8. Вувуникян Ю. М., Чэнь Ваньли. *Методы прямого обучения глубоких импульсных нейронных сетей* // Материалы Международного конгресса по информатике: информационные системы и технологии. 2022. С. 112–116.

ДИФФУЗИЯ В СМЕСИ ИДЕАЛЬНЫХ ГАЗОВ С УЧЕТОМ ЗАВИСИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ ОТ ЭНТРОПИИ СМЕШЕНИЯ

Н. Н. Гринчик, Г. М. Заяц

Проблеме диффузионного смешения газов посвящено большое количество работ, в которых освещаются различные подходы к исследованию этой проблемы. В данной работе впервые предлагается метод моделирования диффузии в смеси идеальных газов с использованием химического потенциала и энтропии смешения.

Известно, что для идеального газа его химический потенциал имеет вид

$$\mu_i = RT\ln(x_i) + \mu_0(T),$$

где x_i – молярная концентрация i-го компонента смеси, R – газовая постоянная, T – температура, $\mu_0(T)$ – стандартное состояние.

Предполагаем, что поток массы i-го компонента определяется не только его градиентом, но и степенью неупорядоченности смеси, то есть энтропией смешения

$$q_i = -D_i \Delta S_{\text{cm}} x_i \nabla\mu_i, \tag{1}$$

где D_i – определяемый экспериментально коэффициент диффузии i-го компонента смеси; энтропия смешения ΔS_{cm} [1, стр.201]

$$\Delta S_{\text{cm}} = -R\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{M_i}{v_i}\right)\left(\sum_{i=1}^{N} x_i\ln(x_i)\right);$$

$$\nabla\mu_i = R\ln(x_i)\nabla T + \frac{RT}{x_i}\nabla x_i, \tag{2}$$

M_i – масса, v_i – молярная масса i-го компонента смеси.

Полагаем, что смесь газов находится при невысоких давлениях и температурах, в связи с этим ее стандартное состояние не изменяется. Поэтому в дальнейшем градиент стандартного состояния $\nabla\mu_0(T)$ не учитывается. Кроме того, мы не будем учитывать градиенты давления, которые могут возникнуть при смешении легких и тяжелых компонентов смесей газов.

Подставив равенство (2) в соотношение (1), получим выражение для потока массы в единице объема i-го компонента смеси

$$q_i = -D_i \Delta S_{\text{cm}}\, x_i\, R\left(\text{n}(x_i)\nabla T + \frac{T}{x_i}\nabla x_i\right). \tag{3}$$

Введем эффективный коэффициент диффузии

$$D_{i,\text{eff}} = D_i \Delta S_{\text{cm}} R = D_i R^2\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{M_i}{v_i}\right)\left(\sum_{i=1}^{N} x_i\ln(x_i)\right).$$

Уравнение, описывающее одномерную диффузию i-го компонента смеси, имеет вид

$$\frac{\partial x_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D_{i,\text{eff}}\, x_i\, \frac{\partial}{\partial x}\left(T \ln x_i\right)\right). \tag{4}$$

В случае изобарно-изотермическоой диффузии смеси газов формула (3) примет вид

$$q_i = -D_i \Delta S_{\text{cm}} RT \nabla x_i,$$

а уравнение диффузии i-го компонента смеси запишется в виде

$$\frac{\partial x_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D_{i,\text{eff}}\, T \frac{\partial x_i}{\partial x}\right). \tag{5}$$

Таким образом, уравнения (4), (5) могут быть использованы для моделирования диффузии в многокомпонентной смеси идеальных газов с учетом и без учета термодиффузии, соответственно.

Рассмотрим пример моделирования диффузионного процесса смешения двухкомпонентной газовой смеси в одномерной постановке при постоянных давлении и температуре.

Краевая задача. Пусть газы A и B находятся в баллоне длинны l с непроницаемыми стенками и разделены непроницаемой мембраной. Мембрана находится на расстоянии $l/2$ от торцов баллона. В некоторый момент времени мембрану удаляют и идёт диффузионное смешение газов A и B. Для исследования эволюции во времени и зависимости от координаты x молярных концентраций x_1 и x_2 газов A и B требуется решить уравнение

$$\frac{\partial x_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D_{1,\text{eff}} \frac{\partial x_1}{\partial x}\right) \quad \text{при условии} \quad x_1 + x_2 = 1 \tag{6}$$

с граничными

$$\left.\frac{\partial x_1(x,t)}{\partial x}\right|_{x=0} = 0, \qquad \left.\frac{\partial x_1(x,t)}{\partial x}\right|_{x=l} = 0 \tag{7}$$

и начальными условиями

$$x_1(x,0) = \begin{cases} 1, & \text{при} \quad 0 \le x \le l/2, \\ 0, & \text{при} \quad l/2 \le x \le l. \end{cases} \tag{8}$$

Необходимо учитывать, что мембрана не может быть удалена мгновенно. Функцию установления – условие, которое обеспечивает отсутствие разрывов как самой функции, так и её производных на середине $x = l/2$ баллона, представим в виде

$$x_1(l/2) = 1 - \frac{2}{e^{\lambda t} + e^{-\lambda t}}. \tag{9}$$

Феноменологический коэффициент диффузии $D_{1,\text{eff}}$ определяется из экспериментальных данных, может зависеть от масштаба осреднения. Поэтому для решения задачи необходимы соответствующие экспериментальные данные. Задача (6)-(9) решается численно сеточным методом.

Для исследования смешения идеальных газов можно использовать и статистический метод с применением вероятностного подхода, определением средних по большому ансамблю частиц характеристик. Однако данные методы всегда связаны с введением дополнительных гипотез о свойствах частиц, их взаимодействии и с упрощением этих свойств. Во многих случаях не существует даже базы для построения таких методов. В тех же случаях, когда они построены, они обычно не являются эффективными средствами решения задачи в силу чрезмерной сложности соответствующих уравнений.

Предлагаемый подход является альтернативой не только использованию закона Фика, но и энтропийным методам моделирования в химической технике, базирующимся на законе сохранения информационной энтропии [2, 3].

Литература

1. Яворский Б. М., Детлаф А. А., Лебедев А. К. *Справочник по физике для инженеров и студентов вузов* / М. : ОНИКС, 2006.

2. Энтропийные методы моделирования в химической технике : межвуз. темат. сб. науч. тр. / Моск. ин-т хим. машиностроения. Москва : МИХМ, 1981 (вып. дан. 1982).

3. Майков В.П. *О выборе оптимального отбора продуктов при разделении бинарных смесей* // ДАН СССР. 1974. Т.215. №6. С.1421-1423.

СПЕКТРАЛЬНЫЙ МЕТОД ЧЕБЫШЁВА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ДВУМЕРНЫХ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ СО СМЕШАННЫМИ ПРОИЗВОДНЫМИ

Дун Цзинхуэй

Рассмотрим задачу Дирихле для двумерного эллиптического уравнения в прямоугольной области:

$$\frac{\partial}{\partial x}\sigma_{xx}\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}\sigma_{yy}\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial y}\sigma_{yx}\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}\sigma_{xy}\frac{\partial u}{\partial y}=f(x,y) \tag{1}$$

$$(x,y)\in[-1,1]\times[-1,1],\quad u(\pm1,y)=u(x,\pm1)=0, \tag{2}$$

где $\sigma_{xx},\sigma_{yy},\sigma_{xy}=\sigma_{yx}$ — компоненты тензора диффузии (проводимости).

На прямоугольной сетке внутренних узлов:

$$\omega_h=\left\{(x_n,y_k),x_m=y_m=\cos\frac{\pi m}{N+1},n=1,N,k=1,N\right\}, \tag{3}$$

спектральный метод Чебышёва для задачи (1) – (2) приводит к системе линейных алгебраических уравнений [1]:

$$Au=f, \tag{4}$$

матрица которой строится на основе матрицы спектрального дифференцирования Чебышёва $D\in R^{N\times N}$ с учетом граничных условий (2):

$$A=A_{xx}+A_{yy}+A_{xy}+A_{yx}$$

$$A_{xx}=(I\otimes D)\cdot[S_{xx}\cdot(I\otimes D)],\quad A_{yy}=(D\otimes I)\cdot[S_{yy}\cdot(D\otimes I)],$$
$$A_{yx}=(D\otimes I)\cdot[S_{yx}\cdot(I\otimes D)],\quad A_{xy}=(I\otimes D)\cdot[S_{xy}\cdot(D\otimes I)]. \tag{5}$$

Здесь S_{xx}, S_{xy} и т.д. — диагональные матрицы соответствующих коэффициентов задачи, $\otimes$ — символ кронекеровского произведения матриц, $I\in R^{N\times N}$ — единичная матрица.