

Профессор В.В. Шитов, аспирант К.В. Гребенников,
(Воронеж. гос. ун-т инж. технол.) кафедра промышленной энергетики,
тел. (473) 255-66-99
доцент П.В. Москалев
(Воронеж. гос. аграр. ун-т) кафедра высшей математики и теоретической механики,
тел. (473) 253-73-71

Перколяционная модель нелинейной фильтрации в пористом карбиде кремния

Сформулирована перколяционная модель процесса нелинейной фильтрации воды в пористом карбиде кремния. Проведено сопоставление результатов моделирования с данными экспериментальных исследований.

In this paper, we formulate a percolation model of nonlinear water filtration in a porous silicon carbide, and compare simulation results with the experimental data.

Ключевые слова: статистическое моделирование, перколяция узлов, нелинейная фильтрация, пористый карбид кремния.

Карбид кремния SiC представляет собой химическое соединение с очень простой структурой и сильными ковалентными связями, что делает его чрезвычайно устойчивым к воздействию неблагоприятных внешних факторов: высокой температуры и давления, а также большинства химически агрессивных веществ. В дополнение к этому необходимо отметить малую плотность, а также высокую теплопроводность и твердость карбида кремния SiC при повсеместно доступном сырье и сравнительно простой технологии получения.

Пористый карбид кремния П-SiC обладает почти столь же высокой устойчивостью к воздействию неблагоприятных факторов, при меньшей эффективной объемной плотности и сравнительно высоких эффективных значениях теплопроводности, твердости и химической устойчивости, что делает его перспективным огнеупорным, теплообменным и фильтрующим конструкционным материалом для современного химического и энергетического машиностроения, металлургической и других отраслей промышленности.

Оценка эффективного гидравлического диаметра образцов П-SiC. Для нахождения эффективного гидравлического диаметра для образцов П-SiC оценим диапазон изменения значений критерия Рейнольдса Re для приведенных в [1, 2] экспериментальных данных.

При изотермической фильтрации несжимаемой жидкости в изотропной пористой среде критерий Рейнольдса определяется отношением:

$$Re = \frac{v_{\phi} \rho_a \beta}{\mu_a \alpha}, \quad (1)$$

где v_{ϕ} — скорость фильтрации, м/с; $\alpha_1 = 1/\kappa_1 = 1,311 \cdot 10^{12} \text{ м}^{-2}$, $\alpha_2 = 1/\kappa_2 = 1,672 \cdot 10^{12} \text{ м}^{-2}$ — вязкостные коэффициенты гидравлического сопротивления для цилиндрических образцов П-SiC при температуре 293 К по данным [1, 2]; β — инерционный коэффициент гидравлического сопротивления.

Заметим, что в данном случае отношение инерционного коэффициента сопротивления к вязкостному β/α имеет размерность длины и играет роль эффективного гидравлического диаметра пористой среды. С другой стороны, как было показано выше, средние значения максимального гидравлического диаметра пор для исследуемых образцов составили $d_{n,1} = 11$ и $d_{n,2} = 10$ мкм, которые также могут играть роль характерных размеров пористой среды. Приравнявая $\beta/\alpha = d_n$, получим оценки для инерционного коэффициента гидравлического сопротивления различных образцов П-SiC: $\beta_1 = 1,442 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$ и $\beta_2 = 1,672 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$.

Тогда с учётом наибольшего наблюдаемого значения скорости фильтрации $v_{\phi} < 6$ см/с верхние оценки для критерия Рейнольдса будут составлять: $Re_1 < 0,656$ и $Re_2 < 0,597$, что явно выходит за пределы линейного режима, сохраняемого при $Re < 0,1$. Действительно, если воспользоваться уравнением Форхгеймера, то перепад давлений на пористой стенке Δp

будет зависеть от скорости фильтрации u_ϕ как

$$\Delta p(v_\phi) = \frac{\Delta d}{2} v_\phi (\alpha \mu_a + \beta \rho_a v_\phi), \quad (2)$$

где $\Delta d/2 = (d_o - d_b)/2 = 3,5$ мм — толщина пористой стенки при внешнем диаметре $d_o = 27$ мм и внутреннем $d_b = 20$ мм.

Графики зависимости (2) при температуре воды 293 К для образца пористого SiC с $d_{n,1} = 11$ мкм (сплошная линия) и для образца с $d_{n,2} = 10$ мкм (штриховая линия) показаны на рис. 1, а. Символами “+” и “x” отмечены положения расчётных точек, соответствующих равноотстоящим друг от друга значениям по оси ординат v , а линиями — аппроксимирующие функции квадратичной регрессии.

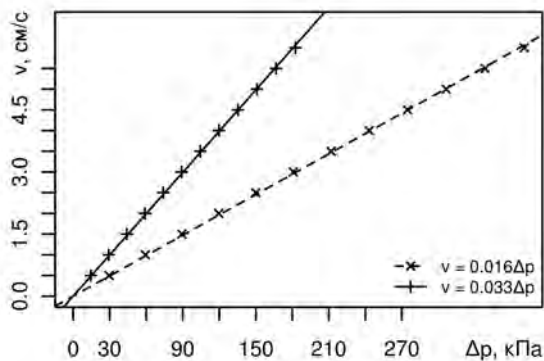
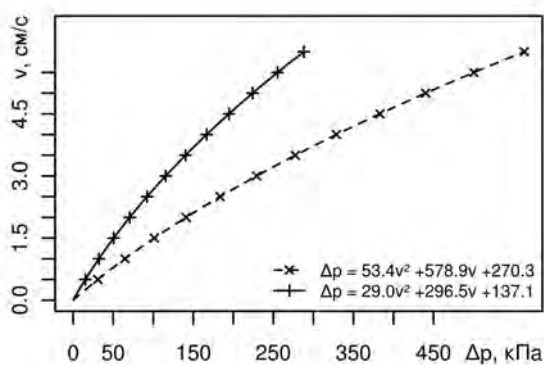


Рис. 1. Применимость линейного закона фильтрации при различных характерных размерах П-SiC: а - $\beta/\alpha = 11$ мкм и $\beta/\alpha = 10$ мкм; б - $\beta/\alpha = 0,838$ мкм

В то же время для эмпирических данных столь сильного нарушения линейного закона фильтрации при $\Delta p > 100$ кПа не наблюдается, что говорит о некорректности использования средних диаметров пор $d_{n,1} = 11$ и $d_{n,2} = 10$ мкм в качестве оценки характерных размеров пористой среды β/α при исследовании фильтрации.

Для получения более адекватной верхней оценки характерного размера П-SiC воспользуемся допущением о сохранении линейного

режима фильтрации при $Re \leq 0,05$ для всех наблюдаемых значений скорости фильтрации $v_\phi \leq 6$ см/с. В таком случае нетрудно определить, что характерный размер $\beta/\alpha \leq 0,838$ мкм. Отметим, что данная оценка почти на порядок меньше ранее используемых значений d_n и приближается к области нанометровых масштабов.

Графики зависимости (2) для $\beta/\alpha = 0,838$ мкм при температуре воды 293 К показаны на рис. 1, б. Приведённый на рис. 1 угловой коэффициент для линейной расчётной модели $b_{\tau,1} \approx 0,033 \cdot 10^{-5}$ м/Па·с менее чем на 3 % отличается от полученного в [1] значения углового коэффициента для эмпирической линейной модели $b_{\tau,1} \approx 0,034 \cdot 10^{-5}$ м/Па·с, что говорит об адекватности найденной оценки эффективного гидравлического диаметра образцов П-SiC.

Распределение относительных частот.

Для построения адекватной вероятностной модели фильтрации в образце П-SiC требуется определить репрезентативные значения для числа узлов решётки и объёма выборки реализаций перколяционного кластера. Размер решётки определяется средними размерами кластера r_y при перколяции вдоль оси ординат для критической доли достижимых узлов $p_c = 0,592746...$ Для оценки величины r_y воспользуемся квадратной перколяционной решёткой с размером, соответствующим по отношению толщины пористой стенки к максимальному диаметру пор: $n_y = l_y/d_n = 3,5 \cdot 10^{-3}/10^{-5} = 350$ узлов. Методика оценки r_y была предложена в работе [3]. Средний размер кластеров, найденный по выборке объёмом $n=1000$ независимых реализаций при $p = p_c$, оказался равен $r_y \approx 137$ узла и составил порядка 40 % от размера использованной перколяционной решётки 350 узлов.

Для определения репрезентативного объёма выборки используем сделанные выше оценки эффективного гидравлического диаметра образцов П-SiC: $\beta/\alpha = 0,838 \approx 0,9$ мкм. Тогда отношение толщины боковой стенки цилиндрического образца к эффективному гидравлическому диаметру П-SiC даёт нам искомое число $n = l_y/\beta = 3,5 \cdot 10^{-3}/0,9 \cdot 10^{-6} \approx 3,9 \cdot 10^3$ реализаций.

В предпосылках наших работ [4, 5] заметим, что правомерность используемого подхода основана на эргодической гипотезе, утверждающей эквивалентность усреднений по индивидуальным реализациям и по их выборке. С учётом этого будем рассматривать состояние каждого узла перколяционной решётки разме-

ром 137×137 узлов как результат усреднения по выборке объемом $n = 3900$ независимых реализаций при различных сочетаниях модельных параметров.

Воспользуемся моделью изотропной перколяции узлов, когда доля достижимых узлов остается постоянной для всей решетки. В качестве стартового множества во всех случаях будем использовать множество достижимых узлов, расположенных вдоль нижней границы решетки. На рис. 2 показаны усредненные по x и y распределения относительных частот $w_y(x)$ и $w_x(y)$ для докритического $p = p_c - 0,02$ и критического $p = p_c$ значений доли достижимых узлов с непроницаемыми (штриховая линия) и периодическими (сплошная линия) граничными условиями. На показанных распределениях хорошо видно, что при докритических долях достижимых узлов $p < p_c$ перколяционные кластеры невелики по размеру и чаще всего ограничены некоторой областью вблизи нижней границы решетки, что проявляется на распределениях $w_x(y)$ в виде асимптотически падающей зависимости.

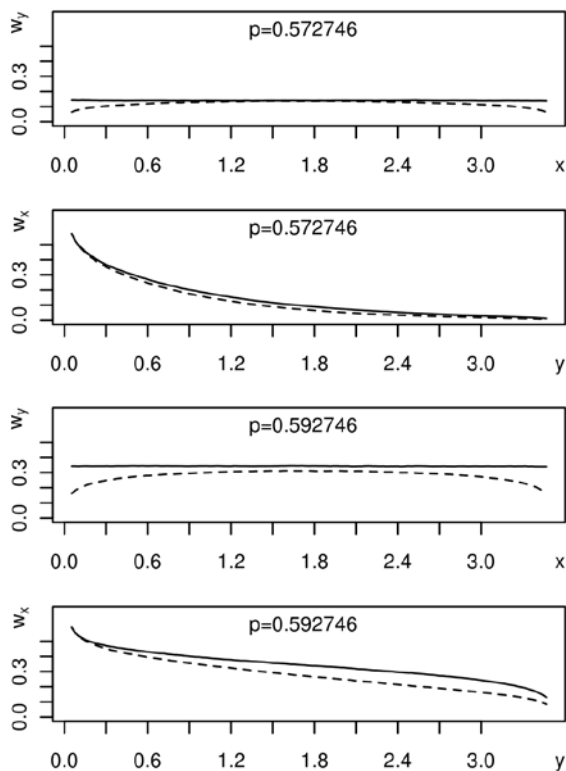


Рис. 2. Усредненные по x, y относительные частоты $w_y(x)$ и $w_x(y)$ при $p \leq p_c$ с непроницаемыми г. у. (штриховая линия) и периодическими г. у. (сплошная линия)

На рис. 2 хорошо видно влияние непроницаемых вертикальных границ решетки, которое выражается в падении относительной

частоты при $x \rightarrow 0$ и $x \rightarrow 3,5$ мм (штриховая линия). Также на графиках можно увидеть, что на пороге перколяции радиус этой окрестности (корреляционная длина) увеличивается, достигая при $p = p_c$ значений, сопоставимых с размером решетки.

Для исключения влияния непроницаемых вертикальных границ на распределение относительной частоты узлов $w(x, y)$ была произведена замена обычных граничных условий при $x = 0$ и $x = 3,5$ мм на периодические. Результаты, полученные после такой модификации, показаны на рис. 2 сплошной линией. На новых распределениях $w_y(x)$ хорошо видно, что средний уровень усредненной относительной частоты в направлении оси x остается постоянным при всех значениях доли достижимых узлов p .

Перколяционное моделирование нелинейной фильтрации. Воспользуемся описанной в наших работах [4, 5, 6] методикой для анализа зависимости массовой фрактальной размерности d выборки кластеров со стартовым подмножеством узлов, расположенным вдоль нижней границы квадратной перколяционной решетки, от её доли достижимых узлов p . Из общих соображений ясно, что формируемые в таких условиях кластеры должны иметь фрактальную размерность d , не превышающую единицы при $p < 1$ и стремящуюся к единице при $p \rightarrow 1$. Но оценка массовой размерности с использованием квадратного покрывающего множества приводит к большим значениям: $1 < d < 2$ при $p < 1$ и $d \rightarrow 2$ при $p \rightarrow 1$. Проблема заключается в том, что при линейном стартовом подмножестве рост кластера ограничен лишь одним направлением, а стандартное покрывающее множество растёт сразу в двух, что и порождает указанное несоответствие. Решение состоит в замене базового элемента покрывающего множества с квадрата на прямоугольник с основанием, ориентированным вдоль стартового множества, и высотой, масштабируемой только в направлении протекания y .

На рис. 3 показана зависимость точечной оценки массовой фрактальной размерности d от доли достижимых узлов p при различных размерах квадратной решетки x . Каждая точка на графике $d(p|x)$ найдена оценкой выборочной совокупности кластеров узлов объемом 1000 реализаций. Линейная регрессионная модель строилась по 12 точкам, равномерно распре-

лённым в логарифмическом масштабе характерных размеров покрывающего множества $\ln r_i$. Вертикальная линия соответствует критическому значению доли достижимых узлов p_c .

Хорошо заметно, что при $p \rightarrow 0$ и $p \rightarrow p_c$ значимость вариаций от размера решётки x для функции $d(p|x)$ быстро падает и в пределе при $n \rightarrow \infty$ зависимость $d(p)$ приобретает кусочно-постоянный характер вида: $d = 0$ при $p < p_c$ и $d = 1$ при $p > p_c$.

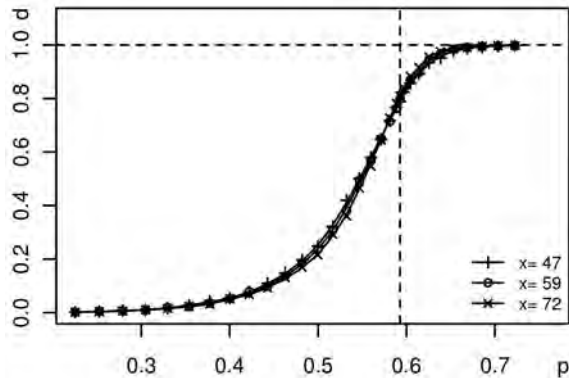


Рис. 3. Точечная оценка массовой фрактальной размерности d от доли достижимых узлов p при различных размерах квадратной решётки x

Анализируя приведённый на рис. 3 график $d(p|x)$, можно заметить, что указанная зависимость при $p < p_c$ носит монотонно возрастающий характер с перегибом в окрестности точки $p \rightarrow p_c$. При этом в окрестности граничных точек при $p \rightarrow 0$ и $p \rightarrow p_c$ функция $d(p)$ линейаризуется, что позволяет говорить о её формальном соответствии с нелинейным законом фильтрации $v(\Delta p)$ в П-SiC при малых перепадах давления Δp . В этом случае доля достижимых узлов перколяционной решётки p будет соответствовать должным образом нормированному градиенту давления в пористой среде Δp , а массовая фрактальная размерность $d(p)$ — нормированной скорости фильтрации $v(\Delta p)$.

В таком случае в качестве аппроксимирующей нелинейный закон фильтрации $v(\Delta p)$ функции можно выбрать аддитивную комбинацию доли достижимых узлов p и зависящей от неё массовой фрактальной размерности $d(p)$:

$$v \approx k_1 d(p) + k_2 p; \quad \Delta p \approx k_3 p, \quad (3)$$

где $k_{1,2,3} = \text{const}$ — размерные постоянные множители, определяемые характеристиками моделируемой пористой среды, фильтрующей жидкости и режимом фильтрации. Распределение $v(\Delta p)$, полученное на основе зависимости (3), показано на рис. 4. Темными точка-

ми обозначены экспериментальные данные из работы [2], а светлыми — расчётные данные, соответствующие зависимости (3) с коэффициентами $k_1 = 0,681 \text{ см/с}$; $k_2 = 0,400 \text{ см/с}$; $k_3 = 135,614 \text{ кПа}$. На рис. 4 видно, что при малых перепадах давлений на стенке $p < 50 \text{ кПа}$ зависимость $v(\Delta p)$ удовлетворительно описывается линейной функцией с очень малым угловым коэффициентом $0,003 \cdot 10^{-5} \text{ м/Па} \cdot \text{с}$ (сплошная линия на рис. 4), а с возрастанием перепада давлений при $p > 60 \text{ кПа}$ — переходит к линейной функции с большим угловым коэффициентом $0,017 \cdot 10^{-5} \text{ м/Па} \cdot \text{с}$ (штриховая линия на рис. 4).

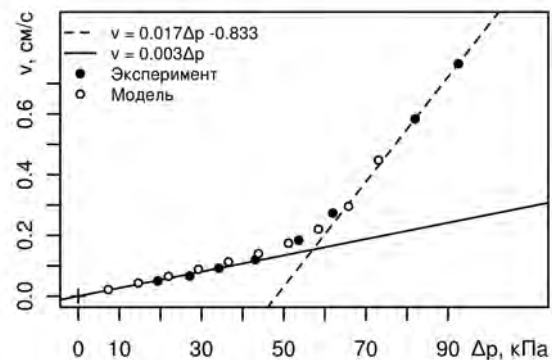


Рис. 4. Сопоставление статистической модели (3) с экспериментальными данными [2]

Заметим, что предельное отклонение модельных точек от указанных прямых не превышает 5 %. Исключение составляет лишь пара из эмпирической и модельной точек в окрестности абсциссы $\Delta p \approx 55 \text{ кПа}$, но и здесь расстояние между самими точками меньше 5 % как по абсциссе, так и по ординате, что говорит о вполне удовлетворительном согласовании результатов моделирования с экспериментом.

С физической точки зрения возможной причиной нарушения линейного закона фильтрации может быть нестабильность положения и суммарного объёма областей захваченного воздуха, возникающая вследствие малой вязкости последнего по сравнению с вытесняющей его водой. Эффективный гидравлический диаметр в двухфазном водовоздушном течении оказывается ниже, поскольку часть порового пространства блокируется захваченным воздухом, что и приводит к росту интегрального гидравлического сопротивления при малых градиентах давления. При возрастании гради-

ента давлений захваченный воздух вытесняется из пористой среды, вследствие чего эффективный гидравлический диаметр увеличивается, а интегральное гидравлическое сопротивление падает. В результате интегральное гидравлическое сопротивление, определяющее среднюю скорость фильтрационного течения в пористой среде, оказывается результатом интерференции местных сопротивлений водовоздушного и водного потоков в пористом карбиде кремния.

С вычислительной точки зрения перколяционный процесс является результатом интерференции динамики двух конкурирующих кластеров: недостижимых и достижимых узлов. При малой доле достижимых узлов доминирующим оказывается кластер недостижимых узлов, а при большой доминирует кластер достижимых узлов. В результате возрастание доли достижимых узлов оказывается эквивалентным возрастанию градиента давлений в пористой среде, поскольку приводит к геометрическому фазовому переходу: от перколяционного кластера недостижимых к перколяционному кластеру достижимых узлов квадратной решётки.

Определённая выше массовая фрактальная размерность показывает как велика будет доля достижимых из данного стартового множества узлов относительно заданной средней доли потенциально достижимых узлов перколяционной решётки, что с физической точки зрения пропорционально скорости фильтрации жидкости и приводит нас к модели (3).

ЛИТЕРАТУРА

1. Gjendal, K. Flow in Microporous Silicon Carbide: an Experimental and Numerical Study [Текст] / K. Gjendal, H.B. Madsen // Master Thesis s031734 and s032056. Department of Micro- and Nanotechnology. DTU Nanotech, 2008. 147 p.
2. Hansen, T.E. Flow in Microporous Silicon Carbide [Текст] / T.E. Hansen // Master Thesis, s011373. Department of Micro- and Nanotechnology. DTU Nanotech, 2007. 98 p.
3. Москалев, П.В. О статистическом оценивании среднего радиуса перколяционного кластера в π -метрике [Текст] / П.В. Москалев // «Информатика: проблемы, методология, технологии»: материалы XII Международной научно-методической конференции. Т.1. Воронеж: ИПЦ ВГУ, 2012. - С.266–267.
4. Москалев, П.В. О распределении выборочных частот узлов перколяционного кластера [Текст] / П.В. Москалев, В.В. Шитов, К.В. Гребенников // «Информатика: проблемы, методология, технологии»: материалы XI Международной научно-методической конференции. Т.2. Воронеж: ИПЦ ВГУ, 2011. - С. 54–58.
5. Москалев, П.В. Статистическое оценивание характеристик перколяционного кластера [Текст] / П.В. Москалев, К.В. Гребенников, В.В. Шитов // Вестник ВГУ. Серия: Системный анализ и информационные технологии. -2011. -№ 1. -С. 29–35.
6. Москалев, П.В. Интервальное оценивание массовой фрактальной размерности для выборки анизотропных кластеров [Текст] / П.В. Москалев, К.В. Гребенников, В.В. Шитов // Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики: сб. трудов международной конференции. -Воронеж: ВГУ, 2011. - С. 271–273.