Verdampingssnelheid van een heterogene verzameling van vloeistofdruppels.

R 56.

Rekenafdeling Mathematisch Centrum.

1 9 4 9

Opdracht R 56.

Verdampingssnelheid van een heterogene verzameling van vloeistofdruppels

1. Inleiding.

Door het Koninklijke Shell-Laboratorium te Delft werd het verzoek gedaan de hier volgende berekeningen uit te voeren. Het betreft de berekening van enkele integralen, voorkomende in een probleem betrekking hebbend op de verdampingssnelheid van een heterogene verzameling van vloeistofdruppels. Vergelijk hiertoe schrijven 11608 van genoemde opdrachtgeefster.

2. Methode der berekeningen.

De te berekenen integralen waren:

A. $$\frac{V}{V_o} = \frac{n}{\Gamma(\frac{m+1}{n})} \int_\tau^\infty u^m\, e^{-u^n} \left[1 - \tau^{3-p}\, u^{p-3}\right]^{\frac{3}{3-p}} du$$

B. $$\frac{\alpha}{\alpha_o} = \frac{n}{\Gamma(\frac{m+1}{n})} \int_\tau^\infty u^m\, e^{-u^n} \left[1 - \quad {}^{3-p}\, u^{p-3}\right] du$$

Het τ-interval moest zo gekozen worden dat $\frac{V}{V_o}$ en $\frac{\alpha}{\alpha_o}$ het interval 1 —— 0,05 doorliepen.

De parametercombinaties waren:

Type A: $p = 1,\ m = 5 \quad n = \frac{1}{5}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, 1, 2, 3.$

Type B: $p = 2,\ m = 5 \quad n = \frac{1}{5}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, 1, 2, 3.$

Berekening van type A. Deze berekeningen verschillen voor verschillende n-waarden.

n = 1. $$\frac{V}{V_o} = \frac{1}{\Gamma(6)} \int_\tau^\infty u^5\, e^{-u} \left[1 - \left(\frac{\tau}{u}\right)^2\right]^{3/2} du =$$

$$= \frac{1}{\Gamma(6)} \int_\tau^\infty e^{-u}\, u^2 \left(u^2 - \tau^2\right)^2 \left(u^2 - \tau^2\right)^{-1/2} du \qquad \text{Stel } u/\tau = v$$

$$\frac{V}{V_o} = \frac{\tau^6}{\Gamma(6)} \int_1^\infty e^{-v\tau}\, v^2\, (v^2-1)^2 (v^2-1)^{-1/2} dv \qquad \text{Stel } v = \mathrm{ch}\,\varphi.$$

$$\frac{V}{V_o} = \frac{\tau^6}{\Gamma(6)} \int_0^\infty e^{-\tau \mathrm{ch}\varphi}\, \mathrm{ch}^2\varphi\ \mathrm{sh}^4\varphi\, d\varphi = \frac{\tau^6}{32\,\Gamma(6)} \times$$

$$\times \left[K_6(\tau) - 2\,K_4(\tau) - K_2(\tau) + 2K_0(\tau)\right]$$

Van tabellen van de Besselfunctie $K_v(\tau)=\int_0^\infty e^{-\tau \mathrm{ch}\varphi}\,\mathrm{ch}\,v\varphi\,d\varphi$ werd gebruik gemaakt en de overige K_v waarden werden berekend.

<u>$n \neq 1$.</u> In dit geval werd de integrand naar opklimmende machten van τ ontwikkeld :

$$\frac{V}{V_o} = \frac{n}{\Gamma(\frac{6}{n})}\int_\tau^\infty u^5\, e^{-u^n}\left[1-(\tfrac{\tau}{u})^2\right]^{3/2} du =$$

$$= \frac{n}{\Gamma(\frac{6}{n})}\left\{\int_\tau^\infty u^5\, e^{-u^n}\,du - \frac{3}{2}\,\tau^2\int_\tau^\infty u^3\, e^{-u^n}\,du + \frac{3}{8}\tau^4\int_\tau^\infty u\, e^{-u^n}\,du + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{16}\,\tau^6\int_\tau^\infty \frac{e^{-u^n}}{n}\,du + \frac{3}{128}\tau^8\int_\tau^\infty \frac{e^{-u^n}}{u^3}\,du \;\ldots\right\}$$

De algemene term van deze reeks is:

$$T_k = (-)^k \binom{3/2}{k}\tau^{2k}\int_\tau^\infty e^{-u^n}\,u^{5-2k}\,du\,, \qquad k=0,1,2,\ldots \qquad \text{Stel } u^n=v.$$

$$T_k = (-)^k \binom{3/2}{k}\frac{\tau^{2k}}{n}\int_{\tau^n}^\infty e^{-v}\,v^{\frac{6-2k}{n}-1}\,dv =$$

$$= (-)^k \binom{3/2}{k}\tau^{2k}\int_{\tau^n}^\infty \frac{e^{-v}dv^{\frac{6-2k}{n}}}{6-2k} = (-)^k\binom{3/2}{k}\tau^{2k}\left[\frac{\tau^{6-2k}e^{-\tau^n}}{2k-6} - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{2k-6}\int_{\tau^n}^\infty e^{-v}\,v^{\frac{6-2k}{n}}\,dv\right] < \frac{(-)^k\binom{3/2}{k}\tau^6 e^{-\tau^n}}{2k-6} \quad \text{mits } k>3.$$

Daar $\sum_0^\infty(-)^k\binom{3/2}{k}$ convergeert, convergeert onze reeks zeker. Voor $k = 0,1,2$ krijgen we voor T_k incomplete Γ-functies die getabelleerd zijn:

$$\int_\tau^\infty e^{-u^n}\,u^{5-2k}\,du = \frac{1}{n}\int_{\tau^n}^\infty e^{-v}\,v^{\frac{6-2k}{n}-1}\,dv = \frac{1}{n}\left[\Gamma(\tfrac{6-2k}{n}) - I(\tau^n, \tfrac{6-2k}{n})\right]$$

als $I(\tau^n,p)=\int_0^{\tau^n} e^{-v}\,v^{p-1}\,dv$ is.

$k = 3$ geeft $\int_\tau^\infty \frac{e^{-u^n}}{u}\,du$, de integraallogarithme, die eveneens getabelleerd is.

$n = 2,3$. In dit geval werden de integralen optredend in T_4 en hoger door partiele integratie herleid tot integraallogarithme en incomplete Γ-functies van orde -1 en hoger, die getabelleerd zijn.

$n = \frac{1}{2}, \frac{1}{3}$. Hier was het voordeliger voor de berekening van T_3 en hoger om gebruik te maken van de asymptotische ontwikkeling die men krijgt door $\int_\tau^\infty \frac{e^{-u^n}}{u^1}\,du$ zodanig partieel te integreren dat de graad van de noemer verhoogd wordt. De divergente reeksen werden door eenmaal toepassen van de Euler-transformatie gesommeerd.

Voor $n = \frac{1}{5}$ was de convergentie van de reeks T_k zo slecht dat hier tot numerieke integratie werd overgegaan.

$n = \frac{1}{5}$ $\frac{V}{V_o} = \frac{1}{5\Gamma(30)} \int_{\tau}^{\infty} e^{-u^{1/5}} u^5 \left[1 - (\frac{\tau}{u})^2\right]^{3/2} du$ werd door $u = \tau \sec v$ getransformeerd tot: $\frac{V}{V_o} = \frac{\tau^6}{5\Gamma(30)} \int_{0}^{\pi/2} e^{-(\frac{\tau}{\cos v})^{1/5}} \frac{\sin^4 v}{\cos^7 v}\, dv.$

Deze laatste integraal werd numeriek berekend.

Type B:

$$\frac{\alpha}{\alpha_o} = \frac{n}{\Gamma(\frac{m+1}{n})} \int_{\tau}^{\infty} u^m\, e^{-u^n} \left[1- \quad {}^{3-p}\, u^{p-3}\right] du =$$

$$= \frac{n}{\Gamma(\frac{m+1}{n})} \int_{\tau}^{\infty} u^5\, e^{-u^n} \left[1 - \frac{\tau}{u}\right] du =$$

$$\frac{n}{\Gamma(\frac{m+1}{n})} \left[\int_{\tau}^{\infty} u^5\, e^{-u^n}\, du - \tau \int_{\tau}^{\infty} u^4\, e^{-u^n}\, du \right] .$$

Deze integralen zijn weer het verschil van volledige en onvolledige Γ-functies. In sommige gevallen werden de integralen elementaire functies.

3. De resultaten van de berekeningen.

Zoals blijkt uit de resultaten varieren de waarden van τ, waarvoor α/α_o en V/V_o de waarde 0,05 aannemen zeer sterk met n.

Zo is bijv. voor $n = 3$ $\tau = 1,3$
$n = 1$ $\tau = 7$
$n = \frac{1}{3}$ $\tau = 2.10^2$
$n = \frac{1}{5}$ $\tau = 6.10^7$.

Deze grenswaarden zijn voor de integralen type A en B nagenoeg gelijk.

A
m=5 p=1

$n = \frac{1}{5}$		$n = \frac{1}{3}$		$n = \frac{1}{2}$	
τ	v/v_0	τ	v/v_0	τ	v/v_0
0	1.000	0	1.000	0	1.000
5.10^6	0.796	1.10^3	0.879	15	0.960
15.10^6	0.429	2.10^3	0.678	30	0.861
25.10^6	0.245	3.10^3	0.512	45	0.738
35.10^6	0.149	4.10^3	0.380	60	0.614
45.10^6	0.096	5.10^3	0.282	75	0.501
55.10^6	0.064	6.10^3	0.211	90	0.403
65.10^6	0.044	7.10^3	0.159	105	0.322
		8.10^3	0.120	120	0.256
		9.10^3	0.091	135	0.202
		10.10^3	0.070	150	0.160
		11.10^3	0.054	165	0.126
				180	0.099
				195	0.078
				210	0.061

A
m=5 p=1

$n = 1$		$n = 2$		$n = 3$	
τ	v/v_0	τ	v/v_0	τ	v/v_0
0	1.000	0	1.000	0	1.000
0.5	0.981	0.2	0.970	0.1	0.987
1.0	0.928	0.4	0.885	0.2	0.947
1.5	0.848	0.6	0.756	0.3	0.884
2.0	0.749	0.8	0.603	0.4	0.800
2.5	0.642	1.0	0.446	0.5	0.700
3.0	0.537	1.2	0.306	0.6	0.590
3.5	0.438	1.4	0.194	0.7	0.478
4.0	0.350	1.6	0.113	0.8	0.370
4.5	0.275	1.8	0.061	0.9	0.273
5.0	0.213	2.0	0.030	1.0	0.190
5.5	0.162			1.1	0.125
6.0	0.122			1.2	0.078
6.5	0.090			1.3	0.051
7.0	0.066				
7.5	0.048				

B
m=5 p=2

$n = \frac{1}{5}$		$n = \frac{1}{3}$		$n = \frac{1}{2}$	
τ	α/α_0	τ	α/α_0	τ	α/α_0
0	1.000	0	1.000	0	1.000
5.10^6	0.690	1.10^3	0.761	20	0.817
10.10^6	0.486	2.10^3	0.560	40	0.647
15.10^6	0.353	3.10^3	0.409	60	0.498
20.10^6	0.263	4.10^4	0.299	80	0.376
25.10^6	0.200	5.10^5	0.220	100	0.280
30.10^6	0.155	6.10^3	0.163	120	0.208
35.10^6	0.122	7.10^3	0.122	140	0.153
40.10^6	0.097	8.10^3	0.091	160	0.113
45.10^6	0.078	9.10^3	0.069	180	0.083
50.10^6	0.064	10.10^3	0.053	200	0.061
55.10^6	0.052			220	0.045

B
m=5 p=2

n = 1		n = 2		n = 3	
τ	α/α_0	τ	α/α_0	τ	α/α_0
0	1.000	0	1.000	0	1.000
0.5	0.900	0.25	0.834	0.1	0.910
1.0	0.800	0.50	0.668	0.2	0.820
1.5	0.701	0.75	0.506	0.3	0.729
2.0	0.604	1.00	0.356	0.4	0.639
2.5	0.512	1.25	0.227	0.5	0.550
3.0	0.427	1.50	0.130	0.6	0.463
3.5	0.350	1.75	0.067	0.7	0.378
4.0	0.282	2.00	0.030	0.8	0.299
4.5	0.224			0.9	0.227
5.0	0.175			1.0	0.165
5.5	0.136			1.1	0.114
6.0	0.104			1.2	0.074
6.5	0.078			1.3	0.045
7.0	0.059				
7.5	0.043				