профилях скорости. Рис. 6 показывает, что сначала элемент жидкости постепенно разгоняется термокапиллярной силой вдоль поверхности, затем скорость выходит на практически установившееся значение, а в конце при достижении торца довольно быстро останавливается. Отметим, что подобное поведение довольно типично для термокапиллярной конвекции. Распределение скорости вдоль поверхности подтверждает результаты [6]. А именно, термокапиллярная сила генерирует опускное течение на свободной поверхности, в то время как концентрационно-капиллярный механизм является скорее вторичным. Действуя в противоположном направлении, концентрационно-капиллярная сила вносит существенный позитивный вклад в распределение концентрации в объеме, делая его менее градиентным. Распределение приобретает более гладкий, «барометрический» вид, что хорошо согласуется с опытом.

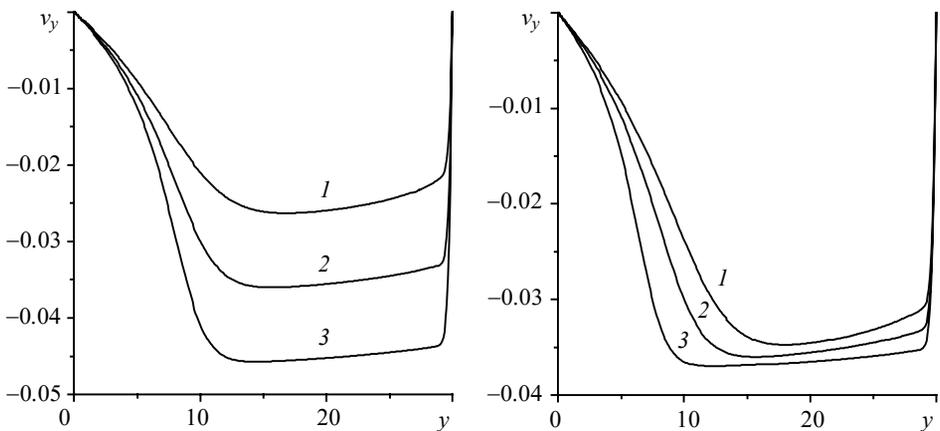


Рис. 6. Продольная компонента скорости на поверхности капилляра. Слева: $Ma_T = 5$. Кр. 1–3 соответствуют $Ma_C = 6, 8, 10$. Справа: $Ma_T = 8$. Кр. 1–3 отвечают $Ma_C = 7, 5, 3$

Fig. 6. Longitudinal velocity component on the surface of the capillary. Left side: $Ma_T = 5$. The curves 1–3 correspond to $Ma_C = 6, 8, 10$. Right side: $Ma_T = 8$. The curves 1–3 correspond to $Ma_C = 7, 5, 3$

Пример расчета «концентрационной вилки», иллюстрирующей динамику разделения смеси в зависимости от времени, приведен на рис. 7. Полученный результат качественно и количественно повторяет подобные зависимости, представленные в [2]. При достижении момента времени порядка 800 безразмерных единиц (1 ч при переходе к размерным единицам) система практически полностью выходит на стационарный режим. Заметим, что окончательный профиль функции тока, а также профиль поверхностной концентрации формируются гораздо быстрее, чем профиль объемной концентрации.

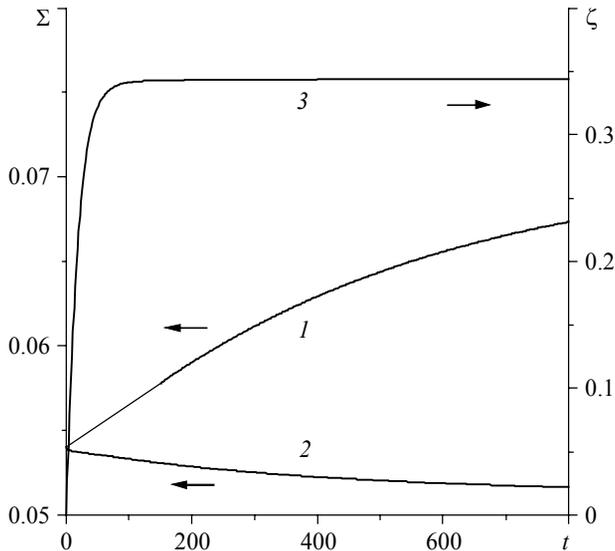


Рис. 7. Максимальное и минимальное значения поля объемной концентрации в зависимости от времени (кр. 1, 2) при $Ma_T = 8$ и $Ma_T = 7$; кр. 3 – максимум поверхностной концентрации в зависимости от времени

Fig. 7. Maximum and minimum values of the volume concentration field as functions of time (1, 2) at $Ma_T = 8$ and $Ma_T = 7$; maximum of the surface concentration as a function of time (3)

Выводы

Результаты прямого численного моделирования показывают, что включение в рассмотрение конвективного переноса, вызываемого поверхностными эффектами, позволяет адекватно описать неожиданно быстрый процесс разделения бинарного расплава на компоненты в тонких капиллярах. Дальнейшее уточнение результатов расчетов упирается в необходимость более точного экспериментального определения управляющих параметров задачи. Это касается значений коэффициентов адсорбции-десорбции для расплавов металлов, коэффициентов поверхностной вязкости и диффузии и т.д. Выяснено, что термокапиллярный механизм является ключевым в формировании пристеночного опускного течения, в то время как вторичный концентрационно-капиллярный механизм работает в противоположную сторону: оказывает сильное стабилизирующее действие и размывает тяжелый компонент в объеме вдоль канала. При учете зависимости коэффициента поверхностного натяжения от концентрации исчезает погранслойный характер в распределении тяжелого компонента: он в меньшей степени накапливается вблизи нижнего торца капилляра.

ЛИТЕРАТУРА

1. Братухин Ю.К., Макаров С.О. Гидродинамическая устойчивость межфазных поверхностей. Пермь: Изд-во Пермск. ун-та, 2005. 240 с.
2. Гаврилин И.В., Фролова Т.Б., Захаров В.П. О ликвации в жидких эвтектических расплавах // Изв. АН СССР. Металлы. 1984. № 3. С. 191–193.
3. Гаврилин И.В. Седиментационный эксперимент при изучении жидких сплавов // Изв. АН СССР. Металлы, 1985. № 2. С. 66–73.
4. Демин В.А. Оседание наночастиц в однородной несущей жидкости при наличии термодиффузии // Вестник Пермского университета. Серия: Физика. 2013. Вып. 1 (23). С. 20–24.
5. Глухов А.Ф., Демин В.А., Третьяков А.В. О влиянии термодиффузии на перераспределение примеси при остывании столба бинарной жидкости // Изв. Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов. 2015. Т. 326. № 11. С. 118–127.
6. Демин В.А., Петухов М.И. К вопросу о механизме крупномасштабного переноса компонентов металлических расплавов в неоднородно нагретых тонких капиллярах // Вестник Пермского университета. Серия: Физика. 2016. Вып. 3(34). С. 65–71. DOI: 10.17072/1994-3598-2016-3-65-71.
7. Slavtchev S., Hennenberg M., Legros J.-C., Lebon G. Stationary solutal Marangoni instability in a two-layer system // J. Colloid and Interface Science. 1998. V. 203. No. 2. P. 354–368. DOI: 10.1006/jcis.1998.5525.
8. Герицки Г.З., Жуховицкой Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.
9. Ролдугин В.И. Физикохимия поверхности: учебник-монография. Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2011. 568 с.
10. Бирях Р.В. Устойчивость однородной нестационарной диффузии ПАВ через плоскую границу раздела жидкостей // Вестник Пермского университета. Серия: Физика. 2016. Вып. 1 (32). С. 64–70. DOI: 10.17072/1994-3598-2016-3-64-70.
11. Birikh R.V., Briskman V.A., Velarde M., Legros J.-C. Liquid Interfacial Systems: Oscillations and Instability. CRC Press, 2003. 392 p.
12. Тарунин Е.Л. Вычислительный эксперимент в задачах свободной конвекции: учеб. пособие. Иркутск: изд-во Иркут. ун-та, 1990. 228 с.

Статья поступила 28.01.2017 г.

Demin V.A., Petukhov M.I. LARGE-SCALE TRANSFER OF MOLTEN METAL COMPONENTS IN THIN CAPILLARIES. *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 48. pp. 57–69

DOI 10.17223/19988621/48/6

The results of direct numerical simulation of the concentration-induced convection have been presented in this paper. A binary melt of the liquid metals filling a vertical thin capillary with a non-uniform temperature distribution on the boundaries has been considered. It is assumed that the absolute nonwetting condition takes place on the sidewalls of a channel. This effect gives rise to a free surface on the vertical boundaries where the thermocapillary force occurs due to the external longitudinal temperature gradient, which provides the motion of the liquid elements at a long distance compared with an axial size of the capillary. The adsorption-desorption processes occurring along the surface, thermocapillary force, convective motion in a volume, and diffusion are all characterized by essentially different characteristic time. These mechanisms generate both the large-scale process of circulation with a motion of admixture on the surface at the hot top of the capillary with the following transfer down along the boundary due to the thermocapillary force, and the final return into the volume as a consequence of desorption at the bottom of the capillary. The numerical calculations have been performed using the PGU-Tesla supercomputer of the Research Academic Center “Parallel and Distributed Calculations” at Perm State National Research University. The finite difference method has been applied. The numerical code has been

written with the use of Fortran-90 programming language. The calculation results show that the lifting speed of the motion back into the volume is less than that on the surface. Therefore, the admixture at the stage of saturation can be accumulated near the bottom of the capillary. The steady-state flow is stationary and it is determined as in the volume as on the surface predominantly by the Marangoni number. Intensity of the motion and adsorption-desorption processes on the free boundary effect essentially on the formation of both the surface and volume concentration fields and the speed of redistribution of components in the volume. Thus, one of the possible mechanisms of longitudinal division of the liquid binary mixtures into components in thin channels has been demonstrated. This modeling can explain the results of some experiments on division of heterogeneous binary metal melts.

Keywords: concentration-induced convection, free surface, thermocapillary effect, adsorption-desorption processes.

DEMIN Vitaliy Anatol'evich (Doctor of Physics and Mathematics, Perm State National Research University, Perm, Russian Federation)

E-mail: demin@psu.ru

PETUKHOV Maksim Ivanovich (Perm State National Research University, Perm, Russian Federation)

E-mail: geniusmaxp@yandex.ru

REFERENCES

1. Bratukhin U.K., Makarov S.O. (2005) *Gidrodinamicheskaya ustoychivost' mezhfaznykh poverkhnostey* [Hydrodynamic stability of interfaces]. Perm: Perm University Press.
2. Gavrilin I.V., Frolova T.B., Zakharov V.P. (1984) *O likvatsii v zhidkikh evtekticheskikh splavakh* [On liquidation in liquid eutectic melts]. Russian Metallurgy (Metally). 3. pp. 191–193.
3. Gavrilin I.V. (1985) *Sedimentatsionnyy eksperiment pri izuchenii zhidkikh splavov* [Sedimentation experiment in the study of liquid alloys]. Russian Metallurgy (Metally). 2. pp. 66–73.
4. Demin V.A. (2013) Sedimentation of nanoparticles in a homogeneous carrying fluid in a presence of thermodiffusion. *Bulletin of Perm University. Physics*. 1(23). pp. 20–24.
5. Glukhov A.F., Demin V.A., Tret'aykov A.V. (2015) On thermodiffusion influence on the dopant distribution during the freezing of binary liquid column. *Bulletin of the Tomsk Polytechnic University. Geo Assets Engineering*. 11(326). pp. 118–127.
6. Demin V.A., Petukhov M.I. (2016) On mechanism of large-scale transfer of molten metal components in non-uniformly heated thin capillaries. *Bulletin of Perm University. Physics*. 3(34). pp. 65–71. DOI: 10.17072/1994-3598-2016-3-65-71.
7. Slavtchev S., Hennenberg M., Legros J.C., Lebon G. (1998) Stationary solutal Marangoni instability in a two-layer system. *J. Colloid Interface Sci.* 2 (203). pp. 354–368. DOI: 10.1006/jcis.1998.5525.
8. Gershuni G.Z., Zhukhovitskiy E.M. (1976) *Convective stability of incompressible fluids*. Jerusalem: Keter Publishing House.
9. Roldugin V.I. (2011) *Fizikokhimiya poverkhnosti* [Physics and chemistry of a surface]. Dolgoprudnyy: Intellect Publishing House.
10. Birikh R.V. (2016) Stability of homogeneous non-stationary surfactant diffusion through a flat interface between liquids. *Bulletin of Perm University. Physics*. 1 (32), pp. 64–70. DOI: 10.17072/1994-3598-2016-3-64-70.
11. Birikh R.V., Briskman V.A., Velarde M., Legros J.C. (2003) *Liquid Interfacial Systems: Oscillations and Instability*. CRC Press.
12. Tarunin E.L. (1990) *Vychislitel'nyy eksperiment v zadachakh svobodnoy konveksii* [Numerical experiment in problems of free convection]. Irkutsk: Irkutsk University Publ.