

УДК 536(075.8)

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПРОЦЕССОВ В СОРБЦИОННЫХ ТЕРМОТРАНСФОРМАТОРАХ**

*Б. Х. Драганов, доктор технических наук, профессор*

*В. В. Козырский, доктор технических наук, профессор*

*Национальный университет биоресурсов и природопользования Украины*

*e-mail: epafort1@mail.ru*

**Аннотация.** *Целью исследования была разработка математической модели фазовых процессов в сорбционных термотрансформаторах.*

*В работе приведена математическая модель гидродинамики гетерогенных сред в эйлеровых переменных в условиях цилиндрической симметрии. Выполнен анализ исследований течения многокомпонентной смеси, один из компонентов которой конденсируется.*

*Рассмотрены диффузионные процессы в сорбционных термотрансформаторах. Приведенный метод анализа сорбционных процессов может быть использован при исследовании явлений, имеющих место в различных видах тепловых насосов (компрессионных, абсорбционных, и их возможных комбинаций), в сорбционных аккумуляторах, в пористых средах.*

**Ключевые слова:** *математическое моделирование, гетерогенная среда, дискретная среда, термодинамическое равновесие, химический потенциал Гиббса, постоянная Больцмана, макроскопическая диффузия, пористая среда, энтропия*

**Актуальность.** В основу исследования гидродинамики многофазных сред положены математические модели. При этом значительный научный интерес представляет течение многокомпонентной смеси, один из компонентов которой конденсируется.

**Анализ последних исследований и публикаций.** Осредненные уравнения движения для газо- и парожидкостных смесей с учетом фазовых переходов приведены в работе [14]. Более строгий анализ основных осредненных уравнений для отдельных компонентов выполнен в [17], теплообмен сплошной среды рассматривается в рамках эйлерова континуума, а закономерности движения дисперсной фазы в потоке исследуются в виде лагранжевого

представления. Турбулентные пульсации скорости дисперсных частиц рекомендуется описывать методом стохастического моделирования [12].

При разработке математической модели гетерофазной среды возникает задача осреднения параметров по некоторому интервалу времени и области пространства. И. В. Деревич [4] предложил метод общего пространственно-временного осреднения, зависящего от интервала или формы и значений объема области.

В работе [8] исходят из условия, что расположение в пространстве, форма и размеры элементов дискретной фазы (капель, пузырьков, частиц) – случайные величины. Суть анализа заключается в том, что вводится функция  $(\varphi_{z_3, \tau})$ , которая указывает на вероятность того, что в окрестностях данной точки пространства в момент времени  $\tau$  находится  $i$ -я фаза, или что данная точка пространства принадлежит множеству точек  $i$ -й фазы в данной точке пространства.

В уравнение движения вводится функция  $k$ -взаимодействия между компонентами потока [13]. Аналогичный метод анализа применительно к  $n$  компонентам, когда один из компонентов участвует в химических реакциях, рассматривался в [11].

Среди работ, посвященных гидродинамике многофазных сред, когда один из компонентов может изменять свое фазовое состояние, следует выделить [5]. Если инерционные эффекты относительно движения фаз незначительны, то для описания движения многофазных сред обращаются к диффузному приближению.

**Цель исследования** – разработка математической модели фазовых процессов в сорбционных термотрансформаторах.

**Материалы и методы исследования.** Уравнение движения и состояния для всей среды в целом, задающее напряжение и внутреннюю энергию, записываются в предположении локально термодинамического равновесия, когда в

каждой точке можно определить температуру среды  $T$ . При этом принимается, что тензор скоростей деформируется,  $u$  определяется полем бароцентрических скоростей смесей  $v$ .

Считается, что влияние состава смеси ( $\rho_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$ , где  $\rho$  – плотность) непосредственно проявляется через физико-химические параметры, входящие в уравнение движения и состояния (теплоемкость, коэффициент вязкости, модуль упругости и т.д.).

После общей постановки задачи запишем систему уравнений одномерного движения двухфазных сред в эйлеровых переменных в условиях цилиндрической симметрии:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 v}{\partial x} + \frac{\rho_1 v}{x} = I_{21}; \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 v}{\partial x} + \frac{\rho_2 v}{x} = -I_{21}; \quad (2)$$

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho v \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial \sigma^r}{\partial x} + \frac{\sigma^r - \sigma^\theta}{x}; \quad (3)$$

$$\rho \left( \frac{\partial u_1}{\partial t} + v \frac{\partial u_1}{\partial x} \right) + \rho \left( \frac{\partial u_2}{\partial t} + v \frac{\partial u_2}{\partial x} \right) = \sigma^r \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\sigma^\theta v}{x} - \frac{\partial q}{\partial x} - \frac{q}{x} + I_{12}(u_1 - u_2). \quad (4)$$

Эти уравнения должны быть дополнены уравнениями состояния для внутренних энергий, тензоров напряжений, вектора потока тепла. Кроме того, нужно задать кинетику интенсивности фазовых переходов [15].

Принимая гипотезу локального равновесия в пределах фазы и допуская, что фазы представляют собой двухпараметрическую среду, приходим к выводу [3], что термодинамические функции каждой фазы зависят только от термодинамических параметров состояния (истинной плотности  $\rho_i^{uc}$  и температуры  $T$ ):

$$u_i = u_i(\rho_i^{uc}, T_i); \rho_i = \rho_i(\rho_i^{uc}, T_i); s_i = s_i(\rho_i^{uc}, T_i). \quad (5)$$

При этом справедливо соотношение Гиббса:

$$T_i \frac{d_i s_i}{dt} = \frac{d_i u_i}{dt} + \rho_i \frac{d_i}{dt} + \left( \frac{1}{\rho_i^{uc}} \right). \quad (6)$$

В представленных уравнениях приняты обозначения:  $\rho_1, \rho_2$  – приведенные плотности фаз;  $t$  – время;  $x$  – координата;  $v$  – скорость;  $I_{ij}$  – интенсивность фазовых переходов ( $I_{12} = I_{21}$ );  $u_1, u_2$  – внутренняя энергия;  $\rho$  – плотность смеси;  $d$  – удельный поток тепла;  $\sigma^r, \sigma^\theta$  – тензор напряжений соответственно в радиальном и окружном направлениях;  $T$  – температура;  $p_i$  – давление;  $s_i$  – энтропия.

Внутреннюю энергию смеси можно принять аддитивной по внутренним энергиям фаз.

Одним из важных разделов динамики двухфазных сред в термотрансформаторе является кинетика конденсации. Конденсация может иметь место в том случае, когда парциальное давление пара одного из компонентов смеси в процессе расширения становится больше его давления насыщения.

Теоретический анализ течений смеси с конденсацией, основанный на концепции образования зародышей (нуклеации), был предложен в [6, 18]. Теоретические принципы этих работ, хотя и не охватывают всю совокупность процессов, происходящих при конденсации, согласуются с экспериментом [16].

В работе [22] предложен упрощенный аналитический метод оценки процесса завершения конденсации, и при расчете процесса нуклеации имело место хорошее соответствие экспериментальных и расчетных данных. Но для быстро движущейся среды данные измерений в состоянии покоя неприменимы при оценке поверхностного напряжения, поэтому расчетный метод имеет ограниченную область приложения.

При более глубоком подходе анализируется течение смеси из  $n$  компонентов, один из которых может конденсироваться. В нее входит кинетическое соотношение для функции распределения капель по размерам;

определены значения коэффициентов конденсации  $a_k$  и термической аккомодации  $\beta$ , предложенные для процессов конденсации в [1].

Составной частью процесса конденсации является нуклеация.

Для условий стационарной нуклеации М. Фольмер [2] определяет скорость образования зародышей  $I_v$ :

$$I_v' = bN_1 \frac{3kT}{\sigma} B \exp(-B), \quad (7)$$

где  $N_1$  – число молекул пара в единице объема;  $b$  – количество молекул, конденсирующихся при столкновении с единицей поверхности в единицу времени;  $k$  – постоянная Больцмана;  $\sigma$  – коэффициент поверхностного натяжения жидкости (независящий от радиуса  $r$  капли).

На основе кинетической теории значение  $b$  определяется по формуле:

$$b = \frac{a_k p}{\sqrt{2\pi m_1 kT}}, \quad (8)$$

где  $a_k$  – коэффициент конденсации, равный отношению числа конденсирующихся молекул пара к числу молекул, падающих на поверхность среды;  $m_1$  – масса молекулы.

Безразмерный множитель в уравнении (7) равен:

$$B = \frac{\sigma}{kT} \left( \frac{4\pi V^2}{3} \right)^{1/3} n_{кр}^{2/3}, \quad (9)$$

где  $V$  – объем, занимаемый одной молекулой жидкости;  $n_{кр}$  – число молекул в капле критического размера.

Заметим, что при заданных внешних условиях капли докритического размера находятся в среде ненасыщенного пара и испаряются, а капли сверхкритического размера ( $r > r_{кр}$ ) – в среде пересыщенного пара и, следовательно, растут.

Более точное выражение для скорости образования зародышей и конденсации получили Р. Беккер и В. Деринг. Их расчетная формула отличается от формулы М. Фольмера предэкспоненциальным множителем:

$$I_v'' = \frac{S_1 \sigma}{3kTn_{кр}} \frac{1}{\sqrt{3\pi B}} I_v', \quad (10)$$

где  $S$  – площадь поверхности пара.

В [10, 21] формула Беккера - Деринга уточнена:

$$I_v'' = n_{кр}^{2/3} I_v'. \quad (11)$$

Таким образом, формула для расчета нуклеации, предложенная Френкелем и Зельдовичем, отличается от предложенной Беккером - Дерингом множителем

$$n_{кр}^{2/3}.$$

Одно из характерных явлений, имеющих место в сорбционных термотрансформаторах, – это диффузия агента.

Обозначим локальный коэффициент диффузии через  $D(x)$ , а адсорбционный потенциал как функцию координаты через  $U(x)$ .

Тогда  $F = -dU/dx$  – сила, действующая на молекулу, и  $v$  – скорость ее установившегося движения.

Поток диффузии  $j$  будет равен:

$$j = -D(x) \frac{dC}{dx} + v(x)C, \quad (12)$$

где  $v$  – скорость;  $C$  – концентрация молекул:

$$C = Z \exp \int \frac{v}{D} dx = Z\gamma, \quad (13)$$

где  $\gamma$  – локальный коэффициент сорбции:

$$\gamma = \exp(-U/kT), \quad (14)$$

где  $k$  – показатель адиабаты;  $T$  – температура, К.

Получаем обобщенное уравнение диффузии:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x} D \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} v C, \quad (15)$$

или, если введем  $Z$ ,

$$\gamma \frac{\partial Z}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x} D \gamma \frac{\partial Z}{\partial x}. \quad (16)$$

В случае трех измерений получим

$$\gamma \frac{\partial Z}{\partial \tau} = \text{div}(D \gamma \text{grad} Z). \quad (17)$$

При равновесии отсюда следует:

$$Z = \text{const.}$$

При этом  $Z$  является аналогом температуры,  $C_p$  – теплоемкости и  $D_{cp}$  – коэффициента теплопроводности.

Коэффициент макроскопической диффузии для нестационарного процесса, оказывается равным  $D_1(\overline{1/\gamma})$ , где чертой сверху обозначено усреднение по координате  $x$ .

Под действием внешних сил, к примеру ветра, диффузия происходит в среде, представляющей собой турбулентный поток. В случае установившегося турбулентного движения и стационарных внешних условий уравнение диффузии в потоке имеет вид:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} + u_x \frac{\partial C}{\partial x} + u_y \frac{\partial C}{\partial y} + u_z \frac{\partial C}{\partial z} = f(x, y, z, \tau) + \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D \frac{\partial C}{\partial z} \right). \quad (18)$$

В практических заданиях диффузии можно рассматривать в рамках модели несжимаемой жидкости. В таком случае уравнение диффузии записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial \tau} + \langle u_x \rangle \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial x} + \langle u_y \rangle \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial y} + \langle u_z \rangle \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial z} = \\ & = f(x, y, z, \tau) + \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial x} - \langle u_x C \rangle \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial y} - \langle u_y C \rangle \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial z} - \langle u_z C \rangle \right), \end{aligned} \quad (19)$$

и является уравнением диффузии в турбулентном потоке несжимаемой среды.

Осредненные значения произведений пульсационных составляющих проекций скорости и концентрации согласно гипотезе Фика-Буссинеска считают пропорциональными градиенту осредненной концентрации [4]:

$$\langle u'_\alpha C' \rangle = -D_B \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial \alpha}, \quad (20)$$

где  $\alpha$  – координата, на которую берется проекция пульсационной составляющей скорости;  $D_B$  – величина, называемая коэффициентом турбулентной (вихревой) диффузии и имеющая размерность коэффициента молекулярной диффузии.

Общие закономерности исследуемых явлений можно получить методом математического моделирования. Для описания уравнения диффузии рассмотрим небольшую ячейку размером  $\delta x$  в точке  $x$ . Число молей в такой ячейке равно  $(n_k(x, t)\delta x)$ , скорость изменения числа молей  $\partial(n_k(x, t)\delta x)/\partial t$ .

Это изменение обусловлено суммарным потоком, т.е. разностью между потоком частиц в ячейку и потоком частиц из ячейки.

Суммарный поток в ячейку размером  $\delta x$  равен

$$J_{Nk}(x) - J_{Nk}(x + \delta x) = J_{Nk}(x) - \left( J_{Nk}(x) + \frac{\partial J_{Nk}}{\partial x} \delta x \right) = -\frac{\partial J_{Nk}}{\partial x} \delta x. \quad (21)$$

Суммарный поток равен скорости изменения числа молей:

$$\frac{\partial n_k(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial J_{Nk}}{\partial x}. \quad (22)$$

Закон Фика позволяет записать (22) как дифференциальное уравнение функции  $n_k(x, t)$ :

$$\frac{\partial n_k(x, t)}{\partial t} = D_k \frac{\partial^2 n_k(x, t)}{\partial x^2}. \quad (23)$$

Это уравнение в частных производных называется уравнением диффузии компонента  $k$ . Оно выполняется для произвольной гомогенной системы. Диффузия уничтожает различия в концентрации во всей системе. Однако

следует иметь в виду, что термодинамическая сила, вообще говоря, стремится выровнять химический потенциал, а не концентрацию.

Учитывая, что характеристикой степени устойчивости и неустойчивости систем является энтропия, рассмотрим вопрос производства энтропии.

В линейном режиме стационарные состояния – такие состояния, в которых полное производство энтропии  $P = \int_V \sigma dV$  достигает минимума. Это требование также обеспечивает устойчивость стационарного состояния. Столь общий принцип определения состояния системы отсутствует в далеком от равновесия нелинейном режиме. Состояния, далекие от равновесия, могут быть неустойчивыми и переходить к новым организованным состояниям. Далее будут установлены термодинамические условия, при которых это может происходить. Начнем с некоторых общих свойств полного производства энтропии  $P$ . Прежде всего, рассмотрим эволюцию  $\delta P$ , обусловленную малыми изменениями в силах  $\delta F_k$  и потоках  $\delta J_k$ .

Пусть  $P$  – производство энтропии в неравновесном стационарном состоянии. Так, как  $P = \int_V \sigma dV = \int_V \sum_k F_k J_k dV$ , изменения  $P$  из-за малых изменений  $dF_k$  и  $dJ_k$  можно записать как

$$\frac{dP}{dt} = \int_V \left( \frac{\delta \sigma}{dt} \right) dV = \int_V \left( \sum_k \frac{dF_k}{dt} J_k \right) dV + \int_V \left( \sum_k F_k \frac{dJ_k}{dt} \right) dV \equiv \frac{d_F P}{dt} + \frac{d_J P}{dt} \quad (24)$$

где  $\frac{d_F P}{dt}$  – изменения, вызванные силами  $F_k$ , а  $\frac{d_J P}{dt}$  – изменения под действием потоков  $J_k$ . Теперь могут быть установлены два общих свойства [12, 14, 17]:

1) в линейном режиме

$$\frac{d_F P}{dt} = \frac{d_J P}{dt}, \quad (25)$$

2) для независимых от времени граничных условий, даже вне линейного режима

$$\frac{d_F P}{dt} \leq 0, \quad (26)$$

(в стационарном состоянии  $\frac{d_F P}{dt} = 0$ ).

Величина  $d_F P$  не является дифференциалом функции состояния, и этим она отличается от термодинамических потенциалов, например свободной энергии Гиббса  $G$  [21]. Следовательно, тот факт, что  $d_F P$  может только уменьшаться, не позволяет делать никаких выводов о том, как будет развиваться процесс.

Первое из выше сформулированных свойств, следует из линейных соотношений  $J_k = \sum_i L_{ki} F_i$  и соотношений взаимности Онсагера  $L_{ki} = L_{ik}$  [7, 9].

Приведем отношение Эйнштейна, дающего связь между скоростью движения и коэффициентом диффузии.

Рассмотрим диффузионные потоки. Для однородной системы

$$(\omega_1 - \omega_2) = \frac{L}{TC_1} P_1 M_1, \quad (27)$$

где  $\omega_1, \omega_2$  – скорости движения потоков;  $L$  – феноменологический коэффициент;  $T$  – температура, К;  $C_1$  – концентрация одного компонента;  $P_1$  – производство энтропии одного компонента;  $M_1$  – масса одного компонента.

Коэффициент пропорциональности между относительной скоростью  $\omega_1 - \omega_2$  и силой  $P_1 M_1$  (на 1 моль)

$$P_1 = \frac{L}{TC_1} \quad (28)$$

называется подвижностью компонента  $I$ .

Система на которую не действует внешние силы записывается так [10].

$$C_1(\omega_1 - \omega_2) = \frac{L}{T} \frac{RT}{C_1} \frac{\partial C_1}{\partial x}. \quad (29)$$

Коэффициент пропорциональности между потоком диффузии  $C_1(\omega_1 - \omega_2)$  и градиентом концентрации по определению является коэффициентом диффузии:

$$D = \frac{L}{T} \frac{RT}{C_1}. \quad (30)$$

Сравнивая уравнения (28) и (30), получаем формулу Эйнштейна, связывающую подвижность с коэффициентом диффузии:

$$D = RTB. \quad (31)$$

Это соотношение имеет совершенно общий характер и получается без каких-либо специальных кинетических допущений.

**Результаты исследований и их обсуждение.** Основной характеристикой сорбционных процессов является значение производства энтропии. Определим производство энтропии в пористых средах.

Прежде всего, отметим, что

$$\sum_k dF_k J_k = \sum_k dF_k J_{ki} F_i = \sum_k (dF_k J_{ik}) F_i = \sum_i dJ_i F_i \quad (32)$$

Используя этот результат в определениях  $d_F P$  и  $d_J P$  с очевидностью получаем, что

$$\frac{d_F P}{dt} = \int \left( \sum_k \frac{dF_k}{dt} J_k \right) dV = \int \left( \sum_k F_k \frac{dJ_k}{dt} \right) dV = \frac{d_J P}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dP}{dt}. \quad (33)$$

Общее свойство (34), примененное к (36), дает результат:

$$\frac{dP}{dt} = 2 \frac{d_F P}{dt} \leq 0 \quad - \text{ в линейном режиме} \quad (34)$$

Соотношение (34) еще раз показывает, что отклонение полного производства энтропии  $P$  от стационарного значения, в соответствии с принципом минимума производства энтропии, монотонно уменьшается.

Неравенство  $d_F P \leq 0$  важный критерий эволюции.

Если все флуктуации  $\delta_F P > 0$ , то стационарное состояние устойчиво. В этом случае более целесообразно использовать теорию устойчивости Ляпунова.

Всякий раз, когда флуктуация выводит систему из равновесного состояния, необратимые процессы возвращают ее в равновесное состояние. Тенденция системы достигать экстремума термодинамического потенциала и оставаться в этом состоянии делает систему устойчивой. Именно так устойчивость равновесного состояния системы связана с существованием термодинамических потенциалов.

В отличие от равновесных систем, которые переходят в состояние с минимальной свободной энергией, неравновесные системы могут развиваться непредсказуемо: их состояние не всегда однозначно определяется макроскопическими уравнениями. Это происходит от того, что при одном и том же наборе условий неравновесная система может переходить к разным состояниям. Причиной тому могут быть флуктуации, малые неоднородности, дефекты или другие случайные факторы. К какому состоянию перейдет конкретная система, в общем случае предсказать невозможно. Новые состояния, достигаемые таким образом, являются часто «упорядоченными состояниями», которые обладают пространственно-временной организацией.

В неравновесных системах результатом диффузии могут быть колебания концентраций и пространственных структур; в закрытой же системе те же диссипативные процессы размывают неоднородности и приводят систему к однородному состоянию [10, 21].

Проблема производства энтропии в энергопреобразующих системах анализировалась А. Бежаном [21, 22]. Полученные результаты позволили решить вопрос о минимизации в теплообменных процессах, а также оптимизации экономических показателей [25].

Указанный метод широко используется для анализа процессов тепломассообмена в пористых средах [23, 24].

Исходная система уравнений для осесимметричного и стационарного случая записывается так:

- состояния:

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho u) + \frac{1}{r^n} \frac{\partial}{\partial r}(r^n \rho v) = 0, \quad (35)$$

- движения в направлении  $z$ :

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho u u) + \frac{1}{r^n} \frac{\partial}{\partial r}(r^n \rho v u) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu_e \frac{\partial u}{\partial z}\right) + \frac{1}{r^n} \frac{\partial}{\partial r}\left(r^n \mu_e \frac{\partial u}{\partial r}\right) - f \frac{\mu_e u}{K} - f \frac{\rho F}{\sqrt{K}} |u| u, \quad (36)$$

- движения в направлении  $r$ :

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho u v) + \frac{1}{r^n} \frac{\partial}{\partial r}(r^n \rho v v) = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu_e \frac{\partial v}{\partial z}\right) + \frac{1}{r^n} \frac{\partial}{\partial r}\left(r^n \mu_e \frac{\partial v}{\partial r}\right) - f \frac{\mu_e v}{K} - f \frac{\rho F}{\sqrt{K}} |u| v - \frac{\mu_e v}{r^2} n, \quad (37)$$

где  $z$  и  $r$  – координаты ( $r$  – радиус);  $u$ ,  $v$  – компоненты скорости;  $\rho$  – плотность;  $f$  – параметры, определяющие степень пористости исследуемого тела;  $\mu_e$  – эффективная вязкость;  $K$  – площадь,  $m^2$ ;  $F$  – показатель интенсивности;  $|u| = (u^2 + v^2)^{0,5}$ , м/с.

Уравнения энергии, если пренебречь эффектом диссипации, в силу вязкости, а также теплообменом имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho_e c_e u T) + \frac{1}{r^n} \frac{\partial}{\partial r}(\rho_e c_e r^n v T) = \frac{\partial}{\partial z}\left(k_e \frac{\partial T}{\partial z}\right) + \frac{1}{r^n} \frac{\partial}{\partial r}\left(r^n k_e \frac{\partial T}{\partial r}\right), \quad (38)$$

где  $k_e$ ,  $c_e$  и  $\rho_e$  – соответственно эффективный коэффициент теплопроводности, эффективный коэффициент теплообмена и эффективная плотность.

В безразмерной форме анализируемая система уравнений записывается следующим образом:

- в направлении  $Z$ :

$$\frac{\partial}{\partial Z}(VU) + \frac{1}{R^n} \frac{\partial}{\partial R}(R^n VU) = -\frac{\partial P}{\partial Z} + \frac{1}{R_e} \left[ \frac{\partial}{\partial Z}\left(\frac{\partial U}{\partial Z}\right) + \frac{1}{R^n} \frac{\partial}{\partial R}\left(R^n \frac{\partial U}{\partial R}\right) \right] - f \frac{U}{D_a R_e}; \quad (39)$$

- в направлении  $R$ :

$$\frac{\partial}{\partial Z}(UV) + \frac{1}{R^n} \frac{\partial}{\partial R}(R^n UV) = -\frac{\partial P}{\partial R} + \frac{1}{R_e} \left[ \frac{\partial}{\partial Z}\left(\frac{\partial V}{\partial Z}\right) + \frac{1}{R^n} \frac{\partial}{\partial R}\left(R^n \frac{\partial V}{\partial R}\right) \right] - f \frac{V}{D_a R_e} - f \frac{V}{R_e R^2} n; \quad (40)$$

- уравнения энергии:

$$\frac{\partial}{\partial Z}(U\Theta) + \frac{1}{R^n} \frac{\partial}{\partial R}(R^n V\Theta) = \frac{1}{P_e} \left( \frac{\partial^2 \Theta}{\partial Z^2} \right) + \frac{1}{P_e R^n} \frac{\partial}{\partial R} \left( R^n \frac{\partial \Theta}{\partial R} \right). \quad (41)$$

Диссипация тепловой энергии для осимметричного движения представляется так:

$$\Phi = 2 \left[ \left( \frac{\partial v}{\partial r} \right)^2 + \left( \frac{v}{r} n \right)^2 + \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 \right] + \left[ \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial r} \right]^2. \quad (42)$$

Генерация энтропии в безразмерной форме равна:

$$E_g = \left( \frac{\partial \Theta}{\partial Z} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Theta}{\partial R} \right)^2 + (1-f) Br_m \left\{ 2 \left[ \left( \frac{\partial V}{\partial R} \right)^2 + \left( \frac{V}{R} n \right)^2 + \left( \frac{\partial U}{\partial Z} \right)^2 \right] + \left[ \frac{\partial V}{\partial Z} + \frac{\partial U}{\partial R} \right]^2 \right\} + f \frac{Br_m}{D_a} \left[ \frac{u}{V} \right]^2, \quad (43)$$

В уравнениях (39– 43) приняты обозначения:

$$Z = z/z_{in}; U = u/u_{in}; V = v/v_{in}; R = r/r_{in}; \Theta = (T - T_{in})/T_w - T_{in}; P = p/p_{in};$$

$$\Theta = (T - T_{in})/T_w - T_{in}; P = p/p_{in}; D_a = k/r_0 - \text{число Дарси}; R_{e=0} = \rho \cdot u_{in} \cdot r/\mu - \text{число Рейнолуса}; Br_m - \text{преобразованное число Брикмана}.$$

Особый интерес представляют графические зависимости величины генерации энтропии от относительного радиуса пор при различных значениях числа Дарси.

**Выводы и перспективы.** Приведенный метод анализа сорбционных процессов может быть использован при исследовании явлений, имеющих место в различных видах тепловых насосах (компрессионных, абсорбционных, и их возможных комбинаций), в сорбционных аккумуляторах, в пористых средах. Энтропия служит мерой эффективности в энергетическом отношении исследуемых явлений. Степень производства энтропии существенно зависит от параметра  $\xi = z/r_0$ , где  $r_0$  – исходный радиус пористости. С увеличением значения  $\xi$  генерация энтропии уменьшается асимптотически, приближаясь к нулевому значению.

### **Список литературы**

1. Баханов В.П. Замкнутая система уравнений двухфазной газодинамики при наличии химических реакций и квазистационарной гомогенной конденсации / В.П. Баханов, М.В. Буйков // Тр. УкрНИГМИ. – 1971. – Вып. 99. – С. 21 – 24.
2. Баханов В.П. Об учете трансляционных и вращательных степеней свободы при вычислении работы образования зародыша в теории нуклеации / В.П. Баханов, М.В. Буйков // Укр. физ. журн. – 1969. – Т. 13, Вып. 5. – С. 761 – 766.
3. Дейч М.Е. Газодинамика двухфазных сред / М.Е. Дейч, Г.А. Филиппов. – [2-е изд.]. – М.: Энергоиздат, 1981. – 472 с.
4. Деревич И.В. Стохастическое описание и расчет гидродинамики массопереноса дисперсных турбулентных потоков в каналах / И.В. Деревич // Материалы III междунар. Минского форума «Тепломассообмен. ММФ-96». – 1996. – Т.5. – С. 134 – 141.
5. Драганов Б.Х. К вопросу движения многокомпонентной среды / Б.Х. Драганов // Гидроаэродинамика. – 1965. – Вып. 2. – С. 2 – 6.
6. Зельдович Я.Б. К теории образования новой фазы. Кавитация / Я.Б. Зельдович // Журн. эксперим. и теорет. физики. – 1942. – № 12. – Вып. 11 – 12. – С. 525 – 538.
7. Ляпунов А.М. Собр. соч. Т.2 / А.М. Ляпунов. – М.: Физматгиз, 1956. – 263 с.
8. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред / Р.И. Нигматулин. – М.: Наука, 1987. – 464 с.
9. Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов / И. Пригожин. – М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1960. – 127 с.
10. Пригожин И. Современная термодинамика от тепловых двигателей до диссипативных структур / И. Пригожин, Д. Кандепуди. – М.: Мир, 2002. – 461 с.
11. Рахматулин Р.И. Основы газодинамики взаимопроникающих движений сжимающих сред / Рахматулин Р.И. // ПМИ. – 1956. – Т. 20. №2. – С. 184 – 195.
12. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Т. 1,2 / Л.И. Седов. – М., 1983. – 568 с.
13. Селезнев Л.И. Распределение двухфазных флуктуаций в двухкомпонентной стабильной системе // Изв. АН СССР. Сер. «Энергетика и транспорт». – 1978. – №6. – С. 136 – 140.
14. Телешов С.Т. Вопросы гидродинамики двухфазных сред / С.Т. Телешов // Вестн. Моск. ун-та. Сер. Мат., мех., астр., физ., хим. – 1958. – Вып.2. – С. 127 – 132.
15. Уоллис Г. Одномерные двухфазные течения / Г. Уоллис. – М.: Мир, 1972. – 440 с.
16. Федер Дж. Гомогенное образование зародышей при конденсации / Дж. Федер // Гетерогенное горение – М., 1967. – С. 469 – 476.

17. Франкль Ф.И. Избранные труды по газовой динамике / Ф.И. Франкль. – М.: Наука, 1973. – 712 с.
18. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей / Я.И. Френкель. – М., Л.: Изд-во АН СССР, 1945. – 458 с.
19. Bejan A. Entropy Generation through Heat and Fluid Flow, John Wiley and Sons, New York. – 1982.
20. Bejan A., Tsatsaronis G., Moran M. Thermal Design and Optimization, John Wiley and Sons, New York. – 1996.
21. Gibbs I.W. Elementary Principles in Station Mechanics. – New-York Yale University Press.
22. Gyarmathy G., Meyer H Versuche über den Einfluss der Entspannungsschelligkeit auf die Nebelbildung in übersättigtem Wasserdampf. – VDI-Forschungsheft, 1965. – № 508. – P. 5 – 30.
23. Mohamad A.A. Heat transfer enhancements in heat exchangers fitted with porous media Part 1: constant wall temperature. Int. J. Therm. Sci. 42 (2003). – P. 385 – 395.
24. Morosuk T. Porous media theory for fouling problems in heat and mass transfer in porous media, in: Proceedings of the NATO Advanced Study Institute on Porous Media, 9 – 20 June 2003, Neptun, Romania, 2003. – P. 406 – 416.
25. Olivera De, Schwarzer B., Le Goff P., Tondcur D. Comparison of the entropic, exergetic and economic optima of a heat exchanger, in: D. Kouremenos, G. Tsatsaronis, C. Rakopoulos (Eds.) Proceedings of International Conference ATHENS'91 Analysis of thermal and Energy Systems, 1991. – P. 105 – 116.

### **References**

1. Bakhanov, V.P., Buykov, M.V. (1971). Zamknutaya sistema uravneniy dvukhfaznoy gazodinamiki pri nalichii khimicheskikh reaktsiy i kvazistatsionarnoy gomogennoy kondensatsii [A closed system of equations for two-phase gas dynamics in the presence of chemical reactions and quasi-stationary homogeneous condensation]. Tr. UkrNIGMI, 99, 21 – 24.
2. Bakhanov, V. P., Buykov, M. V. (1969). Ob uchete translyatsionnykh i vrashchatel'nykh stepeney svobody pri vychislenii raboty obrazovaniya zarodysha v teorii nukleatsii [On the account of translational and rotational degrees of freedom in the calculation of the work of nucleation in the theory of nucleation]. Ukr. fiz. Zhurn, 13 (5), 761 – 766.
3. Deych, M. E., Filippov, G. A. (1981). Gazodinamika dvukhfaznykh sred [Gas dynamics of two-phase media]. Moskow.: Energoizdat, 472 s.
4. Derevich, I.V. (1996). Stokhasticheskoye opisaniye i raschet gidrodinamiki massoperenosa dispersnykh turbulentnykh potokov v kanalakh [Stochastic description and calculation of hydrodynamics of mass transfer of disperse turbulent flows in channels]. Materialy III mezhdunar. Minskogo foruma «Teplomassoobmen. MMF-96», 5, 134 – 141.

5. Draganov, B.Kh. (1965). K voprosu dvizheniya mnogokomponentnoy sredy [On the motion of a multicomponent medium]. *Gidroaerodinamika*, 2, 2 – 6.
6. Zel'dovich Ya. B. (1942). K teorii obrazovaniya novoy fazy. Kavitatsiya [To the theory of the formation of a new phase. Cavitation]. *Zhurn. eksperim. i teoret. Fiziki*, 12 (11 – 12), 525 – 538.
7. Lyapunov A. M. (1956). *Sobr. soch. T.2* [Collected Works. Vol.2]. Moskow: Fizmatgiz, 263.
8. Nigmatulin, R. I. (1987). *Dinamika mnogofaznykh sred* Dynamics of multiphase media ]. Moskow: Nauka, 464.
9. Prigozhin, I. (1960). *Vvedeniye v termodinamiku neobratimyykh protsessov* [Introduction to the thermodynamics of irreversible processes]. Moskow: Izd-vo inostr. lit-ry, 127.
10. Prigozhin, I., Kandepudi, D. (2002). *Sovremennaya termodinamika ot teplovikh dvigateley do dissipativnykh struktur* [Modern thermodynamics from thermal engines to dissipative structures]. Moskow: Mir, 461.
11. Rakhmatulin, R. I. (1956). *Osnovy gazodinamiki vzaimopronikayushchikh dvizheniy szhimayushchikh sred* [Fundamentals of gas dynamics of interpenetrating motions of compressible media]. *PMI*, 20 (2), 184 – 195.
12. Sedov, L. I. (1983). *Mekhanika sploshnoy sredy. T. 1,2* [Continuum mechanics. Vol. 1.2]. Moskow, 568.
13. Seleznev, L. I. (1978). *Raspredeleniye dvukhfaznykh fluktuatsiy v dvukhkomponentnoy stabil'noy sisteme* [Распределение двухфазных флуктуаций в двухкомпонентной стабильной системе ], *Izv. AN SSSR. Ser. «Energetika i transport»*, 6, 136 – 140.
14. Teleshov, S.T. (1958). *Voprosy gidrodinamiki dvukhfaznykh sred* [Problems of hydrodynamics of two-phase media]. *Vestn. Mosk. un-ta. Ser. Mat., mekh., astr., fiz., khim.*, 2, 127 – 132.
15. Uollis, G. (1972). *Odnomernyye dvukhfaznyye techeniya* [One-dimensional biphasic flows ]. Moskow: Mir, 440.
16. Feder, Dzh. (1967). *Gomogennoye obrazovaniye zarodyshey pri kondensatsii* [Homogeneous formation of embryos upon condensation]. *Geterogennoye goreniye*, 469 – 476.
17. Frankl', F. I. (1973). *Ozbrannyye trudy po gazovoy dinamike* [Selected Works on Gas Dynamics]. Moskow: Nauka, 712.
18. Frenkel', Ya. I. (1945). *Kineticheskaya teoriya zhidkostey* [Kinetic theory of liquids]. Moskow – Leningrad: Izd-vo AN SSSR, 458 .
19. Bejan, A. (1982). *Entropy Generation through Heat and Fluid Flow*, John Wiley and Sons, New York.
20. Bejan A., Tsatsaronis G., Moran M. *Thermal Design and Optimization*, John Wiley and Sons, New York. – 1996.
21. Gibbs, I.W. *Elementary Principles in Station Mechanics*. – New-York Yale University Press.

22. Gyarmathy, G., Meyer, H. (1965). Versuche über den Einfluss der Entspannungsschwindigkeit auf die Nebelbildung in übersättigtem Wasserdampf. VDI-Forschungsheft, 508, 5 – 30.

23. Mohamad, A. A. (2003). Heat transfer enhancements in heat exchangers fitted with porous media Part 1: constant wall temperature. Int. J. Therm. Sci., 42, 385 – 395.

24. Morosuk, T. (2003). Porous media theory for fouling problems in heat and mass transfer in porous media, in: Proceedings of the NATO Advanced Study Institute on Porous Media, 9 – 20 June 2003, Neptun, Romania, 406 – 416.

25. Olivera, De, Schwarzer, B., Le Goff, P., Tondcur, D. (1991). Comparison of the entropic, exergetic and economic optima of a heat exchanger. D. Kouremenos, G. Tsatsaronis, C. Rakopoulos (Eds.) Proceedings of International Conference ATHENS'91 Analysis of thermal and Energy Systems, 105 – 116.

### **МОДЕЛЮВАННЯ ФАЗОВИХ ПРОЦЕСІВ У СОРБЦІЙНИХ ТЕРМОТРАНСФОРМАТОРАХ**

***Б. Х. Драганов, В. В. Козирський***

**Анотація.** *Метою дослідження була розробка математичної моделі фазових процесів у сорбційних термотрансформаторах.*

*У роботі наведена математична модель гідродинаміки гетерогенних середовищ в ейлерових змінних в умовах циліндричної симетрії. Виконано аналіз досліджень течії багатокomпонентної суміші, один з компонентів якої конденсується.*

*Розглянуто дифузійні процеси в сорбційних термотрансформаторах. Наведений метод аналізу сорбційних процесів може бути використаний при дослідженні явищ, що мають місце в різних видах теплових насосів (компресійних, абсорбційних, і їх можливих комбінацій), в сорбційних акумуляторах, в пористих середовищах.*

**Ключові слова:** *математичне моделювання, гетерогенне середовище, дискретне середовище, термодинамічна рівновага, хімічний потенціал Гіббса, стала Больцмана, макроскопічна дифузія, пористе середовище, ентропія*

### **MODELLING OF PROCESSES IN THE SORPTION PHASE THERMOTRANSFORMERS**

***B. Draganov, V. Kozyrskiy***

**Abstract.** *The aim of the research was to develop a mathematical model of phase processes in sorption thermotransformers.*

*The paper presents a mathematical model of the hydrodynamics of heterogeneous media in Eulerian variables under the conditions of cylindrical symmetry. The analysis of flow studies of a multicomponent mixture is performed, one of the components of which is condensed.*

*Diffusion processes in sorption thermotransformers are considered. The above method of analyzing sorption processes can be used to study the phenomena that occur in various types of heat pumps (compression, absorption, and their possible combinations), in sorption batteries, in porous media.*

**Key words:** *mathematical modeling, heterogeneous environment, discrete medium, thermodynamic equilibrium, the chemical potential of Gibbs, Boltzmann constant, macroscopic diffusion, porous medium, entropy*