

В. Э. Борзых, Б. В. Семенов, С. Н. Соколко

ОРГАНИЗАЦИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА ДЛЯ ЗАДАЧ МОДЕЛИРОВАНИЯ ОТРАБОТАННЫХ ГАЗОВ ЧЕРЕЗ ПОРИСТУЮ СТРУКТУРУ ВЫПУСКНОЙ СИСТЕМЫ АВТОМОБИЛЯ

Статья посвящена созданию автоматизированной системы для изучения процессов переноса в пористых средах, свойств пористых материалов и их применения. Используемая для этого модель запыленного газа способна помочь в решении широкого спектра прикладных задач, непосредственно связанных с процессами разделения и очистки с применением пористых материалов.

Вычислительный эксперимент, фильтрация газа, пористая среда.

Пористые среды — тела, пронизанные системой сообщающихся между собой пустот (поровых каналов). Они чрезвычайно широко распространены в природе (грунты, горные породы, древесина и т. д.) и находят все более широкое применение в технике. В настоящее время существует ряд технологий для получения пористых материалов. Одной из наиболее перспективных технологий является самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС), позволяющий создавать материалы с различными свойствами. При этом стоимость продуктов получается невысокой, что обусловлено применением доступных дешевых материалов и отходов производства.

Несмотря на широкую распространенность пористых сред, есть нерешенные задачи, в частности при описании процесса фильтрации отработанных газов в фильтроэлементах выпускных систем двигателей внутреннего сгорания. Моделирование этих процессов на ЭВМ позволит провести их детальный анализ, изучить влияние параметров пористой среды на ход процесса переноса.

Следует заметить, что выразить математически фильтрационный или диффузионный поток так, чтобы формулы отражали реальное перемещение частиц флюида по поровому пространству, крайне затруднительно. Как правило, в прикладных исследованиях основной интерес представляют макроскопические особенности того или иного процесса переноса. Микроскопические же детали интересны лишь в той мере, в какой они способны повлиять на общую картину процесса. С этой точки зрения формулы описывают процессы переноса как единое движение фиктивной сплошной среды через некоторое пространство, занимаемое в действительности пористой средой. Подобная идеализация весьма плодотворна, так как благодаря простоте математической записи она представляет очень широкие возможности для моделирования разнообразных ситуаций.

Существует ряд методов, позволяющих описывать процессы течения газа и жидкости в пористых средах. Например, задача о течении вязкой несжимаемой жидкости, описываемая уравнениями Навье — Стокса (макроскопический подход). Рассмотрим один из вариантов численной реализации решения данной задачи [2]:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right), \\ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \end{cases} \quad (1)$$

Криволинейная граница порового канала описывается функцией

$$\Gamma_T(x) = 1.0 - 0.5 \cdot [\tanh(2 - 30 \cdot x / \text{Re}) - \tanh(2)]. \quad (2)$$

Расчетная область представлена на рис. 1.

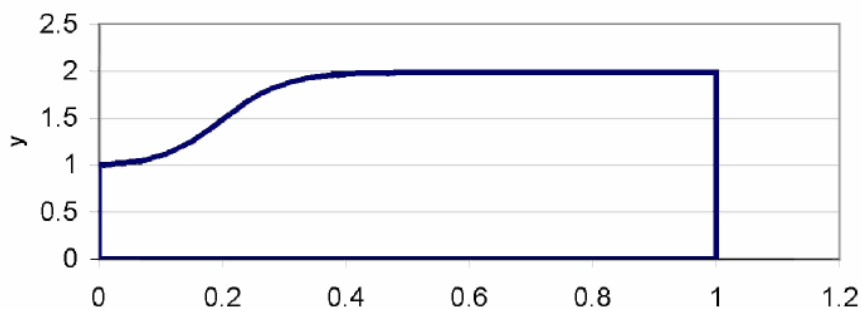


Рис. 1. Пример расчетной области с криволинейной границей

Для данной задачи могут быть поставлены следующие краевые условия. На входе канала $x = 0$ задан параболический профиль продольной составляющей скорости и нулевое значение поперечной составляющей:

$$u|_L = 3 \cdot \left((y-1) - \frac{(y-1)^2}{2} \right), \quad (3)$$

$$v|_L = 0. \quad (4)$$

На верхней стенке $y = \Gamma(x)$ заданы условия, следующие из условий прилипания и непротекания:

$$u|_T = 0, v|_T = 0. \quad (5)$$

Нижняя граница $y = 0$ является линией симметрии:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_B = 0, v|_B = 0. \quad (6)$$

На выходе канала $x = R$ для продольной составляющей скорости задано однородное краевое условие второго рода, для поперечной составляющей — нулевое значение.

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_R = 0, v|_R = 0. \quad (7)$$

Для численной реализации рассмотренной задачи можно использовать следующий подход:

- дискретизация производных конечными разностями на равномерных декартовых сетках;
- независимость формы записи линейных соотношений, аппроксимирующих краевые условия (ступенчатой функцией или методом погруженных границ), от вида уравнений для внутренних точек области.

Существует и другой метод — молекулярно-кинетический [3], описывающий процессы переноса в пористых средах: модель запыленного газа. В нем обосновывается аддитивность вязкого и диффузионного потоков, используется весь аппарат кинетической теории Чепмена — Энскога для смеси газов, в которой пористая среда рассматривается как один из компонентов смеси. При этом изменение давления можно формально описать через изменение мольной доли «пылевого» компонента. Главное достоинство этой модели в том, что она обеспечивает возможность разработки общего подхода, позволяющего с единых позиций, на прочном теоретическом базисе, описать процессы переноса и диффузии во всем их разнообразии. Она позволяет использовать все достижения современной кинетической теории газов в совершенно новом контексте без специального повторения решения Чепмена — Энскога. Так, термо-, баро- и силовая диффузия легко могут быть описаны в рамках модели. В этой теории легко устанавливаются многие особенности в зависимостях коэффициентов диффузии от давления и состава. Кроме того, довольно часто в этой модели можно выявить определенную взаимосвязь между различными явлениями на основе строгого математического подхода без обращения к деталям разработанного ранее аппарата кинетической теории.

Физическую сущность модели определяет запыленный газ, в котором частицы пыли образуют пористую среду. Они рассматриваются как один из компонентов газовой смеси, состоящий из больших тяжелых неподвижных молекул, равномерно распределенных в пространстве. Если в газе имеется градиент давления, то для обеспечения неподвижности частиц пыли к ним необходимо приложить некоторую внешнюю силу. Для математической формулировки модели не нужно знать истинную природу этой внешней силы; в экспериментах внешняя сила обычно бывает обусловлена каким-либо креплением, обеспечивающим неподвижность пористого тела. Конкретное распределение частиц пыли в пространстве может быть произвольным, ибо геометрические характеристики подобного рода включены в кинетические коэффициенты переноса типа постоянных K_0 (параметр кнудсеновского течения) и $\frac{\varepsilon}{q}$ (параметр пористости-извилистости). Таким образом, безразлично, как мы будем представлять себе пыль — в виде хаотически распределенных больших сфер, закрепленных каким-нибудь образом в пространстве, в виде разбросанных по поверхности искривленного капилляра шариков или в каком-либо ином виде.

Рассматривая частицы пыли как гигантские молекулы, мы можем фактически без изменений воспользоваться результатами кинетической теории Чепмена — Энскога. Если ограничиться приближением первого порядка в равновесной максвелловской функции распределения, то эту теорию можно представить в виде двух независимых частей, одна из которых, диффузионная, приводит к набору уравнений диффузии Стефана — Максвелла, а другая, гидродинамическая, дает уравнение вязкого движения газовой смеси как целого. Эти две части теории независимы в том смысле, что уравнение движения смеси как целого не содержит диффузионных членов, а в уравнениях диффузии нет членов, соответствующих гидродинамическому течению смеси. Указанная независимость позволяет предположить простую аддитивность диффузионного и вязкого потоков. В получении с помощью кинетической теории этих двух типов уравнений и в принятии предположения об аддитивности связанных с ними потоков заключена сущность всей теории, а остальное представляет собой главным образом математические преобразования. Их цель — получить систему дифференциальных уравнений, описывающих перенос газа. Решение конкретных задач состоит в интегрировании этих уравнений при некоторых заданных макроскопических граничных условиях.

При этом вопрос о структуре среды выделяется в отдельную, совершенно самостоятельную проблему. Структура среды проявляется только во входящих в дифференциальные уравнения переноса кинетических коэффициентах и, возможно, в некоторых макроскопических граничных условиях. Одно из достоинств модели запыленного газа заключается в том, что она позволяет получать общее решение проблем, связанных с диффузией и вязким течением, без знания особенностей структуры среды. Неизвестные коэффициенты затем могут быть определены либо непосредственно из эксперимента, либо расчетным путем, из данных о структуре среды (если последние известны с достаточной точностью). Способ определения коэффициентов диктуется соображениями удобства. Возможность выделения проблемы геометрии и структуры среды в самостоятельную задачу чрезвычайно важна для практических приложений модели.

Следует сделать еще одно, заключительное замечание по поводу модели запыленного газа. Классическая кинетическая теория газов имеет дело только с упругими столкновениями, внутренние степени свободы многоатомных молекул в расчет не принимаются. Обобщенные теории, учитывающие внутренние степени свободы, в первом приближении приводят к уравнениям переноса, по внешнему виду сходным с соответствующими уравнениями для одноатомных газов. Различаются только выражения для кинетических коэффициентов, которые для многоатомных газов более сложны и содержат члены, связанные с учетом неупругих столкновений. Таким образом, полученные в рамках модели запыленного газа общие соотношения после соответствующей замены явных выражений для кинетических коэффициентов приложимы как одноатомным, так и к многоатомным газам.

Основу модели запыленного газа составляют уравнения переноса. Для компонента i уравнение имеет вид

$$\sum_{j=1}^v \frac{n_j}{n \cdot D_{ij}} \left(\frac{J_i}{n_i} - \frac{J_j}{n_j} \right) + \frac{1 - \Delta'_{id}}{[D_{ik}]_1} \left[\frac{J_i}{n_i} + \frac{B_0}{\eta} (\nabla p - nF) \right] = -\nabla \ln \left(\frac{n_i}{n} \right) - \nabla \ln p + \frac{F_i}{k_B T} - (8)$$

$$- (n')^{-1} \left[\sum_{j=1}^v n_j (\alpha'_{ij})_r + n_d (\alpha'_{id})_r \right] \nabla \ln T, \quad i, j \neq d,$$

$$nF = \sum_{j=1}^v n_j F_j, \quad (9)$$

где n_j — концентрация j -го компонента, D_{ij} — коэффициент взаимной диффузии, J_i — поток компонента i , Δ'_{id} — поправка, $[D_{iK}]_l$ — коэффициент кнудсеновской диффузии, B_0 — параметр вязкого течения, η — вязкость смеси, p — давление, F — сила, действующая на частицу, k_B — коэффициент Больцмана, T — температура, α_{ij} — обобщенное термодиффузионное соотношение.

Уравнения (8) представляют собой локальные (дифференциальные) уравнения переноса газа в пористой среде. Решив эти уравнения, можно получить полное представление о процессе переноса вещества внутри пористого тела. При этом учитываются процессы обычной диффузии, бародиффузии, силовой диффузии и термодиффузии.

Основная цель данной работы — с учетом специфики переноса отработанных газов в выпускных системах двигателей внутреннего сгорания (ДВС), предложить подход к организации численного эксперимента, который должен стать одним из этапов создания автоматизированной системы научных исследований (АСНИ) для изучения подобных процессов. Данный подход основывается на микроскопическом (молекулярно-кинетическом) представлении массопереноса в пористых средах, получаемых по технологии самораспространяющегося высокотемпературного синтеза, с возможностью наглядного описания этих процессов в пористых средах посредством графического представления получаемых зависимостей. Для автоматизации работы исследователя и конструктора выпускных систем в информационную часть предлагается включить базу данных по теплофизическим и макрокинетическим свойствам веществ, входящих в систему пористая матрица — фильтруемые компоненты.

При проектировании будущей системы необходимо представить модель автоматизируемых процессов. Моделирование процесса фильтрации отработанных газов ДВС ориентировано на проведение различного рода исследований, как теоретических, так и экспериментальных (рис. 2).



Рис. 2. Обобщенная схема рассматриваемых видов исследований

Модуль ввода и проверки данных отвечает за получение исходных данных об эксперименте (параметры, тип эксперимента, способ отображения результатов и т. д.) от пользователя и их первичную проверку на корректность. Затем данные передаются модулю расчета для проведения численного эксперимента. Результаты моделирования передаются модулю визуализации для отображения в запрошенной пользователем форме (рис. 3).

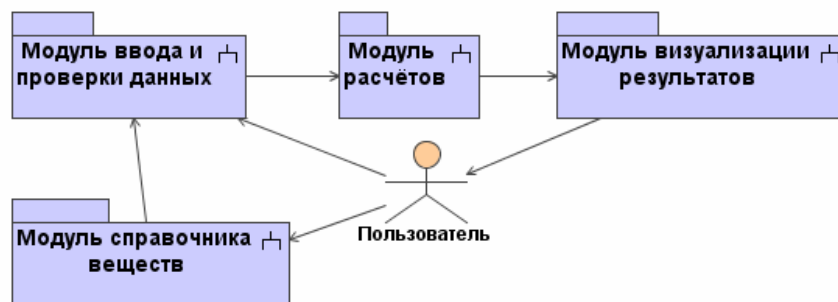


Рис. 3. Обобщенная структурная схема системы

При разработке системы следует сделать особый акцент на ее модульной структуре. Наиболее приемлема для рассматриваемого проекта объектно-ориентированная методология создания приложений. Для достижения большей производительности имеет смысл использовать язык программирования C++. В рамках проекта было создано приложение для операционной системы (ОС) Windows, позволяющее смоделировать движение газа в пористой среде на примере процесса очистки отработанных газов (ОГ) двигателей внутреннего сгорания. Разработка осуществлялась в среде Microsoft Visual Studio 2005. Программа обладает графическим пользовательским интерфейсом, выполненным в соответствии с соглашениями ОС Windows. Функции системы доступны как через меню, так и с помощью «горячих клавиш». На рис. 4 приведен пример результатов работы приложения в сравнении с экспериментальными данными.

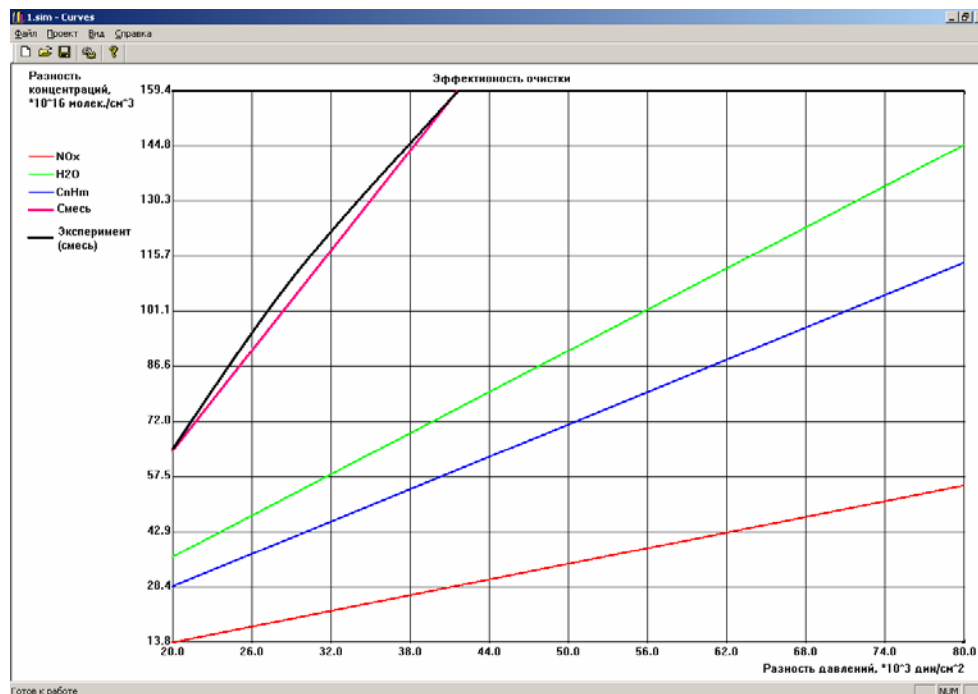


Рис. 4. Пример работы приложения

Дальнейшее развитие этой части АСНИ видится в расширении функциональности и переносе на свободные операционные системы, такие как Linux, что позволит сделать систему более универсальной и пригодной для решения широкого круга задач.

Таким образом, создание программной оболочки и пакетов программ позволило автоматизировать численный эксперимент, являющийся неотъемлемой частью будущей АСНИ в качестве автоматизированного рабочего места исследователя-конструктора выпускных систем ДВС.

ЛИТЕРАТУРА

1. Борзых В. Э., Исаенко В. Д., Исаенко П. В. Очистка отработанных газов ДВС СВС-элементами // Транспортные системы Сибири: Материалы всерос. науч.-техн. конф. — Красноярск, 2003.
2. Васильцов Г. Л., Крюков И. А. Численный метод решения уравнений Навье — Стокса, описывающих течения несжимаемой вязкой жидкости, на криволинейной сетке: Препр. № 594 / Ин-т проблем механики РАН. — М., 1997.
3. Мейсон Э., Малинаускас А. Перенос в пористых средах: модель запыленного газа. — М.: Мир, 1986. — 200 с.

V. Ye. Borzykh, B. V. Semyonov, S. N. Sokolko

ARRANGEMENT OF COMPUTATIONAL EXPERIMENT FOR MODELING BURNT GASES THROUGH POROUS STRUCTURE OF AUTOMOBILE EXHAUST SYSTEM

The article is devoted to creation of an automatic system for investigating transfer processes in porous mediums, as well as properties of porous materials and their use. A model of dust-laden gas used for this is able to help solving a broad range of applied problems immediately associated with separation and purification using porous materials.

Computational experiment, gas filtration, porous medium.