УДК 66.011:678.055.001.24

*Е.И. Акулинин, А.А. Ермаков**

РЕШЕНИЕ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ МАТЕРИАЛОВ С высоким внутридиффузионным СОПРОТИВЛЕНИЕМ В СРЕДЕ FLEXPDE

МЕТОД МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ШИРОКО ПРИМЕНЯЕТСЯ ДЛЯ РАСЧЕТА И ВЫЯВЛЕНИЯ СПЕЦИФИЧЕСКИХ ОСОБЕННОСТЕЙ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ СОРБЦИОННО-ДЕСОРБЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К МАТЕРИАЛАМ С ВЫСОКИМ ВНУТРИДИФФУЗИОННЫМ СОПРОТИВЛЕНИЕМ. ОПИСАНИЕ ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ТАКИХ МАТЕРИАЛАХ ОСУЩЕСТВЛЯЕТСЯ ПУТЕМ ПОСТРОЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ, ПРЕДСТАВЛЯЮЩЕЙ СОБОЙ СИСТЕМУ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ, А ОБЩАЯ ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ ПРОТЕКАНИЯ НЕСТАЦИОНАРНОГО СОРБЦИОННО-ДЕСОРБЦИОННОГО ПРОЦЕССА НА ЕДИНИЧНОМ ОБЪЕКТЕ СВОДИТСЯ К СОВМЕСТНОМУ РЕШЕНИЮ УРАВНЕНИЙ ТЕПЛО- И МАССОПРОВОДНОСТИ, КОТОРЫЕ ФОРМУЛИРУЮТСЯ СЛЕДУЮЩИМ ОБРАЗОМ:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla\left(D\left(T, C\right)\mathrm{grad}\left(C\right)\right); \tag{1}$$

---

*Работа выполнена под руководством д-ра техн. наук, проф. С.И. Дворецкого и при финансовой поддержке программы Министерства образования и науки РФ и государственного фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере – "Ползуновские гранты".

$$c(T,C)\rho\frac{\partial T}{\partial t}=\nabla\left(\lambda\left(T,C\right)\mathrm{grad}\left(T\right)\right); \qquad (2)$$

с начальными при $\tau=0$

$$C(r,\ 0)=C_{\text{н}}; \qquad (3)$$

$$T(r,\ 0)=T_{\text{н}} \qquad (4)$$

и граничным условиями при $\tau>0$ и $l=R$

$$\frac{\partial C}{\partial n}(R,\tau)=\beta\left(C_n-C\right); \qquad (5)$$

$$\frac{\partial T}{\partial n}(R,\ \tau)=\alpha\left(T_n-T\right), \qquad (6)$$

где C – концентрация влаги в материале; T – температура; D – коэффициент диффузии; λ – коэффициент теплопроводности; $c(T,C)$ – удельная теплоемкость; ρ – плотность; R – радиус частицы; C_n – равновесное значение концентрации в материале; $T_{\text{г}}$ – температура на границе частицы; α – коэффициент теплоотдачи; β – коэффициент массоотдачи.

Решение этой задачи в аналитическом виде для материалов с большим внутридиффузионным сопротивлением невозможно, ввиду сложной взаимосвязи $D(T,C)$ и $\lambda(T,C)$ [1, 2]. Поэтому используются численные методы, реализующие конечно-разностные схемы расчета [3, 4].

Наиболее эффективным и производительным методом решения подобных задач и реализации конечно-разностных схем расчета, на наш взгляд, является применение специализированных системных пакетов и в частности, FlexPDE.

FlexPDE – программа, предназначенная для построения сценарных моделей решения дифференциальных уравнений методом Ньютона – Рафсона [3]. По сценарию, написанному пользователем, FlexPDE производит операции, необходимые для преобразования системы дифференциальных уравнений в частных производных в дискретную модель для расчета методом конечных элементов, нахождения решения этой системы и представления результатов в графической форме. Таким образом, FlexPDE выполняет роль вычислительной среды, в которой заключен полный набор функций, необходимых для реализации:

- функции редактирования при подготовке сценариев;
- генератора сеток конечных элементов;
- функции подбора конечных элементов при поиске решения;
- графических функций представления результатов решения.

FlexPDE не ограничивает пользователя заранее заданным списком прикладных задач или видов уравнений. Выбор вида дифференциальных уравнений в частных производных полностью определяется пользователем.

Язык сценария позволяет пользователю формализовать систему дифференциальных уравнений в частных производных и структуру области решений в естественном формате. Реализация метода осуществляется в следующем порядке: 1) задаются переменные задачи (температура и концентрация); 2) вспомогательные переменные задачи (плотность, коэффициенты диффузии, теплопроводности, и т.д.); 3) уравнения, описывающие процесс; 4) область решения; 5) формируются начальные и граничные условия; 6) описывается формат вывода результатов расчета.

Пример реализации решения нестационарной задачи сушки единичной частички зерновой культуры [3] во FlexPDE иллюстрирует ниже приведенный программный код (листинг 1).

Листинг 1.

```
TITLE 'cilindr ' {Заголовок печатаемый на графиках}
COORDINATES cartesian3
```

VARIABLES {Переменные задачи} Temp C

DEFINITIONS {Константы и расчетные уравнения} r1=0.002 {Радиус частицы} tempg=45 {температура газа} B1=20 ci=884+(31.5*(C/(C+l)))+(0.7*temp)+(0.279*(C/(C+l))*temp) rom=1375 lambda=0.108+(0.00125*(C/(C+l))) Cr=4.1961*exp(-1.1018*ln(temp)) Dl=(0.000006*temp*temp)-(0.0003*temp)+0.0054 D2=(0.0002*temp*temp)-(0.012*temp)+0.2203
D3=(0.0041*temp*temp)-(0.2234*temp)+4.1108
D = 0.00000000001*((D1*(C*C))-(D2*C)+D3) V=(3.14*rl^л2)*0.004

INITIAL VALUES {Начальные условия} temp=20 C=0.185

EQUATIONS {расчетные уравнения}

temp: div((lambda/(ci*rom))*grad(temp))=dt(temp)

C: *dw(D*grad(C))* = dt(C)

EXTRUSION {Построение области решения}

SURFACE "Bottom" z=0

LAYER "Everything"

SURFACE "Top" z=0.004

BOUNDARIES {Задание граничных условий}

SURFACE "Bottom" natural(C)=Bi*(Cr-C) natural(temp)=BI*(tempg-temp)

SURFACE "Top" natural(C)=Bi*(Cr-C) natura1(temp)=BI*(tempg-temp)

region 1 start (rl,0)

LAYER "Everything" natural(C)=Bi*(Cr-C) natural(temp)=B I *(tempg-temp) arc(center=0,0) angle=360 to finish time 0 to 1800

PLOTS for cycle=l {Вывод промежуточных результатов расчета} contour(C) on Z=0.002 as "Capacity drying (g/g)"

contour (temp) on Z=0.002 as "Temperature drying (C)"

HISTORIES {Вывод кинетики сушки и нагрева частицы}
history(Vol_INTEGRAL (C/V,1)) as "Capacity drying (g/g)"
history(Vol_INTEGRAL (temp/V,!)) as "Temperature drying (C)"
END

В качестве основных выводов по практике применения пакета FlexPDE к решению краевой задачи для материалов с большим диффузионным сопротивлением можно отметить следующее:

- сценарий полностью описывает систему уравнений и область решений, так что нет никакой неопределенности относительно того, какие именно уравнения решаются;
- новые переменные, новые уравнения или новые условия могут легко добавляться в сценарий;
- коэффициенты диффузии и теплопроводности легко задаются в виде функций от концентрации сорбата и температуры материала, в том числе и в случае аномальных зависимостей;
- система дифференциальных уравнений может быть стационарной или зависимой от времени;
- уравнения могут быть линейными или нелинейными;
- может быть задано любое количество геометрических областей для решения с различными свойствами материала;
- сравнение результатов численного эксперимента с экспериментальными данными [2] показывает, что рассогласование не превышает 10 %;

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1 Рудобашта С.П. Массоперенос в системах с твердой фазой. М.: Химия, 1980. 248 с.

2 Дворецкий С.И., Дмитриев В.М., Пестрецов С.И., Кормиль- цин Г.С., Ермаков А.А. Исследование кинетики сушки зерновых культур: Вестник Тамбовского государственного технического университета, 2002. Т. 8. Вып. 4. С. 228 – 240.

3 Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнение математической физики. 6-е изд. М.: Изд-во Моск. гос.

ун-та, 1999. 654 с.
4 Пасконов В.М., Полежаев В.И., Чудов Л.А. Численное моделирование процессов тепло и массообмена. М.: Наука, 1978. 543 с.

КАФЕДРА "ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЕ ОБОРУДОВАНИЕ И ПИЩЕВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ"