

Владимир Эрнестович БОРЗЫХ —
зав. кафедрой автоматизации и вычислительной техники,
доктор физико-математических наук
borzykh@tsogu.ru

Борис Васильевич СЕМЕНОВ —
ст. преподаватель кафедры автоматизации
и вычислительной техники
semenov@tsogu.ru

Тюменский государственный нефтегазовый университет

УДК 519.67

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ТЕЧЕНИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ГАЗОВ ЧЕРЕЗ ПОРИСТУЮ СТРУКТУРУ

MATHEMATICAL MODELLING OF PROCESSES OF MULTI-COMPONENT GAS FLOW THROUGH POROUS STRUCTURE

АННОТАЦИЯ. Статья посвящена созданию концепции построения математической модели процессов переноса 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.

SUMMARY. The article is devoted to the development of mathematical model of burnt gases transfer processes in porous mediums, which are obtained from SHS-materials. The use of these models helps in solving a wide range of applied problems connected with the processes of separation and purification using porous materials, for example in filtering elements of automobile exhaust systems.

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

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

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 и технологиях. Одной из наиболее перспективных технологий получения пористых материалов является самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС), который позволяет создавать материалы с различными свойствами, в том числе и структурного характера.

Несмотря на широкую распространенность пористых сред, существует ряд нерешенных задач, в частности, при описании процесса фильтрации отработанных газов в фильтроэлементах выпускных систем двигателей внутреннего сгорания. Моделирование этих процессов, в частности, на компьютерах 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 модель отражала 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 которой они способны повлиять

на общую картину процесса. С физической точки зрения процессы переноса описываются 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

Для описания процессов переноса в пористых средах существует ряд подходов, характеризующих процессы течения газа и жидкости в пористых средах. Одним из них можно считать решение задачи о течении вязкой несжимаемой жидкости, описываемой уравнениями Навье-Стокса (макроскопический подход):

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

Для численной реализации задачи необходимо обеспечить:

- дискретизацию 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.

Из вышерассмотренного следует, что требуется подробное описание геометрии поровых каналов, краевых и граничных условий, что затруднительно для решения задачи фильтрации отработанных газов через фильтроэлемент со сложной внутренней геометрией.

Поэтому рассмотрим другой подход — 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. В этом подходе изменение давления можно формально описать через изменение мольной доли «пылевого» компонента. Главное достоинство этой модели состоит в том, что она обеспечивает возможность общности, позволяющей с единых позиций, основанных на прочном теоретическом базисе, описать процессы переноса и диффузии во всем их разнообразии, а также позволяет использовать все достижения современной кинетической теории газов в совершенно новом контексте без специального повторения решения Чепмена–Энскога. Так, термодиффузия, бародиффузия 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. К сказанному следует добавить, что 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.

В основе теории лежит утверждение о том, что перенос газа в пористом теле (или в капилляре) осуществляется следующими тремя независимыми механизмами:

1. Свободно-молекулярное, или кнудсеновское, течение, реализующееся при столь малой плотности газа, что частотой столкновений между молекулами можно пренебречь по сравнению с частотой их столкновений с поверхностями каналов пористого тела или капилляра.

2. Вязкое течение, при котором газ течет как сплошная среда под действием градиента давления и межмолекулярные столкновения преобладают над столкновениями молекул с поверхностью. Этот механизм иногда называют также конвективным или переносом газа как целого.

3. Диффузия в режиме сплошной среды, когда отдельные компоненты смеси перемещаются относительно друг друга под действием градиента концентрации (обычная диффузия), градиента температуры (термодиффузия) или внешних сил (силовая диффузия). Здесь снова межмолекулярные столкновения происходят чаще, чем столкновения молекул с поверхностью.

В приведенной классификации, очевидно, не учтен еще один механизм переноса газа, имеющий в некоторых случаях не меньшую практическую значимость, а именно:

4. Поверхностная диффузия, при которой молекулы газа перемещаются вдоль поверхности твердого тела, не покидая адсорбирующего слоя.

Каждому из указанных выше механизмов переноса соответствует свой кинетический коэффициент: коэффициент кнудсеновской диффузии DK_i (для i -го компонента), коэффициент динамической вязкости η , коэффициент DD_{ij} взаимной диффузии (для i, j -х компонент) и коэффициент поверхностной диффузии DS_i . Механизмы переноса могут встречаться в различных комбинациях, и наша задача отыскать унифицированный способ описания течения при одновременном действии различных механизмов путем использования математического аппарата, для описания каждого из них в отдельности.

Физическую сущность модели определяет запыленный газ, в котором частицы пыли образуют пористую среду. Частицы пыли рассматриваются как один из компонентов газовой смеси, состоящей 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 реакцией, обеспечивающей 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), B_0 (параметр вязкого течения) и $\frac{\psi}{\chi}$ (параметр пористости-извилистости). Для реаль-

ных пористых сред эти коэффициенты имеют различные выражения и, как правило, их получают из экспериментальных данных.

Поскольку вязкий поток течения отработанных газов наиболее характерен для режимов работы двигателей внутреннего сгорания, рассмотрим некоторые его закономерности исходя из условия, что полная сила вязкого сопро-

тивления компенсируется силой, обусловленной перепадом давления на входе и выходе СВС элемента.

$$I_{\text{в}} = -\frac{\rho B_0}{\eta} * \Delta p, \quad (2)$$

где $I_{\text{в}}$ — плотность вязкого потока, ρ — молекулярная плотность газа, B_0 — параметр вязкого течения, характеризующий геометрию парового канала, η — динамическая вязкость.

Для простоты рассуждений примем пористую структуру СВС-элемента в виде набора непересекающихся цилиндрических капилляров радиусом r и общей длиной L , и что каждая пора заканчивается отверстием площадью $S = \pi \cdot r^2$ на внешней поверхности элемента площадью A .

Пористость ψ будет равна:

$$\psi = \frac{\pi \cdot r^2 \cdot l}{A \cdot L} \quad (3)$$

Коэффициент извилистости χ определим через параметр вязкого течения B_0 и коэффициент проницаемости K_0 (определяется в установившемся режиме) [3]:

$$\chi = \frac{\psi \cdot 2 \cdot B_0}{K_0^2} \quad \text{или} \quad \frac{\psi}{\chi} = \frac{K_0^2}{2 \cdot B_0} \quad (4)$$

где $\frac{\psi}{\chi}$ — фактор пористости-извилистости.

Для повышения точности равенства (4) необходимо использовать:

- 1) пересчет K_0 с учетом кнудсеновского минимума проницаемости;
- 2) внесение поправок на нецилиндричность капилляров и на изгибы в порах;
- 3) внесение поправок на распределение пор по размерам.

На основании сказанного и учитывая, что размеры пор влияют на величину K_0 , B_0 , получим:

$$\frac{\psi}{\chi} = \frac{\sigma \cdot K_0^2}{\kappa \cdot \delta \cdot B_0} \quad (5)$$

где κ — коэффициент формы (в расчетах κ принимается равным 2,5), δ — поправка на скольжение по поверхности (Кнудсен получил $\delta = 0,81$, хотя для многокомпонентной смеси рекомендуется значение $\delta = 0,9$), σ — среднеквадратичное отклонение размера пор от среднего.

Для однородно-пористой среды из (5) и значения коэффициентов κ , δ , σ вытекает соотношение:

$$\frac{K_0^2}{B_0} \leq 1. \quad (6)$$

Рассмотрим приведенное уравнение переноса для вязкого потока [3]:

$$J = -(nB_0 / \eta) \nabla p, \quad (7)$$

где B_0 — параметр вязкого течения, η — вязкость течения.

Она определяется из слагаемых компонент:

$$\eta = \sum_{i=1}^v x_i \sum_{k=1}^v x_k \frac{|H|_{ik}}{|H|}, \quad (8)$$

где $|H|$ — детерминант, элементы которого даются выражениями

$$H_{ii} = \frac{x_i^2}{n_{ii}} + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^v \frac{x_i x_k}{(m_i + m_k) n D K_k} \left(1 + \frac{3}{5} \frac{m_i}{m_k} A_{ik}^*\right), \quad (9)$$

$$H_{ik} (i \neq k) = -\frac{2x_i x_k}{(m_i + m_k) n D K_i} \left(1 - \frac{3}{5} A_{ik}^*\right), \quad (10)$$

$x_i = \frac{n_i}{n}$ — мольная доля i -компоненты, m_i — масса i -молекулы (компоненты).

Данные матричные элементы пригодны как для одноатомных, так и для многоатомных газов. В последнем случае необходимо только внести незначительные изменения в безразмерные отношения A_{ik}^* .

Учитывая вышесказанное, можно написать уравнение переноса для i -компоненты многокомпонентной смеси:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N \frac{n_j}{n D_{ij}} \left(\frac{J_i}{n_i} - \frac{J_j}{n_j} \right) + \frac{1}{[DK_i]} \left[\frac{J_i}{n_i} + \frac{B_0}{\eta} (\nabla p - nF) \right] = \\ = -\nabla \ln(n_i / n) - \nabla \ln p + F_i / k_B T - \\ - (n')^{-1} \left[\sum_{j=1}^N n_j (\alpha'_{ij})_{tr} + n_d (\alpha'_{id})_{tr} \right] \nabla \ln T, \quad i, j \neq d \end{aligned} \quad (11)$$

$$nF = \sum_{j=1}^v n_j F_j \quad (12)$$

— полная сила, действующая на единицу объема газовой смеси.

В данной формуле первое слагаемое описывает изменение импульса молекулы i компоненты с другими молекулами смеси, а второе слагаемое в левой части равенства (11) — вклад вязкого течения в полную скорость перемещения компонентов. Входящий в него поток J определяется равенством (7). Первые три слагаемых правой части равенства (11) описывают обычную диффузию, бародиффузию и силовую диффузию соответственно. Слагаемое, содержащее $(\alpha'_{ij})_{tr}$, ответственно за термодиффузию, осложненную присутствием частиц пыли, а слагаемое, содержащее $(\alpha'_{id})_{tr}$, учитывает термическую транспирацию (или термомолекулярную разность давлений), осложненную термодиффузией истинных молекулярных компонентов. Для полного изучения процесса переноса многокомпонентной смеси через пористую структуру необходимо составить систему из N дифференциальных уравнений и задать начальные условия. Граничные условия: скорость газа на поверхности каналов элементов равна нулю. Все N написанных уравнений независимы, поскольку уравнение для частиц пыли исключено.

Для исследования процесса течения отработанных газов на основе СВС-элементов необходимо:

1) составить на основе формулы (11) систему дифференциальных уравнений для основных компонентов смеси: CO , C_n , C_m , NO_x и H_2O .

2) с помощью зависимостей (1)-(6), характеризующих пористость-извилистость СВС-структуры, оценить структурные и гидродинамические параметры пористого фильтроэлемента на основе карбида титана.

3) рассмотреть влияние каждого слагаемого правой части (11) на результаты расчетов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Борzych В.Э. Очистка отработанных газов ДВС СВС-элементами / В.Э. Борzych, В.Д. Исаенко, П.В. Исаенко / Транспортные системы Сибири: м-лы Всерос. науч.-технич. конф. Красноярск: ИПЦ КГТУ, 2003.

2. Васильцов Г.Л., Крюков И.А. Численный метод решения уравнений Навье-Стокса, описывающих течения несжимаемой вязкой жидкости, на криволинейной сетке // Институт проблем механики РАН, Препринт № 594. М., 1997.

3. Мейсон Э., Малинаускас А.. Перенос в пористых средах: модель запыленного газа. М.: Мир, 1986. 200 с.

*Александр Григорьевич ИВАШКО —
зав. кафедрой информационных систем,
доктор технических наук, профессор
ivashco@mail.ru*

*Мария Сергеевна ЦЫГАНОВА —
доцент кафедры информационных систем,
кандидат технических наук
Mademid2@mail.ru*

*Иван Юрьевич КАРЯКИН —
ассистент кафедры информационных систем
Ivan_NYS@mail.ru*

*Институт математики и компьютерных наук
Тюменский государственный университет*

УДК 669.017.03;51-72

МОДИФИЦИРОВАННЫЙ МЕТОД ХУКА-ДЖИВСА ДЛЯ НАХОЖДЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ*

THE MODIFIED METHOD OF HUK-DZHIVS FOR FINDING OF MODEL PARAMETRES OF PHASE TRANSFORMATIONS

АННОТАЦИЯ. В работе предлагается решение задачи нахождения параметров модели фазовых превращений аустенита при термической обработке стали с использованием модифицированного метода Хука-Дживса.

SUMMARY. The article offers the solution to the problem of finding model parameters of austenite phase transformations at thermal processing of steel with the use of Huka-Dzhivsa modified method.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА. Система массового обслуживания (СМО), аустеним, метод Хука-Дживса.

* Работа выполнена в рамках АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы (2000-2010 гг.), НИР «Прогнозирование кинетики распада аустенита в порошковых сталях при непрерывном охлаждении», № 2.1.2/6498.