

Б.В. Семенов

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ТЕЧЕНИЯ ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ СМЕСИ ЧЕРЕЗ ПОРИСТУЮ СТРУКТУРУ

Статья посвящена концепции построения математической модели процесса фильтрации отработанных газов в пористых средах, получаемых на основе СВС-материалов. Использование подобных моделей позволяет решать широкий спектр прикладных задач, непосредственно связанных с процессами разделения и очистки в пористых материалах, например в фильтроэлементах выпускных систем двигателей внутреннего сгорания.

Самораспространяющийся высокотемпературный синтез, пористая среда, вязкое течение, диффузия.

Моделирование процессов течения многокомпонентных смесей через пористую структуру на основе СВС-технологии, в частности на компьютерах, позволит провести их детальный анализ, изучить влияние параметров пористой среды на ход процесса переноса. Рассматриваемый подход к построению математической модели опубликован нами в работах [1–3].

Для более детального изучения данной проблемы возьмем систему из N уравнений переноса компонент из [3], не учитывая коэффициенты термодиффузии, запишем i уравнение системы для многокомпонентной смеси:

$$\sum_{j=1}^N \frac{n_j}{n D_{ij}} \left(\frac{J_i}{n_i} - \frac{J_j}{n_j} \right) + \frac{1}{[DK_i]} \left[\frac{J_i}{n_i} + \frac{B_0}{\eta} (\nabla p - n \sum_{j=1}^N n_j \cdot F_j) \right] =$$
$$= -\nabla \ln(n_i / n) - \nabla \ln p + F_i / k_B T - (n)^{-1} \left[\sum_{j=1}^N (n_j + n_i) \right] \nabla \ln T, \quad i \neq j, \quad (1)$$

где n_i — концентрация i -й компоненты, D_{ij} — коэффициент взаимной диффузии, J_i — поток компонента i (свободно-молекулярный, или кнудсеновский, поток, далее — поток), DK_i — коэффициент кнудсеновской диффузии, B_0 — параметр вязкого течения, η — вязкость смеси, p — давление, F — сила, действующая на частицу, k_B — коэффициент Больцмана, T — температура, i — изменяется от 1 до N .

Будем считать, что отсутствуют граничные слои и скачки концентрации компонентов у поверхности перегородки.

Рассмотрим данную систему уравнений для двухкомпонентной смеси, окиси углерода и окиси азота (CO и NO).

Рассмотрим три варианта исследования математической модели.

1. Полный поток математически представлен в виде суммы двух членов — вклада в поток от движения газа в связи с перепадом давления (разность давлений на входе и выходе пор) и слагаемого, связанного с диффузионным перемещением компонентов.

2. Плотность потока одного компонента представлена в виде суммы диффузионного потока и слагаемого, связанного с полным потоком.

3. Для случая течения в пористых средах используются методы термодинамики необратимых процессов. В этом случае относительный диффузионный поток определяется соотношением

$$J_{rel} = (J_1 / n_1) - (J_2 / n_2). \quad (2)$$

При первом подходе, когда поток описывается вкладом обеих компонент, с помощью алгебраических преобразований уравнению (1) можно придать соответствующий вид и записать его в конечных разностях:

$$J = \frac{\bar{K}_{12}}{R_0 T} \frac{\Delta p}{\Delta z} + \bar{R}_{12} \frac{\Delta n_1}{\Delta z}, \quad (3)$$

где R_0 — универсальная газовая постоянная, $\bar{K}_{12}$ — средний коэффициент проницаемости и $\bar{R}_{12}$ — средний коэффициент диффузионной проницаемости. Два последних параметра равны

$$\bar{K}_{12} = \frac{n_1 D_1 + n_2 D_2}{n_1 Y_1 + n_2 Y_2} + \frac{\bar{p} B_0}{\eta}, \quad (4)$$

$$\bar{R}_{12} = \frac{D_1 - D_2}{n_1 Y_1 + n_2 Y_2}, \quad (5)$$

где

$$D_i = \frac{D_{ik} \cdot D_{12}}{D_{ik} + D_{12}}, \quad (6)$$

$$Y_i = D_i / D_{iK}. \quad (7)$$

Здесь n_1, n_2 — концентрации компонент CO и NO, D_{12} — коэффициент взаимной диффузии CO и NO, D_{ik} — коэффициенты кнудсеновской диффузии ($i = 1, 2$) CO и NO.

При втором подходе, когда плотность потока одного компонента записывается в виде суммы диффузионного потока и слагаемого, связанного с полным потоком, в этом случае уравнение в конечно-разностной форме будет иметь вид

$$J_i = -E_i \frac{\Delta n_i}{\Delta z} + n_i \varepsilon_i J, \quad (8)$$

где

$$E_i = \frac{E_{iK} \cdot E_{12}}{E_{iK} + E_{12}}, \quad (9)$$

$$\varepsilon_i \equiv E_i / E_{12} \quad (10)$$

В третьем варианте описание течения в пористых телах рассматривается с помощью методов термодинамики необратимых процессов. Составим разностную схему для двухкомпонентной смеси отработанных газов, состоящей из окиси углерода и азота. В результате несложных алгебраических преобразований из (2) и (3) получим соотношение:

$$\frac{J_1}{n_1} - \frac{J_2}{n_2} = -\bar{P}_{12} \frac{\Delta n_1}{\Delta z} - \frac{\bar{R}_{12}}{R_0 T} \frac{\Delta p}{\Delta z}, \quad (11)$$

где

$$\bar{P}_{12} = \left(\frac{Y_1 Y_2}{n_1 Y_1 + n_2 Y_2} \right) \left(\frac{D_1}{n_1 Y_1} + \frac{D_2}{n_2 Y_2} \right). \quad (12)$$

Для исследования представленной математической модели были проведены численные расчеты с использованием теоретических и экспериментальных данных из справочника [4].

Основные физические постоянные:

$$Na = 6.022 \cdot 10^{-23} \left(\frac{1}{\text{моль}} \right);$$

$$R = 8.3144 \left(\frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}} \right);$$

$$k = \frac{R}{Na} = 1.381 \cdot 10^{-23} \left(\frac{\text{Дж}}{\text{К}} \right)$$

Введем геометрию фильтра (поры):

$$r = 4.128 \cdot 10^{-9} (\text{м}) \text{ — радиус поры};$$

$$\Delta z = 4.47 \cdot 10^{-3} (\text{м}) \text{ — длина поры};$$

$$B_0 = 2.13 \cdot 10^{-18} (\text{м}^2) \text{ — параметр вязкого течения данного капилляра.}$$

Параметры и расчетные характеристики смеси (СО и NO):

$$t = 300 (\text{С}) \text{ — температура смеси по Цельсию};$$

$$T = 273.16 + t (\text{К}) \text{ — температура смеси по Кельвину};$$

$$p = 101325 (\text{Па}) \text{ — давление};$$

$$\eta = 2.28 \cdot 10^{-2} (\text{с} \cdot \text{Па}) \text{ — вязкость компонент};$$

$$\mu_{\text{CO}} = 18.01 \cdot 10^{-3} \left(\frac{\text{кг}}{\text{моль}} \right) \text{ — мольная доля СО};$$

$$\mu_{\text{NO}} = 30.0061 \cdot 10^{-3} \left(\frac{\text{кг}}{\text{моль}} \right) \text{ — мольная доля NO};$$

$$m_{\text{CO}} = 2.991 \cdot 10^{-26} (\text{кг}) \text{ — масса молекулы СО};$$

$$m_{\text{NO}} = 4.982 \cdot 10^{-26} (\text{кг}) \text{ — масса молекулы NO.}$$

Коэффициенты диффузии:

$$\text{кнудсеновской — } Dk_{\text{CO}} = 3.93 \cdot 10^{-8} \left(\frac{\text{м}^2}{\text{с}} \right), Dk_{\text{NO}} = 1.24 \cdot 10^{-8} \left(\frac{\text{м}^2}{\text{с}} \right);$$

$$\text{взаимной — } D_{\text{CONO}} = 7.39 \cdot 10^{-5} \left(\frac{\text{м}^2}{\text{с}} \right).$$

На рис. 1–3 представлено графическое отображение зависимостей на основе предложенных подходов.

В результате численного эксперимента было определено:

— изменение потока от перепада давления (от 0 до $3 \cdot 10^5$ Па) при различных фиксированных концентрациях входящих в смесь компонент ($n_{\text{CO}} = 0$, $n_{\text{NO}} = 1$, $n_{\text{CO}} = 0.5$, $n_{\text{NO}} = 0.5$).

— изменение зависимости потока J_{CO} от полного потока J при различных фиксированных концентрациях смеси ($n_{\text{CO}} = 0$, $n_{\text{CO}} = 1$, $n_{\text{CO}} = 0.5$).

— изменение разности потоков $J = (J_{\text{CO}}) - (J_{\text{NO}})$ в диапазоне перепада давлений (от 0 до $3 \cdot 10^5$ Па).

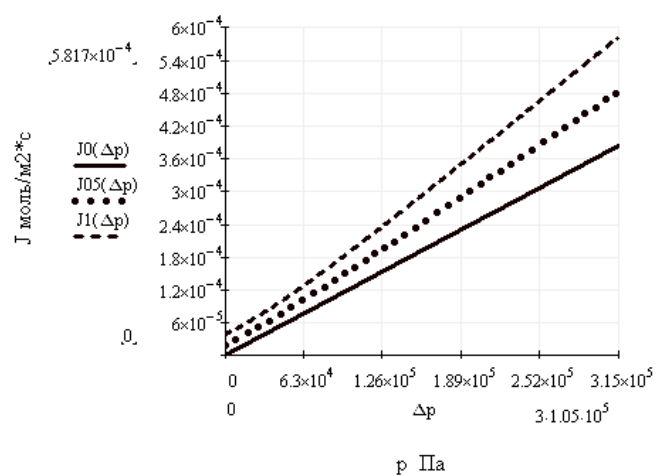


Рис. 1. Зависимость потока смеси от перепада давления

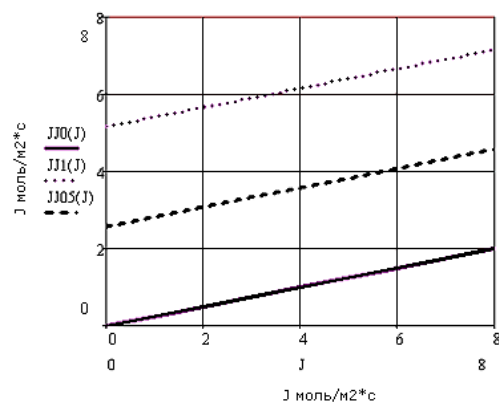


Рис. 2. Зависимость потока J_{co} от полного потока J при различных фиксированных концентрациях смеси и перепада давлений

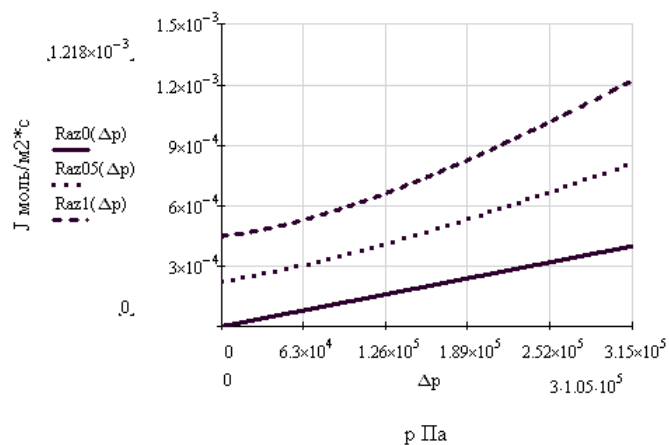


Рис. 3. Расчетные зависимости для разности потоков

Была выявлена нелинейная зависимость потоков в первом и третьем случаях при различных концентрациях компонент, за исключением случая $n_i = 0$, когда в расчетах присутствует одна компонента. Результаты численного эксперимента согласуются с результатами экспериментальных работ Эванса [5, 6] для гелия и аргона (в газообразном состоянии) в графитовом образце с низкой проницаемостью, открытая пористость которого составляет 11 %, толщина равна 0,447 см.

Выводы

1. Расчеты, проведенные на основе предложенной модели, отразили характер течения двухкомпонентной смеси от перепада давления при заданной геометрии фильтроэлемента (параметр B_0) и фиксированных концентрациях компонент смеси.
2. Анализ результатов расчетов показал изменения плотности потока от перепада давления.
3. Для дальнейшего расширения области применения данной модели необходимо провести численные эксперименты для 4–5 основных компонент смеси отработанных газов ДВС с различной геометрией фильтроэлемента на реальных данных.

ЛИТЕРАТУРА

1. Борzych В.Э., Семенов Б.В. Решение задачи фильтрации для выпускных систем двигателей внутреннего сгорания // Всерос. конф., посвященная 60-летию мехмата ТГУ, г. Томск, 22–25 сентября 2008 г. Томск, 2008. С. 187.
2. Борzych В.Э., Семенов Б.В. Решение задачи фильтрации для выпускных систем двигателей внутреннего сгорания // Там же.
3. Борzych В.Э., Семенов Б.В. Математическое моделирование процессов течения многокомпонентных газов через пористую структуру // Вестн. ТюмГУ. 2009. № 6. С. 192–197.
4. Новый справочник химика и технолога [Электрон. ресурс]. Режим доступа: www.naukaspb.ru.
5. Evans R. B., Watson G. M., Truitt J.-J. Appl. Phys. 1962. 33. 2620.
6. Evans R. B., Watson G. M., Truitt J.-J. Appl. Phys. 1963. 34. 2020.

B.V. Semyonov

MATHEMATICAL MODELING OF A BINARY MIXTURE FLOW THROUGH A POROUS STRUCTURE

The article is devoted to a concept of a mathematical modeling regarding filtration of spent gases in porous medium obtained on the basis of SHS-materials. The use of such models makes it possible to solve a wide range of applied problems immediately connected with processing in porous materials, for example, in filtering elements of exhaust systems in combustion engines.

Self propagating high temperature synthesis, porous medium, viscous flow, diffusion.