

УДК 622.867.322

С. Г. ЕХИЛЕВСКИЙ

НЕСТАЦИОНАРНАЯ ЗАДАЧА ДИНАМИКИ СОРБЦИИ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА В РЕГЕНЕРАТИВНОМ ПАТРОНЕ ИЗОЛИРУЮЩЕГО РЕСПИРАТОРА

*Полоцкий государственный университет**(Поступила в редакцию 05.07.2019)*

Предложен альтернативный подход к математическому моделированию рабочего процесса изолирующего дыхательного аппарата при наличии скачка диаметра гранул кислородсодержащего продукта в направлении фильтрации регенерируемого воздуха. В его рамках зависимости, описывающие динамику сорбции углекислого газа однородно снаряженным регенеративным патроном с постоянной концентрацией сорбтива на входе, используются при моделировании процесса с переменным граничным условием, для чего время измеряется количеством поступивших в патрон за время его работы молекул CO_2 . При этом в качестве масштаба такой шкалы длительности процесса используется текущее значение концентрации углекислого газа на входе в патрон. Развитый формализм применен к моделированию динамики сорбции во второй (с уменьшенным диаметром гранул) части патрона, в которую поступает все больше углекислого газа, по мере исчерпания поглощательного ресурса первой части. Показано, что при более низких (чем в однородно снаряженном патроне) пиках мощности источников экзотермического тепла на входах в первую и вторую части регенеративного патрона проскок углекислого газа через весь патрон снижается.

Введение. Математические сложности моделирования природных и технологических процессов связаны с использованием неадекватного инструментария, плохо учитывающего суть изучаемого явления, и неправильным выбором аргументов функций, описывающих его эволюцию. Например, динамика сорбции углекислого газа при регенерации воздуха в изолирующем дыхательном аппарате должна рассматриваться как случайный процесс [1], а не только как задача математической физики [2–4]. Это позволяет подключить мощный дополнительный ресурс в виде основных положений теории вероятностей и информации и полностью уйти от проблемы нестационарных граничных условий. Для этого достаточно отказаться от времени, как абстрактного аргумента, и возраст (функциональное состояние) регенеративного патрона мерить количеством проследовавших в него молекул CO_2 . Реализации таких подходов и обоснованию путей

дальнейшего совершенствования изолирующих дыхательных аппаратов на химически связанном кислороде посвящена данная публикация.

Симметрия плотности вероятности координаты элементарного акта сорбции. Концепция квазистационарного профиля концентрации углекислого газа $W(x, t)$ при моделировании динамики сорбции в регенеративном патроне изолирующего респиратора развита в [5]. В ее рамках, при наличии стационарных граничных условий на входе в патрон

$$W(0, t) = W_0$$

отсчет времени t наступает после замещения находящегося в регенеративном патроне чистого воздуха подлежащим регенерации выдохом. Если пренебречь молекулами CO_2 , связанными при таком замещении, приведенный проскок углекислого газа $\omega = W / W_0$, согласно [5], будет описываться уравнением

$$-\omega'_\xi = e^{-\tau} \left(e^{-\xi} + \int_0^\tau e^\tau d\tau \omega \right), \quad (1)$$

в котором ξ и τ – соответственно обезразмеренные координата и время, связанные с обычными переменными соотношениями

$$\xi = \frac{x\beta}{v}, \quad \tau = \beta\gamma t, \quad (2)$$

где v – скорость фильтрации выдыхаемого воздуха; β и γ – феноменологические постоянные, характеризующие скорость хемосорбции CO_2 и ее ресурс [6], x – расстояние от входа в патрон.

Поскольку координата элементарного акта сорбции молекулы CO_2 есть величина случайная, можно ввести ее плотность вероятности

$$f(\xi, \tau) = -\omega'_\xi(\xi, \tau), \quad (3)$$

приняв во внимание, что $1 - \omega(\xi, \tau)$ – статистическая вероятность поглощения молекулы CO_2 слоем сорбента толщиной ξ .

Продифференцировав (1) по ξ и τ , получим с учетом (3)

$$f_{\xi\tau}'' + f'_\xi + f'_\tau = 0. \quad (4)$$

Уравнение (4) симметрично относительно перестановки аргументов. Поэтому $f(\xi, \tau) = f(\tau, \xi)$ и плотность вероятности можно представить в виде зависимости от суммы и произведения аргументов. Для этого воспользуемся полученным в [5] выражением для приведенной концентрации

$$\omega(\xi, \tau) = e^{-\xi} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi^n}{n!} \left(1 - e^{-\tau} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{\tau^k}{k!} \right) \right]. \quad (5)$$

Используя стандартное разложение для e^{ξ} , преобразуем (5) с целью выделить явно зависимость от $\xi + \tau$

$$\omega(\xi, \tau) = 1 - e^{-\xi-\tau} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi^n}{n!} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{\tau^k}{k!} \quad (6)$$

и подставим (6) в (3)

$$f(\xi, \tau) = -\omega'_{\xi}(\xi, \tau) = -e^{-\xi-\tau} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi^n}{n!} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{\tau^k}{k!} + e^{-\xi-\tau} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi^{n-1}}{(n-1)!} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{\tau^k}{k!}. \quad (7)$$

Приняв во внимание следующие тождества

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi^{n-1}}{(n-1)!} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{\tau^k}{k!} = 1 + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\xi^{n-1}}{(n-1)!} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{\tau^k}{k!} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi^n}{n!} \sum_{k=0}^n \frac{\tau^k}{k!},$$

упростим (7)

$$f(\xi, \tau) = e^{-\xi-\tau} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi^n}{n!} \left(\sum_{k=0}^n \frac{\tau^k}{k!} - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{\tau^k}{k!} \right) \right] = e^{-\xi-\tau} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\xi\tau)^n}{(n!)^2}, \quad (8)$$

отразив явно симметрию $f(\xi, \tau)$ относительно перестановки аргументов.

Правая часть (8) предпочтительнее для численных экспериментов, ибо для обеспечения той же точности требует учета гораздо меньшего числа слагаемых, чем при суммировании полученных ранее двойных рядов [5].

Заметим, что приведенный просок не обладает симметрией относительно перестановки аргументов. Чтобы убедиться в этом, разрешим (3) относительно $\omega(\xi, \tau)$

$$\omega(\xi, \tau) = \int_{\xi}^{\infty} f(\xi, \tau) d\xi$$

и подставим под интеграл правую часть (8). Выполнив в (9) n -кратное интегрирование по частям, получим еще одно выражение для $\omega(\xi, \tau)$

$$\omega(\xi, \tau) = e^{-\xi-\tau} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tau^n}{n!} \sum_{k=0}^n \frac{\xi^k}{k!}, \quad (9)$$

Принцип песочных часов при описании динамики сорбции с нестационарным граничным условием. В начале работы дыхательного аппарата, когда поглотительный ресурс кислородсодержащего продукта практически не тронут и любая отличная от нуля концентрация углекислого газа не является равновесной, продолжительность работы регенеративного патрона определяется лишь количеством поступивших в него молекул CO_2 . Если их нет в фильтруемом воздухе, время с точки зрения регенеративного патрона вообще стоит.

Поэтому, для того чтобы обойти проблему нестационарных граничных условий, для определения функционального возраста патрона можно использовать принцип песочных часов, применяя в качестве аргумента количество молекул CO_2 , поступивших на вход патрона к данному моменту времени

$$N(t) = Q \int_0^t W(0, t) dt, \quad (10)$$

где Q – объемный расход воздуха через регенеративный патрон (постоянный при данном режиме работы аппарата, определяемом уровнем физической нагрузки человека).

Как известно, распределение пробойн при данном числе стрелков не зависит от продолжительности залпа. Поэтому, чтобы использовать полученные для стационарных граничных условий решения (8), (9), будем считать, что концентрация CO_2 на входе в патрон была такой же, как и в последний (текущий) момент, но в течение иного промежутка времени

$$t^*(t) = \frac{N(t)}{QW(0, t)} = \frac{1}{W(0, t)} \int_0^t W(0, t) dt, \quad (11)$$

ибо масштабом при этом является мгновенный расход молекул CO_2 .

Таким образом, проблема неравномерности поступления CO_2 решена пересчетом по (11) второго аргумента ω в каждый момент времени, что при наличии вида $W(0, t)$ означает полное решение задачи

$$W(x, t) = W(0, t) \omega(\xi(x), \tau^*(t)), \quad (12)$$

где

$$\tau^*(t) = \tau(t^*(t)). \quad (13)$$

Рассуждения, с помощью которых получены формулы (11)–(13), не являются строгими, ибо скорость сорбции определяется концентрационным напором [2; 7] и зависит от закона изменения $W(0, t)$ [8]. Однако в начале работы дыхательного аппарата погрешность, в соответствии с изложенным ранее, должна быть небольшой. Чтобы убедиться в этом, мысленно разделим патрон на две части в точке с координатой x . Если на входе в первую часть поддерживается постоянная кон-

центрация CO_2 , то на входе во вторую она медленно растет по закону (9) в связи с истощением ресурса первой части патрона

$$W(x, t) = W_0 \omega(\xi(x), \tau(t)),$$

где $\xi(x)$ и $\tau(t)$ задаются соотношениями (2).

Приняв для второй части патрона x за начало отсчета координаты, вместо (11) получим

$$t^*(t, x) = \frac{N(t, x)}{QW(x, t)} = \frac{1}{W(x, t)} \int_0^t W(x, t) dt \tag{14}$$

или, умножив (14) на $\beta\gamma W(x, t)/W_0$

$$\tau^*(\tau, \xi) = \frac{1}{\omega(\xi, \tau)} \int_0^\tau \omega(\xi, \tau) d\tau, \tag{15}$$

где $\tau^*(\tau, \xi) = \beta\gamma t^*(t, x)$. При этом проскок через регенеративный патрон, согласно (12), будет равен

$$W(L, t) / W_0 = \omega(\eta, \tau) = \omega(\xi, \tau) \omega(\eta - \xi, \tau^*(\tau, \xi)) = \omega(\eta, \tau; \xi), \tag{16}$$

где $\eta = \beta L / v$ – безразмерная длина патрона, связанная с обычной длиной L соотношением (2), а ξ – безразмерная координата точки, разделяющей патрон на две части.

Численные расчеты на основе формул (10), (15), (16) подтверждают (рис. 1), что при малых τ проскок не зависит от ξ , поскольку разделение патрона на части

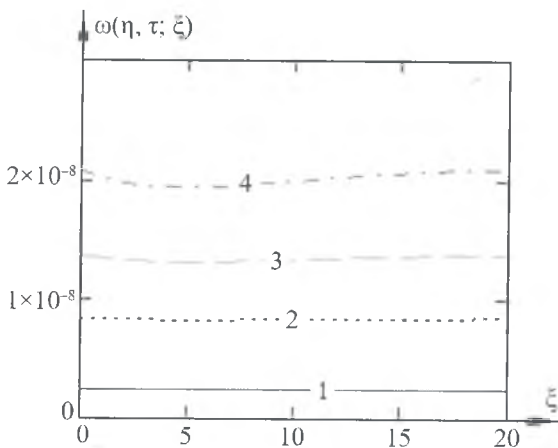


Рис. 1. Зависимость проскока CO_2 через патрон длиной $\eta = 20$ как функция координаты точки его разрезания в различные моменты времени: 1 – $\tau = 0,01$; 2 – $\tau = 0,1$; 3 – $\tau = 0,15$; 4 – $\tau = 0,2$

было чисто формальным. Это значит, что в начале работы дыхательного аппарата формализм (11)–(13), основанный на принципе песочных часов, вполне применим.

Мощность источников экзотермического тепла в патроне со скачком диаметра гранул кислородсодержащего продукта. Хемосорбция углекислого газа кислородсодержащим продуктом на основе надпероксида калия [9; 10] сопровождается значительным выделением экзотермического тепла [2; 11]. Чтобы предотвратить спекание гранул в лобовых (подвергающихся максимальному концентрационному напору) слоях кислородсодержащего продукта, необходимо снизить скорость процесса

$$\beta \rightarrow \alpha\beta \quad (\alpha < 1),$$

для чего можно увеличить диаметр гранул d_0 до значения $d_1 = d_0 / \sqrt{\alpha}$, ибо лимитирующей стадией процесса хемосорбции является диффузия молекул CO_2 внутрь пористых гранул [12], а ее скорость обратно пропорциональна квадрату их диаметра [13]. В результате проскок через первую часть патрона возрастет

$$\omega_1(\xi, \tau) = \omega(\alpha\xi, \alpha\tau), \quad (\xi < \zeta), \quad (17)$$

где ζ – обезразмеренная координата скачка диаметра гранул.

Чтобы компенсировать снижение динамической сорбционной активности всего патрона, гранулы его второй части ($\xi > \zeta$) можно уменьшить

$$d_2 \sim d_0 / \sqrt{\delta}, \quad \beta \rightarrow \delta\beta \quad (\delta > 1). \quad (18)$$

Это не приведет к спеканию второй части, ибо концентрационный напор углекислого газа там снижен работой лобовых слоев. По мере исчерпания их поглощательного ресурса, концентрация CO_2 на входе во вторую часть патрона будет монотонно возрастать. В соответствии с (16), (18), (2) концентрация углекислого газа во второй части патрона ($\xi > \zeta$) будет спадать по закону

$$\omega_2(\xi, \tau) = \omega_1(\zeta, \tau)\omega(\delta(\xi - \zeta), \delta\tau_1^*(\tau, \zeta)), \quad (19)$$

в котором, в соответствии с (15), (17)

$$\tau_1^*(\tau, \xi) = \frac{1}{\omega(\alpha\xi, \alpha\tau)} \int_0^\tau \omega(\alpha\xi, \alpha\tau) d\tau.$$

Сшив зависимости (17), (19) с помощью ступенчатых θ -функций Хевисайда, получим распределение концентрации углекислого газа во всем патроне ($0 < \xi < \eta$)

$$\omega_3(\xi, \tau) = \theta(\zeta - \xi)\omega(\alpha\xi, \alpha\tau) + \theta(\xi - \zeta)\omega(\alpha\zeta, \alpha\tau)\omega(\delta(\xi - \zeta), \delta\tau_1^*(\tau, \zeta)). \quad (20)$$

Продифференцировав (20) по ξ , в соответствии с (3) получим плотность вероятности элементарного акта сорбции в патроне со скачком диаметра гранул

$$f3(\xi, \tau) = \theta(\zeta - \xi)\alpha f(\alpha\xi, \alpha\tau) + \theta(\xi - \zeta)\omega(\alpha\zeta, \alpha\tau)\delta f(\delta(\xi - \zeta), \delta\tau_1^*(\tau, \zeta)),$$

где f и ω как функции своих аргументов задаются полученными для однородно снаряженного патрона формулами (8) и (10) соответственно.

Из уравнения неразрывности

$$\partial U / \partial t = -v\partial W / \partial x,$$

где $U(x, t)$ – объемная концентрация поглощенных молекул CO_2 , и (3) следует, что имеет место равенство

$$\partial U(x, t) / \partial t = \beta W_0 f(\xi(x), \tau(t)).$$

То есть плотность вероятности координаты элементарного акта сорбции пропорциональна мощности источников экзотермического тепла единицы объема кислородсодержащего продукта.

С учетом этого обстоятельства методика определения места и величины скачка диаметра гранул сводится к следующему. Размер гранул на входе в регенеративный патрон следует увеличивать до тех пор, пока пик мощности (рис. 2) не снизится до уровня предотвращения спекания в самом тяжелом режиме эксплуатации дыхательного аппарата (при максимальной физической нагрузке человека). Вычислив соответствующее такому диаметру α , значение δ подберем из условия равенства пиков мощности на входах в первую и вторую части патрона (рис. 2). После чего с помощью (18) вычислим диаметр гранул во второй части патрона. Координата ζ скачка диаметра гранул – минимальная из обеспечивающих не спекание гранул на входе во вторую часть патрона. При этом проскок CO_2 через весь патрон (даже без учета эффекта, обусловленного предотвращением спекания гранул) оказывается ниже, чем в однородно снаряженном патроне (рис. 3).

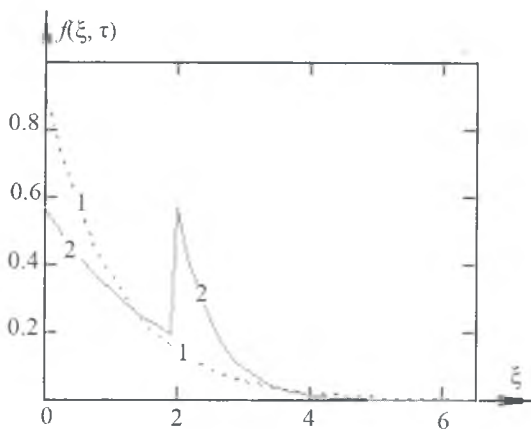


Рис. 2. Плотность мощности источников экзотермического тепла при $\tau = 0,08$: 1 – в однородно снаряженном патроне; 2 – в патроне со скачком диаметра гранул

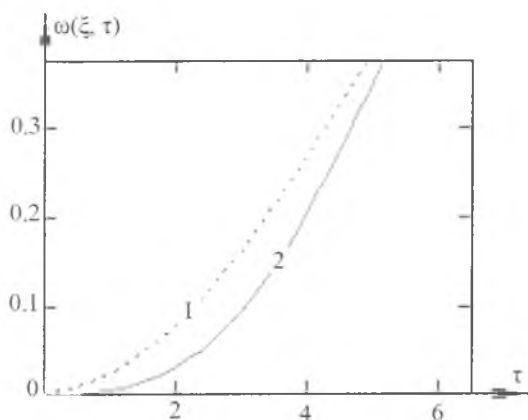


Рис. 3. Проскок углекислого газа через: 1 – однородно снаряженный регенеративный патрон; 2 – патрон со скачком диаметра гранул

Заключение. В работе предложен альтернативный подход к математическому моделированию рабочего процесса изолирующего дыхательного аппарата при наличии скачка диаметра гранул кислородсодержащего продукта в направлении фильтрации регенерируемого воздуха. В его рамках зависимости, описывающие динамику сорбции углекислого газа однородно снаряженным патроном с постоянной концентрацией сорбтива на входе, используются при моделировании процесса с переменным граничным условием, для чего время измеряется количеством поступивших в патрон за время его работы молекул CO_2 . При этом в качестве масштаба такой шкалы длительности процесса используется текущее значение концентрации углекислого газа на входе в патрон. Разработанный формализм применен к моделированию динамики сорбции во второй (с уменьшенным диаметром гранул) части патрона, в которую поступает все больше углекислого газа, по мере исчерпания поглотительного ресурса первой части патрона. Показано, что при более низких (чем в однородно снаряженном патроне) пиках мощности источников экзотермического тепла на входах в первую и вторую части регенеративного патрона, проскок углекислого газа через весь патрон снижается. Полученные результаты могут быть использованы при создании новых и совершенствовании имеющихся изолирующих дыхательных аппаратов на химически связанном кислороде.

Литература

1. Ехилевский С. Г., Мурашкевич О. Н. // Вестн. Полоцкого гос. ун-та. Сер. В. Промышленность. Прикладные науки. 2014. № 13. С. 115–122.
2. Мищенко С. В., Балабанов П. В., Кримиштейн А. А. // Теоретические основы химической технологии. 2014. Т. 48, № 3. С. 328–334.
3. Фёдоров Ю. И. // Изв. Оренбургского гос. аграрного ун-та. 2014. № 3. С. 46–48.
4. Albo S. E., Broadbelt L. J., Snurr R. Q. // AIChE Journal. 2006. Vol. 52, N 11. P. 3679–3687.

5. Пак В. В. и др. // Изв. вузов. Горный журнал. 1994. № 1. С. 54–57.
6. Пак В. В. и др. // Изв. вузов. Горный журнал. 1998. № 11. С. 108–112.
7. Gupta R. et al. // Carbon. 2014. Vol. 66. P. 724–726.
8. Ехилевский С. Г., Ольшаников С. А., Потапенко Е. П. // Изв. вузов. Горный журнал. 2013. № 3. С. 46–53.
9. Gaillard F. Applications du superoxide de potassium a la regeneration sous-marine. Centre de Recherches Appliquees. L'Air Liquide. United states department of the interior, 1992. – 15 p.
10. Диденко Н. С. Регенеративные респираторы для горноспасательных работ. М., 1990. – 158 с.
11. Welty J., Rorrer G. L., Foster D. G. Fundamentals of Momentum Heat and Mass Transfer. Wiley, 2015. – 770 p.
12. Венецианов Е. В. // Изв. АН СССР. Сер. химическая. 1980. № 8. С. 1714–1717.
13. Ехилевский С. Г. и др. // Изв. Донецкого горного ин-та. 2010. № 1. С. 105–113.

S. G. EKHILEVSKIY

THE NONSTATIONARY PROBLEM OF THE DYNAMICS OF SORPTION OF CARBON DIOXIDE IN REGENERATIVE CARTRIDGE OF ISOLATING RESPIRATOR

Summary

The article proposes an alternative approach to the mathematical modeling of the working process of an insulating breathing apparatus in the presence of a change in the diameter of the oxygen-containing product granules in the direction of filtration of the regenerated air. In its framework, the dependences describing the dynamics of carbon dioxide sorption by a uniformly filled regenerative cartridge with a constant concentration of the sorbent at the inlet are used in the simulation of a process with a variable boundary condition, for which time is measured by the number of CO_2 molecules entering the cartridge during its operation. In this case, the current value of the concentration of carbon dioxide at the inlet to the cartridge is used as the scale of such a scale of the process duration. The developed formalism is applied to the modeling of the dynamics of sorption in the second (with a reduced granule diameter) part of the cartridge, which receives more and more carbon dioxide, as the absorption resources of the first part are exhausted. It is shown that at lower peaks of exothermic heat sources at the entrances to the first and second parts of the regenerative cartridge (than in a uniformly loaded cartridge), carbon dioxide leakage through the entire cartridge decreases.