УДК 620.178:620.22-419.8

В.І. Іванов [1], ст. наук. співробітник
В.Ю. Зінченко [1], доцент, к.т.н.
В.О. Скачков [1], доцент, к.т.н.
Ю.М. Радченко [2], доцент, к.т.н.

ДЕЯКІ АСПЕКТИ ДИФУЗІЙНОГО ПЕРЕНЕСЕННЯ ТЕПЛОТИ ТА МАСИ У ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ВОГНЕТРИВКИХ СИСТЕМАХ

[1] *Запорізька державна інженерна академія,*
[2] *Національна металургійна академія України, м. Дніпропетровськ*

В соответствии с положениями термодинамики необратимых процессов рассмотрены физико-математические модели диффузионного переноса тепловой энергии и массы компонентов для огнеупорных систем. Выполнено моделирование диффузионного переноса при перекрестных эффектах в данных системах.

Ключевые слова: огнеупорные системы, физико-математические модели, теплота и масса, диффузионный перенос, термодинамика необратимых процессов

Відповідно до положень термодинаміки безповоротних процесів розглянуто фізико-математичні моделі дифузійного перенесення теплової енергії та маси компонентів для вогнетривких систем. Виконано моделювання дифузійного перенесення за перехресних ефектів у даних системах.

Ключові слова: вогнетривкі системи, фізико-математичні моделі, теплота та маса, дифузійне перенесення, термодинаміка безповоротних процесів

The physics-mathematical models for diffusive transfer of thermal energy and mass of components are considered for the heat-resistant systems at accordance with positions of thermodynamics of irreversible processes. The modeling of diffusive transfer is executed at cross effects in these systems.

Keywords: heat-resistant systems, physics-mathematical models, heat and mass, diffusive transfer, thermodynamics of irreversible processes

Вступ. Термодинаміка безповоротних процесів перенесення теплової енергії та маси речовини є особливим науковим напрямком [1-3] із розгляданням рівняння другого принципу термодинаміки як відправної математичної моделі балансу теплової енергії та маси речовини в елементарному об’ємі термодинамічної системи під час її взаємодії з довкіллям.

Термодинамічний процес характеризується змінюванням параметрів стану системи у просторово-часових координатах. Отже, завдання полягає у перетворенні рівняння

$$dS = \frac{1}{T}dU + \frac{1}{T}P\,dV - \frac{1}{T}\cdot\sum_{k=1}^{n}\mu_k\,dM_k \ , \tag{1}$$

де dS – повний диференціал теплового стану термодинамічної системи; dU, dV – відповідно змінювання внутрішньої енергії та об’єму системи; P, T – відповідно тиск і температура у системі; μ_k – хімічний потенціал k-го компонента системи; dM_k – збільшення маси k-го компонента системи, – на субстанційну інтерпретацію, тобто здійснення переходу від повних похідних функцій стану до субстанційних.

Функції стану в рівнянні (1) відносять до одиниці маси системи (M):

$$dS_m = \frac{1}{T} dU_m + \frac{1}{T} P\, dV_m - \frac{1}{T} \cdot \sum_{k=1}^{n} \mu_k \, dM_{k_0} \quad , \tag{2}$$

де $U_m = u/M$; $V_m = V/M$; $\rho_{k_0} = M_{k_0}/M = \rho_k/\rho$; ρ_{k_0} – відносна концентрація k-го компонента в одиниці маси системи; V_m – питомий об'єм системи.

Помножуючи обидві частини рівняння (2) на щільність системи ρ, одержують

$$dS_V = \frac{1}{T} dU_V + \frac{\rho \cdot P}{T} \, dV_m - \frac{1}{T} \cdot \sum_{k=1}^{n} \mu_k \, dM_k \quad . \tag{3}$$

Для безповоротних процесів рівняння перенесення (3) у субстанційній інтерпретації можна записати як

$$\frac{dS_V}{d\tau} = \frac{1}{T} \cdot \frac{dU_V}{d\tau} + \frac{\rho \cdot P}{T} \cdot \frac{dV}{d\tau} - \frac{1}{T} \cdot \sum_{k=1}^{n} \mu_k \cdot \frac{d\rho_k}{d\tau} \quad , \tag{4}$$

де τ – час.

Ілюстрацію методів побудови фізико-математичних моделей безповоротних процесів перенесення подають для термодинамічної вогнетривкої системи на варіантах дифузійного перенесення теплової енергії та маси компонентів, а також за умов перехресних ефектів*.

Дифузійне перенесення теплової енергії. Розглядають закриту термодинамічну вогнетривку систему, яка обмінюється тепловою енергією із довкіллям. Конвективна складова перенесення теплової енергії до системи є відсутньою. Оскільки зазначена система є твердим тілом, то змінюванням її об'єму V можна нехтувати.

Тоді, враховуючи, що $dS_V/d\tau \cong \partial S_V/\partial\tau$ рівняння (4) набуває вигляду:

$$\frac{dS_V}{d\tau} = -\frac{1}{T} \frac{dU_V}{d\tau} \quad . \tag{5}$$

Відомо, що

$$\frac{dU_V}{d\tau} = -\mathrm{div}\, J_U \quad . \tag{6}$$

Рівняння (5) можна переписати як:

$$\frac{\partial S_V}{\partial\tau} = -\frac{1}{T} \cdot \mathrm{div}\, J_U \quad . \tag{7}$$

Використовують відоме співвідношення $\mathrm{div}\left(y \cdot \vec{x}\right) = y \cdot \mathrm{div}\, \vec{x} + \vec{x} \cdot \nabla\, y$, та вважаючи, що $y = -1/T^2 \cdot \nabla\, T$ та $\vec{x} = \vec{J}_U$, одержують

$$\frac{\partial S_V}{\partial\tau} = -\mathrm{div}\left(\frac{\dot{J}_U}{T}\right) + \frac{J_U}{T^2} \cdot \nabla\, T \quad . \tag{8}$$

Відповідно до рівняння Умова

$$\frac{\partial S_V}{\partial\tau} = -\mathrm{div}\, J_S + \theta \quad . \tag{9}$$

Зіставлення рівнянь (8) і (9) дозволяє одержати співвідношення

---

* Роботу виконано за науковим керівництвом доцента, к.т.н. $\boxed{\text{І.Г. Харченка}}$

$$\dot{J}_S = \frac{J_U}{T} \; ; \quad \theta = -\frac{\dot{J}_U}{T^2} \cdot \nabla T \; . \tag{10}$$

Виходячи з теореми про вироблення ентропії

$$\frac{\partial S_V}{\partial \tau} \cdot T = \sum J_i \cdot X_i \; , \tag{11}$$

де $\partial S_V / \partial \tau$ – швидкість вироблення ентропії усередині системи за рахунок дисипативних ефектів безповоротних процесів перенесення теплової енергії; J_i – питомий тепловий потік дифузійного перенесення теплової енергії, що спричинено дією термодинамічної рушійної сили X_i, – можна записати:

$$\frac{\partial S_V}{\partial \tau} \cdot T = -\dot{J}_U \cdot \frac{1}{T} \cdot \nabla T = J_U \cdot X_U \; . \tag{12}$$

Звідки

$$X_U = -\frac{1}{T} \cdot \nabla T \; . \tag{13}$$

На підставі принципу лінійності потік внутрішньої енергії у системі, що розглядають, визначається співвідношенням

$$\dot{J}_U = -\frac{L_U}{T} \cdot \nabla T \; , \tag{14}$$

де L_U – кінетичний коефіцієнт перенесення внутрішньої енергії.

Вводячи позначення $-L_U / T = \lambda$, одержують

$$\dot{J}_U = -\lambda \cdot \nabla T \; . \tag{15}$$

Підставляючи співвідношення (15) до рівняння (6), записують:

$$\frac{\partial U_V}{\partial \tau} = \lambda \cdot \mathrm{div} \nabla T = \lambda \cdot \nabla^2 T \; . \tag{16}$$

Оскільки ентальпія $h_V = U_V + P \cdot V$, то за $dV \approx 0$ $h_V = U_V$ і рівняння (16) має вигляд:

$$\frac{\partial U_V}{\partial \tau} = \lambda \cdot \mathrm{div} \nabla T \; , \tag{17}$$

де $U_V = C_V \cdot T \cdot \rho$, $\tilde{N}_V$ – питома масова теплоємність системи.

За $\rho, C_V \neq f(\tau)$ мають

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\lambda}{C_V \cdot \rho} \cdot \nabla^2 T \; . \tag{18}$$

Оскільки $\lambda / C_V \cdot \rho = a$, диференційне рівняння теплопровідності за дифузійного перенесення теплової енергії для закритої вогнетривкої системи можна подати як [4]

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = a \cdot \nabla^2 T \; . \tag{19}$$

Дифузійне перенесення маси. Розглядають відкриту термодинамічну вогнетривку систему, яка обмінюється із довкіллям масою компонентів. Такий процес обмежують відсутністю конвективної складової процесу перенесення маси у системі. Об'єм системи під час дифузійного перенесення маси V не змінюється, а змінюванням ентальпії у системі, як результатом змінювання концентрації маси, можна нехтувати.

У такому разі рівняння (4) набуває вигляду:

$$\frac{\partial S_V}{\partial \tau} = -\frac{1}{T} \cdot \sum_{k=1}^{n} \mu_k \cdot \frac{\partial \rho_k}{\partial \tau} \; . \tag{20}$$

Процес, що розглядають, обмежують перенесенням одного компонента за $\mu_k = 0$. Тоді із рівняння (19) одержують

$$\frac{\partial S_m}{\partial \tau} = -\frac{\mu}{T} \cdot \frac{\partial \rho}{\partial \tau} \; . \tag{21}$$

Маючи на указі, що $\partial\rho/\partial\tau = -\mathrm{div}\,\dot{J}_{\mathrm{D}}$, можна записати

$$\rho \cdot \frac{\partial S_m}{\partial \tau} = -\frac{\mu}{T} \cdot \mathrm{div}\, J_D \; , \tag{22}$$

де J_D – питомий потік маси.

Використовуючи співвідношення, яке є відомим із векторного аналізу, мають

$$\rho \cdot \frac{\partial S_m}{\partial \tau} = \mathrm{div}\left[\frac{\mu}{T} \cdot \dot{J}_D\right] - \dot{J}_D \cdot \nabla\left(\frac{\mu}{T}\right) . \tag{23}$$

У рівнянні (23) визначають дисипативний член, який відображує кількісну міру безповоротності даного процесу:

$$\theta = -J_D \cdot \nabla\left(\frac{\mu}{T}\right) . \tag{24}$$

З теореми про вироблення ентропії (11) визначають X_D

$$X_D = -T \cdot \nabla\left(\frac{\mu}{T}\right) , \tag{25}$$

Враховуючи, що $\nabla\left(\frac{\mu}{T}\right) = \frac{1}{T} \cdot \nabla\,\mu - \frac{\mu}{T^2} \cdot \nabla\,T$, за $\nabla T \cong 0$ одержують

$$X_D = -\nabla\,\mu \; . \tag{26}$$

На підставі принципу лінійності потік маси речовини у термодинамічній системі подають співвідношенням

$$J_D = -L_D \cdot \nabla\,\mu \; , \tag{27}$$

де L_D – кінетичний коефіцієнт перенесення маси речовини, $L_D = D$, D – коефіцієнт дифузії.

Таким чином, диференційне рівняння масопровідності за дифузійним перенесенням одного компонента у системі має вигляд:

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} = D \cdot \nabla^2\,\mu \; . \tag{28}$$

Для двокомпонентної системи потенціал перенесення маси одного із компонентів визначають різницею хімічних потенціалів перенесення ($\mu_1 - \mu_2$), тобто відносною величиною теплової енергії, яка є необхідною для перенесення маси одного компонента до просторової області, що зайнята іншим компонентом із хімічним потенціалом μ_i.

Тому до формули (24) вводять відповідні змінювання:

$$\theta = -\sum_{k=1}^{2} J_D \cdot \nabla\left(\frac{\mu_1 - \mu_2}{T}\right). \tag{29}$$

Оскільки згідно з рівнянням Гіббса-Дюгема за $P = \text{const}$ і $T = \text{const}$

$$\rho_{10}\, d\mu_1 = \rho_{20}\, d\mu_2 , \tag{30}$$

де ρ_{10}, ρ_{20} – відповідно відносні концентрації першого та другого компонентів у системі зі середньою щільністю ρ, $\rho_{10} = \rho_1/\rho$; $\rho_{20} = \rho_2/\rho$, – то градієнт потенціалу перенесення маси дорівнює [5]:

$$\left[\nabla\left(\mu_1 - \mu_2\right)\right]_{T,P} = \frac{1}{\rho_{20}} \cdot \left(\frac{\partial \mu}{\partial \rho_{10}}\right)_{T,P} \cdot \nabla \rho_{10} . \tag{31}$$

Маючи це на увазі, записують

$$X_{D_{12}} = -\frac{1}{\rho_{20}} \cdot \left(\frac{\partial \mu}{\partial \rho_{10}}\right)_{T,P} \cdot \nabla \rho_{10} . \tag{32}$$

Тоді

$$\dot{J}_{D_{12}} = -\frac{L_{D_{12}}}{\rho_{20}} \cdot \left(\frac{\partial \mu}{\partial \rho_{10}}\right) \cdot \nabla \rho_{10} . \tag{33}$$

Вводять позначення $\left(L_{D_{12}}/\rho_{20}\right)\cdot\left(\partial\mu/\partial\rho_{10}\right) = D_{12}$ та мають

$$J_{D_{12}} = -D_{12} \cdot \rho \cdot \nabla \rho_{10} . \tag{34}$$

Диференційне рівняння масопровідності під час дифузії першого компонента до просторової області, яка зайнята другим компонентом, набуває вигляду [6]:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial \tau} = D_{12} \cdot \nabla^2 \rho_1 . \tag{35}$$

Дифузійне перенесення під час перехресних ефектів. Відповідно до положень термодинаміки безповоротних процесів рушійними силами процесів перенесення теплоти та маси речовини є відповідно:

$$X_q = \frac{\nabla T}{T}, \quad X_D = T \cdot \nabla\left(\frac{\mu_2 - \mu_1}{T}\right). \tag{36}$$

Зазначені термодинамічні сили є векторами та згідно із принципом Кюрі цілком припустиме їх поєднання, тобто сила, що обумовлює потік теплової енергії, може спричинити масовий потік і навпаки.

Отже, потоки теплової енергії та маси речовини за перехресних ефектів визначаються відповідно співвідношеннями:

$$\dot{J}_q = -L_{qq} \cdot \frac{\nabla T}{T} - \sum_{k=1}^{n-1} L_{qk} \cdot T \cdot \nabla\left(\frac{\mu_k - \mu_n}{T}\right); \tag{37}$$

$$\dot{J}_m = -L_{iu} \cdot \frac{\nabla T}{T} - \sum_{k=1}^{n-1} L_{mk} \cdot T \cdot \nabla\left(\frac{\mu_k - \mu_n}{T}\right), \tag{38}$$

де L_{qi}, L_{qk}, L_{mi}, L_{mk} – кінетичні коефіцієнти перенесення.

Використовуючи рівняння (30) та вводячи позначення: $\partial\mu_1/\partial\rho_{10} = \mu_1'$; $L_{qq}/T = \lambda_1$;

$L_{11} \cdot \mu_1' / \rho_{20} = D$; $L_{q1} \cdot \mu_1' / \rho_{20} = \lambda_{q1}$; $L_{iq} / T = D_{1q}$, записують:

$$\dot{J}_q = -\lambda \cdot \frac{\nabla T}{T} - \left(\lambda_{qi} \cdot \nabla \rho_1\right)^* ; \tag{39}$$

$$\dot{J}_D = \left(D_{iiq} \cdot \frac{\nabla T}{T}\right)^{**} - D \cdot \nabla \rho_1 , \tag{40}$$

де * – ефект дифузійної теплопровідності; ** – ефект термодифузії.

Відповідно до рівняння Умова можна переписати:

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = -\frac{1}{C \cdot \rho} \cdot \operatorname{div} \dot{J}_q ; \tag{41}$$

$$\rho \cdot \frac{\partial \rho_{10}}{\partial \tau} = -\operatorname{div} \dot{J}_D . \tag{42}$$

Для зональних розрахунків, тобто за $\lambda = \mathrm{const}$ та $\lambda_{q1} = \mathrm{const}$, рівняння (41) має вигляд:

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\lambda}{C \cdot \rho} \cdot \operatorname{div} \nabla T + \frac{\lambda_{q1}}{C \cdot \rho} \cdot \operatorname{div} \nabla \rho_1 , \tag{43}$$

де $\lambda / C \cdot \rho = a$ – коефіцієнт температуропровідності системи під час перенесення теплової енергії за рахунок градієнта температури; λ_{q1} – коефіцієнт теплопровідності системи за наявності градієнта потенціалів перенесення маси; $\lambda_{q1} / C \cdot \rho = a_{qm}$ – коефіцієнт температуропровідності системи за дифузійним перенесенням маси k-го компонента, коефіцієнт a_{qm} можна подати через співвідношення: $a_{qm} = a / C_{mq}$, де C_{mq} – коефіцієнт питомої масоємності системи за дифузійним перенесенням теплової енергії масою компонентів системи.

Таким чином, диференційне рівняння теплопровідності за наявності перенесення маси (43) можна записати у вигляді

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = a \cdot \nabla^2 T + \frac{a}{C_{mq}} \cdot \nabla^2 \rho_1 . \tag{44}$$

Аналогічно розглядають процес перенесення маси за перехресних ефектів.

Враховуючи вище наведені позначення, із рівняння (42) одержують

$$\rho \cdot \frac{\partial \rho_{10}}{\partial \tau} = D_{iq} \cdot \nabla^2 T + D \cdot \nabla^2 \rho_1 , \tag{45}$$

де D_{1q} – коефіцієнт термодифузії.

У рівнянні (41) виділяють частину дифузійного потоку маси, яка виникає завдяки наявності градієнту температури

$$\dot{J}_{D1} = -D_{1q} \cdot \nabla T . \tag{46}$$

Такий потік може бути поданим як

$$\dot{J}_{D1} = \frac{1}{C_{qm}} \cdot \dot{J}_q , \tag{47}$$

де C_{qm} – коефіцієнт питомої енергоємності системи на перенесення маси.

Тоді з урахуванням того, що $\lambda / C_{qm} = D_{1q}$, можна записати

$$-\operatorname{div} \dot{J}_{D1} = D_{1q} \cdot \nabla^2 T \ . \quad (48)$$

Таким чином, дифузійне перенесення теплової енергії та маси компонентів у термодинамічній вогнетривкій системі за наявності перехресних ефектів можна подати системою диференційних рівнянь [7]:

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = a \cdot \nabla^2 T + \frac{a}{C_{mq}} \cdot \nabla^2 \rho_1 \ ; \quad (49)$$

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial \tau} = D_{iq} \cdot \nabla^2 T + D \cdot \nabla^2 \rho_1 \ . \quad (50)$$

Висновки. Розглянуто фізико-математичні моделі дифузійного перенесення теплової енергії та маси компонентів, а також їх перехресних ефектів для вогнетривкої системи з позицій термодинаміки безповоротних процесів. Вище наведений підхід до аналізу процесів перенесення дозволяє одержати принципово нові вирішення стосовно низки проблемних питань сучасної техніки, зокрема перенесення енергії та маси речовини під час обробки дисперсних порошків тиском [8].

ПЕРЕЛІК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Хаазе*, *Р*. Термодинамика необратимых процессов [Текст] : пер. с нем. ; под ред. А. В. Лыкова. – М. : Мир, 1967. – 544 с. – Библиография в конце каждого раздела.
2. *Кубо*, *Р*. Термодинамика [Текст] : пер. с англ. ; под ред. Д. Н. Зубарева и Н. М. Плакиды. – М. : Мир, 1970. – 304 с. – Библиография в конце каждого раздела.
3. *Лыков*, *А. В*. Теория тепло- и массопереноса [Текст] / А. В. Лыков, Ю. А. Михайлов. – М. : Л. : Энергия, 1963. – 536 с. – Библиогр. : с. 527-535.
4. *Іванов*, *В. І.* Термодинамічні основи математичної моделі дифузійного перенесення теплової енергії [Текст] / В. І. Іванов, В. О. Скачков // Научният потенциал на света-2013 : материалы IX междунар. науч.-практ. конф., 17-25 сентября 2013 г. – София / редкол. : М. Т. Петков (отв. ред.). – София : «Бял ГРАД-БГ» ООД, 2013. – Т. 26. – С. 41-43.
5. *Лыков*, *А. В*. Тепломассообмен [Текст] : справочник / А. В. Лыков. – 2-е изд., испр. и доп. – М. : Энергия, 1978. – 479 с. – Библиогр. : с. 462-477.
6. *Іванов*, *В. І.* Термодинамічні основи математичної моделі дифузійного перенесення маси речовини [Текст] / В. І. Іванов, В. О. Скачков, Ю. В. Мосейко // Wykształcenie i nauka bez granic-2013 : материалы IX междунар. науч.-практ. конф., 07-15 декабря 2013 г. – Przemyśl / редкол. : S. Gótniak (отв. ред.). – Przemyśl : «Nauka i studia», 2013. – Т. 46. – С. 12-15.
7. *Іванов*, *В. І.* Фізико-математична модель дифузійного перенесення теплової енергії та маси речовини за перехресних ефектів [Текст] / В. І. Іванов, В. Ю. Зінченко, Ю. М. Радченко // Наука в інформаційному просторі : матеріали IX міжнар. наук.-практ. конф., 10-11 жовтня 2013 р. – Дніпропетровськ : ПДАБіА, 2013. – Т. 3. – Технічні науки. – С. 83-86.
8. *Kharchenko*, *I. G.* Phenomenological theory of energy and mass transfer for pressure shaping of disperse materials / I. G. Kharchenko // Int. J. Heat Mass Transfer. – 1975. – Vol. 18. – P. 953-959.

Стаття надійшла до редакції 25.10.2013 р.
Рецензент, проф. І.Г. Яковлєва

Текст даної статті знаходиться на сайті ЗДІА в розділі Наука
http://www.zgia.zp.ua