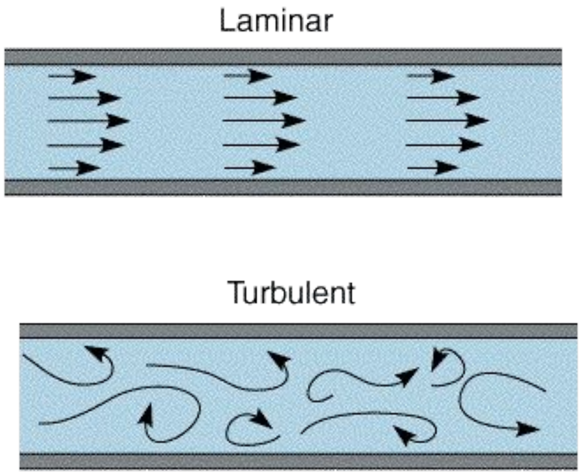
МЕХАНИЗМЫ И УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА СУБСТАНЦИЙ

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

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

$$E = U + E_к + E_п$$

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

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 $T = 273\ K$

$\bar{W}_m$ =461 м/с = 1660 км/ч

Молекулярный перенос субстанции (Теплопроводность)

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

Перенос тепла *(закон Фурье)*

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

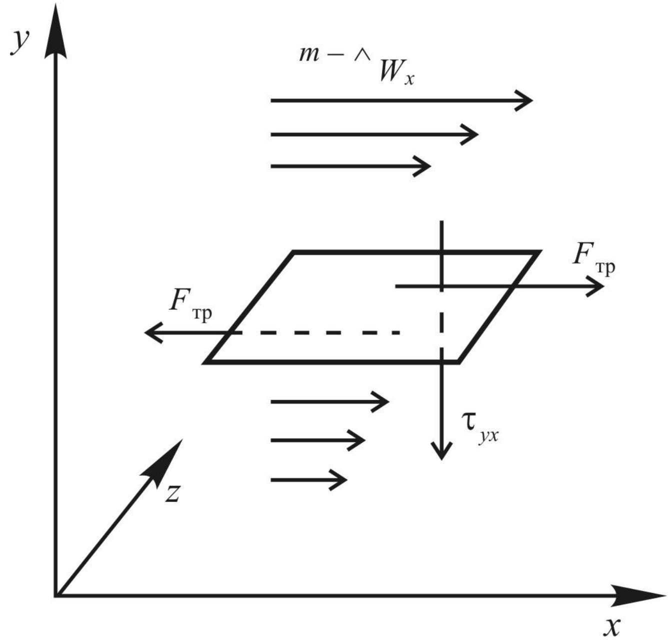
$$\lambda = \lambda_к + \lambda_п + \lambda_с$$

λ- *коэффициент теплопроводности*, Вт/мК.

а- *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 [м^2/с] *коэффициенты динамической* и *кинематической молекулярной вязкости* соответственно

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

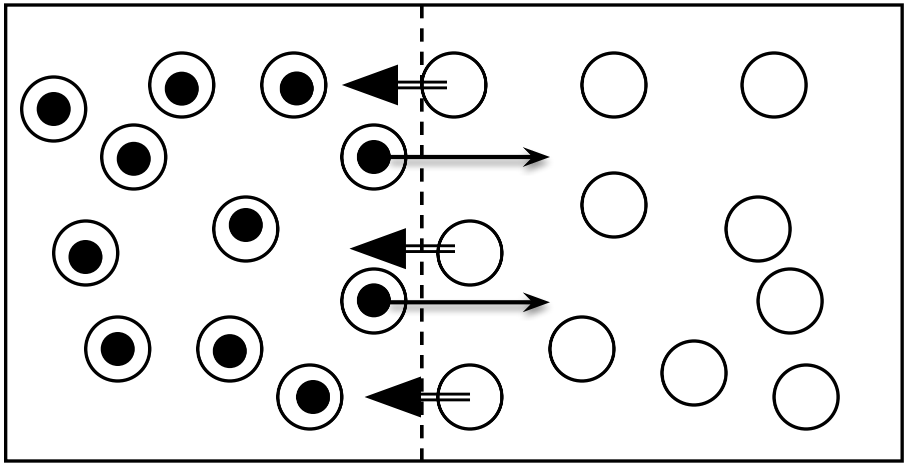
Молекулярный перенос субстанции (Диффузия)

Перенос массы

Поток меченых частиц в равновесных условиях

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

c_i[моль/м^3]



эйнштейновский коэффициент диффузии характеризует подвижность молекул

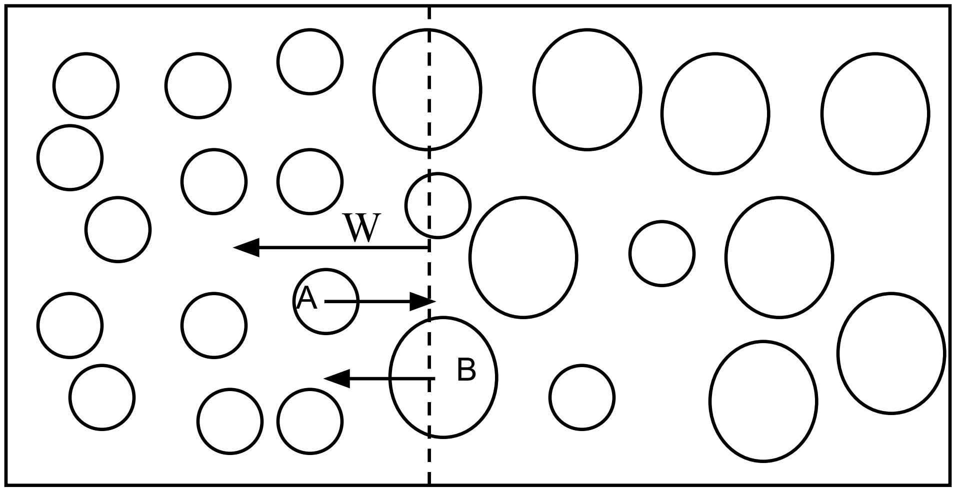
$$D_i = \overline{\Delta \ell_i^2} / 6\Delta t$$

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

Молекулярный перенос субстанции

Перенос массы

Поток массы в неравновесных условиях



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

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

$$D_A > D_B$$

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

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

$$\vec{W} = x_A \vec{w}^{Д} + x_B \vec{w}^{Д} + \vec{w}^{K}$$ -среднемольная скорость

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

C[моль/м^3]
x[мол.дол.]

Среднемольная система координат – суммарный мольный поток вещества = 0

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

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

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

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

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

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

- первый закон Фика

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

Другие системы координат

$$\vec{W}_M = X_A\vec{w}^{\,Д} + X_B\vec{w}^{\,Д} + \vec{w}^{\,K}$$

-среднемассовая скорость X [масс.дол]

$$\vec{W}_V = \phi_A\vec{w}^{\,Д} + \phi_B\vec{w}^{\,Д} + \vec{w}^{\,K}$$

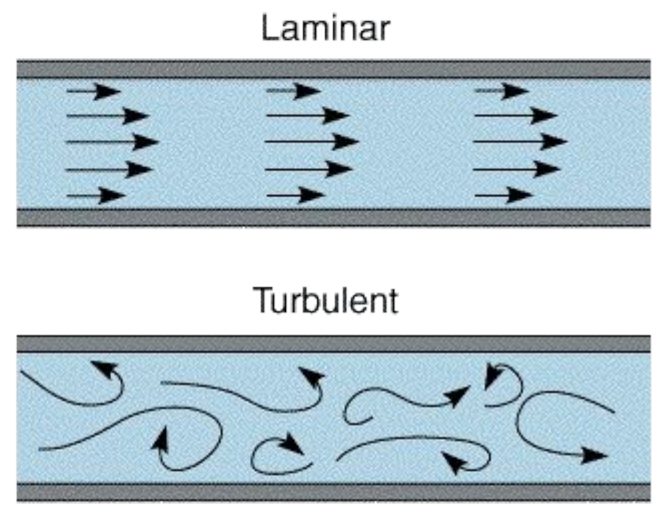
-среднеобъемная скорость φ [объемн. дол]

Турбулентный перенос субстанции

$$\vec{j}_{A\text{т}} = -D_{A} \vec{\nabla} c$$

$$\vec{q} = -\lambda_{\text{т}} \vec{\nabla} T$$

$$\tau_{yx} = -\mu_{\text{т}} \frac{\partial w_x}{\partial y} = -\nu_{\text{т}} \rho \frac{\partial w_x}{\partial y}$$



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	$\vec{q} = -a\vec{\nabla}(\rho c_P T)$	$\vec{j}_A^{Д} = -D_{AB}\vec{\nabla} c_A$	$\tau_{yx} = -\nu \frac{\partial(\rho w_x)}{\partial y}$
Конвективный механизм	$\vec{q} = \rho E \vec{W}$	$\vec{j}_A = \rho_A \vec{W}$	$\tau_{yx} = \rho W_y w_x$
Турбулентный механизм	$\vec{q} = -\lambda_т \vec{\nabla} T$	$\vec{j}_{АТ} = -D_{А}\vec{\nabla} c$	$\tau_{yx} = -\nu_т \frac{\partial(\rho w_x)}{\partial y}$

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)

$$\Delta M = V\Delta\rho = M_{\text{вх}} - M_{\text{вых}}$$

$$\frac{dM}{dt} = V\frac{d\rho}{dt} = G_{\text{вх}} - G_{\text{вых}}$$ Для непрерывных процессов

$$\Delta M_i = V\Delta\rho_i = M_{i,\text{вх}} - M_{i,\text{вых}}$$ Для компонента i

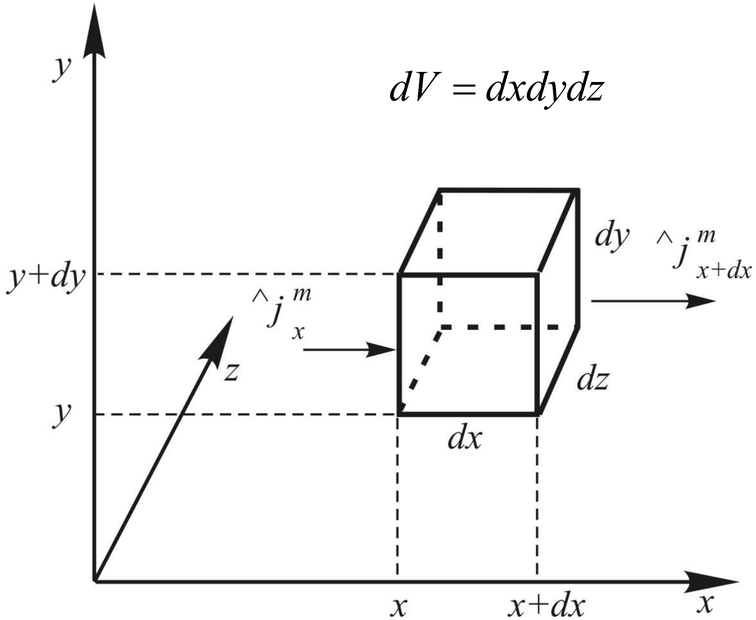
$$\frac{dM_i}{dt} = V\frac{d\rho_i}{dt} = x_{i\ \text{вх}}G_{\text{вх}} - x_{i\ \text{вых}}G_{\text{вых}}$$

$$\frac{dM_i}{dt} = V\frac{d\rho_i}{dt} = x_{i\ \text{вх}}G_{\text{вх}} - x_{i\ \text{вых}}G_{\text{вых}} + r_iV$$ При протекании хим. реакций

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

Локальная форма закона сохранения массы (уравнение неразрывности)

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



$$dV = dxdydz$$

$$G_{x,\text{вх}} = j_x dydz$$

$$G_{x,\text{вых}} = j_{x+dx} dydz = \left(j_x + \frac{\partial j_x}{\partial x} dx \right) dydz$$

$$G_{x,\text{вх}} - G_{x,\text{вых}} = \left(j_x - j_x - \frac{\partial j_x}{\partial x} dx \right) dydz = -\frac{\partial j_x}{\partial x} dxdydz$$

$$G_{y,\text{вх}} - G_{y,\text{вых}} = -\frac{\partial j_y}{\partial y} dxdydz$$

$$G_{z,\text{вх}} - G_{z,\text{вых}} = -\frac{\partial j_z}{\partial z} dxdydz$$

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

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

Локальная форма закона сохранения массы (уравнение неразрывности)

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

субстанциональная производная

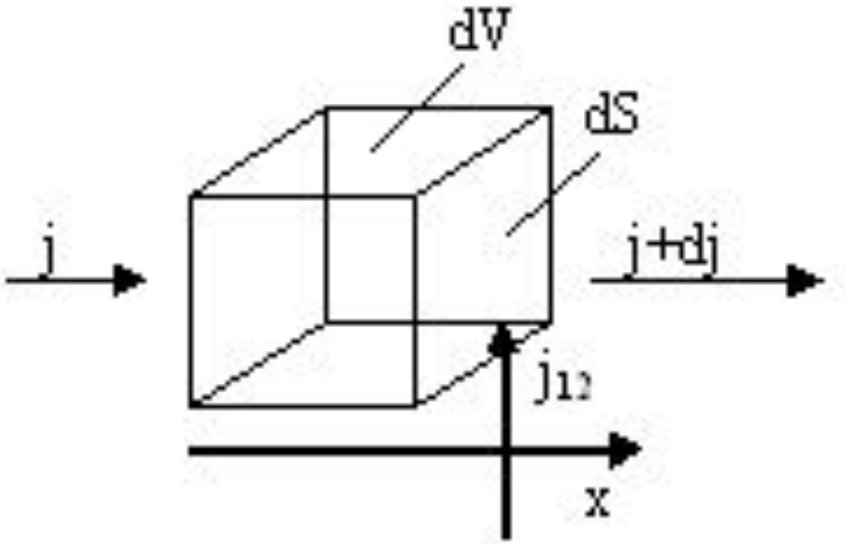
$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial\rho}{\partial x}\frac{dx}{dt} + \frac{\partial\rho}{\partial y}\frac{dy}{dt} + \frac{\partial\rho}{\partial z}\frac{dz}{dt} =$$

$$= \frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial\rho}{\partial x}W_x + \frac{\partial\rho}{\partial y}W_y + \frac{\partial\rho}{\partial z}W_z = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{W}\cdot(\vec{\nabla}\rho)$$

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

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

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



$$j_A dS - (j_A + dj_A)dS + j_{A\,12}dF - r_A dV = \frac{\partial c_A}{\partial \tau} dV$$

$$\frac{\partial c_A}{\partial \tau} + \frac{\partial j_A}{\partial x} = j_{A\,12}\frac{dF}{dV} - r$$

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

$$\vec{j}_A = -(D_{AB} + D_T)\vec{\nabla} c_A + c_A \vec{w}$$

Дифференциальное уравнение конвективной диффузии

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

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

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

НУЖНО ЗАДАТЬ

Условия однозначности:

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

$c_{A}^{ГР} = f(\tau, x_{ГР}, y_{ГР}, z_{ГР})$ граничные условия

поле скоростей

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