

Добыча, транспорт и переработка нефти и газа

УДК 620.193

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КОНДЕНСАЦИИ ПАРА МЕТОДОМ ВЕРОЯТНОСТНОГО КЛЕТОЧНОГО АВТОМАТА

С.Б. Коньгин

Самарский государственный технический университет
443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244

Рассмотрены вопросы применения метода вероятностного клеточного автомата к моделированию процессов конденсации пара. Приведена математическая модель процессов конденсации, на основании которой были получены значения давлений насыщенного пара.

Ключевые слова: конденсация, давление насыщенного пара, вероятностный клеточный автомат.

В работах [1, 2] автором настоящей статьи были разработаны модели различных физико-химических процессов, основанные на использовании метода вероятностного клеточного автомата (ВКА) [3]. В рамках настоящей работы рассматривается возможность использования метода ВКА для моделирования газожидкостных систем на примере процессов конденсации пара.

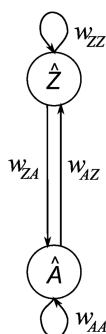
Согласно современным физическим представлениям, насыщенный пар, не содержащий зародышей конденсации, может длительное время не конденсироваться, что затрудняет прямое имитационное моделирование процессов конденсации. В этой связи для ускорения процесса моделирования считается, что в паре находится твердая частица, являющаяся зародышем конденсации.

При построении модели были использованы следующие исходные предпосылки. Область пространства, непосредственно расположенная у твердой поверхности частицы-зародыша, разбивается на совокупность плотноупакованных молекулярных объемов с характерным размером δ , каждый из которых может содержать молекулу. Каждому из указанных молекулярных объемов ставится в соответствие ячейка ВКА. Процесс фазового перехода рассматривается как результат протекания значительного количества элементарных актов испарения и конденсации молекул.

Соответствующая математическая модель представлена в формулах (1)-(10). Каждая ячейка ВКА представляет собой объект, который может находиться в двух состояниях S : пустая (состояние Z) или содержащая конденсированную молекулу (состояние A). Соответственно путем переходов J между указанными состояниями в системе могут моделироваться элементарные процессы: $Z \rightarrow A$ – конденсация, $A \rightarrow Z$ – испарение. Также на каждом шаге возможна реализация «нулевых» процессов $Z \rightarrow Z$ и $A \rightarrow A$. Соответствующий граф переходов между состояниями ячеек ВКА представ-

лен на рис. 1. Выбор реализующихся элементарных процессов в каждой ячейке на каждом шаге производится с помощью генератора случайных чисел θ .

Вероятность реализации элементарного процесса конденсации w_{ZA} за один шаг моделирования определялась на основании молекулярно-кинетической теории, а вероятность реализации элементарного процесса испарения w_{AZ} – на основании термоактивационной модели.



Р и с. 1. Граф переходов между состояниями ВКА в модели конденсации пара

$$c_i = \{S, s_0, \theta, J, W\}, \quad (1)$$

$$S = \{Z, A\}, \quad (2)$$

$$s_0 = Z, \quad (3)$$

$$\theta \in [0; 1], \quad (4)$$

$$J = \{(Z, Z), (Z, A), (A, Z), (A, A)\}, \quad (5)$$

$$W = \{w_{ZZ}, w_{ZA}, w_{AZ}, w_{AA}\}, \quad (6)$$

$$w_{ZZ} = 1 - w_{ZA}, \quad (7)$$

$$w_{ZA} = \gamma \tau_0 \delta^2 p \sqrt{\frac{N_A}{2\pi k T M}}, \quad (8)$$

$$w_{AA} = 1 - w_{AZ}, \quad (9)$$

$$w_{AZ} = \exp\left(-\frac{W_a}{kT}\right). \quad (10)$$

В представленных уравнениях приняты следующие обозначения: s_0 – начальное состояние ячейки; γ – коэффициент прилипания конденсирующейся молекулы к поверхности; τ_0 – период колебаний молекулы в жидкости; p – давление газа в системе; T – абсолютная температура; k – постоянная Больцмана; N_a – число Авогадро; M – молекулярная масса; W_a – теплота испарения.

Для сравнения результатов моделирования, полученных с помощью метода ВКА, с экспериментальными данными была решена задача определения давления насыщенного пара метана [4]. Численные значения исходных данных для метана, использованные при моделировании методом ВКА, взяты при температуре 150 К (табл. 1). В ходе моделирования в первом приближении считалось, что указанные параметры не зависят от температуры.

Т а б л и ц а 1

Исходные данные, использованные при моделировании конденсации метана

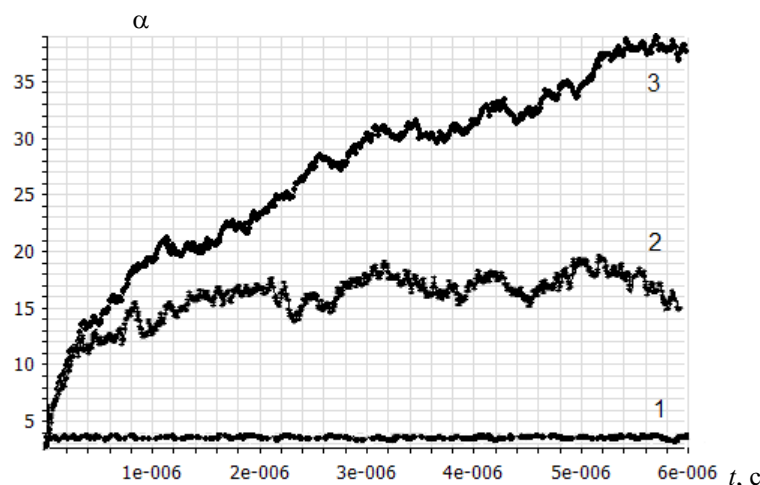
№	Параметр	Обозначение	Ед. изм.	Значение
1	Молекулярная масса	M	г/моль	16,04
2	Период колебаний молекулы	τ_0	с	$1 \cdot 10^{-12}$
3	Размер ячейки ВКА	δ	м	$3,94 \cdot 10^{-12}$
4	Коэффициент прилипания	γ	–	0,2
5	Теплота испарения	W_a	кДж/моль	7,87

Энергия активации десорбции молекул метана из первого слоя на поверхности частицы была принята достаточно большой, так чтобы зародыш был покрыт монослоем адсорбированных молекул.

В результате моделирования методом ВКА были получены следующие основные результаты. При давлениях, существенно меньших давления насыщенного пара, на рассматриваемой твердой поверхности наблюдается процесс полимолекулярной

адсорбции метана. Зависимость степени заполнения поверхности от времени t для данных условий представлена на рис. 2, график 1. Из данного рисунка видно, что количество молекул метана на поверхности не возрастает с течением времени, т. е. процесс конденсации пара при данных условиях моделирования не происходит.

По мере приближения давления к давлению насыщенного пара наблюдается увеличение количества адсорбированного вещества. В области насыщения количество жидкости в поверхностной пленке начинает существенно пульсировать, однако в среднем его необратимого роста не наблюдается (см. рис. 2, график 2). В этом случае пар находится на грани конденсации.



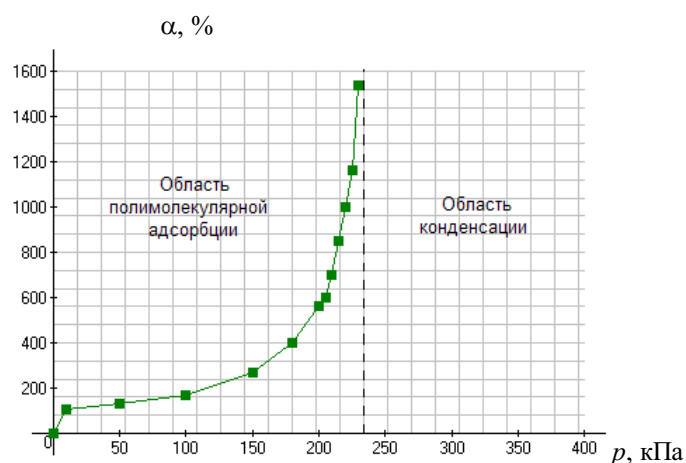
Р и с. 2. Зависимость степени заполнения поверхности молекулами от времени (1 – при давлениях ниже давления насыщенного пара; 2 – при давлениях, близких к насыщенному; 3 – при давлениях выше давления насыщенного пара)

В случае, когда давление компонента превысит давление насыщенного пара, начинается необратимый рост пленки жидкости на поверхности твердой частицы. Здесь количество конденсированного вещества постоянно растет с течением времени (см. рис. 2, график 3).

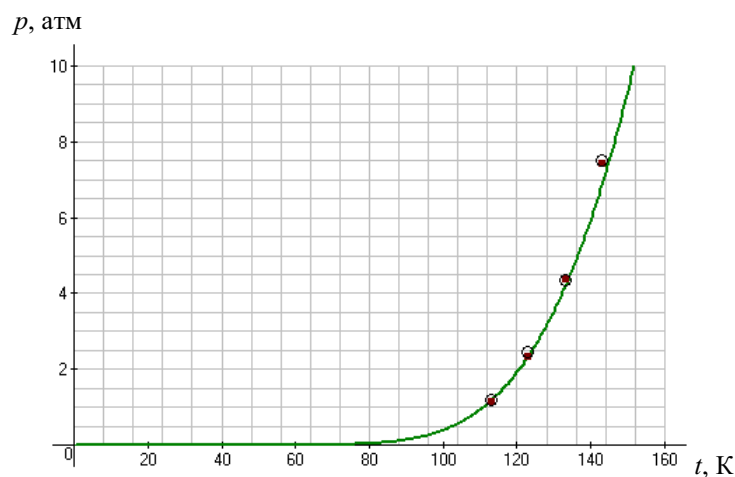
На основании приведенных выше результатов моделирования методом ВКА для каждой температуры может быть построена зависимость равновесной степени заполнения поверхности молекулами метана от его давления (рис. 3). Из рассмотрения данной зависимости видно, что здесь имеются две характерные области. При давлениях ниже давления насыщенного пара данная зависимость аналогична известному уравнению полимолекулярной адсорбции Брунауэра – Эммета – Теллера [1]. По мере приближения к давлению насыщенного пара количество адсорбированных молекул резко увеличивается. При давлениях выше давления насыщенного пара наступает фазовый переход, и количество конденсированного вещества неограниченно возрастает.

Путем проведения серии вычислительных экспериментов с помощью метода ВКА была построена зависимость давления насыщенного пара метана от температуры (рис. 4). Здесь же приведены экспериментальные точки и аналитическая зависимость, полученная с помощью уравнения Клапейрона – Клаузиуса. Из его рассмотрения видно хорошее согласование между результатами использования метода ВКА и экспериментальными значениями.

Полученные в данной работе результаты свидетельствуют о возможности использования предлагаемого метода ВКА для моделирования различных физико-химических процессов в газожидкостных системах. Дальнейшим развитием указанного направления может быть разработка метода ВКА для моделирования фазовых равновесий в многокомпонентных системах.



Р и с. 3. Зависимость равновесной степени заполнения поверхности от давления пара, полученная с помощью метода ВКА



Р и с. 4. Зависимость давления насыщенного пара метана от температуры

Особую привлекательность представляет то обстоятельство, что при построении данной модели была использована та же самая единая методологическая база, что и при построении предыдущих моделей, представленных в работах [1, 2]. Это позволяет в перспективе построить на базе метода ВКА комплексную модель физико-химических процессов в гетерогенных системах, учитывающую широкий круг элементарных составляющих и компонентов.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Коньгин С.Б.* Моделирование процессов адсорбции методом вероятностного клеточного автомата // Вестник Самар. гос. аэрокосм. ун-та им. акад. С.П. Королева. Сер. Актуальные проблемы радиоэлектроники. – 2002. – Вып. 7. – С. 58-64.
2. *Коньгин С.Б., Лесухин С.П.* Стохастическая модель окисления металлов в газовой среде // Известия Самар. научного центра РАН. – 2010. – Т. 12, № 1(2). – С. 377-380.
3. *Ванаг В.К.* Исследование пространственно распределенных динамических систем методами вероятностного клеточного автомата // Успехи физических наук. – 1999. – Т. 169, № 5. – С. 481-505.
4. *Варгафтик Н.Б.* Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. – М.: Физматлит, 1963. – 708 стр.: ил.

Статья поступила в редакцию 10 февраля 2011 г.

UDC 620.193

MODELING OF VAPOR CONDENSATION PROCESSES USING STOCHASTIC CELLULAR AUTOMATON METHOD

S.B. Konygin

Samara State Technical University
244, Molodogvardeyskaya st., Samara, 443100

Questions of application of a method of probability of the cellular automaton for modeling vapor condensation processes are considered. The mathematical model of condensation processes are described. Vapor pressure values are calculated by this model.

Keywords: *vapor condensation, equilibrium vapor pressure, probability cellular automaton.*