

УДК 621.031

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ИМПУЛЬСА КОНЦЕНТРАЦИИ ГЕЛИЯ ПО КОЛОНКЕ, ЗАПОЛНЕННОЙ ЦЕНОСФЕРАМИ

А. С. Верещагин, С. Н. Верещагин*, В. М. Фомин

Институт теоретической и прикладной механики
им. С. А. Христиановича СО РАН, 630090 Новосибирск

* Институт химии и химической технологии СО РАН, 660049 Красноярск

Построена математическая модель и получено аналитическое решение задачи об одномерном стационарном течении смеси разнородных газов с полыми проницаемыми частицами. Случай одномерного нестационарного течения такой смеси анализируется численно. Результаты численного решения сопоставлены с экспериментальными данными по движению пика концентрации гелия в хроматографической колонке, заполненной ценосферами (твердыми полыми проницаемыми сферическими частицами). Определены значения коэффициентов проницаемости стенок ценосфер и коэффициента сопротивления среды ценосфер потоку газа.

Ключевые слова: механика многофазных сред, математическое моделирование, разделение газов.

ВВЕДЕНИЕ

При описании системы с большим количеством частиц, как правило, невозможно проследить движение каждой частицы, так как это усложняет математическую постановку задачи. Для уменьшения количества независимых переменных используются различные методы, в частности вероятностный подход, применяемый в статистической физике. Этот подход предполагает наличие функции, учитывающей вероятность пребывания частиц в тех или иных точках пространства и скорость их движения, что позволяет корректно проводить осреднение по пространству и времени, получая при этом основные законы сохранения.

Другой, феноменологический подход основан на осреднении основных параметров по времени и пространству. Использование такого метода оправдано, когда определяются интегральные характеристики системы, а не характеристика каждой частицы.

Рассмотрим систему, состоящую из смеси газов, в которой находятся твердые полые сферические частицы (в дальнейшем ценосферы), причем один из газов может проникать в частицы и выходить из них. Модель такой системы в рамках механики многофазных сред построена, например, в [1] с использованием подхода, предложенного в [2]. При выводе уравнений применяется теория взаимопроникающих континуумов, согласно которой каждый континуум (в данном случае их четыре: два для газов вне частиц, один для проницаемых частиц, один для газа в частицах) описывается собственными параметрами, являющимися интегральными характеристиками исходной системы.

Работа выполнена в рамках Интеграционного проекта СО РАН № 112 "Научное обоснование диффузионно-сорбционной технологии выделения гелия из природного газа в нестационарных условиях".

При выводе математической модели используются следующие предположения:

- 1) размеры твердых частиц значительно больше длины свободного пробега в каждом газе и существенно меньше характерной длины, на которой изменяются макроскопические параметры;
- 2) ценосферы являются полыми сферическими частицами одинакового диаметра с тонкой стенкой и имеют одни и те же физические свойства;
- 3) один из газов способен проникать внутрь микросфер, так что его поток через оболочку пропорционален разности давлений внутри и снаружи;
- 4) скорости и температуры несущих газов вне частиц совпадают;
- 5) скорости и температуры оболочки микросфер и газа внутри микросфер одинаковы;
- 6) газы считаются идеальными;
- 7) внутри микросфер все параметры однородны.

Используя принятый в [2] подход, можно записать систему уравнений

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho_{11}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_{11} \mathbf{v}_1) &= -K, & \frac{\partial \rho_{12}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_{12} \mathbf{v}_1) &= 0, \\
 \frac{\partial \rho_{21}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_{21} \mathbf{v}_2) &= K, & \frac{\partial \rho_{22}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_{22} \mathbf{v}_2) &= 0, \\
 \frac{\partial \rho_1 \mathbf{v}_1}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_1 \mathbf{v}_1 \times \mathbf{v}_1 + m_1 p I) &= p \nabla m_1 - \mathbf{f}_{12} - K \mathbf{v}_2, \\
 \frac{\partial \rho_2 \mathbf{v}_2}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_2 \mathbf{v}_2 \times \mathbf{v}_2 + m_2 p I) &= p \nabla m_2 + \mathbf{f}_{12} + K \mathbf{v}_2,
 \end{aligned} \tag{1}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial U_1}{\partial t} + \operatorname{div}[(U_1 + m_1 p) \mathbf{v}_1] &= -q_{12} m_2 - \mathbf{f}_{12} \cdot \mathbf{v}_2 - K \left(\varepsilon_2 + \frac{\mathbf{v}_2^2}{2} \right) - p \frac{\partial m_1}{\partial t}, \\
 \frac{\partial U_2}{\partial t} + \operatorname{div}[(U_2 + m_2 p) \mathbf{v}_2] &= q_{12} m_2 + \mathbf{f}_{12} \cdot \mathbf{v}_2 + K \left(\varepsilon_2 + \frac{\mathbf{v}_2^2}{2} \right) - p \frac{\partial m_2}{\partial t}
 \end{aligned}$$

с замыкающими соотношениями

$$\begin{aligned}
 \rho_1 \varepsilon_1 &= (\rho_{11} C_{11} + \rho_{12} C_{12}) T_1, & \rho_2 \varepsilon_2 &= (\rho_{21} C_{11} + \rho_{22} C_s) T_2, \\
 m_1 + m_2 &= 1, & \rho_{22} &= \rho_{22}^0 (1 - \beta^3) m_2.
 \end{aligned}$$

Здесь и далее

$$\begin{aligned}
 p_{11} &= \frac{\rho_{11} R_1 T_1}{m_1}, & p_{12} &= \frac{\rho_{12} R_2 T_1}{m_1}, & p_{21} &= \frac{\rho_{21} R_1 T_2}{m_2} \beta^3, \\
 U_1 &= \rho_1 (\varepsilon_1 + \mathbf{v}_1^2 / 2), & U_2 &= \rho_2 (\varepsilon_2 + \mathbf{v}_2^2 / 2), \\
 \rho_1 &= \rho_{11} + \rho_{12}, & \rho_2 &= \rho_{21} + \rho_{22}, & p &= p_{11} + p_{12}, \\
 K &= C_m (p_{11} - p_{21}) m_2, & \mathbf{f}_{12} &= C_F \frac{m_2}{m_1} \frac{1}{R^2} (\rho_{11} \nu_1 + \rho_{12} \nu_2) (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2), \\
 \beta &= r / R,
 \end{aligned}$$

t — время; I — единичный тензор; ρ_{11} — осредненная по объему вне частиц плотность газа, способного проникать в ценосферы; ρ_{12} — осредненная по объему вне частиц плотность газа, который не может проникать в ценосферы; ρ_{21} — осредненная по объему плотность газа в частицах; ρ_{22} — осредненная по объему плотность оболочки частиц; \mathbf{v}_1 — скорость движения газов вне частиц; \mathbf{v}_2 — скорость движения частиц; T_1 — температура газов вне частиц; T_2 — температура частиц и газа внутри частиц; m_1 — объемная концентрация

газа вне частиц; m_2 — объемная концентрация частиц; $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ — удельная внутренняя энергия первого и второго континуумов соответственно; ρ_{22}^0 — плотность материала частиц; r — радиус внутренней полости ценосферы; R — радиус ценосферы; C_m — коэффициент проницаемости частиц; C_F — коэффициент сопротивления частиц потоку газа; q_{12} — межфазный тепловой поток; C_{11}, C_{12} — теплопроводность газа, проникающего и не проникающего в частицы; C_s — теплопроводность твердого материала частиц; ν_1, ν_2 — вязкость газа, проникающего и не проникающего в частицы соответственно.

Система (1) аналогична известным уравнениям Эйлера. Различаются лишь правые части, учитывающие переток массы, импульса и энергии между континуумами. Следует отметить, что вязкость используется только при определении сил взаимодействия между континуумами газа и частиц. В общем случае величины C_m и C_F переменные и являются функциями других параметров среды, но для качественного анализа явления можно принять их постоянными.

1. ОДНОМЕРНОЕ НЕСТАЦИОНАРНОЕ ДВИЖЕНИЕ

1.1. Математическая модель. Математическая модель данной задачи следует из общей системы уравнений. Дополнительно используются следующие предположения: движение одномерное и нестационарное; $m_2 = 1 - m_1 = \text{const}$; $v_2 = 0$; $T_1 = T_2 = T = \text{const}$. В общем случае данные выражения нельзя подставить в исходную систему, так как изначально частицы находились во взвешенном состоянии. В поставленной задаче они закреплены и неподвижны, поэтому из исходной модели возьмем только законы сохранения массы и импульса для газа, находящегося вне частиц. В результате получим следующую замкнутую систему дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \rho_{21,t} &= C_m(p_{11} - p_{21})m_2, \\ \rho_{11,t} + (\rho_{11}v_1)_x &= -C_m(p_{11} - p_{21})m_2, \quad \rho_{12,t} + (\rho_{12}v_1)_x = 0, \\ (\rho_1v_1)_t + (\rho_1v_1^2 + P)_x &= -C_F \frac{m_2}{m_1} \frac{1}{R_+^2} (\rho_{11}\nu_1 + \rho_{12}\nu_2)v_1. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь

$$\begin{aligned} p_{11} &= \rho_{11}R_1T/m_1, \quad p_{21} = \rho_{21}R_1T/(\beta^3m_2), \quad P = \rho_{11}R_1T + \rho_{12}R_2T, \\ m_1 + m_2 &= 1, \quad \rho_1 = \rho_{11} + \rho_{12}, \end{aligned}$$

ρ_{21} — плотность гелия, попавшего в частицы; ρ_{11} — плотность гелия вне частиц; ρ_{12} — плотность газа вне частиц, физические параметры которого существенно отличаются от параметров гелия; v_1 — скорость движения смеси; m_2 — объемная концентрация частиц; R_1, R_2 — газовые постоянные (индекс 1 соответствует гелию, 2 — другому газу); T — температура; ν_1, ν_2 — вязкости газов; R_+ — внешний радиус частиц.

1.2. Характеристики математической модели. Определим тип математической модели (2). Раскрывая производные, перейдем к следующей системе дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \rho_{21,t} &= K, \quad \rho_{11,t} + v_1\rho_{11,x} + \rho_{11}v_{1,x} = -K, \quad \rho_{12,t} + v_1\rho_{12,x} + \rho_{12}v_{1,x} = 0, \\ v_{1,t} + \frac{1}{\rho_1} P_x + v_1v_{1,x} &= \left(K - C_F \frac{m_2}{m_1} \frac{1}{R_+^2} (\rho_{11}\nu_1 + \rho_{12}\nu_2) \right) \frac{v_1}{\rho_1}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь

$$K = C_m m_2 \left(\frac{\rho_{11}}{m_1} - \frac{\rho_{21}}{\beta^3 m_2} \right) R_1 T, \quad \rho_1 = \rho_{11} + \rho_{12}, \quad P = \rho_{11} R_1 T + \rho_{12} R_2 T.$$

Таким образом, систему можно представить в виде

$$U_t + A(U)U_x = R(U),$$

где

$$U = \begin{pmatrix} \rho_{21} \\ \rho_{11} \\ \rho_{12} \\ v_1 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v_1 & 0 & \rho_{11} \\ 0 & 0 & v_1 & \rho_{12} \\ 0 & R_1 T / \rho_1 & R_2 T / \rho_1 & v_1 \end{pmatrix},$$

$$R = \begin{pmatrix} K \\ -K \\ 0 \\ \left(K - C_F \frac{m_2}{m_1} \frac{\rho_{11} v_1 + \rho_{12} v_2}{R_+^2} \right) \frac{v_1}{\rho_1} \end{pmatrix}.$$

Найдем жорданово разложение матрицы A :

$$A = rdl \quad (l = r^{-1}).$$

Собственными значениями являются 0 , v_1 , $v_1 - c$ и $v_1 + c$ ($c = \sqrt{P/\rho_1}$ — аналог скорости звука для смеси в целом).

Искомые выражения для r и l имеют вид

$$r = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{R_2}{R_1} & -\frac{\rho_{11}}{c} & \frac{\rho_{11}}{c} \\ 0 & 1 & -\frac{\rho_{12}}{c} & \frac{\rho_{12}}{c} \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad l = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{R_1 \rho_{12}}{R_1 \rho_{11} + R_2 \rho_{12}} & \frac{R_1 \rho_{11}}{R_1 \rho_{11} + R_2 \rho_{12}} & 0 \\ 0 & -\frac{R_1 T}{2\sqrt{\rho_1 P}} & -\frac{R_2 T}{2\sqrt{\rho_1 P}} & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{R_1 T}{2\sqrt{\rho_1 P}} & \frac{R_2 T}{2\sqrt{\rho_1 P}} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

В рассматриваемом случае скорость потока мала ($v_1 < c$) и движение считается однонаправленным, поэтому имеется две положительные характеристики, одна отрицательная и одна нулевая. Таким образом, система уравнений (3) является гиперболической, хотя полная система (1) предположительно составного типа [2].

2. СЛУЧАЙ ОДНОМЕРНОГО СТАЦИОНАРНОГО ДВИЖЕНИЯ

2.1. Математическая модель. В стационарном случае система уравнений записывается в виде

$$\begin{aligned} \rho_{11} &= \rho_{21}, & (\rho_{11} v_1)_x &= 0, & (\rho_{12} v_1)_x &= 0, \\ (\rho_1 v_1^2 + \rho_{11} R_1 T + \rho_{12} R_2 T)_x &= -C_F \frac{m_2}{m_1} \frac{1}{R_+^2} (\nu_1 \rho_{11} + \nu_2 \rho_{12}) v_1. \end{aligned} \quad (4)$$

Решение уравнений (4) будем искать при

$$\rho_{11}|_{x=0} = \rho_{11}^0, \quad \rho_{12}|_{x=0} = \rho_{12}^0, \quad v_1|_{x=0} = v_1^0.$$

Здесь ρ_{11}^0 , ρ_{12}^0 , v_1^0 — плотности и скорость течения в точке $x = 0$.

В дальнейшем представляет интерес случай $x > 0$, $v_1^0 > 0$, а решение при $v_1^0 < 0$ легко получается из предыдущего решения.

2.2. Качественный анализ задачи. В стационарном случае первые интегралы системы уравнений (4) имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}\rho_{11}v_1 &= C_1, & \rho_{12}v_1 &= C_2, \\ \alpha_0v_1 + \frac{\alpha_R T}{v_1} &= -C_F \frac{m_2}{m_1} \frac{1}{R_+^2} \alpha_\nu x + C_3.\end{aligned}$$

Здесь $\alpha_0 = C_1 + C_2$; $\alpha_R = C_1 R_1 + C_2 R_2$; $\alpha_\nu = C_1 \nu_1 + C_2 \nu_2$; C_1, C_2, C_3 — константы:

$$C_1 = \rho_{11}^0 v_1^0, \quad C_2 = \rho_{12}^0 v_1^0, \quad C_3 = (\rho_{11}^0 + \rho_{12}^0)(v_1^0)^2 + (\rho_{11}^0 R_1 + \rho_{12}^0 R_2)T.$$

Из соотношения $p_{11} = p_{21}$ следует

$$\rho_{21} = \beta^3 m_2 \rho_{11} / m_1.$$

Покажем, каким образом из данной системы уравнений с начальными условиями можно получить решение задачи Коши, записанное в явном виде, а также укажем математический критерий ее разрешимости в случае конечной длины исследуемой области (например, при движении смеси газов через хроматографическую колонку, заполненную цеолитами).

Запишем закон сохранения импульса в более удобном для дальнейшего исследования виде

$$\alpha_0(v_1 - v_1^0) + \alpha_R T(1/v_1 - 1/v_1^0) = -C'_F \alpha_\nu x,$$

где $C'_F = C_F(m_2/m_1)/R_+^2$. Это соотношение представляет собой неявную зависимость $v_1(x)$. Явное выражение получается при решении квадратного уравнения относительно v_1 . Далее описан другой способ получения этой зависимости, который позволяет изучить течение более детально.

Из приведенного выше уравнения выразим x как функцию v_1 :

$$x = f(v_1) = -\frac{1}{C'_F \alpha_\nu} \left[\alpha_0(v_1 - v_1^0) + \alpha_R T \left(\frac{1}{v_1} - \frac{1}{v_1^0} \right) \right].$$

Исследуем функцию f на наличие экстремумов, т. е. $\partial f / \partial v_1 = 0$ тогда и только тогда, когда

$$v_1 = v_c = \sqrt{\frac{\alpha_R T}{\alpha_0}} = \sqrt{\frac{p_0}{\rho_1^0}} = \sqrt{\frac{\rho_{11}}{\rho_{11} + \rho_{12}} R_1 T + \frac{\rho_{12}}{\rho_{11} + \rho_{12}} R_2 T}$$

(p_0, ρ_1^0 — давление и суммарная плотность смеси газов на входе в колонку). Заметим, что постоянная и не меняющаяся вдоль колонки величина v_c является аналогом скорости звука для данной смеси газов.

Для v_c нетрудно получить следующую оценку. Пусть $c_1 = \sqrt{R_1 T}$, $c_2 = \sqrt{R_2 T}$ — скорости звука для двух данных газов в смеси. (Будем считать, что $c_1 < c_2$; в противном случае знаки нужно изменить на противоположные.) Тогда справедливо соотношение

$$c_1 \leq v_c \leq c_2.$$

При этом близость значения v_c к одному из значений c_i ($i = 1, 2$) зависит от исходного состава смеси.

Качественная зависимость $v_1(x)$ представлена на рис. 1. Видно, что реализуются течения двух типов: 1) дозвуковое при $v_1|_{x=0} = v_1^0 < v_c$; 2) сверхзвуковое при $v_1|_{x=0} = u_1^0 > v_c$. Второй случай нефизичен, поскольку соответствует течению газа из области меньшего давления в область большего (это следует из соотношения $\rho_{11}v_1 = C_1$ и зависимости между давлением и плотностью для идеального газа).

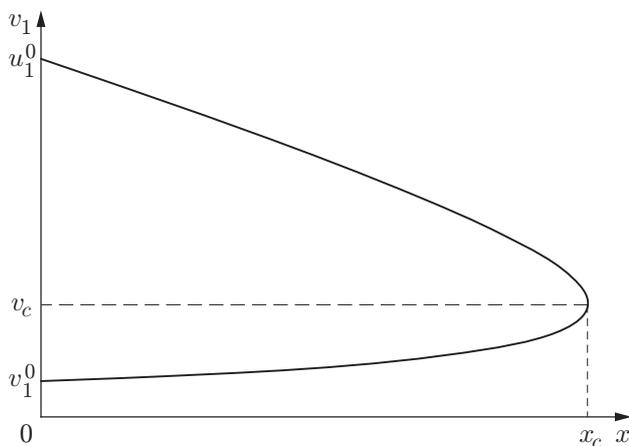


Рис. 1

Рис. 1. Зависимость $v_1(x)$

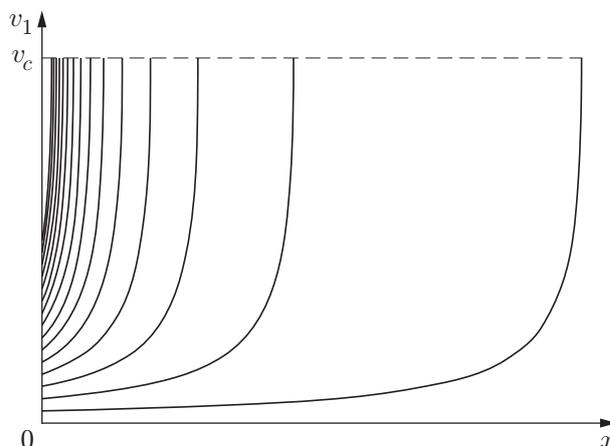


Рис. 2

Рис. 2. Качественный вид дозвуковой ветви зависимости $v_1(x)$ при начальных скоростях $v_1^0 = v_1(0) < v_c$ для одного и того же состава смеси

В дальнейшем будем рассматривать смеси с конкретными значениями ρ_{11}^0 и ρ_{12}^0 . На рис. 2 представлена картина течения при различных начальных скоростях v_1^0 для одного и того же состава смеси.

При заданных начальном составе смеси и скорости газов на входе в колонку сформулируем условие существования решения одномерной стационарной задачи о прохождении смеси газа через заполненный ценосферами слой, который расположен на отрезке $[0, L]$. Из рис. 1 следует, что такое течение “запирается” в критической точке $x = x_c$. Таким образом, критерий существования стационарного решения имеет вид

$$x_c = f(v_c) \geq L.$$

Подставляя f в это выражение, получаем неравенство

$$|v_1^0 - v_c| \geq \sqrt{C'_F \alpha_\nu L v_1^0 / \alpha_0}.$$

3. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О ДВИЖЕНИИ ПИКА КОНЦЕНТРАЦИИ ГЕЛИЯ ЧЕРЕЗ ХРОМАТОГРАФИЧЕСКУЮ КОЛОНКУ

Для верификации полученной математической модели рассмотрим следующую физическую задачу. На вход хроматографической колонки, заполненной ценосферами и продуваемой аргоном, импульсно подается гелий, который потоком аргона продвигается вниз по течению. Гелий, в отличие от аргона, может свободно проникать в ценосферы и выходить из них. Решение этой задачи необходимо не только для верификации математической модели и уточнения некоторых констант, входящих в основные уравнения, но и для выяснения возможности использования ценосфер в качестве своеобразного фильтра с целью обогащения смеси гелием.

Уравнения, описывающие движение газов по хроматографической колонке, приведены в п. 1. Для численного интегрирования системы (3) необходимо сформулировать начальные и граничные условия.

3.1. Начальные условия. Предположим, что гелий в колонку еще не подан. Тогда в колонке, заполненной частицами, имеется стационарный поток несущего газа, который не поглощается частицами. Определим профили скорости и плотности в потоке, зная давление газа на входе и выходе. В этом случае система уравнений (4) имеет вид

$$\begin{aligned} (\rho_{12}v_1)_x &= 0, \\ (\rho_{12}v_1^2 + \rho_{12}R_2T)_x &= -C_F \frac{m_2\nu_2}{m_1} \frac{1}{R_+^2} \rho_{12}v_1, \end{aligned} \quad (5)$$

где $v_1(x)$, $\rho_{12}(x)$ — искомые функции.

Граничные условия принимают вид

$$\rho_{12}|_{x=0} = \frac{p_0}{R_2T}, \quad \rho_{12}|_{x=L} = \frac{p_a}{R_2T}, \quad p_a < p_0,$$

где p_0 , p_a — заданные давления на входе и выходе из колонки соответственно.

По заданному потоку газа F на выходе из колонки можно определить коэффициент сопротивления среды C_F . Пусть T_a — температура внешней среды, p_a — атмосферное давление, S — площадь сечения колонки. Тогда

$$p_a = \rho_{12}v_1SR_2T_a/F.$$

Интегрируя по x уравнения исходной системы (5), получаем

$$\begin{aligned} \rho_{12}v_1 &= \rho_{12}^0v_1^0, \\ \rho_{12}^0v_1^0(v_1 - v_1^0) + R_2T(\rho_{12} - \rho_{12}^0) &= -C_F \frac{m_2}{m_1} \frac{\nu_2}{R_+^2} \rho_{12}^0v_1^0x. \end{aligned}$$

Здесь ρ_{12}^0 , v_1^0 — плотность и скорость при $x = 0$.

Из граничных условий следует

$$\rho_{12}^0 = p_0/(R_2T),$$

а из соотношения для потока на выходе из колонки и первого интеграла получаем выражение

$$\rho_{12}v_1 = \rho_{12}^0v_1^0 = \rho_{12}^L v_1^L = p_a F / (SR_2T_a),$$

где $\rho_{12}(L) = \rho_{12}^L$; $v_1(L) = v_1^L$. Отсюда следует

$$v_1^0 = p_a T F / (p_0 T_a S).$$

Аналогично для скорости на выходе из колонки имеем соотношение

$$v_1^L = T F / (T_a S).$$

Из второго интеграла системы (5) выразим C_F через известные значения ρ_{12} и v_1 на границах области:

$$C_F = \frac{m_1 R_+^2}{m_2 \nu_2 L} \left[\frac{T}{T_a} \frac{F}{S} \left(\frac{p_a}{p_0} - 1 \right) + R_2 T_a \frac{S}{F} \left(\frac{p_0}{p_a} - 1 \right) \right]. \quad (6)$$

Для того чтобы получить значения искомых функций во всей области движения, нужно разрешить второй интеграл системы (5) с использованием полученных зависимостей. В результате для v_1 имеем уравнение

$$v_1^2 + \left\{ \frac{T}{T_a} \frac{F}{S} \left[\frac{x}{L} \left(\frac{p_a}{p_0} - 1 \right) - \frac{p_a}{p_0} \right] + R_2 T_a \frac{S}{F} \left[\frac{x}{L} \left(\frac{p_0}{p_a} - 1 \right) - \frac{p_0}{p_a} \right] \right\} v_1 + R_2 T = 0.$$

Из первого интеграла системы (5) следует

$$\rho_{12} = p_a F / (SR_2 T_a v_1).$$

Таким образом, зная все исходные данные, можно получить начальные профили скорости и плотности.

3.2. Граничные условия. Пусть в момент $t = 0$ импульсно подается гелий. В соответствии с анализом, проведенным в п. 1, для краевой задачи нужно ставить начальное условие при $t = 0$, два условия на левой границе $x = 0$ и одно условие на правой границе $x = L$. В данном случае на границах зададим условия для давления:

$$p_{11}|_{x=0} = \begin{cases} p_0, & t \leq t_c, \\ 0, & t > t_c, \end{cases} \quad p_{12}|_{x=0} = \begin{cases} 0, & t \leq t_c, \\ p_0, & t > t_c, \end{cases} \quad p_{11} + p_{12}|_{x=L} = p_L.$$

Здесь p_{11} — давление гелия вне частиц; p_{12} — давление несущего газа; p_0 — заданное давление несущего газа на входе в колонку; p_L — давление на выходе из колонки.

3.3. Численное интегрирование задачи. На отрезке $[0, L]$ зададим две равномерные сетки: со значениями в целых узлах $\omega_h^1 = \{x_0 = 0, x_1 = h, \dots, x_N = L\}$ и со значениями в дробных узлах $\omega_h^2 = \{x_{1/2} = h/2, x_{3/2} = 3h/2, \dots, x_{N-1/2} = L - h/2\}$. Здесь h — шаг разностной сетки.

Функции ρ_{21} , ρ_{11} , ρ_{12} будем проецировать на сетку ω_h^2 , а функцию v_1 — на сетку ω_h^1 .

Исходные дифференциальные уравнения, за исключением уравнения

$$\rho_{21,t} = C_m R_1 T (m_2 \rho_{11} / m_1 - \rho_{21} / \beta^3),$$

можно записать в общем виде:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + A(U) \frac{\partial U}{\partial x} = R(U).$$

Здесь

$$U = \begin{pmatrix} \rho_{11} \\ \rho_{12} \\ v_1 \end{pmatrix}, \quad A(U) = \begin{pmatrix} v_1 & 0 & \rho_{11} \\ 0 & v_1 & \rho_{12} \\ R_1 T / \rho_1 & R_2 T / \rho_1 & v_1 \end{pmatrix},$$

$$R = \begin{pmatrix} -K \\ 0 \\ \left(K - C_F \frac{m_2}{m_1} \frac{\rho_{11} v_1 + \rho_{12} v_2}{R_+^2} \right) \frac{v_1}{\rho_1} \end{pmatrix},$$

$$K = C_m R_1 T (m_2 \rho_{11} / m_1 - \rho_{21} / \beta^3).$$

В матрице, стоящей перед производной по x , выделим диагональную часть, т. е. представим матрицу в виде суммы:

$$A(U) = B(U) + v_1 I'$$

(I' — единичная матрица размера 3×3). Численное решение будем искать следующим образом. На первом шаге решается задача $\partial U / \partial t = G$ ($G = R(U) - B(U) \partial U / \partial x$), в которой находятся значения величин на промежуточном шаге. На втором шаге решается задача $\partial U / \partial t + v_1 \partial U / \partial x = 0$, в которой значения на следующем слое по времени получаются через значения на промежуточном шаге.

На первом шаге имеем

$$\frac{\rho_{21,j+1/2}^* - \rho_{21,j+1/2}^n}{\tau} = K_{j+1/2}^n,$$

$$\begin{aligned}\frac{\rho_{11,j+1/2}^* - \rho_{11,j+1/2}^n}{\tau} &= -K_{j+1/2}^n - \rho_{11,j+1/2}^n \frac{v_{1,j+1}^n - v_{1,j}^n}{h}, \\ \frac{\rho_{12,j+1/2}^* - \rho_{12,j+1/2}^n}{\tau} &= -\rho_{12,j+1/2}^n \frac{v_{1,j+1}^n - v_{1,j}^n}{h}, \\ \frac{v_{1,j}^* - v_{1,j}^n}{\tau} &= f_j^n - \frac{2T}{\rho_{1,j+1/2}^n + \rho_{1,j-1/2}^n} \left(R_1 \frac{\rho_{11,j+1/2}^n - \rho_{11,j-1/2}^n}{h} + R_2 \frac{\rho_{12,j+1/2}^n - \rho_{12,j-1/2}^n}{h} \right).\end{aligned}$$

Здесь τ — шаг по времени; величины со знаком “*” — параметры на промежуточном шаге.

На втором шаге получаем

$$\begin{aligned}\rho_{21,j+1/2}^{n+1} &= \rho_{21,j+1/2}^*, \\ \frac{\rho_{11,j+1/2}^{n+1} - \rho_{11,j+1/2}^*}{\tau} + \frac{v_{1,j}^* + v_{1,j+1}^*}{2} \frac{\rho_{11,j+1/2}^* - \rho_{11,j-1/2}^*}{h} &= 0, \\ \frac{\rho_{12,j+1/2}^{n+1} - \rho_{12,j+1/2}^*}{\tau} + \frac{v_{1,j}^* + v_{1,j+1}^*}{2} \frac{\rho_{12,j+1/2}^* - \rho_{12,j-1/2}^*}{h} &= 0, \\ \frac{v_{1,j}^{n+1} - v_{1,j}^*}{\tau} + v_{1,j}^* \frac{v_{1,j}^* - v_{1,j-1}^*}{h} &= 0.\end{aligned}$$

Здесь

$$\begin{aligned}K_{j+1/2}^n &= C_m R_1 T \left(\frac{m_2}{m_1} \rho_{11,j+1/2}^n - \frac{1}{\beta_3} \rho_{21,j+1/2}^n \right), \quad \rho_{1,j+1/2} = \rho_{11,j+1/2} + \rho_{12,j+1/2}, \\ f_j^n &= \left[\frac{K_{j+1/2}^n + K_{j-1/2}^n}{2} - C_F \frac{m_2}{m_1} \frac{1}{R^2} \left(\frac{\rho_{11,j+1/2}^n + \rho_{11,j-1/2}^n}{2} \nu_1 + \frac{\rho_{12,j+1/2}^n + \rho_{12,j-1/2}^n}{2} \nu_2 \right) \right] \times \\ &\quad \times \frac{2v_{1,j}^n}{\rho_{1,j+1/2}^n + \rho_{1,j-1/2}^n}.\end{aligned}$$

3.4. Результаты численного эксперимента. Численный эксперимент проводился для колонки длиной 1 м с внутренним диаметром 3 мм, заполненной сферическими частицами радиусом 80 мкм (отношение радиуса полости к внешнему радиусу 0,91; объемная концентрация частиц 0,6). Газ-носитель — аргон, избыточное давление которого на входе в колонку составляло 0,17 МПа, давление газа на выходе принималось равным атмосферному. Температура колонки изменялась от 273 до 800 К, объемный расход аргона приблизительно равен 10/21 см³/с при комнатной температуре и атмосферном давлении, масса импульса гелия составляла 0,2301 мг.

Для сопоставления результатов численного и физического экспериментов определялось изменение во времени расхода гелия на выходе из колонки. В расчетах начальный профиль концентрации гелия на входе в колонку считался прямоугольным.

На рис. 3 представлены результаты расчета для прямоугольного профиля при различных значениях коэффициента проницаемости C_m . Видно, что с увеличением C_m характер зависимости $M(t)$ существенно меняется. При малых значениях коэффициента проницаемости (рис. 3,а) наблюдается некоторое снижение максимальной концентрации и характерное размытие заднего фронта пика. Такой характер зависимости $M(t)$ в физическом эксперименте соответствует медленной диффузии гелия внутрь частиц при низких температурах или ситуации, когда газ не способен проникать внутрь частиц (например, азот).

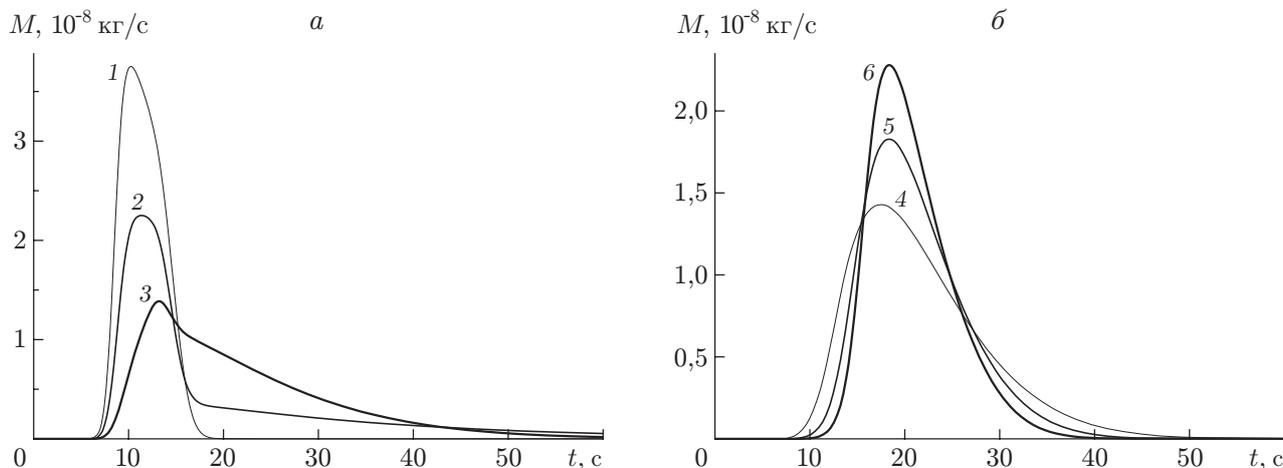


Рис. 3. Зависимость расхода гелия на выходе из колонки от времени при различных значениях коэффициента проницаемости частиц C_m :
 1 — $C_m = 0$; 2 — $C_m = 10^{-7}$ с/м²; 3 — $C_m = 3 \cdot 10^{-7}$ с/м²; 4 — $C_m = 10^{-6}$ с/м²; 5 — $C_m = 5 \cdot 10^{-6}$ с/м²; 6 — $C_m = 10^{-5}$ с/м²

При увеличении коэффициента проницаемости (рис. 3, б) происходит сдвиг кривых в направлении больших времен, сопровождающийся сильным размытием заднего фронта пика. При дальнейшем увеличении коэффициента проницаемости максимум концентрации сдвигается в направлении больших времен удерживания газа. При высоких скоростях процесса диффузии зависимость $M(t)$ становится почти симметричной, при этом ширина импульса почти в два раза больше времени удерживания несорбируемого компонента, что определяется отношением объема, доступного для гелия, к объему между сферами, равному 2,13. Такое поведение системы согласуется с теорией хроматографического процесса и качественно соответствует результатам расчета статистическими методами, выполненного ранее [3].

Результаты расчета сопоставлялись с данными экспериментов, в которых использовалась фракция ценосфер размером $0,063 \div 0,100$ мм, полученная из концентрата летучей золы Московской ТЭЦ-22 методом аэродинамической сепарации (насыпная плотность $0,18$ г/см³, средний радиус 40 мкм, расчетное отношение радиуса полости к внешнему радиусу $0,978$). Длина слоя ценосфер в колонке с внутренним диаметром 3 мм составляла 1 м, газ-носитель — аргон, объемный расход равен $0,121$ см³/с ($T_a = 273$ К, $p_a = 0,1013$ МПа). Изменение коэффициента проницаемости достигалось варьированием температуры колонки в интервале $300 \div 850$ К, при этом избыточное давление газа-носителя на входе составляло $0,06 \div 0,17$ МПа, давление газа на выходе из колонки равно атмосферному.

Поскольку для количественного сопоставления модели с экспериментальными данными необходима подгонка параметров системы (в первую очередь, коэффициента проницаемости), целесообразно проводить сравнение прежде всего в предельных случаях, а именно при очень большом и очень малом значениях коэффициента проницаемости. При промежуточных значениях модель должна удовлетворительно описывать поведение системы. Зависимость $M(t)$, полученная в численном расчете и физическом эксперименте, приведена на рис. 4.

Результаты сравнения расчетных и экспериментальных данных позволяют сделать следующие выводы.

Смещение пиков, изменение ширины и эволюция формы пиков при вариации коэффициента проницаемости хорошо описываются предложенной моделью.

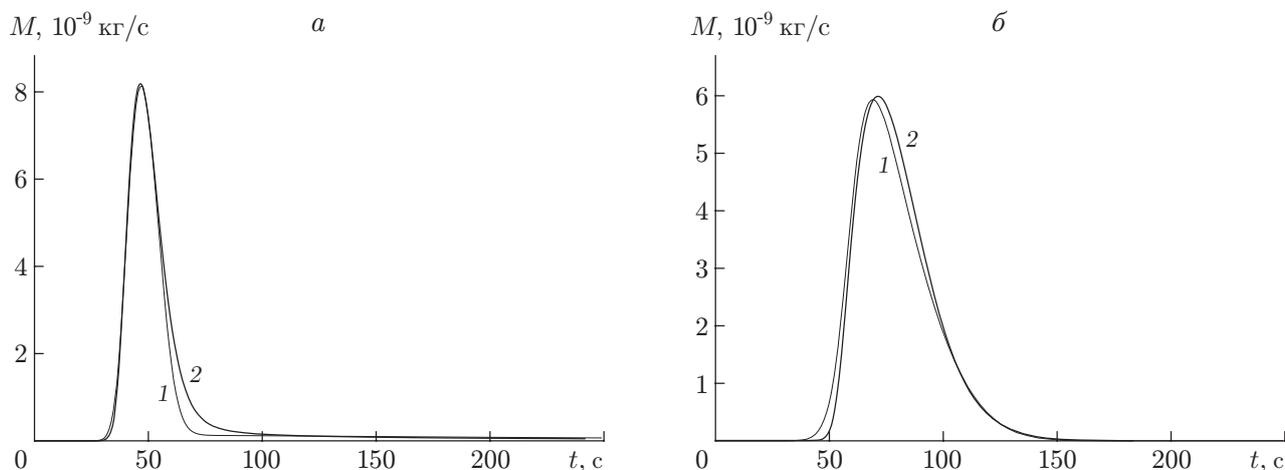


Рис. 4. Зависимость $M(t)$, полученная в численном расчете и физическом эксперименте:

a — $T = 216$ °C; b — $T = 580$ °C; 1 — численный расчет, 2 — физический эксперимент

Модель удовлетворительно описывает смещение пика гелия при изменении коэффициента проницаемости от минимального значения (почти полное отсутствие диффузии) до максимального (близкое к равновесному проникновению гелия): в расчетах временное смещение пика гелия составляет около 9 с, в экспериментах — 10 с (при $T = 216, 580$ °C).

Предложенная модель удовлетворительно описывает общие закономерности поведения системы. Количественное сравнение результатов расчета и экспериментальных данных позволяет определить значения коэффициента проницаемости стенок ценосфер C_m и коэффициента сопротивления среды микросфер C_F (по формуле (6)), которые могут быть использованы в дальнейших расчетах (в данном случае $C_m = 5 \cdot 10^{-9}$ с/м², $C_F = 256,019$ при $T = 216$ °C и $C_m = 3 \cdot 10^{-7}$ с/м², $C_F = 303,112$ при $T = 580$ °C).

ЛИТЕРАТУРА

1. Долгушев С. В., Фомин В. М. Уравнения динамики смеси газ — пыле селективно-проницаемые микросферы // ПМТФ. 2002. Т. 43, № 1. С. 83–90.
2. Нигматулин Р. И. Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978.
3. Верещагин С. Н., Куртева Л. И., Рабчевская А. А. и др. Использование ценосфер летучих зол от сжигания каменных углей для процессов диффузионного разделения газов // Тр. Всерос. конф. “Процессы горения и взрыва в физикохимии и технологии неорганических материалов”, Москва, 24–27 июня 2002 г. М.: Ин-т структур. макрокинетики и проблем материаловедения, 2002. С. 70–74.

Поступила в редакцию 30/X 2006 г.