



ISSN: 2658–5782

Номер 3

2024

МНОГОФАЗНЫЕ СИСТЕМЫ

mfs.uimech.org





Моделирование температурной конвекции в микропробирках при точечном нагреве: зависимость скорости конвекции от угла наклона

А.И. Исламов, К.Р. Набиуллина

Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа

E-mail: nabiullina1998@gmail.com

В настоящей работе приводятся результаты исследования зависимости скорости конвекции жидкости в микропробирке от угла наклона при точечном нагреве. При проведении данного исследования используется ранее подготовленная конечно-объемная сетка конусообразной микропробирки для использования в рамках программного пакета OpenFOAM. Проведены подробный анализ и описание математической модели, а также серия вычислительных экспериментов с использованием встроенного решателя buoyantBoussinesqPimpleFoam.

Важным этапом данной работы является пост-обработка результатов, полученных в ходе проведения серии вычислительных экспериментов. В работе приведено подробное описание особенностей проведенной обработки данных для прямого количественного сравнения результатов, полученных в отдельных экспериментах серии.

В проведенных вычислительных экспериментах были получены количественные данные для выявления зависимости скорости конвекции жидкости в микропробирке от угла наклона при точечном нагреве. На основе полученных результатов выявлено существенное влияние угла наклона на скорость конвекции, что в дальнейшем может послужить решением для проблем оптимизации процессов перемешивания в микромасштабных системах.

Ключевые слова: полимеразная цепная реакция, OpenFOAM, температурная конвекция, приближение Буссинеска, вычислительное моделирование

Modeling of temperature convection in microtubes under point heating: dependence of convection velocity on tilt angle

A.I. Islamov, K.R. Nabiullina

Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russia

E-mail: nabiullina1998@gmail.com

This paper presents the results of a study of the dependence of the convection velocity of a liquid in a microtube on the angle of inclination during point heating. This study utilizes a previously prepared finite-volume mesh of a cone-shaped microtube for use within the OpenFOAM software package. A detailed analysis and description of the mathematical model and a series of computational experiments using the built-in buoyantBoussinesqPimpleFoam solver are performed.

An important step in this paper is the post-processing of the results obtained from a series of computational experiments. The paper provides a detailed description of the features of the data processing carried out for direct quantitative comparison of the results obtained in the individual experiments of the series.

In the conducted computational experiments, quantitative data were obtained to reveal the dependence of the liquid convection velocity in a microtube on the angle of inclination during spot heating. From the obtained results, a significant influence of the inclination angle on the convection velocity was revealed, which can serve as a solution for the problems of optimization of mixing processes in microscale systems in the future.

Keywords: PCR, polymerase chain reaction, OpenFOAM, temperature convection, Boussinesq approximation

1. Введение

Полимеразная цепная реакция (ПЦР) — это самый распространенный метод увеличения объема нуклеиновых кислот. ПЦР широко используется в молекулярной биологии для увеличения количества ДНК в образ-

цах и проведения генетических анализов (секвенирования генома). Этап ускорения играет ключевую роль в процессе ПЦР, поскольку определяет начальные условия для последующей амплификации ДНК. Понимание и оптимизация этого этапа имеют большое зна-

чение для достижения точных и надежных результатов. Впервые ПЦР была описана Нобелевским лауреатом Кэри Маллисом в 1983 году [1].

В 1996 году компания Applied Biosystems представила метод количественной ПЦР с обратной транскрипцией (ПЦР-ОТ) в виде общедоступной технологии, выпустив на рынок прибор 7700 [2]. В то время этот метод стал наиболее точным и чувствительным способом обнаружения и количественного определения нуклеиновых кислот.

В связи с необходимостью оптимизации процесса диагностики ДНК большое внимание уделяется сокращению продолжительности ПЦР. Существует несколько способов ускорения ПЦР. Наиболее широко используемым методом является проведение конвективной ПЦР. В этом случае изменение температуры реакционной смеси достигается за счет перемещения реакционного содержимого под действием тепловой конвекции. Движение жидкости осуществляется за счет температурного градиента, возникающего из-за нагрева и (или) охлаждения некоторых точек микропробирки, в которой осуществляется ПЦР [3].

Первые упоминания о роли конвективных сил в микрофлюидных устройствах для амплификации нуклеиновых кислот встречаются в патентной литературе. В патенте США [2], описывающем кремниевое микрофлюидное устройство для проведения реакций с нуклеиновыми кислотами (включая ПЦР и лигазную цепную реакцию), термоконвекция используется для пассивного охлаждения реакционной смеси у стенок устройства.

В работе [4], посвященной разработке метода нагрева реакционной смеси за счет электролитического сопротивления, также упоминается охлаждение посредством принудительных конвекционных потоков воздуха.

В отечественной литературе [5] также встречаются упоминания о конвективных потоках в контексте проведения ПЦР в массивном термоблоке, однако отмечается их незначительная интенсивность.

Первое описание «истинной» конвекционной ПЦР, где конвективные токи выступают в качестве основной движущей силы, перемешивающей слои жидкости, представлено в патенте [6].

В работе [7] представлена новая концепция проведения ПЦР с использованием конвекционной ячейки, работающей на основе принципа Бенара–Рэлея. Устройство выполнено в виде кубика из оргстекла с вертикальным каналом, имеющим глубину 1,5 см и объем 35 мкл. Нагрев нижней части кубика до 97°C и термостатирование верхней части при 61°C обеспечивают циркуляцию реакционной смеси, имитируя температурные циклы ПЦР. Экспериментально подтверждена работоспособность предложенной системы: за 1,5 часа реакции был получен специфичный ПЦР-продукт, детектируемый методом агарозного гель-электрофореза.

Несмотря на попытки усовершенствования конвекционной ПЦР-системы, предпринятые авторами работы [8], сохранились основные недостатки данного ме-

тода, такие как низкая скорость реакции и сложности с заполнением реакционных сосудов. Время инкубации, необходимое для получения количества целевого продукта, сопоставимого с традиционной ПЦР, составляло около 40 минут.

В работе [9] авторы предложили альтернативный вариант конвекционной ячейки для ПЦР, добившись при этом впечатляющей скорости амплификации — около 10 минут — за счет сокращения времени одного цикла (денатурация–отжиг–элонгация) до 15 секунд. Однако, реакционный сосуд в виде тонкого слоя жидкости между покровными стеклами, герметизированными силиконом, делает данную систему непригодной для широкого применения, особенно в области ДНК-диагностики.

Анализ существующих исследований в области термоконвекции демонстрирует, что формирование конвективных ячеек различных типов неизменно связывалось с созданием температурного градиента.

Так, в большинстве работ нагрев осуществлялся снизу, что обеспечивало вертикальный градиент температур. В других исследованиях воздействие различных температур осуществлялось на боковые стороны системы, что приводило к возникновению горизонтального градиента температур.

Несмотря на значительный прогресс в исследовании конвективных явлений, влияние ориентации температурного градиента относительно вектора гравитации на морфологию и динамику конвективных ячеек остается недостаточно изученным. Традиционно считалось, что нагрев сверху не может привести к развитию термоконвекции в силу стабилизирующего воздействия гравитации.

Однако развитие экспериментальных методов, в частности, использование лазерных систем для локального нагрева жидкости, позволило инициировать конвективные течения и при инвертированном температурном градиенте. Например, фокусировка лазерного излучения в центре емкости с жидкостью приводит к возникновению восходящих конвективных потоков, что нашло практическое применение в реализации конвекционной ПЦР.

Дальнейшие исследования в этом направлении представляют значительный интерес для углубленного понимания механизмов формирования и эволюции конвективных структур в различных условиях.

За прошедшие почти два десятилетия существования конвекционной ПЦР эта реакция доказала свою жизнеспособность и в настоящее время разработаны различные варианты метода с одним, двумя или даже тремя источниками нагрева и разнообразной формой реакционных сосудов.

Исследование проблем ускорения ПЦР остается актуальным и важным даже при наличии уже разработанных средств и методов. Экспериментальные проверки требуют больших трудозатрат, в связи с чем появляется необходимость в предварительном моделировании и проведении расчетов для дальнейших исследований.

В настоящей работе на основе вычислительного моделирования рассматривается предположение, что помимо температурного градиента существенное влияние на время проведения ПЦР может оказывать также и угол наклона микропробирки, то есть изменение геометрии области конвекции относительно вертикали.

2. Температурная конвекция

Существует два вида конвекции: естественная (свободная) и вынужденная. Естественная конвекция возникает из-за разности плотностей жидкости, вызванной ее контактом с поверхностью с другой температурой, что вызывает подъемные (архимедовы) силы. Примерами естественной конвекции являются теплоотдача от стен или крыши здания в безветренный день, конвекция в сосуде с жидкостью, содержащей нагревательную спираль, или теплоотдача от солнечного коллектора в штиль.

Вынужденная конвекция возникает, когда жидкость обтекает поверхность с другой температурой под действием внешней силы. Скорость жидкости при насильственной конвекции выше, чем при свободной, что позволяет передавать больше тепла при том же температурном градиенте. Однако эта увеличенная передача тепла компенсируется энергией, затрачиваемой на поддержание движения жидкости. Вне зависимости от вида конвекции количество тепла, переносимого тепловым потоком, можно вычислить с помощью закона Ньютона–Рихмана:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0.$$

Представления о механизмах теплопереноса в различных средах начали формироваться задолго до возникновения строгих научных теорий. В частности, английский метеоролог Дж. Гадлея (G. Hadley) в 1735 году и российский ученый М.В. Ломоносов в 1753 году выдвигали гипотезы о существовании таких механизмов. Важно отметить, что сам феномен температурной конвекции в природных системах был эмпирически известен еще со времен античности, начиная с трудов Архимеда [10].

Возможно первое практическое применение тепловой конвекции состоялось в середине XVIII века благодаря англичанину полковнику W. Cook, предложившему для обогрева помещений использовать проложенные вдоль стен комнат металлические трубы, в которые подавался водяной пар из специальной емкости, нагреваемой на кухне [11].

На рубеже XIX–XX веков были опубликованы основополагающие труды французского ученого Г. Бенара (H. Benard), посвященные систематическому изучению феномена термоконвекции. Эти работы положили начало активным исследованиям в данной области.

3. Микрофлюидика

Первыми результатами в микрофлюидике (микромасштабные течения) следует считать обнаружение

конвективных ячеек Рэлея–Бенара. Несмотря на то, что Рэлей [12] предсказал формирование конвективных ячеек под действием градиента плотности, вызванного неоднородным нагревом, теоретическое развитие этой концепции, предпринятое Джеффрисом (H. Jeffreys) [13], не получало экспериментального подтверждения до 1935 года [14]. Обнаружение данного феномена не было признано научным сообществом того времени вследствие распространенности ошибочных представлений о конвекции, основанных на авторитетном мнении Рэлея.

Однако микрофлюидика как научное направление, исследующее поведение жидкостей и газов на микроуровне, возникла в 1990-х годах. Современным этапом ее развития стала нанофлюидика [15], изучающая явления в наноразмерных системах, транспорт молекул через наноканалы, взаимодействие с наноструктурами и другие аспекты.

Бурное развитие микрофлюидики привело к появлению инновационных устройств, способных контролировать потоки жидкости и газожидкостные потоки объемом нано- и пиколитров в микроскопических каналах с высокой точностью [16]. Эта технология открывает новые возможности для аналитических методов и разработки устройств с уникальными техническими характеристиками, не имеющими аналогов в макромасштабе.

Впервые возможность ПЦР на микрочипах было продемонстрировано в работах исследовательской группы под руководством А. Нортропа [17]. В 1994 году были опубликованы работы исследователей под руководством Рэмзи, в которых представлены новые методы разделения образцов на микрофлюидных чипах с применением электрофореза и электрохроматографии [18].

Приборы на основе микрофлюидных чипов имеют значительные преимущества по сравнению с традиционными аналитическими системами: экономия реагентов и образцов, высокая чувствительность обнаружения компонентов образца, компактные размеры и низкое энергопотребление.

Микроустройства для проведения ПЦР могут быть разделены на группы в зависимости от принципа и механизма нагревания реакционной смеси (прямое нагревание камеры, нагрев смеси в потоке, конвекционное нагревание, нагревание электромагнитным излучением) и способов перемещения реакционной смеси (стационарные и проточные системы) [19]. К стационарным системам с реакционными камерами, где температура меняется в каждом цикле амплификации, относятся однокамерные чипы [20] и мультикамерные чипы [21].

4. Математическая модель

Основной причиной тепловой конвекции является изменение плотности среды в зависимости от температуры. В большинстве случаев изменения плотности невелики, и их можно учитывать только в члене, отвечающем за подъемную силу. Для вывода уравнений тепло-

вой конвекции используется уравнение Навье–Стокса, дополненное уравнениями теплопроводности, закона сохранения энергии и уравнением состояния. Этот подход дает систему нелинейных уравнений в частных производных, которую можно найти во многих источниках, например, в [23]. Полученные уравнения называются уравнениями тепловой конвекции в приближении Буссинеска [24] и при описании конвекции в несжимаемой жидкости являются наиболее популярной моделью.

В литературе существуют разногласия в определении термина «приближение Буссинеска» из-за того, что уравнения конвекции были выведены Ж. Буссинеском только для случая уменьшения плотности жидкости от температуры. Например, Моллендорф и Джен (J.C. Mollendorf, K.H. Jahn) [25] говорят о двух аспектах приближения Буссинеска: первый подразумевает незначительные изменения плотности, а второй — линейную зависимость плотности от температуры.

В исследовании Гебхарта и соавторов (B. Gebhart et al.) [26] за приближение Буссинеска принимается система уравнений, описывающая линейную зависимость плотности от температуры. В отечественной литературе приближение Буссинеска определяется как любые приближения, в которых изменения плотности учитываются только в члене, отвечающем за подъемную силу, который может включать в себя не только температуру, но и, например, давление [27], ускорение свободного падения во времени [23] и другие факторы [28].

В потоках, сопровождающихся теплопередачей, свойства жидкости обычно зависят от температуры. Вариации могут быть незначительными, но все же являться причиной движения жидкости. Если изменение плотности невелико, то плотность можно рассматривать как постоянную в нестационарном и конвективном членах и как переменную только в поле внешних сил (гравитационном члене).

В присутствии силы тяжести тела уравнения сохранения массы и импульса имеют вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0; \tag{1}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \\ & + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot (2\mu_{eff} \boldsymbol{\tau}) - \nabla \left(\frac{2}{3} \mu_{eff} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \right), \tag{2} \\ & \boldsymbol{\tau} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \cdot \mathbf{u})^T), \end{aligned}$$

где \mathbf{u} — вектор скорости; p — давление; ρ — плотность жидкости при нормальных условиях (базовая плотность); \mathbf{g} — вектор ускорения свободного падения; μ_{eff} — сумма молекулярной и турбулентной вязкостей; $\boldsymbol{\tau}$ — тензор скорости деформации.

Если и плотность, и гравитационное ускорение постоянны, гравитационная сила может быть выражена через градиент:

$$\rho \mathbf{g} = \nabla(\rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}),$$

где \mathbf{r} — радиус-вектор (координата).

Таким образом, градиент давления и сила тяжести могут быть объединены в следующее уравнение:

$$\nabla p - \rho \mathbf{g} = \nabla(p - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}).$$

Теперь рассмотрим случай, когда плотность непостоянна. Приближение Буссинеска справедливо, когда изменение плотности, вызванное изменением температуры, невелико.

В потоках, сопровождающихся теплопередачей, свойства жидкости обычно зависят от температуры. Вариации могут быть небольшими, но все же являться причиной движения жидкости. Если изменение плотности невелико, то плотность можно рассматривать как постоянную в нестационарном и конвективном членах и как переменную только в гравитационном члене. Это и называется приближением Буссинеска [24].

Здесь и далее обозначим эталонную плотность через ρ_0 при эталонной температуре T_0 . Если мы заменим ρ на ρ_0 в уравнениях (1) и (2), то получим уравнение неразрывности

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

и уравнение сохранения импульсов

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_0 \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \nabla (2\mu_{eff} \boldsymbol{\tau}). \tag{3}$$

Затем разделим обе части уравнения (3) на ρ_0 и получим:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla (\mathbf{u} \mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho_0} (\nabla p - \rho \mathbf{g}) + \nabla \cdot (2\mu_{eff} \boldsymbol{\tau}).$$

Здесь плотность ρ в гравитационном члене вычисляется как линейная функция температуры:

$$\begin{aligned} \rho & \approx \rho_0 [1 - \beta(T - T_0)], \\ \beta & = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} \approx -\frac{1}{\rho_0} \frac{\rho - \rho_0}{T - T_0}, \end{aligned}$$

где β — коэффициент температурного расширения; T_0 — значение температуры для нормальных условий, при которых плотность жидкости имеет значение ρ_0 ; температура T вычисляется из уравнения теплопроводности с учетом конвекции:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} T) = \nabla \cdot (\kappa \nabla T), \tag{4}$$

при этом диффузным членом с коэффициентом теплопроводности κ можно пренебречь.

С точки зрения реализации члены градиента давления и силы тяжести переставляются в следующем виде:

$$\begin{aligned} & -\nabla \left(\frac{p}{\rho_0} \right) + \left(\frac{p}{\rho_0} \right) \mathbf{g} = \\ & = -\nabla \left(\frac{p - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}}{\rho_0} + \frac{\rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}}{\rho_0} \right) + \left(\frac{p}{\rho_0} \right) \mathbf{g} = \\ & = -\nabla p_{rgh} - (\mathbf{g} - \mathbf{r}) \nabla \left(\frac{p}{\rho_0} \right), \\ & p_{rgh} = (p - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}). \end{aligned}$$

Откуда вытекает уравнение

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla(\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p_{rgh} - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{r})\nabla\left(\frac{p}{\rho_0}\right) + \nabla \cdot (2\mu_{eff}\boldsymbol{\tau}). \quad (5)$$

В решателе OpenFOAM buoyantBoussinesqPimpleFoam решаются уравнения (4) и (5). Данные уравнения описывают процессы, протекающие при тепловой конвекции в микропробирках, которые были смоделированы по результатам проведенного ранее исследования.

Схема расчетной области с указанием точек приложения нагрева и охлаждения приведена на рис. 1. Данная схема нагрева/охлаждения задана с учетом экспериментов, описанных в работах [29–31]. На рисунке также указаны основные параметры вычислительной области: D — диаметр моделируемой части пробирки; r — радиус закругления дна; h — высота моделируемой части пробирки без учета дна; H — общая высота.

Граничные условия для рассматриваемой задачи заданы в достаточно простом виде. По всем границам принято наличие твердой стенки, что означает применение граничного условия прилипания (вектор скорости равен 0):

$$\nabla T \cdot \mathbf{n} = 0.$$

Для температуры выделены две диагонально расположенные граничные области в нижней и верхней частях пробирки, в которых температура задается как величина с постоянным значением: область нагрева при $T_{hot} = 400$ К и область охлаждения $T_{cold} = 300$ К, начальная температура принята равной 300 К. На остальных границах для температуры задан нулевой градиент или «условие протекания»: $\vec{v} = 0$.

При такой постановке задача характеризуется безразмерными числами: число Рейнольдса — $Re \approx 10$, число Рэлея — $Ra \approx 10^6$, число Нуссельта — $Nu \approx 1.7$.

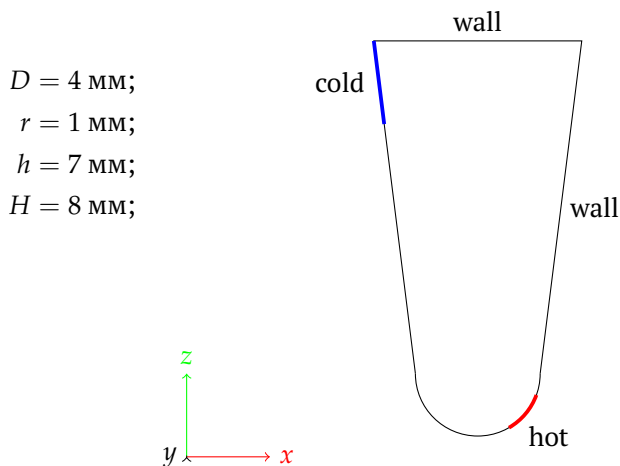


Рис. 1. Схема вычислительной области, представленная в сечении Oxz

5. Инструменты вычислительного моделирования

В качестве инструмента для решения поставленной задачи выбран пакет прикладных программ OpenFOAM (Open Source Field Operation And Manipulation) [32]. OpenFOAM — это доступная система для численного моделирования задач механики сплошных сред. Базовая версия пакета OpenFOAM поставляется с множеством программных решений, вспомогательных инструментов и библиотек. Помимо программных решений пакет включает в себя широкий спектр утилит, позволяющих генерировать и преобразовывать расчетные сетки, устанавливать значения полей и многое другое.

OpenMPI (Open Message Passing Interface) — это стандарт для передачи сообщений и параллельных вычислений, который обеспечивает возможность взаимодействия между процессами, работающими на различных узлах кластера или на одном компьютере, и представляющий собой набор библиотек и инструментов для разработки параллельных приложений, которые могут эффективно использовать вычислительные ресурсы нескольких узлов [33].

Принцип работы OpenMPI включает в себя следующие аспекты:

1. Инициализация и завершение.
2. Создание коммутаторов.
3. Обмен сообщениями.
4. Синхронизация.
5. Управление ресурсами.

Это основные принципы работы OpenMPI, которые позволяют разработчикам создавать параллельные приложения, эффективно использующие возможности распределенных и многопроцессорных систем.

С помощью встроенной утилиты decomposePar [33] осуществили декомпозицию сетки и полей. В нашем случае запуск производился на локальной машине с многоядерным CPU 11th Gen Intel(R) Core(TM) i7-11700 @ 2.50GHz с 8 ядрами, но в конфигурации мы выставили использование только 4 ядер CPU. По итогу получили 4 подкаталога с номерами процессора. В каждом каталоге содержится каталог времени, содержащий описание фрагментированных (декомпозированных) полей и каталог с описанием декомпозированной сетки.

Далее проведена постобработка данных. По окончании вычислений собираем (агрегируем) данные воедино для последующей обработки в нормальном режиме и просмотра решений в среде paraFoam. Восстановление решения осуществляется при помощи утилиты reconstructPar [33].

Использование пространственной декомпозиции позволяет пропорционально ускорять вычисления, производимые в рамках пакета OpenFOAM, что положительно сказывается при моделировании «тяжелых» задач динамики сплошной среды.

6. Результаты и обсуждение

Проведена серия вычислительных экспериментов с использованием встроенного решателя buoyantBoussinesqPimpleFoam, конечно-объемной сетки и граничных условий. В качестве начальных условий в каждом расчете использовалась неподвижная жидкость при постоянной температуре $T_0 = 300$ К. Расчеты сделаны при разных направлениях вектора ускорения свободного падения (угол наклона микропробирки) от 0° (ось пробирки вертикальна) до 90° (ось пробирки горизонтальна). При этом поворот микропробирки осуществляется таким образом, что зона нагрева располагается внизу закругления острого конца пробирки, а зона охлаждения — наверху противоположного конца.

Результаты моделирования продемонстрированы на рис. 2–4.

На рис. 2 показаны линии тока для вертикально размещенной микропробирки. Следует отметить, что аналогичная картина течения может быть показана и для наклоненной пробирки. Некоторое отличие в интенсивности линий тока на рисунке не слишком различимо. Однако при некоторых положения пробирки картина течения кардинально изменяется, как это показано на рис. 3. Такое распределение вихрей возникает при наклоне приблизительно 11° . На рисунке цвет линий характеризует температуру жидкости, а длина — скорость.

После проведения расчета необходимо было обработать данные для дальнейшего анализа смоделированного процесса, а также исследования зависимости скорости конвекции жидкости в микропробирке от угла наклона при точечном нагреве.

В качестве инструмента для постобработки была использована встроенная утилита OpenFOAM — postProcess. Данная утилита использована для вычисления модуля вектора скорости в каждой ячейке сетки, для получения этих данных был использован параметр — mag(U). Также для дальнейшего анализа нам потребовалось получение значения объема ячеек, для этого был использован параметр writeCellVolumes.

После запуска следующей утилиты в качестве решения получили список/каталог по временным меткам (от 0 до 1.1 с шагом 0.01), внутри каждого каталога находился файл с полученными данными модуля вектора скорости в каждой ячейке сетки и объемом. Скорость соотносится с объемом по порядку.

Для анализа интенсивности перемешивания жидкости, важного для задачи ускорения ПЦР, нами введено понятие коэффициента перемешивания ξ . Данный коэффициент рассчитывается из результатов моделирования как сумма произведений объема и значения модуля скорости для всех конечных объемов расчетной области. На рис. 4 представлена зависимость $\xi(\alpha)$, то есть коэффициента перемешивания от угла наклона микропробирки:

$$\xi(\alpha) = \sum_1^n (V_i \cdot v_i),$$

где ξ — коэффициент перемешивания; α — угол наклона пробирки; V_i — значение объема в i -ой ячейке; v_i — значение модуля вектора скорости в i -ой ячейке; n — количество ячеек сетки.

Исходя из полученных результатов видно, что максимальная оценка скорости тепловой конвекции достигается при угле наклона $\alpha = -40^\circ$. Кроме того, приведенная выше зависимость, представленные на рис. 4, согласуется с результатами исследований, полученных в ходе реального эксперимента [3].

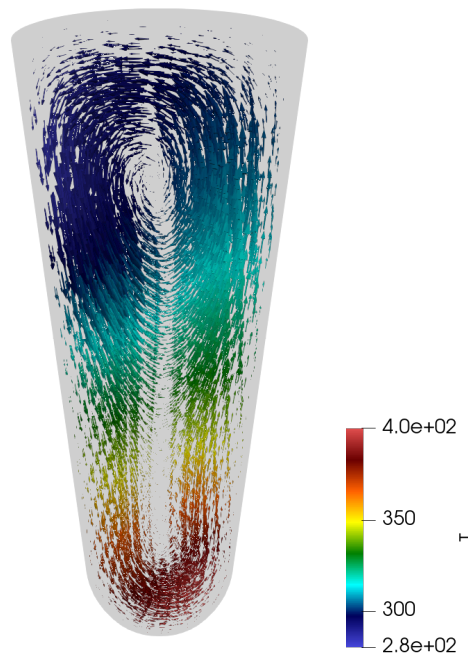


Рис. 2. Визуализация линий тока для случая, когда пробирка не наклонена

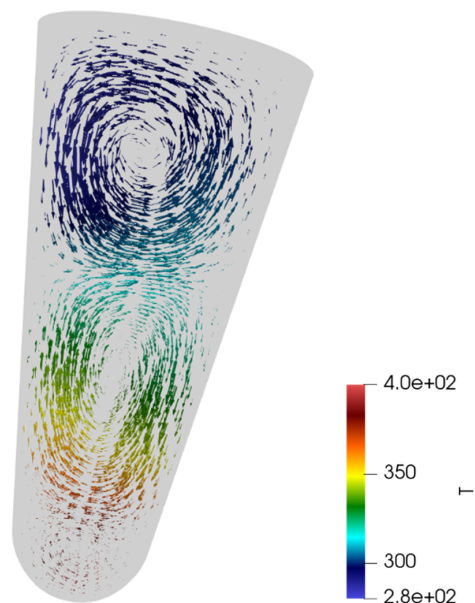


Рис. 3. Визуализация линий тока для случая, когда пробирка в наклонном положении с углом наклона 11°

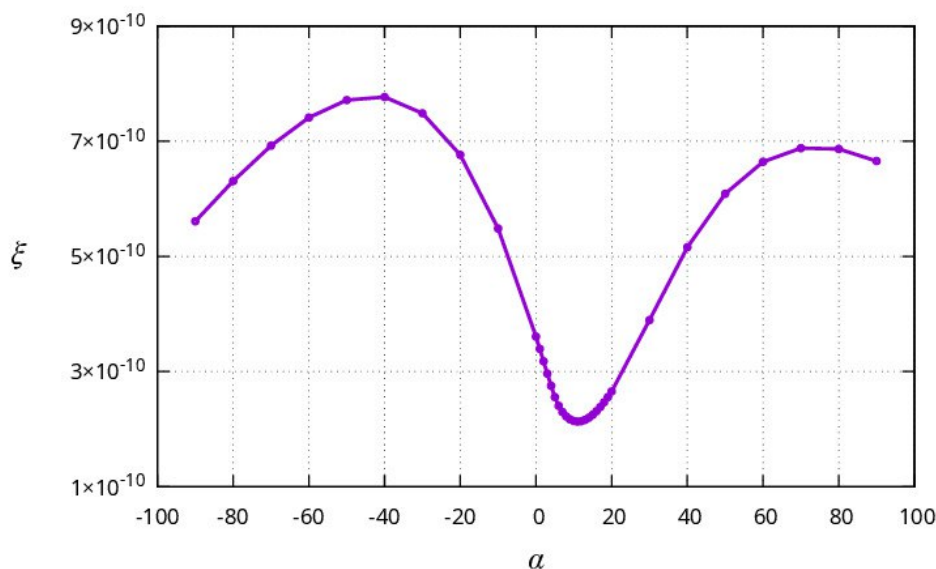


Рис. 4. Зависимость уровня перемешивания от угла наклона пробирки

При угле наклона $\alpha = -11^\circ$ наблюдается наименьшая оценка скорости тепловой конвекции. Одной из причин снижения скорости тепловой конвекции является то, что области нагрева/охлаждения находятся друг над другом, вызывая тем самым взаимное трение потоков, что в свою очередь мешает образованию конвективного круга и приводит к уменьшению скорости тепловой конвекции.

Также при углах наклона $\alpha = -90^\circ$ и $\alpha = 90^\circ$ замечен спад скорости конвекции. Объясняется это тем, что при нагреве области горизонтально расположенной пробирки тепловые потоки ударяются о «стенку» и приводят к снижению скорости конвекции таким образом, что потоки просто вытесняют друг друга. В случае с $\alpha = 90^\circ$ подъемное нагревательное течение сверху ограничено, что вынуждает жидкость течь вдоль стенки постепенно охлаждаясь. Здесь учитываются силы трения о «стенку» и условие прилипания, замедляющее такой поток. То же справедливо и про охлаждающий поток. При $\alpha = -90^\circ$ обеспечивается более подходящее условие для всплытия нагретой жидкости и опускания охлажденной при минимальном взаимном трении и трении со «стенкой», что приводит к чуть более высокой скорости конвекции. Соответственно при таких углах наклона скорость конвекции не самая эффективная.

7. Заключение

В настоящей работе рассмотрена ранее смоделированная модель микропробирки в условиях температурной конвекции. Произведены расчеты с использованием встроенного решателя, а также их постобработка с последующим применением средств языка программирования Python. По результатам были проведены анализ полученных результатов и оценка качества перемешивания в зависимости от угла наклона пробирки.

Важно отметить, что моделирование температурной конвекции в микропробирках представляет собой

важную область исследований с широким спектром приложений, начиная от микрофлюидики и биомедицинских технологий до электроники и материаловедения. Оптимизация и дальнейшее исследование рассматриваемых процессов актуально уже более двух столетий.

По результатам исследования выявлено существенное влияние угла наклона на результаты, что говорит о том, что предположение, выдвинутое в начале статьи, было верным.

Результаты исследования позволяют лучше понять влияние угла наклона пробирки на скорость конвекции жидкости, что имеет значение для оптимизации процессов, связанных с теплообменом и перемешиванием в микромасштабных системах. Полученные данные могут быть использованы для разработки новых методов контроля и управления конвекцией в микропробирках, что открывает перспективы для создания более эффективных и точных микросистем.

Список литературы / References

- [1] Игнатов К.Б., Мирошников А.И., Крамаров В.М. Новый подход к увеличению специфичности ПЦР // Биоорганическая химия. 2003. Т. 29, № 4. С. 403–407.
EDN: ookiiz
Ignatov K.B., Miroshnikov A.I., Kramarov V.M. A New Approach to Enhanced PCR Specificity // Russian Journal of Bioorganic Chemistry. 2003. V. 29, No. 4. Pp. 368–371.
DOI: 10.1023/A:1024953302170
- [2] Northrup M.A., Mariella, Jr. R.P., Carrano A.V., Balch J.W. Silicon-based sleeve devices for chemical reactions. US Patent No. 5, 589, 136. Dec. 31, 1996.
<https://www.osti.gov/biblio/415720>
- [3] Garafutdinov R.R., Chemeris D.A., Sakhabutdinova A.R., Moiseev K.V., Urmancheev S.F., Mikhaylenko C.I., Privalov L.Yu., Chemeris A.V. Convective polymerase chain reaction in standard microtubes // Analytical Biochemistry. 2022. V. 641. 114565.
DOI: 10.1016/j.ab.2022.114565
- [4] Heap D.M., Herrmann M.G., Wittwer C.T. PCR amplification using electrolytic resistance for heating and temperature monitoring // Biotechniques. 2000. V. 29. P. 1006–1012.
DOI: 10.2144/00295st01

- [5] Чернышев А.В., Мединцев С.Ф., Сочивко Д.Г., Атамасов Н.В. Исследование рабочих процессов в амплификаторе ДНК в целях повышения выхода количества продукта полимеразной цепной реакции // Вестник МГТУ им. Н.Э.Баумана. Серия «Машиностроение». 2011. № 5. С. 138–149.
Chernyshev A.V., Medintsev S.F., Sochivko D.G., Atamasov N.V. Study of working processes in dna amplifier for increasing the yield of polymerase chain reaction product // Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Mechanical Engineering. 2011. No. 5. Pp. 138–149. (in Russian)
EDN: oifzql
- [6] Bennett W.J., Richards J.B., Milanovich F.P. Convectively driven thermal-cycling. US Patent No. 6, 586, 233 B2. Jul. 1, 2003.
<https://www.osti.gov/biblio/1174383>
- [7] Krishnan M., Ugaz V.M., Burns M.A. PCR in a Rayleigh-Benard convection cell // Science. 2002. V. 298. 793.
DOI: 10.1126/science.298.5594.793
- [8] Krishnan M., Agrawal N., Burns M.A., Ugaz V.M. Reactions and fluidics in miniaturized natural convection systems // Anal. Chem. 2004. V. 76. P. 6254–6265.
DOI: 10.1021/ac049323u
- [9] Braun D., Goddard N.L., Libchaber A. Exponential DNA replication by laminar convection // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 91. P. 158103.
DOI: 10.1103/PhysRevLett.91.158103
- [10] Normand C., Pomeau Y. Convective instability: A physicist's approach // Rev. Mod. Phys. 1977. V. 49, No. 3. P. 581–624.
DOI: 10.1103/RevModPhys.49.581
- [11] Cook W. A proposal for warming rooms by the steam of boiling water conveyed in pipes along the walls: and a method of preventing ships from leaking, whose bottoms are eaten by the worms // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. 1745. V. 43, No. 476. P. 370–372.
DOI: 10.1098/rstl.1744.0079
- [12] Lord Rayleigh O.M. F.R.S. On convection current in horizontal layer of fluid, when the higher temperature is on the under side // Philosophical Magazine. 1916. V. 32, No. 192. P. 529–546.
DOI: 10.1080/14786441608635602
- [13] Jeffreys H. The stability of a layer of fluid heated below // Philosophical Magazine. 1926. V. 2. P. 833–844.
DOI: 10.1080/14786442608564114
- [14] Schmidt R.J., Milverton S.W. On the instability of a fluid when heated from below // Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences. 1935. V. 152, No. 877. P. 586–594.
DOI: 10.1098/rspa.1935.0209
- [15] Eds. J.B. Edel, A.J. de Mello. Nanofluidics. Nanoscience and Nanotechnology. Cambridge: Thomas Graham House, 2009. 198 p.
DOI: 10.1039/9781847558909
- [16] Squires T., Quake S. Microfluidics: Fluid physics at the nanoliter scale // Revs Mod. Phys. 2005. No. 77. P. 977–1007.
DOI: 10.1103/RevModPhys.77.977
- [17] Northrup M.A., Ching M.T., White R.M., Watson R.T. DNA amplification in a microfabricated reaction chamber // 7 Int. Conf. on Solid State Sensors and Actuators "Transducers'93". 1993. P. 924–927.
- [18] Jacobson S.C., Hergenroder R., Koutny L.B., Ramsey J.M. Open channel electrochromatography on a microchip // Analytical Chemistry. 1994. V. 66, No. 14. P. 2369–2373.
DOI: 10.1021/ac00086a024
- [19] Zhang C., Xing D. Miniaturized PCR Chips for Nucleic Acid Amplification and Analysis: Latest Advances and Future Trends // Nucl. Acids Res. 2007. V. 35, No. 13. P. 4223–4237.
DOI: 10.1093/nar/gkm389
- [20] Erill I., Campoy S., Rus J., Fonseca L., Ivorra A. Development of a CMOS-compatible PCR chip: comparison of design and system strategies // J. Micromech. Microeng., 2004, v. 14, p. 1558–1568
DOI: 10.1088/0960-1317/14/11/018
- [21] Matsubara Y., Kerman K., Kobayashi M., Yamanura S., Morita Y., Tamiya E. Microchamber array based DNA quantification and specific sequence detection from a single copy via PCR in nanoliter volumes // Biosens. Bioelectron. 2005. V. 20, No. 8. P. 1482–1490.
DOI: 10.1016/j.bios.2004.07.002
- [22] Gershuni G.Z., Luybimov D.V. Thermal vibrational convection. John Wiley and Sons, 1998. 358 p.
- [23] Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.
Gershuni G.Z., Zhukhovitskij E.M. [Convective stability of incompressible fluid] *Konvektivnaja ustojchivost' neszhimaemoj zhidkosti*. Moscow: Nauka. 1972. 392 P. (in Russian)
- [24] Boussinesq J. Theorie de l'ecoulement tourbillonnant et tumultueux des liquides dans les lits rectilignes a grande section. Vol. 1. Gauthier-Villars. 1897. 64 p.
- [25] Mollendorf J.C., Jann K.H. Onset of Convection in a Horizontal Layer of Cold Water // J. Heat Transfer. 1983. V. 105, No. 3. Pp. 460–465.
DOI: 10.1115/1.3245607
- [26] Гебхарт Б., Джалурия Й., Махаджан Р., Саммакия Б. Свободноконвективные течения, тепло- и массообмен. Кн. 1, 2. М.: Мир, 1991. 1208 с.
Gebhart B., Jaluria Y., Mahajan R. L., Sammakia B. Buoyancy-induced flows and transport. Washington, DC: Hemisphere Publ. Corp., 1988. 1001 p.
<https://api.semanticscholar.org/CorpusID:128746069>
- [27] Бекежанова В.Б. Исследование устойчивости равновесного состояния в модели конвекции с нелинейной зависимостью плотности от температуры и давления // ПМТФ. 2007. Т. 48, № 2. С. 66–74.
EDN: onmexd
Bekezhanova V.B. Stability of the equilibrium state in a convection model with nonlinear temperature and pressure dependences of density // Journal of Applied Mechanics and Technical Physics. 2007. V. 48, No. 2. Pp. 200–207
DOI: 10.1007/s10808-007-0026-7
- [28] Славинский М.П. Физико-химические свойства элементов. М.: Металлургиздат, 1952. 765 с.
Slavinskij M.P. [Physicochemical properties of elements] *Fiziko-Himicheskie svojstva elementov*. Moscow: Metallurgizdat. 1952. 756 P. (in Russian)
- [29] Кулешов В.С., Моисеев К.В., Урманчиев С.Ф. Изолированные режимы течений при конвекции аномально термовязкой жидкости в плоской ячейке // Прикладная математика и механика. 2019. № 3. С. 484–494.
DOI: 10.1134/S0032823519030093
Kuleshov V.S., Moiseev K.V., Urmancheev S.F. Isolated Convection Modes for the Anomalous Thermoviscous Liquid in a Plane Cell // SpringerLink. 2019. № 54. С. 983–990.
DOI: 10.1134/S0015462819070097
- [30] Кулешов В.С., Моисеев К.В. Конвекция термовязкой жидкости в ячейке, подогреваемой сбоку // Многофазные системы. 2019. Т. 14, № 1. С. 67–72.
Kuleshov V.S., Moiseev K.V. Convection of thermoviscous fluid in a cell heated from the side. Multiphase Systems. 14 (2019) 1. 67–72 (in Russian).
DOI: 10.21662/mfs2019.1.010
- [31] Кулешов В.С. Стационарные режимы конвекции жидкости с гауссовской зависимостью вязкости от температуры // Труды Института механики им. Р.Р. Мавлютова Уфимского научного центра РАН. 2016. Т. 11, № 2. С. 218–225.
Kuleshov V.S. Stationary fluid convection modes with a Gaussian viscosity dependence of temperature Proceedings of the Mavlyutov Institute of Mechanics. 2016. 11(2). 218–225. (in Russian)
DOI: 10.21662/uim2016.2.032
- [32] OPENFOAM®
<https://openfoam.org/> (дата обращения 10.04.2024)
- [33] Open MPI: Open Source High Performance Computing
<https://www.open-mpi.org/> (дата обращения 10.04.2024).

Сведения об авторах / Information about the Authors**Артур Ильзирович Исламов**

Уфимский университет науки и технологий

Artur Ilzirovich Islamov

Ufa University of Science and Technology

ai.islamov@tensor.ruORCID: [0009-0005-0863-0108](https://orcid.org/0009-0005-0863-0108)**Камилла Радиковна Набиуллина**

Уфимский университет науки и технологий

Kamilla Radikovna Nabiullina

Ufa University of Science and Technology

nabiullina1998@gmail.comORCID: [0009-0004-7004-2086](https://orcid.org/0009-0004-7004-2086)



Penetration of a Silicon Vapor through Residual Gaseous Medium during Siliconizing of a Carbon Composite Material

V.A. Demin^{*,**}, T.V. Demina^{*,***}, V.E. Zinurova^{*,***}

^{*}Perm State National Research University, Perm, Russia

^{**}Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russia

^{***}Institute of Continuous Media Mechanics, Perm, Russia

E-mail: demin@psu.ru

A new physical and mathematical approach is proposed for the description of a silicon vapor high-temperature transfer from the melt mirror to the surface of absorbing carbon porous medium in an atmosphere of residual gas under moderate vacuum conditions. The general hydrodynamic equations are simplified as much as possible and lead to the model, which is intended for further numerical implementation in the course of simulation the non-stationary three-dimensional process of high-temperature siliconizing of porous carbon products of arbitrary shape and under the condition of complex distribution of silicon sources and sinks. The physical and mathematical model of transport consists of only one non-linear differential equation in partial derivatives for the silicon vapor concentration in the atmosphere of argon or any other residual gas. The main achievement consists of obtaining two stationary analytical solutions for plane and cylindrical geometry in one-dimensional formulation of the problem, which explain the anomalously large silicon vapor flux into the porous material in full-scale experiments. The exact solutions for the studied gas mixtures are expressed in terms of the well-known verified values of material parameters. The high degree of the model usability is supported by numerical simulation in a non-steady two-dimensional case. It has shown that despite the low saturation density of gaseous silicon, the vapor-liquid phase process of high-temperature siliconizing of the carbon material is physically possible in a reasonable time.

Keywords: high temperature processes, rare gaseous medium, transfer of silicon vapor, diffusive and convective transport

The authors acknowledge financial support by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme №124021600038-9)

1. Introduction

All currently known technologies of the production of high-temperature composite materials are being improved constantly and, due to their increasing complexity, require the implementation of more perfect approaches at different stages [1–3], including the very first one — the construction of new physical and mathematical models for the process occurring. One of the current problems in this area is the numerical simulation of the gaseous silicon transfer from the melt surface to the product during high-temperature siliconizing of a carbon porous material. For real production conditions, the complex system of differential equations in partial derivatives must describe this process. The adequate modelling of this process requires taking into account many complicating factors, including compressibility of the medium. At the same time, the technology is essentially three-dimensional and requires a highly detailed computational mesh due to the presence of many crucibles with the melt in retort and their complex location in the working space of the furnace. As the result, it is not yet possible for a technologist to carry out quickly full-fledged 3D numerical simulation of this process. At the moment, existing models for describing the transfer of

gaseous silicon in a working space of the industrial installation during high-temperature siliconizing are limited to the simplest approaches [4]. Namely, due to the fact that this process is carried out under conditions of moderate vacuum and at extremely high temperatures above the melting point of silicon, it is believed that the diffusion plays decisive role in ensuring the transport of gaseous silicon from the melt surface to the product [5]. In other words, to simulate this process, the simplest diffusion equation is always used without taking into account additional mechanisms, like convective transport. At the same time, it turns out that the use of real values of the diffusion coefficient in this equation does not allow us to ensure the supply of silicon amount observed in the experiment, which is necessary for complete siliconizing of the product. As the result, there is a paradoxical situation, because the facts speak for themselves: in experiments, under certain conditions, the product can still be saturated with the required amount of silicon but calculations based on diffusive model predict impossibility of this process. This means that all the physical conditions, necessary for the successful implementation of this process, still remain not fully understood.

2. Diffusive and Convective Transport in Gases

2.1. Statement of the problem

At first, let us ignore the details of real industrial technology and consider the process in the simplest model formulation, when the surfaces of the product and the silicon melt represent two parallel planes located at a distance L from each other (Figure 1,a). The working space of retort is filled up with a residual gas, the role of which the argon plays. The conditions of medium vacuum are maintained in the retort and correspond to the partial pressure about 100 Pa [6, 7]. The temperature exceeds the melting point of silicon. The product 1 is saturated by silicon vapour which is generated by the melt 2 (Figure 1,a). There is a task to study the transfer of silicon vapor from the melt surface to the product through residual gas. Characteristic size of the retort accounts for about 1–2 m, therefore in our statement we can neglect the effect of gravity (quantitative estimation of this effect will be given in section 2.2). At first, let us begin the discussion about phenomenon description from the analysis of the classical diffusion equation, which has in the three-dimensional case the following form

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right), \tag{1}$$

where D is the diffusion coefficient, C is the mass concentration of gaseous silicon. This is a standard second order partial differential equation of parabolic type. In the stationary case ($\partial/\partial t = 0$), the problem (1) is simplified and reduced to the Laplace’s equation $\Delta C = 0$.

The non-applicability of this equation for the simulation of silicon vapor transfer becomes obvious in a limiting case of one-dimensional statement ($\partial/\partial y = \partial/\partial z = 0$). For the simplest homogeneous boundary conditions

$$C(0) = 0, \quad C(L) = C_s, \tag{2}$$

only linear distribution of silicon concentration satisfies to

the one-dimensional Laplace’s equation

$$C(x) = \frac{C_s}{L} x. \tag{3}$$

Here C_s is the concentration of silicon vapor on the melt surface. Obviously, this value can’t exceed the concentration of saturation for given thermodynamic conditions. The zero value of concentration on the left boundary means complete absorption of gaseous silicon by the porous medium. Characteristic distance L between the melt surface and the product in the course of the technological process is equal about 0.5–1 m. The saturated vapor pressure for silicon at the temperature not much higher than the melting point of silicon is very small and accounts in order of magnitude to $p_s = 10$ Pa [8, 9]. Thus, the number of silicon atoms per unit of volume for conditions of saturation is estimated using the state equation for the ideal gas

$$n_s = \frac{p_s}{kT} = \frac{10}{1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 1800} = 4.03 \cdot 10^{20} \text{ 1/m}^3, \tag{4}$$

where k is the Boltzmann’s constant. The characteristic working temperatures lie near $T = 1800–1900$ K. It is important to compare the theoretically predicted silicon flux density with the weight gain of the product observed in experiment. In fact, by definition the flux density of a substance is the mass transferred per a unit time through a unit area. If silicon transport is determined only by the diffusion, then in this case the Fick’s law describes silicon flux density

$$j_{Si} = -\rho D \nabla C = -D \nabla \rho_{Si}. \tag{5}$$

Let us make the estimation of diffusion coefficient using the well-proven formula of molecular-kinetic theory [10]:

$$D = \frac{3}{8} \frac{kT}{\sigma_{12} p} \sqrt{\frac{\pi kT}{2\mu_{12}}} = \frac{3}{8} \frac{(kT)^{3/2}}{d_{Si}^2 p \sqrt{\pi m_0}}. \tag{6}$$

Here σ_{12} is the effective scattering cross-section for two particles, μ_{12} is the equivalent mass. For two approximately equal masses and sizes for silicon atom and argon one, we

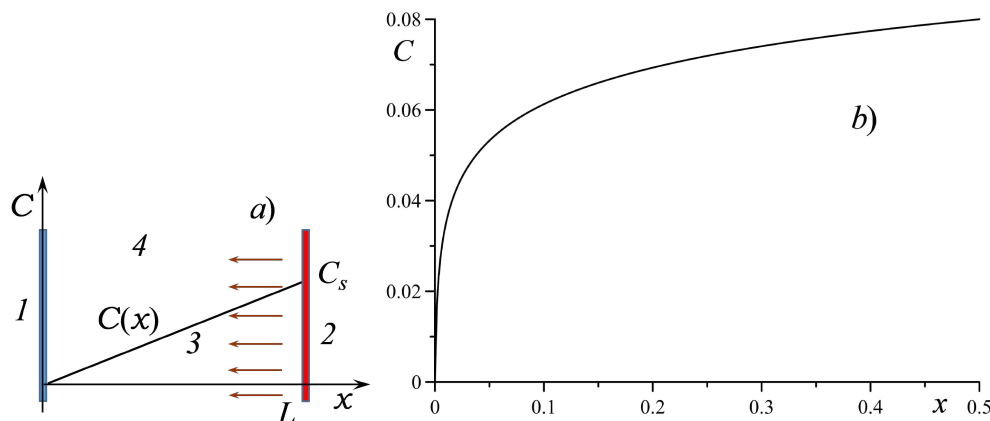


Figure 1. a) Plane geometry of the problem: 1 – product surface (carbon material), 2 – surface of silicon melt (melt mirror), 3 – linear distribution according to the standard diffusion model, 4 – working space of retort; b) Analytical solution of modified diffusion equation for $L = 0.5$ m

apply $\sigma_{12} \approx \pi d^2$, $\mu_{12} \approx m_0/2$; where m_0 is the mass of one silicon atom $m_0 = M_{Si}/N_A = 0.028 \text{ kg/Mole} / 6.02 \cdot 10^{23} \text{ 1/Mole} = 4.7 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$ (M_{Si} is the silicon molar mass). In addition, the diameter of this atom accounts about $d_{Si} = 0.23 \cdot 10^{-9} \text{ m}$. The resulting value of the diffusion coefficient is $D = 0.7 \text{ m}^2/\text{s}$. Despite of so giant and unusual value of diffusion coefficient, the formula (5) for constant gradient C_s/L predicts a very low value of silicon flux density $j_{Si} = 2.62 \cdot 10^{-5} \text{ kg/m}^2 \text{ s}$ (silicon density on the melt mirror is $\rho_{Si} = p_{Si}M_{Si} / RT = 1.87 \cdot 10^{-5} \text{ kg/m}^3$, where R is the universal gas constant).

According to the estimations of technologists involved in the siliconizing of carbon products, this is clearly not enough to block the pores completely in a reasonable time for existing porosity of the material. Moreover, today there is a situation when the moving to a new workpiece shape or new heating conditions, the process cannot be predicted whether it will be successful. However, in reality, if certain conditions are found experimentally, the product of any shape is still successfully saturated with silicon. Thus, an assertion can be reliably established according to which all failures during the technological process are determined not by the diffusive resistance of residual gas and the large distance from the melt surface to the product, but by absolutely another factors.

2.2. Convective transport in residual gas

Thus, it is necessary to explain the anomalously intensive transport of gaseous silicon from the melt to the product surface, which takes place in experiments. The more general equation of admixture transfer in continuous media mechanics, taking into account an additional convective mechanism of the transport [11], is written in the form

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\mathbf{V}\nabla)C = D\Delta C. \tag{7}$$

Here \mathbf{V} is the macroscopic mean-mass velocity of a physically small fluid element. The main problem of the equation usage is in the absence of mathematical completeness, since the velocity field is an additional unknown quantity. It seems that convective mechanism is the next significant factor after diffusion in the course of silicon mass transfer.

Within the framework of continuous media mechanics, the dynamics of fluid is determined generally by the Navier–Stokes equation [11]. In three-dimensional case, there are three evolutionary nonlinear partial differential equations for velocity components V_x , V_y and V_z . These equations include in addition two variables — the pressure and the density, which need to be determined also. As the result, two supplementary equations are added to the system: the law of mass conservation for compressible medium in differential form and the equation of state. Thus, the final system of equations becomes extremely cumbersome and difficult to solve.

Currently, direct numerical simulation of the processes under consideration in a full three-dimensional formulation is very difficult, even with the help of high-performance supercomputers. The task is to reformulate

the problem more simply. On the one hand, it is important to take into account all the physical factors necessary for the adequate description of the process under consideration, and on the other hand, to avoid the use of overly complex models. It is desirable to construct a new physical model that can permit to carry out our calculations in a reasonable time and would not require an excessive computing power.

To realize these perspectives let us follow the approach, which is implemented in the theory of porous media. Residual gas is not generated at the melt surface and is not absorbed by the product. It permits to suppose that the transfer of silicon vapor through the residual gas is analogous to filtration of a fluid through porous medium, and this average flow is not reduced to the diffusion phenomenon. Then, let us take the momentum equation for filtration in its primary formulation (Wooding, 1957) and evaluate the contribution of each term in it. In the hydrodynamics of porous media, it is necessary to distinguish between the intrinsic velocity \mathbf{v} and the seepage velocity \mathbf{u} . The seepage velocity is determined through the total fluid flow rate and is related to the pore velocity by the ratio $\mathbf{u} = \phi\mathbf{v}$. Here ϕ is the material porosity. For intrinsic velocity in the porous medium mechanics, we can use the equation of the fluid motion in first rough approximation [12], neglecting by Brinkman’s and Vafai’s complexifications

$$\rho_f \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v} \right) = -\nabla p - \frac{\eta}{\kappa}\mathbf{u} + \rho_f \mathbf{g}. \tag{8}$$

Here ρ_f is the density of the pumped fluid, η is the dynamic viscosity, κ is the permeability. Turning completely to the seepage velocity, we get the equation in the form of Dupuit-Forchheimer

$$\rho_f \left(\phi^{-1} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \phi^{-2} (\mathbf{u}\nabla)\mathbf{u} \right) = -\nabla p - \frac{\eta}{\kappa}\mathbf{u} + \rho_f \mathbf{g}. \tag{9}$$

Now it is needful to evaluate the terms containing velocity in the left and right parts of this equation. The most non-trivial parameter in this equation is permeability. In relation to the mobile atoms of the residual gas (argon), we can only talk about the model nature of this matter as a porous medium with some effective permeability. Namely, we mean a model according to which the gaseous silicon, as a kind of fluid, is filtered through a carrier medium due to the fact that silicon vapors are scattered on dotty argon atoms, which heavier than silicon atoms, but nevertheless mobile. Due to the extreme rarefaction of the carrier medium, it is expected that the permeability has anomalously large value.

Indeed, the value of mean free path corresponding to the conditions of moderate vacuum is equal

$$l = \frac{kT}{\sqrt{2}\pi d^2 p} = \frac{1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 1800}{\sqrt{2}(1.4 \cdot 10^{-10})^2 100} = 2.8 \cdot 10^{-3} \text{ m}. \tag{10}$$

The value of mean free path permits to calculate the Knudsen number. It plays key role in the mechanics of rare gases. The distance between the product and the melt mirror determines characteristic spatial scale. In our case

$L \sim 1$ m. Following to definition, the Knudsen number can be estimated as

$$Kn = \frac{l}{L} \sim l = 2.8 \cdot 10^{-3} \text{ m.}$$

One can conclude that Knudsen number satisfies condition $Kn \ll 1$, that leads to the ability of continuum media mechanics application. On the other hand, this value close to the limits of applicability of this approach. This is the actual reason of the paradoxical situation that demands taking into accounts of additional factors to describe anomalously intensive transfer of silicon vapour.

Nevertheless, let us apply the Kozeny–Karman formula to estimate the permeability of this artificial porous medium. For partial pressure of argon 100 Pa and porosity $\phi = 1 - v_0 n_{Ar} = 0.999999979$, the permeability has the value

$$\kappa = \frac{\kappa_0 \phi^3}{(1 - \phi)^2} = 2 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2, \quad (11)$$

where v_0 is the volume of one argon atom, κ_0 is the Kozeny–Karman constant. It has supposed in our calculation that following estimation is valid for this parameter $\kappa_0 \sim a^2$; where a is the characteristic size of the obstacle (for spherical argon atom $a \sim 10^{-10}$ m).

Another important quantity is the macroscopic mean-mass velocity of the gas element \mathbf{V} . We have to distinguish later among three velocities: the mean-mass velocity \mathbf{V} , which appears in equation (7), the seepage velocity \mathbf{u} and the intrinsic one \mathbf{v} , that enter into equation (8). Note that the values of seepage velocity and intrinsic one are approximately equal to each other because our medium is rare and its porosity is extremely close to unit. It can be assumed for estimation that during evaporation, silicon atoms detach from the melt surface with a root-mean-square speed

$$u = \sqrt{3kT/m_0} \approx 1250 \text{ m/s.} \quad (12)$$

An averaging this velocity over all directions gives the mean value of the silicon flux density out of the melt in projection on the normal $j_{Si} = \rho_{Si} u / 2$. The definite part of the vapor momentum is transmitted to the scattering centers therefore the equality for the mean-mass velocity takes place $\rho_{Si} u / 2 = (\rho_{Si} + \rho_{Ar}) V$. As the result, the mean-mass velocity is defined by the formula $V = \rho_{Si} u / 2(\rho_{Si} + \rho_{Ar}) = 41$ m/s (for partial pressure of argon $p_{Ar} = 100$ Pa the density is equal to $\rho_{Ar} = \rho_{Ar} M_{Ar} / RT = 2.67 \cdot 10^{-4}$ kg/m³). This evaluation means that convective mechanism makes the significant contribution to the general transfer of gaseous silicon during the process under consideration.

Let us estimate now the value of each term in equation (9), taking into account that the porosity of such medium is close to unit. In our statement, the flux and the seepage velocity of gaseous silicon have only one component along x -axis, which can depend on all three coordinates, therefore $\mathbf{v} \nabla \mathbf{v} \neq 0$ for compressible fluid. On the other hand, the conditions for steady transfer are settled extremely quickly. Thus, we can assume $\partial \mathbf{v} / \partial t = 0$ for steady regime of transfer. Thus, the non-linear term, viscous one and gravity

force in (9) are equal in order of magnitude to following values

$$\begin{aligned} \left| \rho_f \phi^{-2} (\mathbf{u} \nabla) \mathbf{u} \right| &\sim \rho_f \frac{u^2}{L} = 1.87 \cdot 10^{-5} \frac{625^2}{1.0} = 7.3, \\ \left| \frac{\eta \mathbf{u}}{\kappa} \right| &= \frac{3.5 \cdot 10^{-4} \cdot 625}{2 \cdot 10^{-3}} = 110, \\ \left| \rho_f \mathbf{g} \right| &= 1.87 \cdot 10^{-5} = 1.87 \cdot 10^{-4} \end{aligned} \quad (13)$$

and satisfy the condition

$$\left| \frac{\eta \mathbf{u}}{\kappa} \right| \gg \left| \rho_f \phi^{-2} (\mathbf{u} \nabla) \mathbf{u} \right| \gg \left| \rho_f \mathbf{g} \right|. \quad (14)$$

One can see that there is no parity between these three terms. Comparison of these quantities permits to neglect by the inertial term and gravity influence in equation (9). As the result, the Darcy's law follows from this equation

$$\mathbf{u} = -\frac{\kappa}{\eta} \nabla p_{Si}. \quad (15)$$

Due to the incessant evaporation on the melt surface and absorption on the product, we have a certain average density gradient of silicon vapor. Since the pressure in the ideal gas is proportional to density, this causes a silicon pressure gradient, which can act as an additional driving force differing from diffusion. The partial pressure of silicon according to the equation of the ideal gas state is equal to

$$p_{Si} = n_{Si} kT, \quad (16)$$

where $n_{Si} = N_{Si} / V$ – number of silicon atoms per unit volume. Let us express n_{Si} over the mass concentration C . By definition, we introduce mass concentration over the formula

$$C = \frac{\rho_{Si}}{\rho_{Ar} + \rho_{Si}}. \quad (17)$$

Silicon density is expressed from (17) in terms of relative mass concentration as follows

$$\rho_{Si} = \frac{C}{1 - C} \rho_{Ar}. \quad (18)$$

Let's rewrite equation (16) in terms of silicon density, i.e. substitute relation (18) into (16) at second step:

$$p_{Si} = \frac{RT}{M_{Si}} \frac{C}{1 - C} \rho_{Ar}. \quad (19)$$

Then, we substitute this result into Darcy's law (15), for simplicity neglecting the spatial inhomogeneities of argon density and temperature. Let's also take into account the fact that the silicon mass concentration never actually reaches the unit. Argon, as a residual gas, always presents in the retort, and their concentration is approximately an order of magnitude higher than the concentration of silicon vapor. As the result, we expand the factor $C / (1 - C)$ into a series in small C and limit ourselves in the final expression to the first non-vanishing term. Darcy's law (15) takes the final form

$$\mathbf{u}_{Si} = -\frac{\kappa}{\eta} \nabla p_{Si} = -\frac{\kappa RT \rho_{Ar}}{\eta M_{Si}} \nabla C. \quad (20)$$

However, it is necessary to substitute the average-mass velocity into equation (7), which is calculated as

$$\mathbf{V} = \frac{\rho_{\text{Ar}}\mathbf{u}_{\text{Ar}} + \rho_{\text{Si}}\mathbf{u}_{\text{Si}}}{\rho_{\text{Ar}} + \rho_{\text{Si}}} = \frac{\rho_{\text{Si}}\mathbf{u}_{\text{Si}}}{\rho_{\text{Ar}} + \rho_{\text{Si}}} \approx \frac{\rho_{\text{Si}}\mathbf{u}_{\text{Si}}}{\rho_{\text{Ar}}}. \quad (21)$$

In this approximation the argon is immovable $\mathbf{u}_{\text{Ar}} = 0$. According to our model, the silicon vapour is filtered through the stationary argon. Substituting this expression into the generalized equation (7) for impurity transfer, we finally obtain the equation

$$\frac{\partial C}{\partial t} - \frac{\kappa RT \rho_{\text{Si}}}{\eta M_{\text{Si}}} (\nabla C)^2 = D \Delta C. \quad (22)$$

Now this is a more complex partial differential equation of diffusion with nonlinearity like the square of the concentration gradient. Note that similar diffusion equations with nonlinearities that are quadratic to the concentration gradient are quite common in various fields of physics. Thus, in works [13, 14] it is shown that a nonlinear term of this type quite significantly changes the transport diffusion properties of the material, which is played by a lithium niobate crystal, and makes it possible to explain some of the observed effects associated with the saturation with hydrogen of the material under consideration. For stationary conditions, equation (22) is reduced to the form

$$-(\nabla C)^2 = \psi \Delta C, \quad (23)$$

where ψ is a positively definite, dimensionless parameter responsible for the contribution of the convective term to the overall transport of silicon vapor

$$\psi = \frac{\eta M_{\text{Si}} D}{\kappa RT \rho_{\text{Si}}}. \quad (24)$$

It is important to estimate the value of the new introduced parameter. Let us use the values of dynamic viscosity and diffusion coefficient as in the works [6, 7]. These parameters were assessed in relation to our siliconizing process with the help of the well-known formulas of the molecular kinetic theory [10]. There is the formula for dynamic viscosity for a rare gas

$$\eta = \frac{1}{3} \left(\frac{2}{\pi} \right)^{3/2} \frac{(m_0 k T)^{1/2}}{d^2}. \quad (25)$$

Here d is the diameter of atom; m_0 is the atom's mass. Formula (25) gives the same magnitude of dynamic viscosity: $\eta = 3.5 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$. Thus, according to (6), (11), (25) parameter ψ quantitatively has the value

$$\psi = \frac{3.5 \cdot 10^{-4} \cdot 28 \cdot 10^{-3} \cdot 0.7}{2 \cdot 10^{-3} \cdot 8.31 \cdot 1800 \cdot 1.87 \cdot 10^{-5}} = 0.012. \quad (26)$$

Note that this complex is an initially dimensionless parameter in the problem (23) and characterizes the relationship between diffusive and convective transport. The smallness of this parameter in (23) means that the new nonlinear term in the left part of the equation has an essential role in our model.

Of course, the parameter (24) in most cases is greater. This parameter is small only for conditions of medium vacuum during product siliconizing in the course of technological process. At normal conditions, the density of carrying gas becomes significantly bigger and this leads to the diminution of permeability. It is seen from formula (24) that this parameter at lower temperature becomes also greater. As the result, the parameter ψ increases and we have purely diffusive transfer.

3. Exact Solutions of Equation for Concentration

3.1. Plane one-dimensional geometry

Thus, we have only one closed equation (22) for silicon vapor transfer with well-known parameters. Owing to the comparative simplicity of this equation, the pleasant ability exists to find an exact analytical solutions in several actual statements. The first one is one-dimensional stationary distribution of silicon vapor in Cartesian coordinate system with boundary conditions of the first kind. The equation (23) in this case has the form

$$-\left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)^2 = \psi \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}. \quad (27)$$

It is supplemented with the Dirichlet boundary conditions

$$C(0) = 0, \quad C(L) = C_s. \quad (28)$$

Using procedure the change of variable [15], the integration of equation of (27) with boundary conditions (28) gives the solution

$$C(x) = \psi \ln \left(\frac{x}{L} (\exp(C_s/\psi) - 1) + 1 \right). \quad (29)$$

The functional dependence (29) is presented in Figure 1b for $C_s = 0.08$ and $\psi = 0.012$. This dependence qualitatively different from the linear solution (3). It means that the silicon vapor tends to fill up completely the working space of retort. Derivative of (29) on the product surface is determined by formula

$$\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{x=0} = \frac{\psi (\exp(C_s/\psi) - 1)}{L}. \quad (30)$$

It can be seen that this derivative is significantly greater than the same one for the linear solution. Thus, one can explain the anomalously intensive absorption of gaseous silicon by the product during silicification. In the limiting case of small ratio C_s/ψ the exponent can be expanded into series and we have got the derivative for linear solution (3), which is equal to C_s/L .

3.2. Cylindrical one-dimensional case

Analogical problem can be solved in cylindrical coordinate system. Using conditions of concentration uniformity on azimuthal angle and axial coordinate, we have the equation

$$-\left(\frac{\partial C}{\partial r}\right)^2 = \frac{\psi}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C}{\partial r} \right). \quad (31)$$

As before, the Dirichlet boundary conditions can be imposed in our case

$$C(R_1) = 0, \quad C(R_2) = C_s. \quad (32)$$

This boundary value problem describes steady transfer of silicon vapor form external uniform sources located at distance $R_2 - R_1$ to the product of cylindrical form with radius R_1 (Figure 2,a).

As the result of statement with cylindrical symmetry, the integration of equation (31) for boundary conditions (32) gives superlogarithmic solution

$$C(r) = \psi \ln \left(\frac{(\ln(r/R_2) - \exp(C_s/\psi) \ln(r/R_1))}{\ln(R_2/R_1)} \right). \quad (33)$$

Derivative of (33) at $r = R_1$ is determined by expression

$$\frac{\partial C}{\partial r} \Big|_{z=R_1} = \frac{\psi}{R_1} \frac{(1 - \exp(C_s/\psi))}{(\ln(R_1/R_2) - \exp(C_s/\psi))}. \quad (34)$$

It is seen that in the case of modified equation (22) the values of derivative as for rectangular coordinate system as for cylindrical one are evidently greater than analogical one for classical diffusion equation (1). The distinction can exceed the whole order. Note that the mass flux is proportional to the derivative of concentration. Thus, it means that the vapor-liquid phase method could be soundly applied for silicification of carbon porous materials and our theory confirms ability of the technology realization.

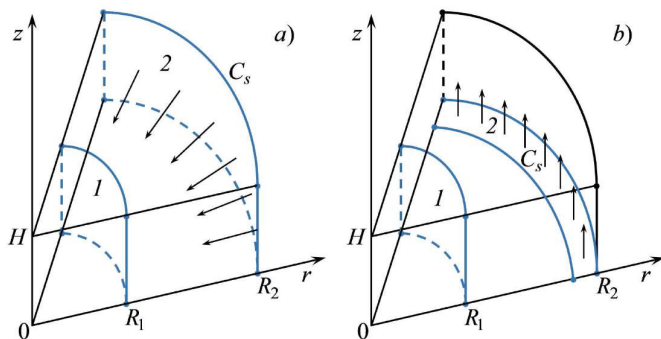


Figure 2. a) Cylindrical geometry of the problem with vertical melt mirror: 1 – product surface, 2 – melt mirror, R_2 , R_1 – radii of cylindrical shells, C_s – concentration of saturation; b) Cylindrical geometry with horizontal melt mirror

4. Numerical Simulation in Two-dimensional Statement

4.1. Two-dimensional problem with the axial symmetry

The problem of silicon vapor transfer looks more realistic for the systems with cylindrical symmetry. The simplest configurations are presented in Figure 2, where one can see two coaxial cylindrical shells with different radii R_2 and R_1 , corresponding to the melt surface and cylindrical product. Now let us consider the general case of time-dependent statement to observe also the formation and motion of concentration front. On the other hand, we simplify the statement assuming the condition of axial symmetry of the system. Thus, the equation (22) for unknown function $C(r, z, t)$ in cylindrical coordinates can be written as

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} - D_c \left[\left(\frac{\partial C}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)^2 \right] = \\ = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right). \end{aligned} \quad (35)$$

Here D_c is the dimensional parameter, which characterizes the intensity of convective transfer in comparison with diffusion. Note, that there is no necessity to introduce non-dimensional quantities in our problem because this parameter has the same dimension [m^2/s] as diffusion coefficient. There is a mathematical ability to compare D_c and D . By definition, this new parameter is equal to

$$D_c = \frac{\kappa R T \rho_{\text{Si}}}{\eta M_{\text{Si}}}. \quad (36)$$

Further, we shall call it as the parameter of convective transport, which appears in physics for the first time. For our conditions it has the value $D_c \approx 58 \text{ m}^2/\text{s}$ (see estimation ψ). Besides of the sectors with sources and sinks the impermeable boundaries of retort appear in this statement. Thus, two sets of boundary conditions take place for corresponding configurations, which are shown in Figure 2:

$$\begin{aligned} 1) \quad & C(R_1, z) = 0, \quad C(R_2, z) = C_s, \\ & \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_{z=0} = \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_{z=H} = 0. \\ 2) \quad & C(R_1, z) = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial r} \Big|_{z=R_2} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_{z=H} = 0; \\ & R_1 \leq r \leq R_s : \quad \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0, \\ & R_s < r \leq R_2 : \quad C(r, z) = C_s. \end{aligned} \quad (37)$$

According to the first statement, the surfaces of product and melt mirror are opposite to each other. Under the second set of boundary conditions, the surface of the melt mirror is horizontal and surrounds the vertical product shell like in an experiment.

4.2. The method of numerical simulation

Now we have an evolutionary differential equation (35) in partial derivatives, which is solved numerically by the standard method of finite differences [16]. It is important to use the method that can be applied in a future for automatization of technological process. The method of finite differences is the most suitable for this purpose realization. An explicit scheme of first-order accuracy by time is applied to simulate the evolution of the system. In calculation algorithm, the spatial derivatives have different accuracy to provide the stability of the scheme. We use central second-order accuracy formulas for derivatives approximation along axial coordinate z and first-order accuracy backward differences along radial coordinate r . The solution of equation (35) with boundary conditions (37) is found for reasonable values of dimensional parameters $H = 0.4$ m, $L = R_2 = 0.9$ m, $R_1 = 0.2$ m, $D = 0.7$ m²/s, $D_c = 58$ m²/s (L is the full retort radius, which can distinguish from the radius of the shell with the melt). The time step is chosen in dependence on spatial one to obtain the stability of the numerical procedure (the Courant criterion). The author’s computer code has implemented in the FORTRAN-90 programming language. The space of retort is initially empty, which means that at the beginning the concentration of the silicon vapor is equal zero in calculation domain. There is used a numerical grid with the number of nodes along radial and axial coordinates 85(121):41; along radial axis 85 nodes – for vertical melt surface (Figure 2,a), 121 – for horizontal one (Figure 2,b). The ratio of the retort radius L to the product height H has been varied in the interval 2–4.

4.3. Numerical results and discussion

Two-dimensional numerical calculations show some complementary features of the process. This computation permits to ascertain the characteristic time of the settling of silicon vapor distribution in retort. The fields of silicon concentration in section (r,z) are presented in Figure 3 for two moments of time in the case when the surfaces of melt and product are opposite (Figure 2,a). Following values of

time points correspond to these realizations: $t_1 = 0.008$ s, $t_2 = 0.5$ s.

At initial stage the concentration front of silicon vapor originates on the external boundary and moves inside to the product surface. It is visible that the gaseous silicon propagate quickly through the entire space of retort. One can see that the settling of stationary concentration profile occurs approximately over the time $t = 0.5$ s. At the final steady stage, the diminution of concentration is only observed near the product surface, which absorbs the silicon vapor according to the boundary condition. The profile on the Figure 3,b looks like the analytical solution (33). Also it corresponds qualitatively to the solution with plane geometry (29) which is shown in Figure 1b,.

It must be emphasized that in the case of cylindrical symmetry, one can observe the more strong effect of wave front steeping in comparison with the plane statement. In the system with cylindrical symmetry the streamlines are concentrated during the motion of gaseous silicon from the periphery to the centerline therefore the additional increasing of flux density on the surface product is observed owing to the topological convergence effect.

Then, let us consider the problem with more realistic statement, when the mirror of silicon melt is horizontal and the product surface, as early, is vertical (Figure 2,b). The width of the melt ring is equal $\Delta R = L/3$. The fields of silicon concentration are shown in Figure 4. At first stage the gaseous silicon becomes to evaporate vertically upward (Figure 4,a). After that the streamlines turn to the product surface and the silicon vapor begins again to fill up quickly the working space of the retort.

It can be concluded that the filling of the working space in the retort by the atoms of gaseous silicon occurs after the beginning of evaporation less than for the second. Mainly due to the convective transfer, the concentration of silicon in the volume quickly amounts to the value, which is close to the one near the melt surface. If conditions of silicon condensation take place on the product surface, the high gradient of concentration originates at this boundary after

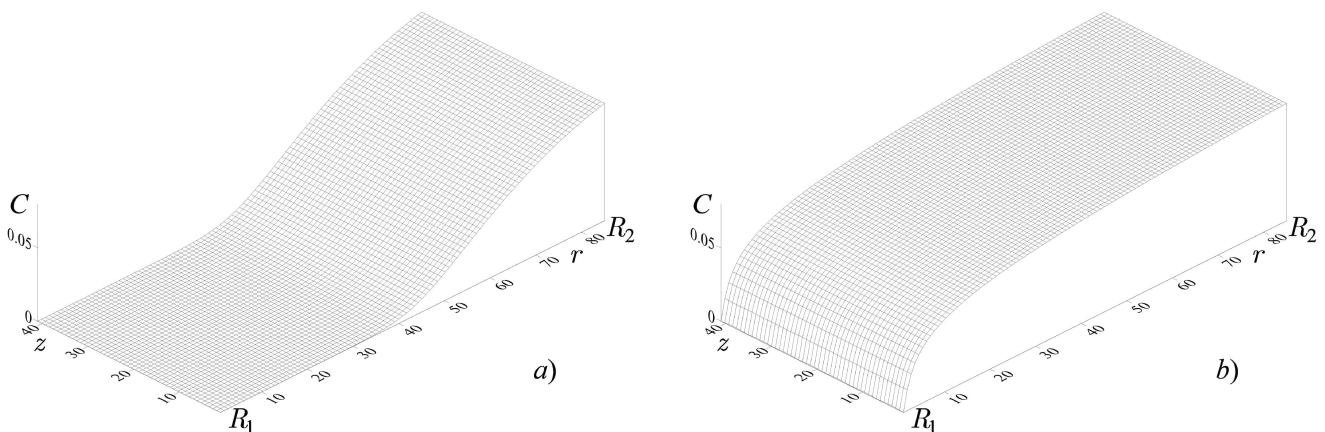


Figure 3. The concentration of silicon vapor in vertical section for the opposite surfaces of the melt and product for two moments of time; a) – t_1 , b) – t_2

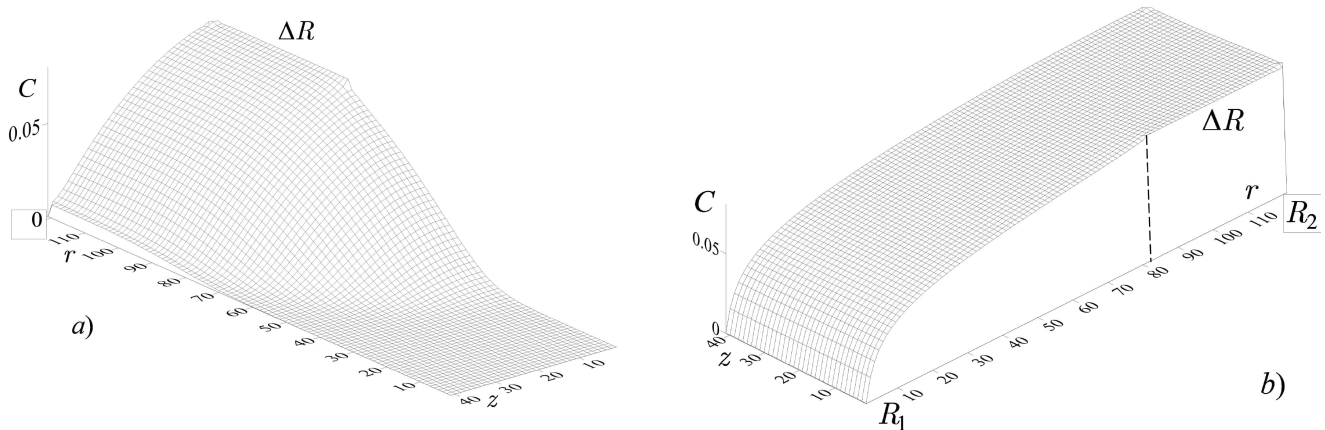


Figure 4. The concentration of silicon vapor in vertical section for the horizontal surface of the melt mirror for two moments of time *a*) – $t_1 = 0.005$ s, *b*) – $t_2 = 0.1$ s

the settling of steady state. The pressure flow is realized in this system because of the intensive evaporation at the melt surface. So, not only diffusion causes silicon transport through the residual gas but also convective transfer.

Theoretical works [4, 5] predicted the impossibility of silicon transfer in sufficient quantities for the realistic time. In the result of solution of the classical diffusion equation, the estimation of the full siliconizing time is equal 20–30 hours [4, 5]. The time of the siliconizing is proportional to the derivative of concentration at the surface of the product, see formulas (30) and (34). Our calculations demonstrate that the concentration derivative at the product boundary is ten times greater than in the case of pure diffusion. Thus, we prognosticate the siliconizing time 2–3 hours that conforms experimental data very well.

5. Conclusion

In the results of analytical and numerical calculations, one can summarize that there is no necessity to approach the crucibles as possible to the product during technological process in order to overpass the diffusive barrier of residual gas. This point of view could be valid only for linear distribution of gaseous silicon concentration in retort. Indeed, in this case the technologists have to move crucibles closer to the product in order to increase as possible the concentration derivative on the sample surface.

It has proved analytically, and additional numerical calculations confirm this result, that the convective transfer of gaseous silicon makes considerable contribution into the full mass flux in real technological conditions.

It is shown theoretically, that silicon vapor tends to occupy quickly the whole working space in retort therefore near the product surface there is always sufficient amount of silicon for successful realization of the siliconizing process. The simplicity of numerical procedure realization confirms an efficiency of suggested new non-linear diffusion equation for description of silicon transfer in the conditions of medium vacuum.

References

- [1] Narottam P. Ceramic Matrix Composites Materials, Modeling and Technology. Bansal P. and Lamon Jacques (Eds). Chromatographia, 2015, 78, 843–844. DOI: [10.1007/s10337-015-2883-1](https://doi.org/10.1007/s10337-015-2883-1)
- [2] Shang J. Durability Testing of Composite Aerospace Materials Based on a New Polymer Carbon Fiber-Reinforced Epoxy Resin. Fluid Dynamics and Material Processing, 2023, 19(9), 2315–2327. DOI: [10.32604/fdmp.2023.026742](https://doi.org/10.32604/fdmp.2023.026742).
- [3] Shikunov, S.L., Kurlov, V.N. SiC-based composite materials obtained by siliconizing carbon matrices. J. Technical Physics, 2017, 62(12), 1869–1876. DOI: [10.1134/S1063784127120222](https://doi.org/10.1134/S1063784127120222)
- [4] Kulik A.V., Kulik V.I., Ramm M.S., Demin S.E. Development of a model and numerical study of the processes for production composites with a SiC matrix by vapour-phase siliconization. Proceedings of the IV-th International Conference "Functional nanomaterials and high-purity substances", Moscow: Inst. of Metallurgy and Materials Science, RAS, Suzdal, Russia, 2012.
- [5] Kulik A.V., Kulik V.I., Ramm M.S., Demin, S.E. Numerical study of gradient CVI processes for production of SiC-matrix composites. Proceedings of V-th International Conference "Functional nanomaterials and high-purity substances", Moscow: Inst. of Metallurgy and Materials Science, RAS, Suzdal, Russia, 2014.
- [6] Demin V.A., Maryshev B.S., Menshikov A.I. Numerical modelling of a high temperature silicification process in the carbon-carbon porous medium. Bulletin of Perm University. Physics, 2021, No. 3, 56–62 (in Russian). DOI: [10.17072/1994-3598-2021-3-56-62](https://doi.org/10.17072/1994-3598-2021-3-56-62)
- [7] Menshikov A.I. Theoretical modeling of the processes of condensation and adsorption during the saturation of porous materials (Ph.D. Thesis) Perm State National Research University. Russia. 2022.
- [8] Stull D.R. Vapor pressure of pure substances. Ind. and Eng. Chem., 1947, 39(4), 517–550. DOI: [10.1021/ie50448a022](https://doi.org/10.1021/ie50448a022)
- [9] Tomooka T., Shoji Y., Matsui T. High Temperature Vapor Pressure of Si. J. Mass Spectrom. Soc. Jpn., 1999, 47 (1), 49–53. DOI: [10.5702/masspec.47.49](https://doi.org/10.5702/massspec.47.49)
- [10] Hirschfelder J.O., Curtiss Ch.F., Bird R.B. Molecular theory of gases and liquids. New York: Wiley and Sons, 1954, 1–1219. DOI: [10.1063/1.3061949](https://doi.org/10.1063/1.3061949)
- [11] Landau L.D., Lifshitz E.M. Fluid Mechanics. Course of Theoretical Physics. Oxford: England: Pergamon Press, Ltd., 1966, 6, 1–536.
- [12] Nield D.A., Bejan A. Convection in porous media. New York: Springer, 2006, 1–654. DOI: [10.1007/978-3-319-49562-0](https://doi.org/10.1007/978-3-319-49562-0)

- [13] Demin, V.A., Petukhov, M.I., Ponomarev, R.S., Topova, A.V. On a role of anisotropy and nonlinear diffusive effects during the construction of waveguides in the lithium niobate. *Bulletin of Perm University. Physics*, 2021, 1, 49–58 (in Russian).
DOI: [10.17072/1994-3598-2021-1-49-58](https://doi.org/10.17072/1994-3598-2021-1-49-58)
- [14] Vohra, S.T., Mickelson, A.R., Asher, S.E. Diffusion characteristics and waveguiding properties of proton exchanged and annealed LiNbO₃ channel waveguides. *J. of Applied Physics(AIP)*, 1989, 66(11), 5161–5174
DOI: [10.1063/1.343751](https://doi.org/10.1063/1.343751)
- [15] Korn G.A., Korn T.M. *Mathematical handbook for scientists and engineers*. McGraw-Hill Book Company, 1968, 1-831.
DOI: [10.1002/zamm.19690490921](https://doi.org/10.1002/zamm.19690490921)
- [16] Samarskii, A.A. *The theory of difference schemes*. New York: Marcel Dekker, Inc., 2001, 1–762.
DOI: [10.1201/9780203908518](https://doi.org/10.1201/9780203908518)

Information about the Authors

Vitaly Anatolyevich Demin

Sc.D. (Phys. & Math.), Prof.

Perm State National Research University, Perm, Russia

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russia

demin@psu.ru

ORCID: [0000-0002-6095-1380](https://orcid.org/0000-0002-6095-1380)

Tatyana Vitalyevna Demina

Perm State National Research University, Perm, Russia

Institute of Continuous Media Mechanics, Perm. Russia

demina-tatyana99@yandex.ru

ORCID: [0009-0006-5600-1354](https://orcid.org/0009-0006-5600-1354)

Veronika Eduardovna Zinurova

Perm State National Research University, Perm, Russia

Institute of Continuous Media Mechanics, Perm. Russia

zinurovaveronika5@yandex.ru

ORCID: [0009-0009-0953-7684](https://orcid.org/0009-0009-0953-7684)



Numerical modelling of the effect of gas temperature non-uniformity on the geometric parameters of the heating element in a cold spraying technology

A.A. Mukhutdinova*, A.D. Nizamova*, W.Y. Li**

*Mavlutov Institute of Mechanics UFRC RAS, Ufa, Russia

**Shaanxi Key Laboratory of Friction Welding Technologies, School of Materials Science and Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an, Shaanxi Province, China

E-mail: adeshka@yandex.ru

In contemporary mechanical engineering, extending the lifespan of products necessitates heightened standards for the materials used in the fabrication of components and structures. One of the most promising avenues is enhancing material characteristics through the application of functional coatings. This includes boosting the material's corrosion resistance, wear resistance, and protection against mechanical damage, as well as enabling localized repairs without disassembling the structure. Preference is given to technologies that do not adversely affect the surface to which they are applied. Cold spray technology stands out as one of the most rapidly advancing methods for applying protective coatings and imbuing materials with various functional properties. This technique not only safeguards surfaces but also enhances their operational characteristics, ensuring the longevity and reliability of products. Investigation of the influence of the dependence of the gas heating on the geometric parameters of the heating element of the cold spraying technology was considered in this work. This task was considered in two software solvers: the software product "Thermoviscous fluids: a hydrodynamic simulator for modeling flow in annular channels with heat exchange" and ANSYS. The modeling results show that the spiral steel tube can effectively be used for heating gas to high temperatures at high speeds. However, it is necessary to consider that at high speeds, additional hydrodynamic effects such as turbulence and shear flows may occur, which can affect the efficiency and stability of the gas (nitrogen) flow.

Keywords: gas heating, heating element, cold spraying technology, nitrogen

The research work was supported by the state budget funds for the state assignment 124030400064-2 (FMRS-2024-0001).

1. Introduction

In the realm of modern mechanical engineering, extending the service life of products demands elevated standards for the materials employed in the manufacture of components and structures [1–3]. One of the most promising approaches is to enhance material characteristics through the application of functional coatings. This includes augmenting the material's corrosion resistance, wear resistance, and protection against mechanical damage, as well as facilitating localized repairs without disassembling the structure [4]. Technologies that do not negatively impact the applied surface are favored.

Cold spraying (CS) technology is at the forefront of methods for applying protective coatings and endowing materials with various functional properties [5, 6]. This process, broadly known as cold spraying, aims to develop methods and devices for spraying coatings that impart the necessary properties to product surfaces, such as reducing porosity, increasing hardness, strength, and corrosion resistance.

The primary objective of these innovations is to create a method and device for spraying coatings that elevate

the surface properties of products to the required levels, ensuring reduced porosity, enhanced hardness, increased strength, and superior corrosion resistance. Over the past 20 years, the greatest inventive activity in the field of CS coating technologies has been observed in Russia, Germany, China and the USA [7]. Also, this coating area is also being developed by developers from Japan, the Republic of Korea, India, Austria and Australia [8].

The forefront of CS technology development is marked by a drive to enhance productivity and automate the coating application process. This is achieved through the creation of novel automated systems and the exploration of modern powder materials, which endow parts and products with diverse functional properties.

The device for applying coatings via the CS method comprises several key components: a dosing feeder, a housing that includes a powder hopper shaped like a drum with recesses on its cylindrical surface, and a mixing chamber equipped with a nozzle designed to accelerate powder particles. The nozzle is connected to both the mixing chamber and a compressed gas source. A powder particle feed controller ensures the desired flow rate during the coat-

ing process, while a partition installed at the bottom of the hopper prevents powder particles from entering the space between the drum and the dosing device body, thus avoiding potential jamming.

The nozzle, featuring a profiled passage, enables the gas flow to reach supersonic speeds. To further boost process efficiency and regulate the speed of the gas-powder mixture with a supersonic jet, the device incorporates an element for heating compressed gas, complete with a temperature control system.

Preferably, the heating element should be made from a resistor alloy, which will allow for a reduction in the overall dimensions and weight of the heating means [9–13].

In the work of Wenya Li [14], an experiment was carried out and a 2D model of the entire process of CS technology was constructed, however, numerical modeling of the gas heating element was not performed. Nitrogen is most often used as a working gas.

Nitrogen is an inert diatomic gas without color and odor, the chemical formula of the diatomic molecule N_2 , molar mass 28.01 kg/kmol. The nitrogen content in the atmospheric air is about 78.09 % by volume. It is used in technological processes as an inert sealing medium, for example, for dry gas mechanical seals and sealing complexes, in the chemical industry for the synthesis of ammonia. Liquid nitrogen is used as a refrigerant in mechanical engineering for the assembly of non-removable tight joints (cooling of the covered part). Nitrogen is used in special technological processes for applying a thin layer of wear-resistant coating — titanium nitride on the surface of steel parts; in combination with silicon, it forms a wear-resistant promising ceramic material, silicon nitride Si_3N_4 [15].

Numerical simulation of the gas heating process will allow to set the optimal parameters of the heated element to reduce the gas heating time, and, accordingly, optimize the process in the complex.

2. Problem statement

The working gas is nitrogen (N_2), which is supplied to the tube at room temperature, 293 – 298 K (20 – 25 °C), and a pressure of 2 to 10 MPa. The tube walls are maintained at a constant temperature of 1273 K (1000 °C). The inner diameter of the tube is fixed and is 0.008 m, and the

wall thickness is 0.002 m. The diameter, number of coils, and length of the tube are parameters that need to be determined for efficient gas heating.

3. Methods

This task was considered in two software solvers:

1. The software product «Thermoviscous fluids: a hydrodynamic simulator for modeling flow in annular channels with heat exchange» [16].
2. ANSYS — a universal finite element analysis (FEA) software system

4. Numerical results

4.1. Part 1. Results of numerical simulation in the own software product

The flow of incompressible nitrogen in a flat channel was considered. The channel diameter was fixed, and the channel length L varied from 1 m to 50 m. The modeling environment used was the own software product «Thermoviscous fluids: a hydrodynamic simulator for modeling flow in annular channels with heat exchange» which was adapted to solve this problem: the inner diameter of the tube — 0.008 m; the length of the tube — from 1 m to 50 m; the pressure drop dp — 1 Pa; the initial temperature of the gas — 293 K; the temperature of the tube walls — 1273 K.

To solve the problem of the incompressible flow of nitrogen in a flat channel, the control volume method was chosen. This approach allows solving the Navier–Stokes equations with high accuracy, which is critical for obtaining reliable results.

The geometric dimensions of the tube, the properties of nitrogen, the boundary conditions for velocity and pressure at the inlet and outlet of the tube, and the temperature at the tube walls were used as input data for modeling.

Based on the calculations, the results for the distribution of velocity, pressure, and temperature along the length of the tube were obtained. The results of the test calculation for a channel with a length of 1 m and a pressure drop of 1 Pa are shown in Fig. 1. The graph shows the distribution of temperature and velocity along the length of the channel in a dimensionless form.

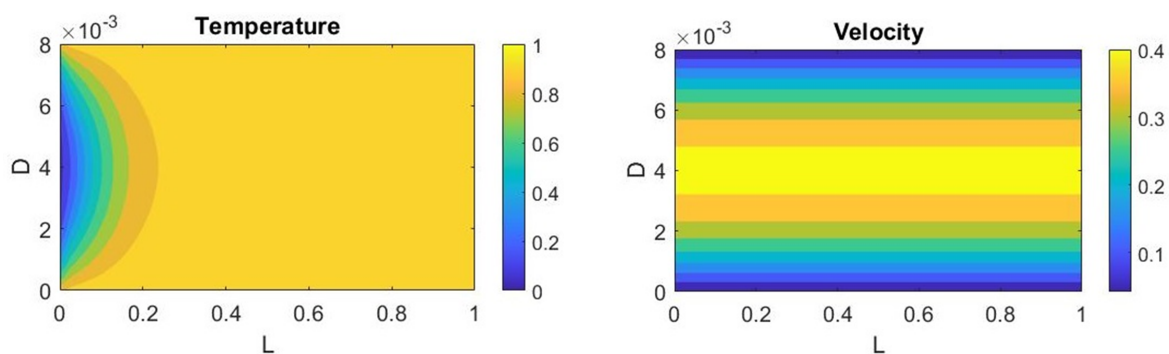


Figure 1. Distribution of temperature and velocity in the computational domain for $L = 1$ m at $dp = 1$ Pa

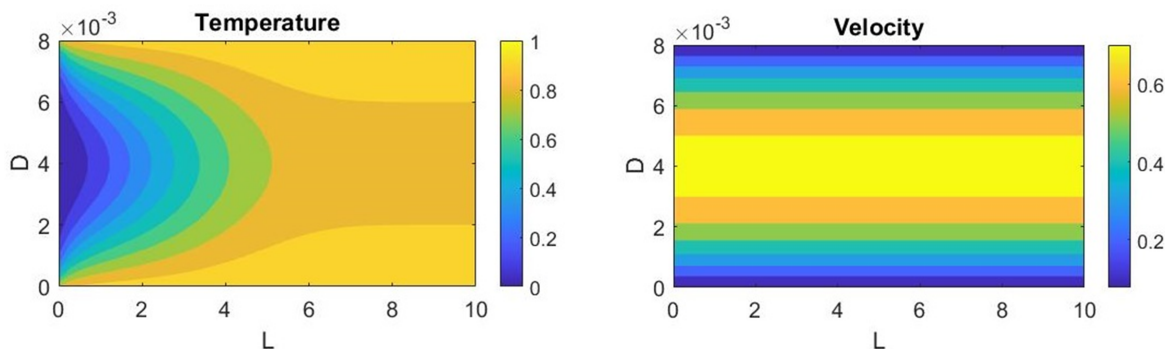


Figure 2. Distribution of temperature and velocity in the computational domain for $L = 10$ m at $dp = 10^4$ Pa

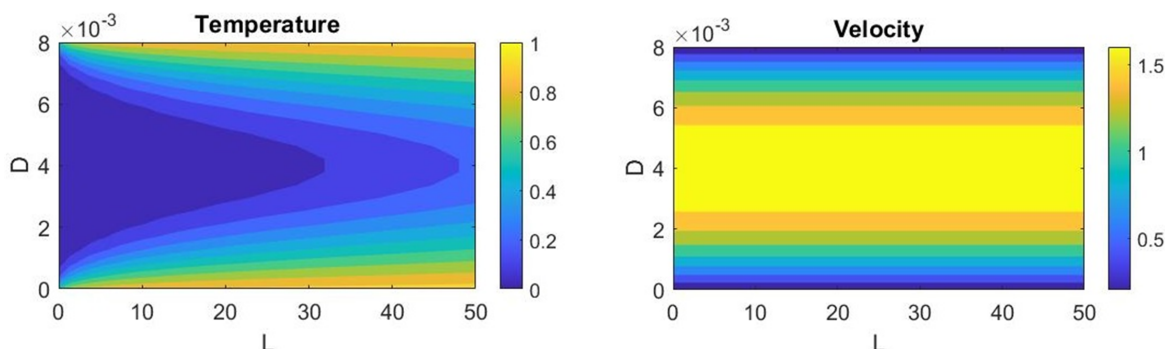


Figure 3. Distribution of temperature and velocity in the computational domain for $L = 50$ m at $dp = 10^5$ Pa

From the obtained results, it follows that the distribution of the nitrogen velocity along the length of the channel has a parabolic shape. The maximum velocity is reached in the middle of the channel and decreases to zero at the tube walls.

The study results showed (Fig. 2) that as the channel length increases to 10 meters and the pressure drop to 10^4 Pa (equivalent to 0.1 atm), the nitrogen is heated closer to the middle of the channel. The maximum nitrogen velocity in the channel is 0.7 m/s.

Further, when the channel length is increased to 50 meters and the pressure drop to 10^5 Pa (equivalent to 1 atm), the nitrogen does not have enough time to heat up in the center of the channel due to the high flow velocity (Fig. 3). Heating occurs only in the near-wall region of the channel. The maximum nitrogen velocity in the channel is 1.5 m/s.

Further research is needed, including the use of more complex channel geometries and experimental studies, to improve the accuracy and validity of the mathematical model and optimize the cold spray process. One option for increasing the complexity of the channel geometry is the use of spiral channels, which have a more complex shape than flat channels and allow for modeling of the flow under more realistic conditions.

4.2. Part 2. Results of numerical simulation in the ANSYS software system

The flow of nitrogen in a spiral steel tube in a 3D configuration is considered to study the features of gas flow in such conditions and to optimize the parameters of the tube

to increase the efficiency of gas heating.

Initial parameters: inner diameter of the tube – 0.008 m; length of the tube – 1.154 m; spiral diameter – 0.06 m; wall thickness of the tube – 0.002 m; initial temperature of the liquid – 293 K; temperature of the tube walls – 1273 K; inlet pressure – 2 – 10 MPa; outlet pressure – 0.1 MPa.

The first step of modeling involves constructing the geometry and mesh. Fig. 4 shows the geometry of the computational domain with the constructed mesh.

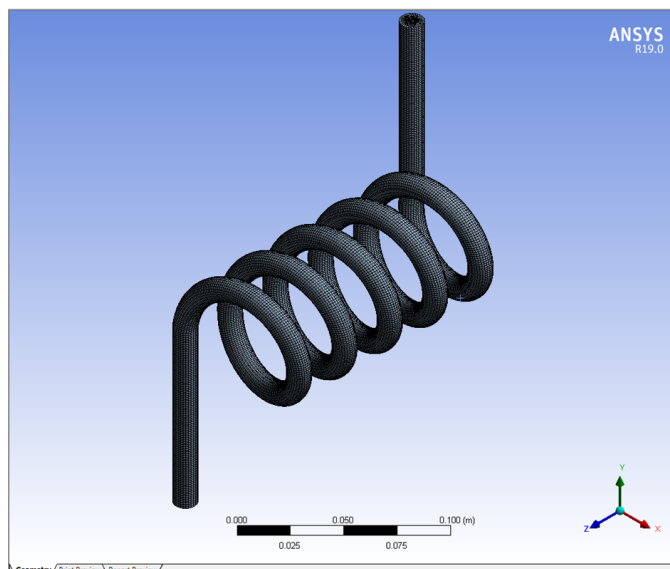


Figure 4. 3D Geometry of the Computational Domain

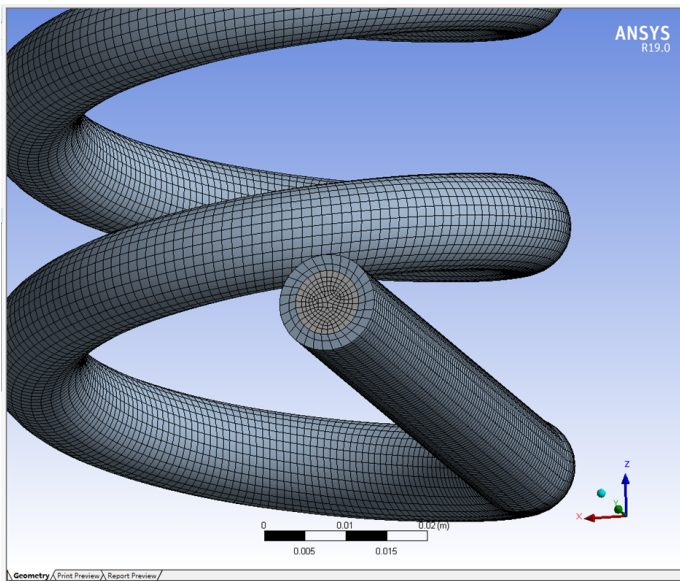


Figure 5. Mesh of the Computational Domain

was created using the ANSYS. Fluent software, and the mesh was built using the AutoMesh module. The computational domain geometry consists of a spiral cylindrical pipe made up of five spirals ($N = 5$) with a distance of 0.03 m between them, into which the working gas is supplied.

Fig. 5 shows the constructed mesh on the inlet of the pipe. The selected cell sizes ($dx = 0.001$ m or 0.0005 m) ensure sufficient computational accuracy while minimizing modeling time.

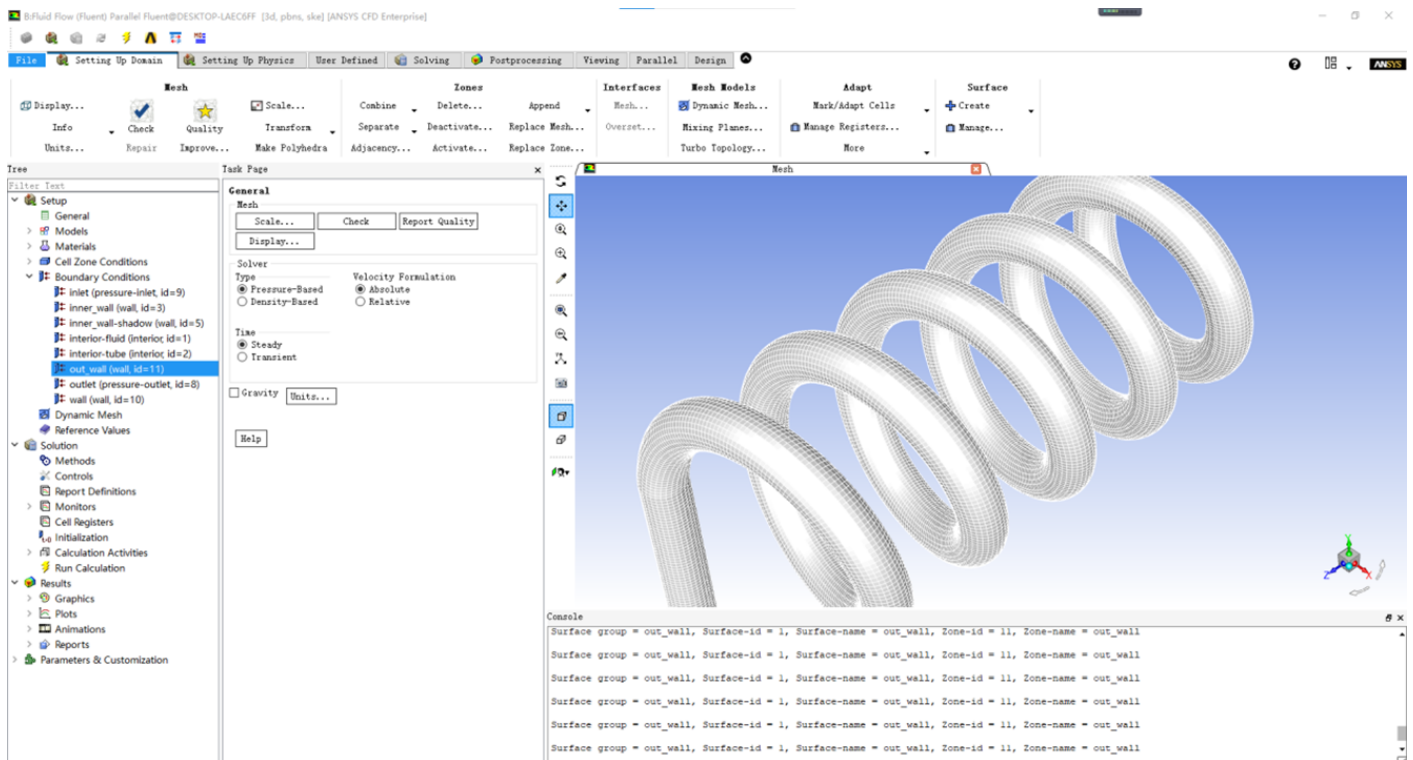


Figure 6. ANSYS Setup Module

The next step in modeling is to set up the model, which includes selecting the model equations, materials and properties, as well as boundary conditions on the inlet, outlet, and walls of the pipe.

Fig. 6 shows the ANSYS software’s setup module, where the model parameters are *conFig.d*. For modeling the flow of nitrogen in a spiral steel pipe, the Navier–Stokes equations for turbulent flow and the $k-\epsilon$ turbulence model were chosen. The wall of the pipe was selected as stainless steel, and the gas properties were specified according to the modeling conditions.

The boundary conditions on the inlet to the channel include the gas temperature, and the pressure is fixed both at the inlet and the outlet of the channel. The walls of the pipe are considered stationary and have a constant temperature. To account for heat exchange between the gas and the walls of the pipe, a heat dissipation condition was chosen.

To refine the model, additional parameters were also specified, such as the coefficient of roughness of the inner wall of the pipe (roughness height $1e-6$ m, roughness constant 0.5), the coefficient of thermal conductivity and heat capacity of the gas according to the properties of nitrogen.

The results of modeling the flow of nitrogen in a spiral steel pipe are presented below. At the inlet to the channel, an initial pressure drop is set, in this case equal to 2 MPa.

Fig. 7 shows the linear pressure distribution in the spiral pipe. From the graph, it can be seen that the pressure in the pipe gradually decreases from the inlet to the outlet, which corresponds to the expected behavior in turbulent gas flow.

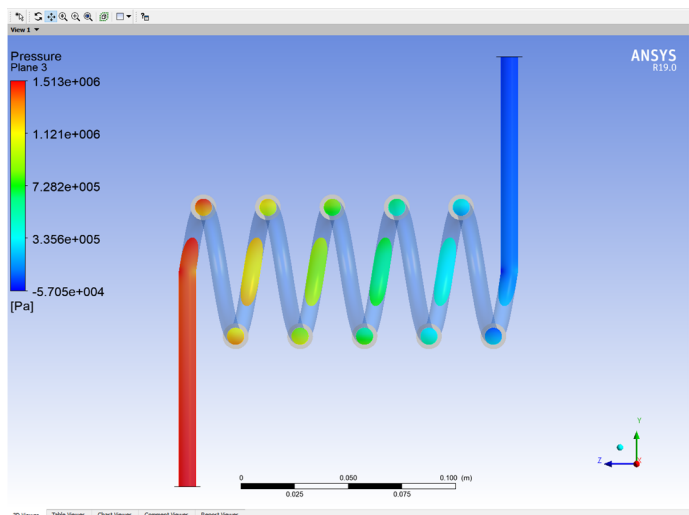


Figure 7. Pressure distribution in the spiral pipe for $N = 5$ at $dp = 2$ MPa

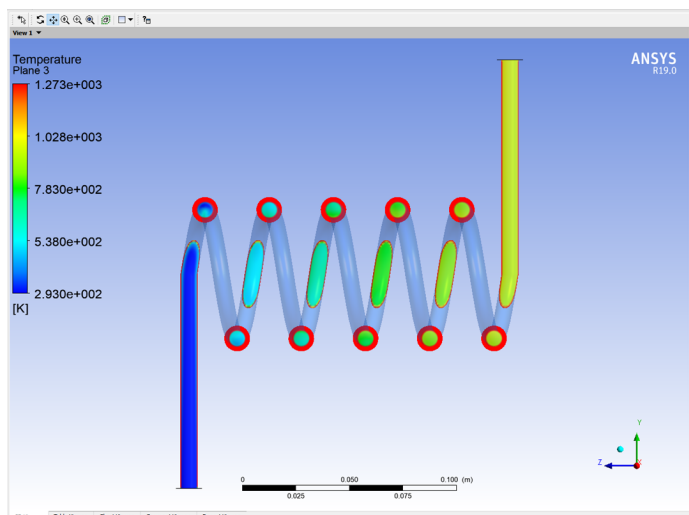


Figure 8. Temperature distribution of the gas in the spiral steel pipe at the given pressure drop for $N = 5$ at $dp = 2$ MPa

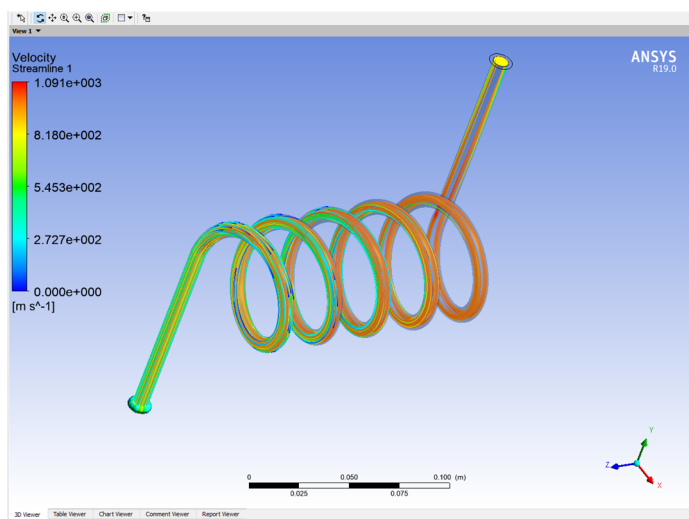


Figure 9. Gas velocity distribution in the spiral tube for $N = 5$ at $dp = 2$ MPa

A constant temperature of 1273 K is set on the walls of the spiral steel pipe. Fig. 8 shows the established temperature distribution in the pipe. It can be seen that nitrogen enters with a minimum temperature of 293 K. As the gas flows through the spiral pipe, it is heated to a temperature of approximately 1000 K.

As can be seen from the Fig. 9, the gas velocity changes along the pipe and reaches its maximum value closer to the outlet of the computational domain. The maximum velocity of the nitrogen is approximately 1.000 m/s.

The results of a parametric study on the influence of pressure differential on the velocity and temperature of the gas at the tube outlet are presented. An investigation into the impact of element mesh size on the solution to the problem at hand has been conducted.

Tab. 1 demonstrates that as the pressure differential increases, the velocity of the gas flow rises, while conversely, the temperature of the gas at the outlet decreases.

Tab. 2 presents the results of calculations with an element mesh size of 0.0005 m.

Upon comparing the results presented in Tabs. 1 and 2, it is evident that the difference between the values is less than 1 %.

When considering the modeling of a spiral tube with a length of 1.154 meters and five rings at fixed parameters based on the pressure differential, it is found that this length is insufficient for the complete heating of the gas at the specified pressure differentials (ranging from 2 MPa to 10 MPa).

Subsequently, the number of spirals was increased to 10 ($N = 10$), with a distance of 0.015 meters between them, while keeping all other parameters unchanged. The overall length of the tube in this case was 2.09 meters.

Fig. 10 shows the temperature distribution at a pressure differential of 2 MPa. It is observed that, starting from the 8th ring, the gas temperature exceeds 1000 K. Upon exiting the tube, the gas temperature reached 1251.15 K.

Tabs. 3 and 4 present the modeling results for various pressure differentials and element mesh sizes. The difference in the results is less than 1 %.

Table 1. Modeling results for $N = 5$ with $dx = 0.001$ m

Pressure, MPa	Velocity, m/s	Temperature, K
2	258.667	1058.12
3	378.155	967.406
4	461.835	951.118
8	565.5605	896.395
10	669.286	841.672

Table 2. Modeling results for $N = 5$ with $dx = 0.0005$ m

Pressure, MPa	Velocity, m/s	Temperature, K
2	258.586	1058.31
3	376.527	968.134
4	459.403	952.506
8	564.6785	896.168
10	669.954	839.83

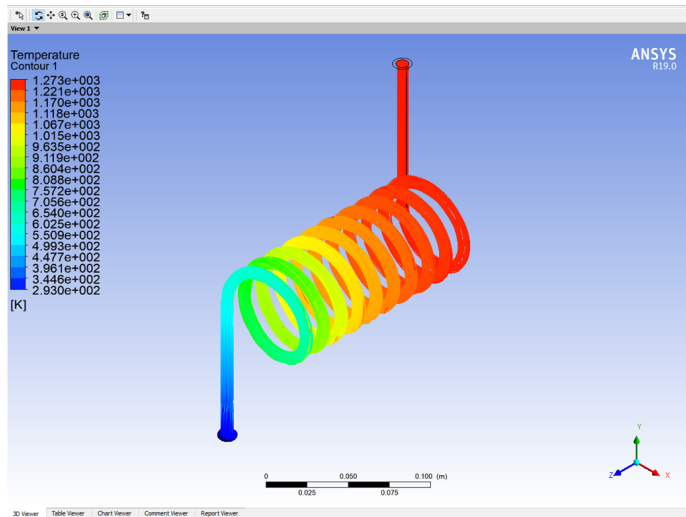


Figure 10. Temperature distribution in the tube with $N = 10$ and $dp = 2$ MPa

At a pressure differential of 2 MPa, the maximum temperature at the outlet is 1251.15 K, which is 193.03 K higher than the calculations with five rings and an increased velocity of 72.171 m/s.

Increasing the pressure differential to 10 MPa results in a temperature decrease of 155.6 K and an increase in velocity by 2.5 times. This is significantly lower than the desired temperature.

The results from Tabs. 1–4 are presented at Figs. 11 and 12 and are qualitatively similar for the meshes 0.001 m and 0.0005 m.

We have modified the spiral diameter from 0.06 m to 0.121 m, increased the channel length to 4 meters, and the number of spirals to 15 ($N = 15$) with a spacing of 0.015 m, using an element size of $dx = 0.002$ m (Fig. 13).

As a result of the modeling with a pressure differential of 10 MPa, the gas velocity was 410.228 m/s, and the temperature was 1257.43 K. This is lower than the desired temperature for the specified pressure differential.

Next, we increased the number of spirals to 17 ($N = 17$) under the same parameters and a pressure differential of 10 MPa. The resulting gas temperature was 1264.76 K, and the flow velocity was 376.234 m/s.

Table 3. Modeling results for $N = 10$ with $dx = 0.001$ m

Pressure, MPa	Velocity, m/s	Temperature, K
2	186.415	1251.15
3	257.071	1227.91
4	302.925	1200.7
8	392.901	1120.41
10	465.696	1095.55

Table 4. Modeling results for $N = 10$ with $dx = 0.0005$ m

Pressure, MPa	Velocity, m/s	Temperature, K
2	183.627	1251.07
3	258.09	1227.9
4	302.539	1200.7
8	393.043	1120.45

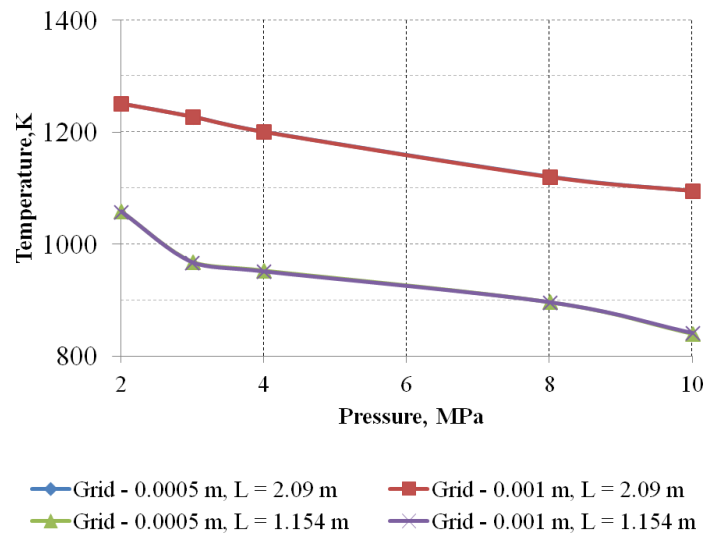


Figure 11. Temperature distribution

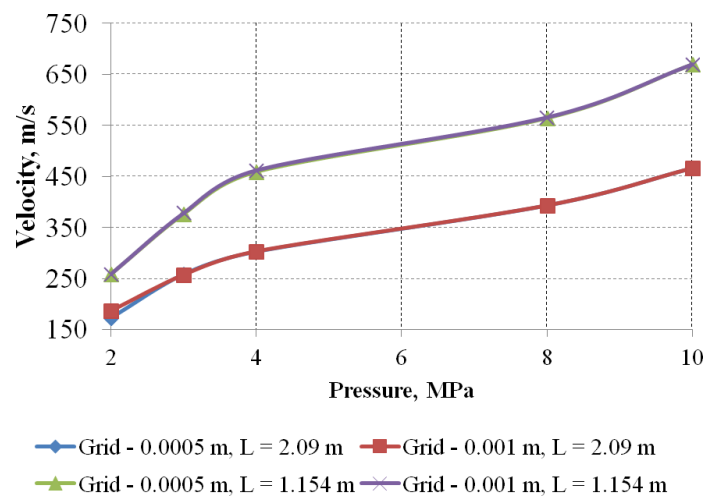


Figure 12. Velocity distribution

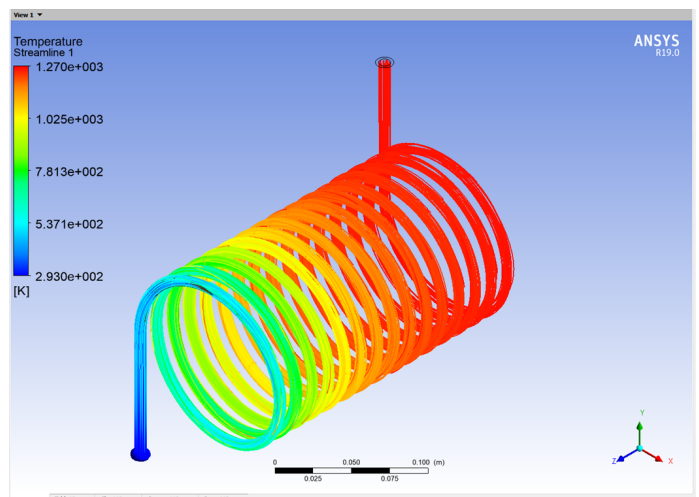


Figure 13. Channel scheme for $N = 15$

5. Conclusion

The modeling results show that the spiral steel tube can effectively be used for heating gas to high temperatures at high speeds. However, it is necessary to consider that at high speeds, additional hydrodynamic effects such as turbulence and shear flows may occur, which can affect the efficiency and stability of the gas (nitrogen) flow.

References

- [1] Kozlov I.A., Leshev K.A., Nikiforov A.A., Demin S.A. [Cold gas dynamic coating spraying (review)] *Proceedings of VIAM [Trudy VIAM]*. 2020. No. 8(90). Pp. 77–93 (in Russian). DOI: [10.18577/2307-6046-2020-0-8-77-93](https://doi.org/10.18577/2307-6046-2020-0-8-77-93)
- [2] Kablov E.N. [Innovative developments of FSUE "VIAM" of the State Research Center of the Russian Federation on the implementation of "Strategic directions for the development of materials and technologies for their processing for the period up to 2030"] *Aviation materials and Technologies [Aviatsionnyye materialy i tekhnologii]*. 2015. No. 1(34). Pp. 3–33 (in Russian). DOI: [10.18577/2071-9140-2015-0-1-3-33](https://doi.org/10.18577/2071-9140-2015-0-1-3-33)
- [3] Kablov E.N., Starcev O.V. [Fundamental and applied studies of corrosion and aging of materials in climatic conditions (review)] *Aviation materials and technologies [Aviatsionnyye materialy i tekhnologii]*. 2015. No. 4(37). Pp. 38–52 (in Russian). DOI: [10.18577/2071-9140-2015-0-4-38-52](https://doi.org/10.18577/2071-9140-2015-0-4-38-52)
- [4] Kablov E.N., Starcev O.V., Medvedev I.M. [Review of foreign experience in corrosion research and corrosion protection products] *Aviation materials and technologies [Aviatsionnyye materialy i tekhnologii]*. 2015. No. 2(35). Pp. 76–87 (in Russian). DOI: [10.18577/2071-9140-2015-0-2-76-87](https://doi.org/10.18577/2071-9140-2015-0-2-76-87)
- [5] Kablov E.N., Nikiforov A.A., Demin S.A., Chesnokov D.V., Vinogradov S.S. [Promising coatings for corrosion protection of carbon steels] *Steel [Stal]*. 2016. No. 6. Pp. 70–81 (in Russian). EDN: WCKVLX
- [6] Vinogradov S.S., Nikiforov A.A., Demin S.A., Chesnokov D.V. [Corrosion protection of carbon steels] *Aviation materials and technologies [Aviatsionnyye materialy i tekhnologii]*. 2017. No. 5. Pp. 242–263 (in Russian). DOI: [10.18577/2071-9140-2017-0-5-242-263](https://doi.org/10.18577/2071-9140-2017-0-5-242-263)
- [7] Champagne V., Helfritsch D. A Demonstration of the Antimicrobial Effectiveness of Various Copper Surfaces. *Journal of Biological Engineering*. 2013. Vol. 7, article number 8. Pp. 1–8. DOI: [10.1186/1754-1611-7-8](https://doi.org/10.1186/1754-1611-7-8)
- [8] Irissou E., Legoux J.-G., Ryabinin A., Jodoin B., Moreau Ch. Review of Cold Spray Process and Technology: Part I—Intellectual Property. *Journal of Thermal Spray Technology*. 2008. Vol. 17, no. 4. Pp. 495–516. DOI: [10.1007/s11666-008-9203-3](https://doi.org/10.1007/s11666-008-9203-3)
- [9] Moridi A., Hassani-Gangaraj S., Guagliano M., Dao M. Cold spray coating: review of material systems and future perspectives. *Surface Engineering*. 2014. Vol. 36, no. 6. Pp. 369–395. DOI: [10.1179/1743294414Y.0000000270](https://doi.org/10.1179/1743294414Y.0000000270)
- [10] Gärtner F., Stoltenhoff T., Schmidt T., Kreye H. The cold spray process and its potential for industrial applications. *Journal of Thermal Spray Technology*. 2006. Vol. 15, no. 2. Pp. 223–232. DOI: [10.1361/105996306X108110](https://doi.org/10.1361/105996306X108110)
- [11] Champagne V., Helfritsch D. Mainstreaming cold spray — push for Applications. *Surface Engineering*. 2014. Vol. 30, no. 6. Pp. 396–403. DOI: [10.1179/1743294414Y.0000000277](https://doi.org/10.1179/1743294414Y.0000000277)
- [12] Van Steenkiste T., Smith J. Evaluation of coatings produced via kinetic and cold spray processes. *Journal of Thermal Spray Technology*. 2004. Vol. 13, no. 2. Pp. 274–282. DOI: [10.1361/10599630419427](https://doi.org/10.1361/10599630419427)
- [13] Marx S., Paul A., Köhler A., Hüttel G. Cold spraying: Innovative layers for new applications. *Journal of Thermal Spray Technology*. 2006. Vol. 15, no. 2. Pp. 177–183. DOI: [10.1361/105996306X107977](https://doi.org/10.1361/105996306X107977)
- [14] Wan W., Li W., Wu D., Qi Zh., Zhang Zh. New insights into the effects of powder injector inner diameter and overhang length on particle accelerating behavior in cold spray additive manufacturing by numerical simulation. *Surface and Coatings Technology*. 2022. Vol. 444. P. 128670. DOI: [10.1016/j.surfcoat.2022.128670](https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2022.128670)
- [15] [Physical properties of nitrogen] *Fizicheskiye svoystva azota*. <https://www.highexpert.ru/content/gases/nitrogen.html> (Accessed: 09.07.2024).
- [16] Kireev V.N., Mukhutdinova A.A., Urmancheev S.F. [Thermoviscous fluids: a hydrodynamic simulator for modeling flow in annular channels with heat exchange] *Termovязkiye zhidkosti: gidrodinamicheskiy simulyator dlya modelirovaniya techeniya v kol'tsevykh kanalakh s teploobmenom*. Certificate of state registration of the computer program No. 2023669294 Russian Federation (application No. 2023668718, registered 12.09.2023, published 13.09.2023) (in Russian). EDN: JYTNM

Information about the Authors

Aigul A. Mukhutdinova

Mavlyutov Institute of Mechanics, UFRS RAS, Ufa, Russia

mukhutdinova23@yandex.ru

ORCID: [0000-0002-5009-002X](https://orcid.org/0000-0002-5009-002X)

Adelina D. Nizamova

Ph.D (Physics & Mathematics)

Mavlyutov Institute of Mechanics, UFRS RAS, Ufa, Russia

adeshka@yandex.ru

ORCID: [0000-0002-7772-2672](https://orcid.org/0000-0002-7772-2672)

Wenya Li

PhD, Professor

School of Materials Science and Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an, Shaanxi Province, China

liwy@nwpu.edu.cn

ORCID: [0000-0002-5067-843X](https://orcid.org/0000-0002-5067-843X)



Численное исследование взаимодействия ударной волны с засыпкой частиц с использованием модели Баера–Нунциато

П.А. Чупров

Институт автоматизации проектирования РАН, Москва

E-mail: petchu@mail.ru

Работа посвящена применению модели Баера–Нунциато для изучения ударно-волновых процессов в засыпках частиц. Численный алгоритм основан на HLLC-подобном решателе и учитывает процессы установления равновесия на межфазной границе с учетом эффекта уплотнения частиц. Постановка задачи согласуется с известными экспериментальными данными. В рамках работы получено качественное и количественное соответствие с результатами натуральных экспериментов и расчетов других авторов, предложено объяснение экспериментально наблюдаемым феноменам.

Ключевые слова: численное моделирование, уравнения Баера–Нунциато, компактирование

Работа выполнена в рамках государственного задания № 24022400174-3

Numerical study of the interaction of a shock wave with a layer of particles using the Baer–Nunziato model

P.A. Chuprov

ICAD RAS

E-mail: petchu@mail.ru

The work is devoted to the application of the Baer–Nunziato model to study shock wave processes in particle beds. The numerical algorithm is based on an HLLC-like solver and takes into account the processes of establishing equilibrium at the interface, taking into account the effect of particle compaction. The problem statement corresponds to the full-scale experiment of B.C. Fan et al. As part of the work, qualitative and quantitative agreement was obtained with the results of natural experiments and calculations of other authors, and an explanation was proposed for the experimentally observed phenomena.

Keywords: numerical modeling, Baer–Nunziato equations, compaction

1. Введение

Пылевой взрыв — одна из самых опасных ситуаций, которые могут возникнуть при работе с химически активными порошками. Такие явления становятся причинами существенных разрушений и человеческих жертв. Веществами, способных стать причиной пылевого взрыва являются угольная пыль, алюминиевая пыль, мука, древесная пыль и многие другие.

Объемный взрыв отложений химически активной пыли начинается с некоторого начального инициирующего взрыва, природа которого может быть совершенно разной. Например, в угольных шахтах таким инициатором является взрыв метана в глубине. Формирующаяся при этом начальном взрыве ударная волна (УВ) распространяется по помещению, взаимодействует с отложе-

ниями химически активной пыли, диспергирует их в воздух, после чего эти частицы уже сами загораются и усиливают взрыв. Таким образом, важную роль в динамике пылевого взрыва имеет распространяющаяся перед волной горения УВ. При взаимодействии УВ со слоем частиц происходит два эффекта: диспергирование частиц над поверхностью слоя, которое напрямую влияет на параметры волны горения, и деформация, промятие слоя как целого. Первое явление является хорошо изученным как на практике, так и численно [1–3], в то же время волновые процессы в самом слое получили недостаточно внимания и не были столь тщательно исследованы, хотя изменение формы поверхности слоя вследствие сложной волновой динамики в нем может оказывать влияние на параметры волны горения.

2. Математическая модель и численный метод

Численное исследование задачи проводилось при помощи модели Баера–Нунциато [4], зарекомендовавшей себя лучшим образом при решении самых разнообразных задач многофазных сред, в том числе и неравновесных. Модель обладает широчайшей областью гиперболичности, что положительно сказывается на качестве численного решения и общей робастности алгоритма. В настоящей работе использовалась двумерная модификация системы, представленная ниже:

$$\mathbf{u}_t + \mathbf{f}_x(\mathbf{u}) + \mathbf{g}_y(\mathbf{u}) = \mathbf{h}(\mathbf{u})\bar{\alpha}_x + \mathbf{i}(\mathbf{u})\bar{\alpha}_y + \mathbf{p} + \mathbf{s},$$

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \bar{\alpha} \\ \bar{\alpha}\bar{\rho} \\ \bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{v} \\ \bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{u} \\ \bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{E} \\ \alpha\rho \\ \alpha\rho v \\ \alpha\rho u \\ \alpha\rho E \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} 0 \\ \bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{v} \\ \bar{\alpha}(\bar{\rho}\bar{v}^2 + \bar{p}) \\ \bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{u}\bar{v} \\ \bar{\alpha}\bar{v}(\bar{\rho}\bar{E} + \bar{p}) \\ \alpha\rho v \\ \alpha(\rho v^2 + p) \\ \alpha\rho uv \\ \alpha v(\rho E + p) \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{g} = \begin{bmatrix} 0 \\ \bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{u} \\ \bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{u}\bar{v} \\ \bar{\alpha}(\bar{\rho}\bar{u}^2 + \bar{p}) \\ \bar{\alpha}\bar{u}(\bar{\rho}\bar{E} + \bar{p}) \\ \alpha\rho u \\ \alpha\rho uv \\ \alpha(\rho u^2 + p) \\ \alpha u(\rho E + p) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{h} = \begin{bmatrix} -\bar{v} \\ 0 \\ \bar{p} \\ 0 \\ \bar{p}\bar{v} \\ 0 \\ -\bar{p} \\ 0 \\ -\bar{p}\bar{v} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{i} = \begin{bmatrix} -\bar{u} \\ 0 \\ 0 \\ \bar{p} \\ \bar{p}\bar{u} \\ 0 \\ 0 \\ -\bar{p} \\ -\bar{p}\bar{u} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{p} = \begin{bmatrix} F \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -(\bar{p} + \beta)F \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \bar{p}F \end{bmatrix}, \quad \mathbf{s} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ M_x \\ M_y \\ I \\ 0 \\ -M_x \\ -M_y \\ -I \end{bmatrix},$$

$$\bar{\alpha} + \alpha = 1,$$

$$\bar{E} = \frac{\bar{v}^2}{2} + \frac{\bar{u}^2}{2} + \frac{\bar{p} + \bar{\gamma}\bar{P}_0}{\bar{\rho}(\bar{\gamma} - 1)},$$

$$E = \frac{v^2}{2} + \frac{u^2}{2} + \frac{p + \gamma P_0}{\rho(\gamma - 1)},$$

$$F = \frac{\alpha\bar{\alpha}}{\mu_c}(\bar{p} - p - \beta),$$

$$\beta = \bar{\alpha}\bar{\rho} \frac{dB}{d\bar{\alpha}} = -\bar{\alpha}\bar{\rho} \cdot a \cdot n \cdot \ln \frac{1-\bar{\alpha}}{1-\bar{\alpha}_0} \left(\frac{B(\bar{\alpha})}{a} \right)^{\frac{n-1}{n}},$$

$$B(\bar{\alpha}) = \begin{cases} B_a(\bar{\alpha}), & \text{если } \bar{\alpha}_0 < \bar{\alpha} < 1, \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases}$$

$$B_a(\bar{\alpha}) = a[b_1(\bar{\alpha}) - b_1(\bar{\alpha}_0) + b_2(\bar{\alpha})]^n,$$

$$b_1(\bar{\alpha}) = (1 - \bar{\alpha}) \cdot \ln(1 - \bar{\alpha}),$$

$$b_2(\bar{\alpha}) = (1 + \ln(1 - \bar{\alpha}_0)) \cdot (\bar{\alpha} - \bar{\alpha}_0).$$

Здесь t — время; x и y — пространственные координаты; α — объемная доля; v — x -компонента скорости; u — y -компонента скорости; ρ — плотность; p — давление; F — скорость релаксации; β — межгранулярное напряжение; μ_c — вязкость компактирования; $B(\bar{\alpha})$ — потенциальная энергия компактирования. Более подробно процессы релаксации и компактирования описаны, например, в [5, 6]. Вектор \mathbf{s} содержит в себе обменные члены: M_x и M_y соответствуют межфазному обмену импульсом, а I — энергией. Для расчета обменных членов использовались корреляции из [7].

Для решения полученной системы использовался метод расщепления по физическим процессам. На первом шаге расщепления рассматривается гиперболическая часть системы, на втором — учет вектора \mathbf{p} , на третьем — вектора \mathbf{s} . Рассмотрим подробнее гиперболический этап. При решении системы (1) уравнение компактирования решается отдельно. Оставшаяся часть системы на гиперболическом шаге записывается в виде:

$$\mathbf{U}_t + \mathbf{F}_x(\mathbf{u}) + \mathbf{G}_y(\mathbf{u}) = \mathbf{H}(\mathbf{u})\bar{\alpha}_x + \mathbf{I}(\mathbf{u})\bar{\alpha}_y,$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \bar{\alpha}\bar{\rho} \\ \bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{v} \\ \bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{u} \\ \bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{E} \\ \alpha\rho \\ \alpha\rho v \\ \alpha\rho u \\ \alpha\rho E \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{v} \\ \bar{\alpha}(\bar{\rho}\bar{v}^2 + \bar{p}) \\ \bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{u}\bar{v} \\ \bar{\alpha}\bar{v}(\bar{\rho}\bar{E} + \bar{p}) \\ \alpha\rho v \\ \alpha(\rho v^2 + p) \\ \alpha\rho uv \\ \alpha v(\rho E + p) \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{u} \\ \bar{\alpha}\bar{\rho}\bar{u}\bar{v} \\ \bar{\alpha}(\bar{\rho}\bar{u}^2 + \bar{p}) \\ \bar{\alpha}\bar{u}(\bar{\rho}\bar{E} + \bar{p}) \\ \alpha\rho u \\ \alpha\rho uv \\ \alpha(\rho u^2 + p) \\ \alpha u(\rho E + p) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H} = \begin{bmatrix} 0 \\ \bar{p} \\ 0 \\ \bar{p}\bar{v} \\ 0 \\ -\bar{p} \\ 0 \\ -\bar{p}\bar{v} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{I} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \bar{p} \\ \bar{p}\bar{u} \\ 0 \\ 0 \\ -\bar{p} \\ -\bar{p}\bar{u} \end{bmatrix}.$$

Ее конечно-объемная аппроксимация выглядит следующим образом:

$$\mathbf{U}_{i,j}^{n+1} = \mathbf{U}_{i,j}^n - \frac{\Delta t^n}{\Delta x} \left[\mathbf{F}_{i+1/2,j}(\mathbf{U}_{i,j}^n, \mathbf{U}_{i+1,j}^n) - \mathbf{F}_{i-1/2,j}(\mathbf{U}_{i-1,j}^n, \mathbf{U}_{i,j}^n) \right] - \frac{\Delta t^n}{\Delta y} \left[\mathbf{G}_{i,j+1/2}(\mathbf{U}_{i,j}^n, \mathbf{U}_{i,j+1}^n) - \mathbf{G}_{i,j-1/2}(\mathbf{U}_{i,j-1}^n, \mathbf{U}_{i,j}^n) \right] + \mathbf{H}(\mathbf{U}_{i,j}^n)\Delta(\bar{\alpha})_x + \mathbf{I}(\mathbf{U}_{i,j}^n)\Delta(\bar{\alpha})_y. \quad (2)$$

Численный поток $\mathbf{F}_{i+1/2,j}(\mathbf{U}_{i,j}^n, \mathbf{U}_{i+1,j}^n)$ рассчитывается с помощью авторского варианта схемы HLLC, основанного на работах [8–11] (остальные численные потоки записываются по аналогии):

$$\begin{aligned}
 \mathbf{F}_{i+1/2,j} &= \begin{bmatrix} \Phi_{i+1/2,j} \\ \bar{\Phi}_{i+1/2,j} \end{bmatrix}, & \mathbf{U}_{i,j} &= \begin{bmatrix} \mathbf{W}_{i,j} \\ \bar{\mathbf{W}}_{i,j} \end{bmatrix}, \\
 \Phi_{i+1/2,j} &= \begin{cases} \Phi_{i,j}^n, & \text{если } S_{i+1/2,j}^- \geq 0, \\ \Phi_{i,j}^n + S_{i+1/2,j}^- (\mathbf{Q}_*^- - \mathbf{W}_{i,j}^n), & \text{если } S_{i+1/2,j}^- < 0 \text{ и } S_{i+1/2,j}^* \geq 0, \\ \Phi_{i+1,j}^n + S_{i+1/2,j}^+ (\mathbf{Q}_*^- - \mathbf{W}_{i+1,j}^n), & \text{если } S_{i+1/2,j}^* < 0 \text{ и } S_{i+1/2,j}^+ \geq 0, \\ \Phi_{i+1,j}^n, & \text{если } S_{i+1/2,j}^+ \leq 0, \end{cases} \\
 S_{i+1/2,j}^+ &= \max(v_{i,j}^n + c_{i,j}^n, v_{i+1,j}^n + c_{i+1,j}^n), \\
 S_{i+1/2,j}^- &= \max(v_{i,j}^n - c_{i,j}^n, v_{i+1,j}^n - c_{i+1,j}^n), \\
 S_{i+1/2,j}^* &= \frac{p_{i+1,j}^n - p_{i,j}^n + \rho_{i,j}^n v_{i,j}^n (S_{i+1/2,j}^- - v_{i,j}^n) - \rho_{i+1,j}^n v_{i+1,j}^n (S_{i+1/2,j}^+ - v_{i+1,j}^n)}{\rho_{i,j}^n (S_{i+1/2,j}^- - v_{i,j}^n) - \rho_{i+1,j}^n v_{i,j}^n (S_{i+1/2,j}^+ - v_{i+1,j}^n)}, \\
 \mathbf{Q}_*^- &= \begin{bmatrix} C^- \\ C^- S_{i+1/2,j}^* \\ C^- v_{i,j}^n \\ C^- \left[\frac{p_{i,j}^n}{\rho_{i,j}^n} + (S_{i+1/2,j}^* - v_{i,j}^n) \left(S_{i+1/2,j}^* + \frac{p_{i,j}^n}{\rho_{i,j}^n (S_{i+1/2,j}^- - v_{i,j}^n)} \right) \right] \end{bmatrix}, \\
 C^- &= \frac{\alpha_{i,j}^n (S_{i+1/2,j}^- - v_{i,j}^n)}{S_{i+1/2,j}^- - S_{i+1/2,j}^*}, \\
 \mathbf{Q}_*^+ &= \begin{bmatrix} C^+ \\ C^+ S_{i+1/2,j}^* \\ C^+ v_{i+1,j}^n \\ C^+ \left[\frac{p_{i+1,j}^n}{\rho_{i+1,j}^n} + (S_{i+1/2,j}^* - v_{i+1,j}^n) \left(S_{i+1/2,j}^* + \frac{p_{i+1,j}^n}{\rho_{i+1,j}^n (S_{i+1/2,j}^+ - v_{i+1,j}^n)} \right) \right] \end{bmatrix}, \\
 C^+ &= \frac{\alpha_{i+1,j}^n (S_{i+1/2,j}^+ - v_{i+1,j}^n)}{S_{i+1/2,j}^+ - S_{i+1/2,j}^*},
 \end{aligned}$$

где c — скорость звука. Решатель является симметричным относительно фаз, поэтому выражения для потока в дисперсной фазе получаются из приведенных выше выражений для газовой фазы путем замены величин без черты на величины с чертой.

Аппроксимация градиента объемной доли $\Delta(\bar{\alpha})_x$ в (2) выглядит как:

$$\begin{aligned}
 \Delta(\bar{\alpha})_x &= \frac{1}{\Delta x} (\delta_{i+1/2,j} - \delta_{i-1/2,j}), \\
 \delta_{i+1/2,j} &= \begin{cases} \bar{\alpha}_{i,j}^n, & \text{если } \bar{S}_{i+1/2,j}^* \geq 0, \\ \bar{\alpha}_{i+1,j}^n, & \text{иначе.} \end{cases}
 \end{aligned}$$

Наконец, аппроксимация уравнения компактирования выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \bar{\alpha}_{i,j}^{n+1} &= \bar{\alpha}_{i,j}^n - \frac{\Delta t^n}{\Delta x} [\bar{S}_{i+1/2,j}^* \delta_{i+1/2,j} - \bar{S}_{i-1/2,j}^* \delta_{i-1/2,j}] - \\
 &\quad - \frac{\Delta t^n}{\Delta y} [\bar{S}_{i,j+1/2}^* \delta_{i,j+1/2} - \bar{S}_{i,j-1/2}^* \delta_{i,j-1/2}].
 \end{aligned}$$

3. Постановка задачи и результаты

Схематично постановка задачи, основанная на натурном эксперименте из [12], представлена на рис. 1. Через грань АВ в область входит УВ, проходящая сначала над твердым уступом АG, после чего взаимодействующая с засыпкой частиц GDEF. На всех остальных гранях используется граничное условие жесткой стенки с проскальзыванием. В начальный момент времени внутри расчетной области в каждой точке скорости обеих фаз равны нулю, давления равны атмосферному.

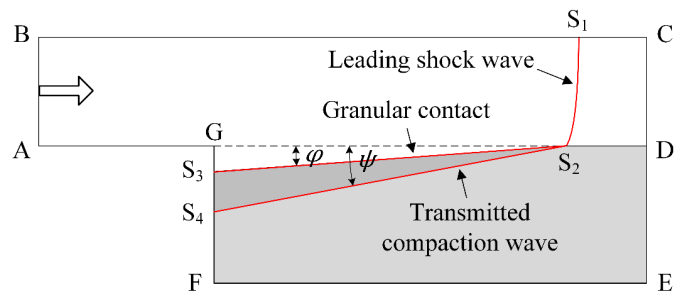


Рис. 1. Схематичное изображение волновой картины

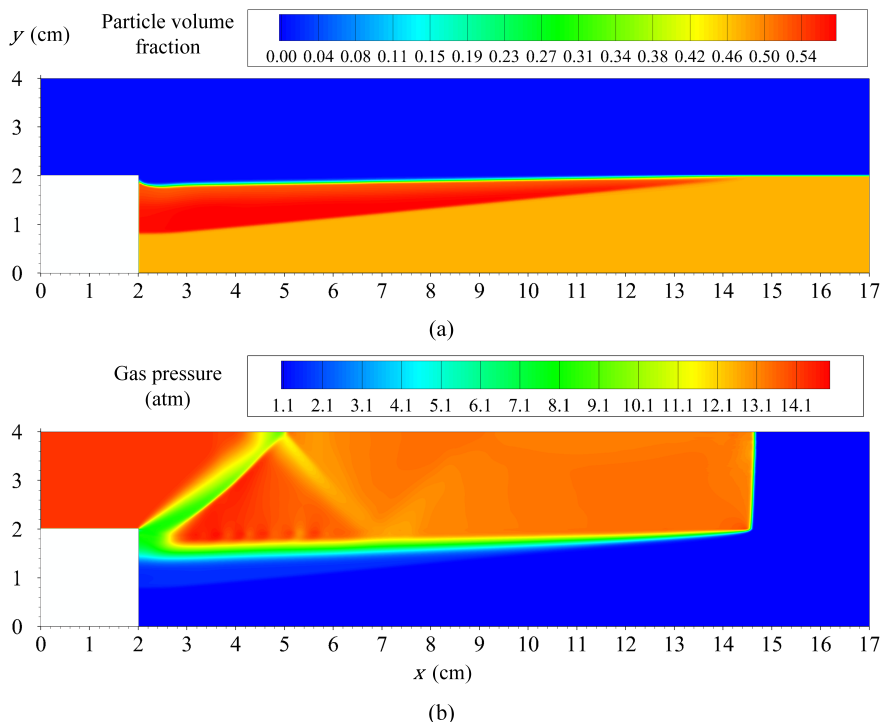


Рис. 2. Пространственное распределение объемной доли частиц (вверху) и давления газа (внизу)

В результате численного моделирования были получены результаты, качественно и количественно соответствующие имеющимся в литературы данным. На рис. 2 представлено пространственные распределения давления газа и объемной доли частиц в момент времени 122 мкс. Из рисунков заметно, что в процессе взаимодействия и УВ, и слой деформируются, происходит промятие слоя под некоторым углом. Более того, под поверхностью слоя формируется зона повышенной объемной доли частиц — зона компактирования. Краевые эффекты у угла уступа и отражение волны компактирования от дна канала не являются предметом интереса настоящей работы, однако представляют перспективную цель дальнейших исследований.

Интерес представляет зависимость геометрических характеристик деформированного слоя от интенсивности проходящей волны. В натуральных экспериментах было обнаружено, что с увеличением числа M проходящей волны слой проминается все сильнее, то есть угол φ увеличивается, а волна компактирования проникает в слой на все меньшую толщину, то есть угол ψ уменьшается. Численные эксперименты свидетельствуют о том, что существенное влияние на формирование волновой структуры в слое имеет так называемая «пробка» — область уплотненных частиц перед волной сжатия. Эта «пробка» препятствует проникновению сжатого газа внутрь слоя частиц, ограничивая тем самым зону уплотнения. Доля частиц в «пробке» возрастает с увеличением числа M , тем самым увеличивая ее останавливающий эффект и уменьшая угол ψ . На рис. 3 наглядно продемонстрировано наличие вышеупомянутого эффекта, а также наличие эффекта «пробки». В рамках настоящей работы интерес представляет пара-

метрическое исследование «пробки». На рис. 4 представлены аналогичные распределения объемной доли частиц, но для случая разных значений критической объемной доли $\bar{\alpha}_0$ при превышении которого начинают учитываться эффекты уплотнения частиц.

Ожидаемо, что при увеличении этого значения плотность возникающей пробки увеличивается, а глубина уменьшается в полном соответствии с предложенным ранее механизмом формирования течения в слое — более плотная пробка эффективнее препятствует проникновению волны вглубь слоя. Рассмотрим зависимость течения еще от одного параметра закона компактирования — n , который входит в выражение для определения межгранулярного напряжения.

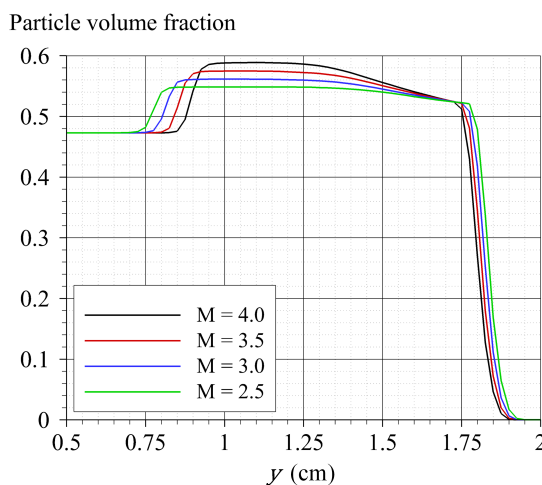


Рис. 3. Зависимость объемной доли частиц от вертикальной координаты для разных интенсивностей проходящей волны в сечении $x = 3$ см

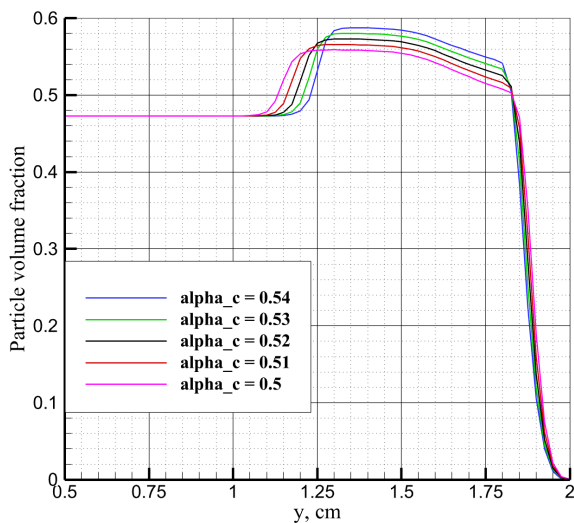


Рис. 4. Зависимость объемной доли частиц от вертикальной координаты для разных значений α_0 в сечении $x = 4$ см

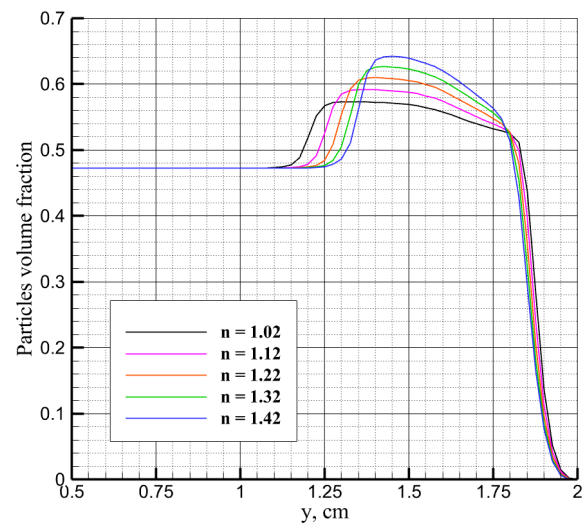


Рис. 5. Зависимость объемной доли частиц от вертикальной координаты для разных значений n в сечении $x = 4$ см

На рис. 5 продемонстрированы соответствующие результаты. Представленные кривые показывают аналогичную предыдущим случаям зависимость — увеличение объемной доли в пробке уменьшает ее длину. Стоит отметить, что во всех представленных случаях сокращение длины пробки происходило с обеих сторон, то есть одновременно с уменьшением проникновения волны компактирования вглубь слоя сама поверхность слоя деформировалась больше, несмотря на то, что интенсивность УВ в двух последних случаях не менялась. В рамках настоящей работы предполагается, что это вызвано тем, что более плотный слой эффективнее воспринимает импульс от УВ, что обуславливает более сильную деформацию.

4. Заключение

В рамках настоящей работы продемонстрирована возможность эффективного использования модели Баера–Нунциато для численного моделирования взаимодействия проходящей УВ со слоем частиц. Полученные данные свидетельствуют об эффективности предложенного численного метода, основанного на методе HLLC. На основании полученных данных было предложено объяснение экспериментально наблюдаемому феномену зависимости геометрических характеристик слоя от интенсивности проходящей УВ, заключающееся в формировании под поверхностью слоя области повышенной объемной доли, препятствующей дальнейшему распространению деформации вглубь слоя. Проведено исследование зависимости характеристик деформированного слоя от параметров закона уплотнения частиц. Полученные данные подтверждают правильность предложенного в работе объяснения.

Список литературы / References

- [1] Shimura K., Matsuo A. Using an extended CFD-DEM for the two-dimensional simulation of shock-induced layered coal-dust combustion in a narrow channel // *Proc. Comb. Inst.* 2019. V. 37, Issue 3. Pp. 3677–3684. DOI: [10.1016/j.proci.2018.07.066](https://doi.org/10.1016/j.proci.2018.07.066)
- [2] Song Y., Zhang Q. Criterion and propagation process of spark-induced dust layered explosion // *Fuel*. 2020. V. 267. Pp. 117205. DOI: [10.1016/j.fuel.2020.117205](https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.117205)
- [3] Guhathakurta S., Houim R.W. Impact of particle diameter and thermal radiation on the explosion of dust layers // *Proc. Comb. Inst.* 2023. V. 39, Issue 3. Pp. 2905–2914. DOI: [10.1016/j.proci.2022.10.011](https://doi.org/10.1016/j.proci.2022.10.011)
- [4] Baer M.R., Nunziato J.W. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition in reactive granular materials // *International Journal of Multiphase Flow*. 1986. V. 12, Issue 6. Pp. 861–889. DOI: [10.1016/0301-9322\(86\)90033-9](https://doi.org/10.1016/0301-9322(86)90033-9)
- [5] Chuprov P.A. Numerical simulation of combustion wave propagation in a black powder charge using a two-fluid model // *Adv. Theory and Practice of Comp. Mech. Smart Innovation, Sys. Tech.* Springer. 2022. V. 274. Pp. 167–178. DOI: [10.1007/978-981-16-8926-0_12](https://doi.org/10.1007/978-981-16-8926-0_12)
- [6] Saurel R., Favrie N., Petitpas F., Lallemand M.-H., Gavriluyk S.K. Modeling dynamic and irreversible powder compaction // *J. Fluid Mech.* 2010. V. 664. Pp. 348–396. DOI: [10.1017/S0022112010003794](https://doi.org/10.1017/S0022112010003794)
- [7] Houim R.W., Oran E.S. A multiphase model for compressible granular-gaseous flows: formulation and initial tests // *J. Fluid Mech.* 2016. V. 789. Pp. 166–220. DOI: [10.1017/jfm.2015.728](https://doi.org/10.1017/jfm.2015.728)
- [8] Li Q., Feng J., Cai T., Hu C. Difference scheme for two-phase flow // *App. Math. Mech.* 2004. V. 25. Pp. 536–545. DOI: [10.1007/BF02437602](https://doi.org/10.1007/BF02437602)
- [9] Liang S., Liu W., Yuan L. Solving seven-equation model for compressible two-phase flow using multiple GPUs // *Comp. & Fluids*. 2014. V. 99. Pp. 156–171. DOI: [10.1016/j.compfluid.2014.04.021](https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2014.04.021)
- [10] Tokareva S.A., Toro E.F. HLLC-type Riemann solver for the Baer-Nunziato equations of compressible two-phase flow // *J. Comp. Phys.* 2010. V. 229, Issue 10. Pp. 3573–3604. DOI: [10.1016/j.jcp.2010.01.016](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2010.01.016)

- [11] Lochon H., Daude F., Galon , HerardJ.-M. HLLC-type Riemann solver with approximated two-phase contact for the computation of the Baer-Nunziato two-fluid model // J. Comp. Phys. 2016. V. 326. Pp. 733–762.
DOI: [10.1016/j.jcp.2016.09.015](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2016.09.015)
- [12] Fan B.C., Chen Z.H., JiangX.H., Li H.Z. Interaction of a shock wave with a loose dusty bulk layer // Shock Waves. 2007. V. 16. Pp. 179–187.
DOI: [10.1007/s00193-006-0059-5](https://doi.org/10.1007/s00193-006-0059-5)

Сведения об авторах / Information about the Authors

Петр Анатольевич Чупров
Институт автоматизации проектирования РАН, Москва,
Россия

Petr Anatolievich Chuprov
Institute of Computer Aided Design of the RAS, Moscow,
Russia
petchu@mail.ru
ORCID: [0000-0003-1564-205X](https://orcid.org/0000-0003-1564-205X)



Собственные колебания жидкости в вертикальной и горизонтальной скважинах

Д.А. Насырова

Институт механики им. Р.Р. Мавлютова УФИЦ РАН, Уфа

E-mail: dinasyrova@mail.ru

В настоящее время при добыче нефти широко применяется технология гидроразрыва пласта. В пласте создаются трещины и закрепляются пропантами для предотвращения их смыкания. В работе рассматриваются собственные колебания жидкости в вертикальной нефтяной скважине при закрытой верхней границе и в горизонтальной скважине со множественным гидроразрывами пласта. На основе математической модели, описывающей движение столба жидкости в скважине и фильтрацию в призабойной зоне, подверженной гидроразрыву пласта, получены решения задачи о собственных затухающих колебаниях столба жидкости в скважине. Получено характеристическое уравнение для определения собственных частот колебаний. Исследованы зависимости собственной частоты, коэффициента затухания и декремента затухания от проницаемости пласта. Обоснована возможность применения гидроудара для получения информации о состоянии скважины и геометрии трещины гидроразрыва пласта.

Ключевые слова: гидроразрыв пласта, нефтяная скважина, собственные колебания, проницаемость пласта, коэффициент затухания

Работа выполнена при поддержке средствами госбюджета по госзаданию №075-00570-24-01 (Гидрогазодинамика многофазных, термовязких и микродисперсных сред)

Natural fluctuations of the liquid in vertical and horizontal wells

D.A. Nasyrova

Mavlyutov Institute of Mechanics UFRC RAS, Ufa

E-mail: dinasyrova@mail.ru

Currently, hydraulic fracturing (FRACKING) technology is widely used in oil production. Cracks are created in the formation, fixed with propanths to prevent them from closing. The paper considers the natural fluctuations of the liquid in a vertical oil well with a closed upper boundary and in a horizontal well with multiple fracturing. Based on a mathematical model describing the movement of a column of liquid in a well and filtration in a bottomhole zone exposed to hydraulic fracturing, solutions to the problem of intrinsic damping vibrations of a column of liquid in a well are obtained. We have obtained a characteristic equation for determining the natural frequencies of vibrations. The dependences of natural frequency, attenuation coefficient and attenuation decrement on crack conductivity and reservoir permeability are investigated.

Keywords: hydraulic fracturing, oil well, natural oscillations, reservoir permeability, attenuation coefficient

1. Введение

Нефть — одно из ценнейших полезных ископаемых на Земле и ключевой ресурс мировой экономики. Добыча нефти — сложный и наукоемкий процесс, который непрерывно модернизируется и совершенствуется как в практической, так и в теоретической областях. На данный момент одной из проблем нефтегазодобывающей отрасли является поддержание уровня добычи нефти на фоне истощения залежей с традиционными запасами и вовлечения в разработку трудноизвлекаемых запасов углеводородов. В этих условиях широкое применение получили геолого-технологические мероприятия по ин-

тенсификации добычи нефти, наиболее эффективным из них считается гидравлический разрыв пласта (ГРП). Метод ГРП, при наличии трещины в пласте, приводит к кардинальному изменению дебита скважины [1], и, следовательно, к интенсификации работы скважины. Важно отметить, что технология ГРП не является методом бурения, а используется для увеличения притока нефти из скважины после завершения бурения и удаления буровой установки с площадки. Процесс занимает в среднем от трех до пяти дней. Как только процесс завершен, скважина готова к добыче нефти. По мере развития технологии ГРП перед исследователями вста-

ют вопросы определения количественных характеристик гидроразрыва, геометрии трещин и изменения коллекторских характеристик пласта, в связи с чем перед ними встают новые задачи. Так, например, задача по определению параметров трещины ГРП необходима для расчета количества пропантов, моделирования процесса фильтрации жидкости, а также для установления связи между дебитом и расходом жидкости.

Сигналы давления, вызванные гидроударом, были смоделированы в работе [2] с использованием численной модели. Данная модель объединяет уравнения неразрывности и импульса для скважины с трещиной ГРП. В продолжении работы [3] модель в статье [2] была представлена в виде цепи с последовательно соединенными сопротивлением R , емкостью C и индуктивностью I с целью определения влияния R , C и I на сигнал гидроудара. Для этого две переменные оставались постоянными, а третья менялась в диапазоне допустимых значений. В работе показано, что изменения сопротивления разрушению, емкости или инерции изменяют сигнатуру моделируемого гидравлического удара. Изменение емкости влияет на период колебаний гидроудара и среднее давление, поддерживаемое гидравлическим ударом, изменение сопротивления — на начальную амплитуду гидроудара и скорость затухания колебаний, а вариации инерции — на период действия гидравлического удара. Авторы работы [2] пришли к следующему выводу. Диагностика трещины с гидроударом дает важную информацию о созданной трещине, такую как относительный размер, который получается из расчетной длины, ширины и высоты, и связность, которая указана значением сопротивления R , со стволом скважины.

Задача об отборе жидкости из пласта в скважину или закачке жидкости из скважины в пласт при наличии трещины ГРП, перпендикулярной стволу скважины в режиме постоянного расхода, рассматривалась в работе [4]. Для построения приближенных решений авторы использовали метод последовательной смены стационарных состояний (ПССС). В основе метода ПССС стоит предположение, что давление в пласте меняется по времени значительно медленнее, чем по координатам. Получены аналитические решения, описывающие эволюцию давления в трещине при постоянном расходе флюида из пласта в скважину; проведено сравнение результатов точного и приближенного решения; проанализировано влияние пористости, проницаемости и плотности пласта и трещины на эволюцию давления в трещине и скважине. Основной вывод работы: сравнение результатов точного и приближенного решения показало, что они практически совпадают.

В работе [5] представлена новая методика анализа данных о переходных процессах в скважине, пересеченной вертикальной трещиной с конечной проводимостью. Данная технология базируется на теории билинейных течений, что позволяет учитывать переходные линейные течения как в трещине, так и в пласте. Рассмотрена скважина с вертикальной трещиной ГРП с

постоянным дебитом в бесконечном горизонтальном изотропном пласте. По известным значениям проницаемости, пористости, толщины и начального давления пористой среды и полудлины, ширины, проницаемости и пористости трещины ГРП построены кривые нового типа, которые доступны для анализа давления в скважинах с трещиноватостью.

Хабибуллин И.Л. и Хисамов А.А. [6–8] в своих работах решали задачи нестационарной фильтрации в системе «пласт–трещина ГРП». Авторы пришли к выводу, что наличие трещины ГРП влияет на зависимость давления, скорости фильтрации от фильтрационных характеристик системы. Авторы построили и провели анализ аналитических решений данной задачи. Было изучено влияние длины трещины на количественные характеристики процесса.

Моделирование нестационарной фильтрации вокруг скважины с вертикальной трещиной гидроразрыва наиболее детально представлено в работе [9], где для описания фильтрации в трещине ГРП использована классическая модель радиальной фильтрации. Авторами получены точные решения, с их помощью был проведен анализ коллекторских свойств пласта и трещины ГРП. Также оценено влияние вязкости на эволюцию давления в трещине.

Решения для работы скважины с трещиной ГРП при постоянном дебите и давлении получены в работе [10], где были рассмотрены скважины как бесконечной, так и конечной длины. Авторы использовали метод изменения стационарных состояний. Получено, что в начальный момент фильтрации вдоль стенок трещины ГРП скорость фильтрации намного меньше, чем нормальная составляющая к стенке.

Задача о выходе процесса функционирования скважины на стационарный режим при постоянных перепадах давления и дебите рассмотрена в работе [11]. Получены точные и приближенные аналитические решения, а также формулы, определяющие дебит скважины, аналитические формулы Дюпюи ($Q = \frac{2\pi k}{\mu} \frac{p_k - p_c}{\ln(R_k/r_c)}$, где μ — динамическая вязкость, k — проницаемость, p_k — давление на внешней границе пласта, p_c — давление на забое скважины, r_c — радиус скважины, R_k — радиус цилиндрического пласта).

Большое внимание в настоящее время уделяется трещинам многозонного гидроразрыва пласта (МГРП). МГРП позволяет в одной пробуренной горизонтальной скважине провести несколько равноценных ГРП. Благодаря МГРП можно ввести в разработку ранее нерентабельные запасы и увеличить темпы выработки и коэффициент нефтеотдачи. Так в работе [12] представлены теоретические основы и выполнена апробация способа понижения размерности задачи о притоке пластового флюида к трещинам МГРП за счет моделирования пространственной фильтрации в пласте с помощью одномерных трубок тока. Две постановки модельных задач, рассмотренные в работе, позволили отразить две принципиально различные структуры фильтрационных по-

токов: в крайнем сегменте области дренирования МГРП с эллиптическим контуром питания и во внутреннем сегменте в форме прямоугольника между двумя соседними трещинами МГРП. Получены аналитические выражения функций свойств для трубок тока с различием внутренних и внешних берегов трещин.

В настоящей работе предлагается метод определения качества ГРП, используя возбуждение собственных колебаний столба жидкости как в вертикальной скважине с одной трещиной, так и в горизонтальной скважине с множественным ГРП, с целью получения характеристических уравнений для определения собственных частот колебаний. Построены теоретические модели возникновения колебаний жидкости, образующихся при гидроударе в результате остановки насоса или перекрытия скважины.

2. Исследование собственных колебаний в вертикальной скважине

Проведем исследование собственных колебаний в вертикальной скважине с использованием метода акустической спектроскопии. Этот метод позволяет исследовать состояние скважины и призабойной зоны путем возбуждения собственных колебаний жидкости. Рассматриваемая в настоящей работе система «вертикальная скважина–трещина ГРП–пласт» приведена на рис. 1. Данная система предполагает, что

- трещина ГРП вертикальная и симметричная;
- скважина радиуса a через перфорированный участок длины l_p сообщается с трещиной и окружающим трещину и скважину пористым проницаемым пластом;
- жидкость растекается сначала по трещине и потом перпендикулярно в пласт, а также от открытого участка скважины радиально;
- в начальный момент времени при $t = 0$ система находится в состоянии покоя;

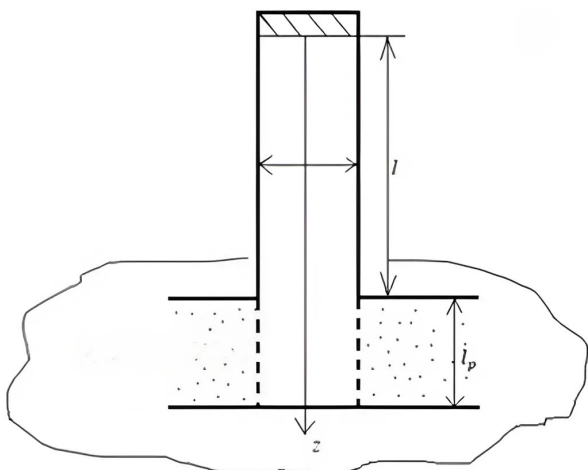


Рис. 1. Схема обсаженной скважины, сообщающейся с пластом

- протяженность столба жидкости в закрытом участке скважины l значительно превышает открытый ее участок протяженностью l_p ;
- ось Oz направлена вертикально вниз и начало координат находится на верхней границе скважины.

Для изучения колебаний столба жидкости требуется описать фильтрацию жидкости в окрестности скважины и в трещине ГРП.

Уравнения, выражающие законы сохранения масс и импульсов для жидкости, движущейся в скважине, в линеаризованном приближении имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho_0 \frac{\partial w}{\partial z} &= 0, \quad \rho_0 \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial z} = -\frac{2\sigma}{a_c}, \quad (0 < z < l), \\ \sigma &= \mu \int_{-\infty}^t \frac{\partial w / \partial \tau}{\sqrt{\pi \nu (t - \tau)}} d\tau, \quad \nu = \frac{\mu}{\rho_0}, \quad \rho = \frac{P}{C^2}, \end{aligned} \quad (1)$$

где ρ — плотность жидкости; P — давление в скважине; w — линейная скорость жидкости; C — скорость звука в жидкости; σ — касательное напряжение в жидкости на поверхности стенки скважины; μ и ν — коэффициенты динамической и кинематической вязкости жидкости. Нижний индекс «0», p или f показывает, что параметр относится к невозмущенному состоянию, пласту или трещине.

Запишем граничные условия для (1):

$$z = 0 : w(0, t) = 0,$$

$$z = l : P(l, t) = P^{(l)}(t), \quad w(l, t) = w^{(l)}(t).$$

Уравнение сохранения масс для открытого участка скважины сохранения масс имеет вид:

$$\begin{aligned} \pi a^2 l_p \frac{\partial \rho_p}{\partial t} &= \pi a^2 \rho_0 w^{(l)} - \\ &- 2\pi a l_p \rho_0 u_{pa} - 2d_f l_p \rho_0 u_{f0}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь u_{pa} — скорость фильтрации жидкости в окружающую проницаемую горную породу через стенку открытого участка скважины; u_{f0} — скорость фильтрации жидкости в трещину ГРП шириной d_f .

Для определения скорости фильтрации жидкости в пласте решается внешняя (от открытого участка скважины) фильтрационная задача в пласте и трещине. Основное уравнение упругого режима фильтрации в пласте вокруг скважины записывается в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_p}{\partial t} &= \kappa_p \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial P_p}{\partial r} \right), \\ (l < z < l + l_p, \quad a < r < \infty), \\ \kappa_p &= \frac{k_p \rho_0 C^2}{m_p \mu}, \end{aligned} \quad (3)$$

где r — радиальная координата (расстояние от оси скважины); k_p — проницаемость пласта. Отметим, что проницаемость пласта является важным параметром, который показывает способность горной породы пропускать жидкость при перепаде давлений.

Граничные условия на границе «скважина–пласт» и на большом удалении от скважины для давления в пласте выглядят следующим образом:

$$P_{p|r=a} = P^{(l)}, \quad P_{p|r \rightarrow \infty} = 0.$$

Закон Дарси для описания скорости фильтрации через стенку скважины и в трещину выглядит следующим образом:

$$u_{pa} = u_{p|r=a} = -\frac{k_p}{\mu} \left(\frac{\partial P_p}{\partial r} \right)_{|r=a}, \quad (4)$$

$$u_{f0} = u_{p|x=0} = -\frac{k_f}{\mu} \left(\frac{\partial P_f}{\partial x} \right)_{|x=0}. \quad (5)$$

Фильтрация флюида по трещине и в пласте описывается системой уравнений:

$$\frac{\partial P_f}{\partial t} = \kappa_f \frac{\partial P_f^2}{\partial x^2} + \frac{2m_p \kappa_p}{m_f d_f} \left(\frac{\partial P_p}{\partial y} \right)_{y=0}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial P_p}{\partial t} = \kappa_p \frac{\partial P_p^2}{\partial y^2}. \quad (7)$$

Здесь $P_f = P_f(x, t)$ — давление в трещине; $P_p = P_p(x, y, t)$ — давление в пласте, где координата y отсчитывается от стенки трещины; $\kappa_i = \frac{k_i \rho_0 C^2}{m_i \mu}$ ($i = p, f$) — коэффициент пьезопроводности. Этот коэффициент дает характеристику скорости перераспределений давлений в упругом пласте из-за изменения проницаемости.

Система уравнений (6)–(7) может быть сведена к интегро-дифференциальному уравнению, описывающему динамику давления в трещине. Для данной задачи, рассматриваемой в настоящей работе, подходит упрощенное уравнение, которое получено в работе [9]:

$$\frac{\partial^2 P_f}{\partial x^2} = A_f \int_{-\infty}^t \frac{\partial P_f / \partial \tau}{\sqrt{\pi(t-\tau)}} d\tau, \quad (8)$$

$$A_f = \frac{2 m_p \sqrt{\kappa_p}}{d_f m_f \kappa_f}$$

$(l < z < l + l_p, \quad 0 < x < \infty).$

Учитывая закон Дарси (4), (5) и уравнения (1) из уравнения (2) следует:

$$\frac{1}{\rho_0 C^2} \frac{\partial^{(l)}}{\partial t} = \frac{w^{(l)}}{l_p} + \frac{2k_p}{a\mu} \left(\frac{\partial P_p}{\partial r} \right)_{|r=a} + \frac{2d_f k_f}{\pi a^2 \mu} \left(\frac{\partial P_f}{\partial x} \right)_{|x=0}. \quad (9)$$

Решение уравнений (1) ищется в комплексном виде:

$$P = A^{(P)}(z) e^{i\omega t}, \quad w = A^{(w)}(z) e^{i\omega t}, \quad (10)$$

где $\omega = \Omega + i\delta$ — комплексная частота собственных колебаний. Отметим, что действительная часть Ω отвечает за период колебаний $T = 2\pi/\Omega$, а мнимая часть δ — за интенсивность затухания.

Используя граничное условие, при $z = l$ находим решение системы (1) для $P^{(l)}$ и $w^{(l)}$:

$$P^{(l)} = c_1 \cos(Kl) e^{i\omega t} w^{(l)} = i \frac{c_1}{\rho_0 \omega} \frac{K \sin(Kl)}{\left(1 + \frac{2}{y}\right)} e^{i\omega t}, \quad (11)$$

$$\text{где } K^2 = \frac{\left(1 + \frac{2}{y}\right) \omega^2}{C^2}; \quad y = \left(\frac{i\omega a^2}{v}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Решения уравнений (3) и (8) запишутся как

$$A_p^{(p)}(r) = A_p^{(p)}(l) \frac{K_0(rq)}{K_0(aq)}, \quad (12)$$

$$A_f^{(p)} = A_p^{(p)}(l) e^{iK_f x},$$

где

$$A_p^{(p)}(l) = c_1 \cos(Kl), \quad K_f = A_f \sqrt{i\omega},$$

$$K_0 = \int_0^{\infty} e^{x \cosh \psi} d\psi.$$

Подставляя выражения для определения давления и скорости (11) и решения (12) в (9), получим следующее характеристическое уравнение для определения ω :

$$\tan(Kl) = \left(-\frac{2m_p K_1(z_p)}{z_p K_0(z_p)} - \frac{2m_f d_f i K_f}{z_f^2} - 1 \right) Kl_p,$$

$$\text{где } q = \sqrt{\frac{i\omega}{\kappa_p}}, \quad z_p = a \sqrt{\frac{i\omega}{\kappa_p}}, \quad z_f = a \sqrt{\frac{i\omega}{\kappa_f}}.$$

Зависимости собственной частоты ω , коэффициента затухания δ , а также декремента затухания, определяемого как $\Delta = \left(\frac{2\pi}{\omega}\right) \delta$, от проницаемости пласта представлены на рис. 2. Показаны кривые, соответствующие случаю отсутствия трещины ГРП (пунктирные линии), т.е. жидкость от скважины растекается радиально, и наличия трещины ГРП (сплошные линии), т.е. жидкость течет в трещину. Видно, что

- увеличение проницаемости пласта приводит к монотонному снижению собственных частот колебаний;
- коэффициент затухания δ и декремент затухания Δ немонотонно зависят от проницаемости пласта;
- переход к низким частотам происходит при значениях параметров пласта и трещины, когда достигаются максимальные значения коэффициента и декремента затухания;
- затухание колебаний значительно усиливается при наличии трещины.

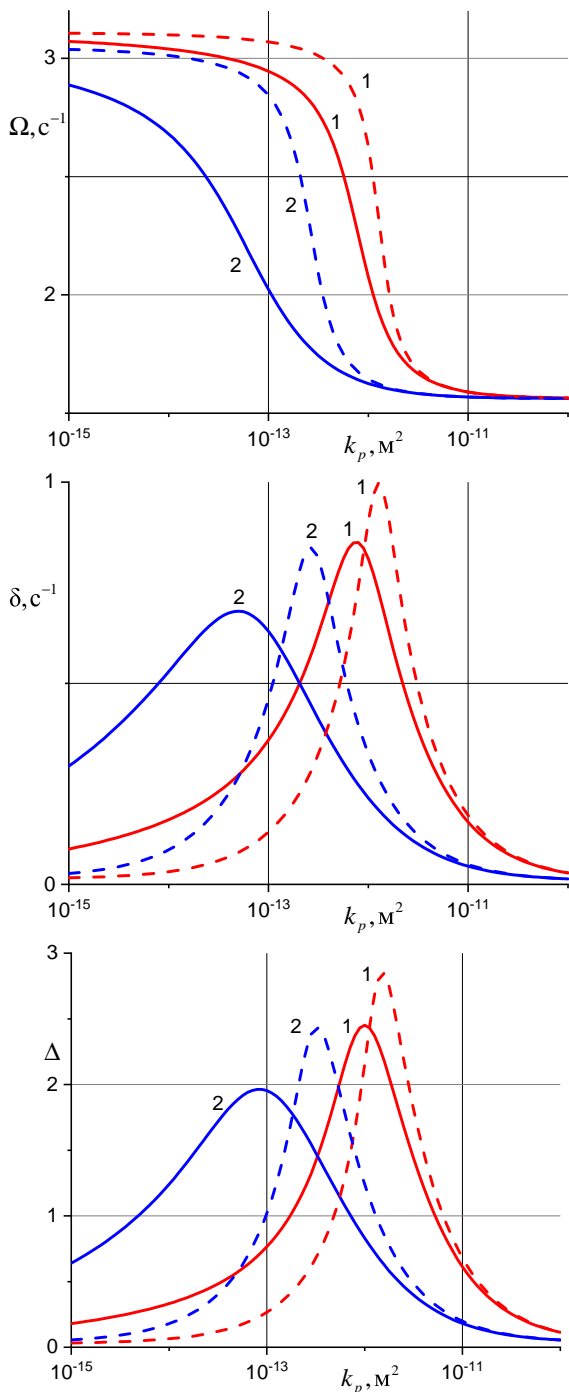


Рис. 2. Зависимости собственной частоты (а), коэффициента затухания (б), декремента затухания (в) от проницаемости пласта при протяженности открытого участка скважины $l_p = 10$ метров (линии 1) и $l_p = 40$ метров (линии 2). Пунктирные линии – без трещины ГРП; сплошные линии – с трещиной ГРП

3. Исследование собственных колебаний в горизонтальной скважине

Теперь рассмотрим случай, когда скважина горизонтальная. У горизонтальных скважин более значительная протяженная зона и поэтому они увеличивает эффективность разработки запасов. В этом случае исследование собственных колебаний предполагает изу-

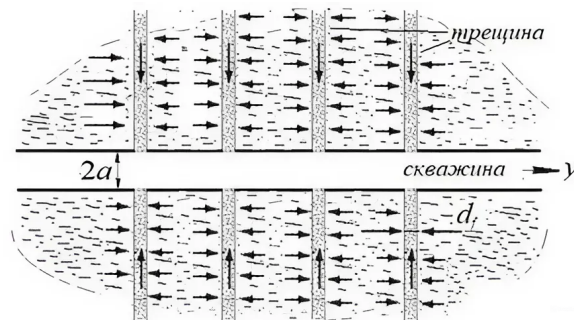


Рис. 3. Схема системы «скважина–трещины ГРП–пласт»

чение движения жидкости в скважине с равномерно расположенными радиальными трещинами ГРП.

Для решения задачи в данной постановке рассмотрим обсаженную горизонтальную скважину длиной l , которая сообщается с пластом посредством n радиальных трещин ГРП, расположенных равномерно вдоль скважины, число которых, приходящееся на единицу длины скважины, равно $n = N/l$. Схема задачи представлена на рис. 3.

Уравнения сохранения масс и импульсов, описывающие движение жидкости в скважине для малых возмущений давления, плотности и скорости, имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho_0 \frac{\partial w}{\partial z} &= -\frac{2}{a} \rho_0 n d_f u_{f(w)}, \\ \rho_0 \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial z} &= -\frac{2\sigma}{a_c} \quad (0 < z < l), \end{aligned} \tag{13}$$

где $\sigma = \mu \int_{-\infty}^t \frac{\partial w / \partial \tau}{\sqrt{\pi v(t-\tau)}} d\tau$; $v = \frac{\mu}{\rho_0}$; $\rho = \frac{P}{C^2}$; $p = p(t, z)$ – давление в скважине на расстоянии z от начала горизонтального участка; σ – касательное напряжение в жидкости на поверхности стенки скважины; r – радиус скважины; $u_{f(w)}$ – скорость фильтрации на выходе из скважины в трещину.

Далее необходимо найти скорость фильтрации. Для определения $u_{f(w)}$ решим фильтрационную задачу в трещине. Запишем уравнение фильтрации в трещине:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial P_f}{\partial r} \right) = A_f \int_{-\infty}^t \frac{\partial P_f / \partial \tau}{\sqrt{\pi(t-\tau)}} d\tau,$$

где

$$\begin{aligned} u_f &= -\frac{k_f}{\mu} \left(\frac{\partial P_f}{\partial r} \right) \quad (a < r < \infty), \\ A_f &= \frac{2}{d_f} \frac{m_p \sqrt{\kappa_p}}{m_f \kappa_f}, \quad \kappa_i = \frac{k_i \rho_0 C^2}{m_i \mu}. \end{aligned}$$

Граничные условия для давления в трещине задаются как:

$$P_{|r=a} = P(t, z), \quad P_{f|r \rightarrow \infty} = 0.$$

Нижний индекс $i = p$ или f определяет, что значение параметра относится к пласту или трещине.

Для определения $u_{f(w)}$ решаем уравнение (13) в виде: $p_f(t, z, r) = A_f^{(p)}(z, r)e^{i\omega t}$. Получим, что $A_f^{(p)}(z, r) = A^{(p)}(z) \frac{K_0(xr)}{K_0(xa)}$.

Следовательно, для скорости фильтрации получим:

$$u_{f(w)} = \frac{k_f x}{\mu} A^{(p)}(z) \frac{K_1(xa)}{K_0(xa)} e^{i\omega t}, \tag{14}$$

где $\frac{dK_0(s)}{ds} = -K_1(s)$, $K_0(xr)$ и $K_1(xr)$ — функции Макдональда нулевого и первого порядков.

Решение уравнений (13), учитывая (14), будем искать в виде: $P = A^{(p)}(z)e^{i\omega t}$, $w = A^{(w)}(z)e^{i\omega t}$. После преобразований сведем (13) к обыкновенному дифференциальному уравнению:

$$\frac{d^2 A^{(p)}(z)}{dz^2} + K^2 A^{(p)}(z) = 0,$$

где $K^2 = \frac{\omega^2}{C^2} \left(1 + \frac{2}{y}\right) \left(1 + \frac{2nd_f k_f x C^2}{iav\omega}\right) \left(\frac{K_1(xa)}{K_0(xa)}\right),$

$$x^2 = A_f \sqrt{-i\omega}, y = \left(\frac{i\omega a^2}{v}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

При $z = l$ получается, что

$$\sin(Kl) = 0.$$

Данное уравнение представляет собой характеристическое уравнение для определения комплексной частоты $\omega = \Omega + i\delta$.

На рис. 4 представлены зависимости собственной частоты ω , коэффициента затухания δ и декремента затухания $\Delta = (2\pi/\omega)\delta$ от проницаемости пласта для различных значений ширины трещины d_f и их количества N . Из рисунка видно, что

- с ростом проницаемости пласта частота собственных колебаний монотонно снижается;
- чем больше ширина трещин и их количество, тем быстрее снижается частота;
- коэффициент затухания δ и декремента затухания Δ возрастают при увеличении проницаемости пласта;
- при $N = 13$ и $d_f = 7$ мм коэффициент и декремент затухания монотонно возрастают, достигают максимального значения при $k_p = 10^{-13}$ м² и далее с ростом проницаемости снижаются.

4. Заключение

В настоящей работе решены две задачи о собственных затухающих колебаниях жидкости в вертикальной скважине с одной трещиной ГРП и в горизонтальной скважине с множественным ГРП. Получены математические модели, описывающие движение столба жидкости в таких скважинах. Выведены характеристические

уравнение для определения собственных частот колебаний. Проведены численные исследования зависимости собственной частоты, коэффициента затухания и декремента затухания от проницаемости пласта.

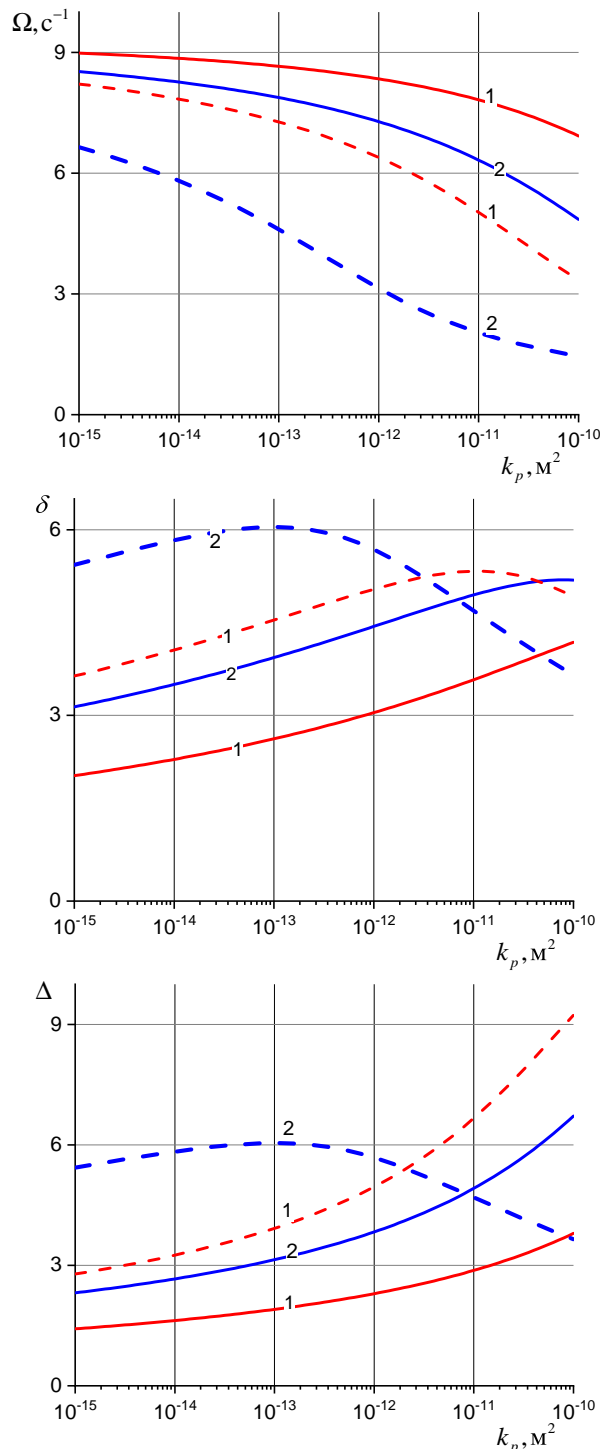


Рис. 4. Зависимости собственной частоты (а), коэффициента затухания (б), декремента затухания (в) от проницаемости пласта при различных значениях ширины трещины d_f : линии 1 – 3 мм, линии 2 – 5 мм. Сплошная линия – количество трещин $N = 7$, точечная – $N = 13$.

Список литературы / References

- [1] Экономидес М., Олини Р., Валько П. Унифицированный дизайн гидроразрыва пласта: от теории к практике. Москва-Ижевск: Институт компьютерных технологий, 2007. 237 с.
Economides M., Olini R., Valko P. Unified Hydraulic fracturing design: from theory to practice. Moscow-Izhevsk: Institute of Computer Technologies, 2007. 237 p. (in Russian)
- [2] Carey M., Mondal S., Sharma M. Analysis of Water Hammer Signatures for Fracture Diagnostics // SPE Annual Technical Conference and Exhibition. Texas, USA, 28–30 September 2015. SPE-174866-MS.
DOI: 10.2118/174866-MS
- [3] Patzek T., De A. Lossy Transmission Line Model of Hydrofractured Well Dynamics // Journal of Petroleum Science and Engineering. 2000. V. 25 (1-2). P. 59–77.
DOI: 10.2118/46195-MS
- [4] Аносова Е.П., Нагаева З.М., Шагапов В.Ш. Фильтрация флюида к скважине через радиальную трещину ГРП при постоянном расходе // Изв. РАН. МЖГ. 2023. № 2. С. 90–101.
Anosova E.P., Nagaeva Z.M., Shagapov V.Sh. Filtration of fluid to a well through a radial fracture of hydraulic fracturing at constant flow // Izv. RAS. MZHG. 2023. No. 2. Pp. 90–101. (in Russian)
DOI: 10.31857/S0568528122600692
- [5] Cinco-Ley H., Samaniego-V. Transient Pressure Analysis for Fractured Wells // JPT. 1981. P. 1749–1766. SPE 7490.
DOI: 10.2118/7490-PA
- [6] Хабибуллин И.Л., Хисамов А.А. К теории билинейного режима фильтрации в пластах с трещинами гидроразрыва // Вестник Башкирского университета. 2018. Т. 23, № 4. С. 958–963.
Khabibullin I.L., Khisamov A.A. On the theory of bilinear flow regime in the layers with hydraulic fracturing cracks // Bulletin of Bashkir University. 2018. Vol. 23, No. 4. Pp. 958–963. (in Russian)
EDN: yuxnqt
- [7] Хабибуллин И.Л., Хисамов А.А. Нестационарная фильтрация в пласте с трещиной гидроразрыва // Известия РАН. Механика жидкости и газа. 2019. № 5. С. 6–14.
DOI: 10.1134/S0568528119050050
Khabibullin I.L., Khisamov A.A. Unsteady Flow through a Porous Stratum with Hydraulic Fracture // Fluid Dynamics. 2019. V. 54, No. 5. P. 594–602.
DOI: 10.1134/S0015462819050057
- [8] Хабибуллин И.Л., Хисамов А.А. Моделирование нестационарной фильтрации в системе пласт-трещина гидроразрыва // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2022. № 77. С. 158–168.
Khabibullin I.L., Khisamov A.A. Modeling of unsteady filtration in a formation - hydraulic fracture system // Bulletin of Tomsk State University. Mathematics and mechanics. 2022. No. 77. Pp. 158–168. (in Russian)
DOI: 10.17223/19988621/77/12
- [9] Нагаева З.М., Шагапов В.Ш. Об упругом режиме фильтрации в трещине, расположенной в нефтяном или газовом пласте // Прикладная математика и механика. 2017. Т. 81, № 3. С. 319–329.
EDN: yspcjl
Nagaeva Z.M., Shagapov V.Sh. Elastic seepage in a fracture located in an oil or gas reservoir // Journal of Applied Mathematics and Mechanics. 2017. V. 81, No. 3. P. 214–222.
DOI: 10.1016/j.jappmathmech.2017.08.013
- [10] Шагапов В.Ш., Нагаева З.М. Приближенное решение задачи об упругом режиме фильтрации в трещине, находящейся в нефтяном пласте // Инженерно-физический журнал. 2020. Т. 93, № 1. С. 206–215.
EDN: rvgckr
Shagapov V.Sh., Nagaeva Z.M. Approximate Solution of the Problem on Elastic-Liquid Filtration in a Fracture Formed in an Oil Stratum // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. 2020. V. 93, No. 1. P. 201–209.
DOI: 10.1007/s10891-020-02109-4
- [11] Шагапов В.Ш., Хамидуллин И.Р., Нагаева З.М. Фильтрация к вертикальной скважине из пласта, подверженного ГРП, в случае коротких трещин // Инженерно-физический журнал. 2020. Т. 93, № 6. С. 1414–1423.
EDN: ntvjuc
Shagapov V.Sh., Khamidullin I.R., Nagaeva Z.M. Filtration to a Vertical Well from a Broken-Down Formation in the Case of Short Fractures // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. 2020. V. 93, No. 6. P. 1363–1372.
DOI: 10.1007/s10891-020-02241-1
- [12] Поташев К.А., Мазо А.Б., Мухина М.В. и др. Моделирование притока пластового флюида к трещинам бесконечной проницаемости многозонного гидроразрыва пласта с помощью трубок тока // Ученые записки Казанского университета. Серия: Физико-математические науки. 2022. Т. 164, № 1. С. 101–121.
Potashev K.A., Mazo A.B., Mukhina M.V. et al. Modeling of fluid inflow towards multistage hydraulic fractures of infinite permeability using stream tubes // Scientific Notes of Kazan University. Series: Physical and Mathematical Sciences. 2022. Vol. 164, No. 1. Pp. 101–121. (in Russian)
DOI: 10.26907/2541-7746.2022.1.101-121
- [13] Башмаков Р.А., Насырова Д.А., Шагапов В.Ш. Собственные колебания жидкости в скважине, сообщающейся с пластом, при наличии трещины ГРП // Прикладная математика и механика. 2022. Т. 86, № 1. С. 88–104.
Bashmakov R.A., Nasyrova D.A., Shagapov V.Sh. Natural vibrations of fluid in a well connected to the formation, in the presence of a hydraulic fracture // Applied Mathematics and Mechanics. 2022. Vol. 86, No. 1. Pp. 88–104. (in Russian)
DOI: 10.31857/S0032823522010027
- [14] Шагапов В.Ш., Башмаков Р.А., Хакимова З.Р., Насырова Д.А. Колебания столба жидкости в открытой скважине и сообщающейся с пластом, подверженным ГРП // Вестник Башкирского университета. 2022. Т. 27, № 4. С. 872–880.
Shagapov V.Sh., Bashmakov R.A., Khakimova Z.R., Nasyrova D.A. Fluid column oscillations in an open hole and communicating with a reservoir exposed to hydraulic fracturing // Bulletin of Bashkir University. 2022. Vol. 27, No. 4. Pp. 872–880. (in Russian)
DOI: 10.35184/bulletin-bsu-2022.4.10
- [15] Bashmakov R.A., Nasyrova D.A., Khakimova D.A. Natural Vibrations of Fluid in a Well Connected with the Reservoir by a System of Radial Fractures // Fluid Dynamics. 2024. Vol. 59, No. 2. P. 291–299.
DOI: 10.1134/S001546282460024X

Сведения об авторах / Information about the Authors

Дина Ахметовна Насырова

Институт механики им. Р.Р. Мавлютова УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Dina A. Nasyrova

Mavlyutov Institute of Mechanics, UFRS RAS, Ufa, Russia

dinasyrova@mail.ru

ORCID: 0000-0002-3191-7466



К юбилею Болотновой Раисы Хакимовны



9 ноября 2024 года свой юбилей отмечает доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Института механики им. Р.Р. Мавлютова УФИЦ РАН Раиса Хакимовна Болотнова.

Болотнова Р.Х. закончила механико-математический факультет Московского государственного университета в 1978 году и начала трудовую деятельность в Отделе физики и математики Башкирского филиала АН СССР. Под руководством академика РАН Роберта Искандеровича Нигматулина и д.ф.-м.н. Наиля Хатыповича Ахмадеева Болотнова Р.Х. выполнила цикл исследований по распространению ударных волн в неоднородных упругопластических средах с фазовыми переходами и разрушением. Совместно с Н.Х. Ахмадеевым ею были созданы математические модели уплотняющейся пористой упругопластической среды, порошковой среды с химическими превращениями и повреждаемой упругопластической среды для описания нестационарных движений ударных волн с анизотропным характером

процесса динамического разрушения хрупкого и вязкого типов. Для решения задач безопасности конструкций при ударных нагрузках с привлечением акустического анализа была разработана и реализована методика определения параметров в последовательности слоев пористых и многослойных мишеней для снижения риска откольного разрушения.

Продолжая исследования в области ударно-волновых технологий Болотнова Р.Х. решила ряд задач, связанных с теоретическими основами создания новых материалов методами порошковой металлургии. Ею исследованы особенности синтеза неорганических материалов в условиях ударного нагружения порошковой смеси с использованием разработанной одномерной модели порошковой среды с учетом химических превращений. Модель повреждаемой упругопластической среды, обобщенная на двумерный случай, описывающая нестационарное движение неоднородных ударных волн с учетом анизотропии разрушения хрупкого и вязкого типов с помощью тензора повреждений, позволила исследовать особенности волновых процессов с учетом влияния краевых эффектов и двумерной кинетики на процесс динамического разрушения. В 1989 г. Болотнова Р.Х. защитила диссертацию на соискание степени кандидата физ.-мат. наук «Особенности откольного разрушения конденсированных сред при ударном нагружении».

В дальнейшем научные интересы Раисы Хакимовны были направлены на разработку методов построения единых аналитических широкодиапазонных уравнений состояния жидкости и газа. Ею получены уравнения состояния воды, ацетона, бензола и тетрадекана и их дейтерированных аналогов. Уравнения описывают газовую и жидкую фазы при интенсивных газо- и гидродинамических процессах с учетом испарения и конденсации, учитывают диссоциацию и ионизацию, сопровождающие явления суперсжатия [1–3]. Эти исследования были связаны с поставленными Р.И. Нигматулиным задачами по изучению условий для достижения сверхвысоких давлений и температур в режиме коллапса паровых и газовых пузырьков в результате интенсивных акустических воздействий [4]. Так называемые «широкодиапазонные уравнения состояния Болотновой–Нигматулина» получили известность и успешно применяются различными научными коллективами при исследовании динамики ударных волн

в газо-парожидкостных системах и для анализа состояния вещества в области сверхсжатий. В 2008 г. Болотнова Р.Х. защищена диссертация на соискание степени доктора физ.-мат. наук «Теоретическое исследование ударно-волновых течений при разрушении, структурных, фазовых, химических превращениях и построение уравнений состояния веществ».

Раиса Хакимовна в течение ряда лет читала спецкурсы на математическом факультете Башкирского государственного университета по уравнениям состояния веществ и моделям динамики волновых процессов с фазовыми превращениями.

В настоящее время она возглавляет научное направление «Гидродинамические процессы в газожидкостных системах в условиях ударно-волнового воздействия» в рамках госзадания Института механики им. Р.Р. Мавлютова УФИЦ РАН по исследованиям, связанным с теоретическим анализом динамических нестационарных процессов в пенных структурах и вскипающих газо-парожидкостных смесях в режимах взрывного истечения:

1. Изучение особенностей динамики слабой ударной волны в ударной трубе со слоем водной пены на основе предложенной двухфазной упруго-вязко-пластической модели водной пены, описывающей ее поведение под воздействием слабых ударных волн, не разрушающих пенную структуру. Проведение исследований процесса взаимодействия мощного воздушного сферического ударно-волнового импульса с защитным барьером из водной пены с учетом явлений синерезиса [5–7].

Решение теоретических задач, касающихся применения водных пен в качестве демпфирующих преград от разрушительного ударного воздействия, направлено на обеспечение эффективной безопасности в условиях чрезвычайных ситуаций.

2. Исследование динамики формирования расширяющейся струи флюида сверхкритических параметров состояния, истекающей из сосуда высокого давления через тонкое сопло, сопровождающееся образованием вихревых зон и периодических пульсаций давления внутри струи [8, 9].

Изучение особенностей эволюции формы струи криогенных жидкостей чрезвычайно важно при конструировании двигателей, работающих в условиях космического пространства.

Раиса Хакимовна уделяет большое внимание подготовке кадров высшей квалификации и успешно работает с магистрантами и аспирантами. Под ее руководством защищены три диссертации на соискание ученой степени кандидата физ.-мат. наук.

Ею опубликовано более 170 научных трудов, среди которых монография, учебное пособие, свыше 90 работ в рейтинговых российских и международных журналах, 7 зарегистрированных в Роспатенте вычислительных программ.

Болотнова Р.Х. принимает регулярное участие в работе всероссийских и международных конференций и съездов.

Сотрудничала в программах Совета по грантам Президента Российской Федерации для государственной поддержки ведущих научных школ РФ НШ-2669.2014.1, НШ-6987.2016.1. Осуществляла руководство грантов р_а 17-41-020582 (2017-2019 гг.), № 20-31-90013 - Аспиранты (2020-2022 гг.), являлась экспертом научных проектов и научных отчетов РФФИ (2017-2022 гг.).

На данный момент Болотнова Р.Х. руководит грантом РНФ № 23-29-0030 (2023-2024 гг.) и является членом диссертационного совета Д 24.2.479.05 по специальности 1.1.9 - Механика жидкости, газа и плазмы.

Раиса Хакимовна удостоена звания Лауреат премии комсомола Башкирии в области науки (1985 г.). Имеет Почетные грамоты Российской академии наук и Профсоюза работников Российской академии наук (2011 г.); Уфимского научного центра Российской академии наук (2017 г.); Администрации городского округа города Уфа (2017 г.); Академии наук Республики Башкортостан (2017 г.); Профсоюза работников РАН (2021). Награждена медалью Российского национального комитета по теоретической и прикладной механике имени Х.А. Рахматулина (2018 г.), нагрудным знаком «За заслуги перед городом» (2019 г.) и Общественной медалью «За верность профессии» (2020 г.). В 2018 году Болотнова Р.Х. присуждено звание «Почетный работник науки и техники Российской Федерации».

Коллектив Института механики им. Р.Р. Мавлютова и редакция журнала «Многофазные системы» от всей души поздравляют свою коллегу Раису Хакимовну Болотнову с юбилеем и желают ей отличного здоровья, благополучия и дальнейших творческих успехов!

Список литературы / References

- [1] Нигматулин Р.И., Болотнова Р.Х. Широкодиапазонное уравнение состояния органических жидкостей на примере ацетона // Доклады Академии наук. 2007. Т. 415, № 5. С. 617–621.
EDN: IAQHKD
Nigmatulin R.I., Bolotnova R.Kh. Wide-range equation of state for organic liquids: Acetone as an example // Doklady Physics. 2007. Vol. 52, No. 8. Pp. 442–446.
DOI: 10.1134/S1028335807080095
- [2] Нигматулин Р.И., Болотнова Р.Х. Широкодиапазонное уравнение состояния воды и пара. Упрощенная форма // Теплофизика высоких температур. 2011. Т. 49, № 2. С. 310–313.
EDN: NEFZRF
Nigmatulin R.I., Bolotnova R.Kh. Wide-range equation of state of water and steam: Simplified form // High Temperature. 2011. Vol. 49, No. 2. P. 303–306.
DOI: 10.1134/S0018151X11020106
- [3] Нигматулин Р.И., Болотнова Р.Х. Широкодиапазонные уравнения состояния бензола и тетрадекана в упрощенной форме // Теплофизика высоких температур. 2017. Т. 55, № 2. С. 206–215.
DOI: 10.7868/S004036441701015X
Nigmatulin R.I., Bolotnova R.Kh. Simplified wide-range equations of state for benzene and tetradecane // High Temperature. 2017. Vol. 55, No. 2. P. 199–208.
DOI: 10.1134/S0018151X17010151
- [4] Nigmatulin R.I., Akhatov I.Sh., Topolnikov A.S., Bolotnova R.Kh., Vakhitova N.K., Lahey R.T., Jr., Taleyarkhan R.P. Theory of supercompression of vapor bubbles and nanoscale thermonuclear fusion // Physics of Fluids. 2005. Vol. 17, No. 10. P. 107106.
DOI: 10.1063/1.2104556

- [5] Агишева У.О., Болотнова Р.Х., Гайнуллина Э.Ф., Коробчинская В.А. Особенности вихреобразования при воздействии импульса давления на газовую область, ограниченную пенным слоем // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. 2016. № 6. С. 47–56.
DOI: [10.7868/S0568528116060025](https://doi.org/10.7868/S0568528116060025)
Agisheva U.O., Bolotnova R.K., Korobchinskaya V.A., Gainullina E.F. Features of vortex formation under the impact of a pressure pulse on a gas region bounded by the foam layer // Fluid Dynamics. 2016. Vol. 51, No. 6. P. 757–766.
DOI: [10.1134/S0015462816060053](https://doi.org/10.1134/S0015462816060053)
- [6] Болотнова Р.Х., Гайнуллина Э.Ф. Влияние теплообменных процессов на снижение интенсивности сферического взрыва в водной пене // Прикладная математика и механика. 2019. Т. 83, № 3. С. 468–477.
DOI: [10.1134/S0032823519030020](https://doi.org/10.1134/S0032823519030020)
Bolotnova R.K., Gainullina E.F. Influence of Heat Transfer on Decreasing Intensity of a Spherical Explosion in Aqueous Foam // Fluid Dynamics. 2019. Vol. 54, No. 7. P. 970–977.
DOI: [10.1134/S0015462819070024](https://doi.org/10.1134/S0015462819070024)
- [7] Болотнова Р.Х., Гайнуллина Э.Ф., Нурисламова Э.А. Моделирование процесса ослабления сферического взрыва применением водной пены // Многофазные системы. 2019. Т. 14, № 2. С. 108–114.
DOI: [10.21662/mfs2019.2.005](https://doi.org/10.21662/mfs2019.2.005)
- [8] Болотнова Р.Х., Коробчинская В.А. Пространственное моделирование процесса формирования струи вскипающей воды при истечении из тонкого сопла // Теплофизика и аэромеханика. 2017. Т. 24, № 5. С. 783–794.
EDN: ZMWKFF
Bolotnova R.K., Korobchinskaya V.A. Boiling water jet outflow from a thin nozzle: spatial modeling // Thermophysics and Aeromechanics. 2017. Vol. 24, No. 5. P. 761–771.
DOI: [10.1134/S0869864317050110](https://doi.org/10.1134/S0869864317050110)
- [9] Болотнова Р.Х. Исследование динамики формирования полой струи при истечении пара из сверхкритического состояния // Многофазные системы. 2018. Т. 13, № 4. С. 73–78.
DOI: [10.21662/mfs2018.4.011](https://doi.org/10.21662/mfs2018.4.011)

Содержание

Механика жидкости и газа

А.И. Исламов, К.Р. Набиуллина

Моделирование температурной конвекции в микропробирках при точечном нагреве:
зависимость скорости конвекции от угла наклона 94–102

V.A. Demin, T.V. Demina, V.E. Zinurova

Penetration of a Silicon Vapor through Residual Gaseous Medium
during Siliconizing of a Carbon Composite Material 103–111

A.A. Mukhutdinova, A.D. Nizamova, W.Y. Li

Numerical modelling of the effect of gas temperature non-uniformity
on the geometric parameters of the heating element in a cold spraying technology 112–118

П.А. Чупров

Численное исследование взаимодействия ударной волны с засыпкой частиц
с использованием модели Баера–Нунциато 119–124

Д.А. Насырова

Собственные колебания жидкости в вертикальной и горизонтальной скважинах 125–131

Портрет ученого

К юбилею Раисы Хакимовны Болотновой 132–134

Contents

Liquid & Gas Mechanics

A.I. Islamov, K.R. Nabiullina

Modeling of temperature convection in microtubes under point heating:
dependence of convection velocity on tilt angle (in Russian) 94–102

V.A. Demin, T.V. Demina, V.E. Zinurova

Penetration of a Silicon Vapor through Residual Gaseous Medium
during Siliconizing of a Carbon Composite Material 103–111

A.A. Mukhutdinova, A.D. Nizamova, W.Y. Li

Numerical modelling of the effect of gas temperature non-uniformity
on the geometric parameters of the heating element in a cold spraying technology 112–118

P.A. Chuprov

Numerical study of the interaction of a shock wave with a layer of particles
using the Baer–Nunziato model (in Russian) 119–124

D.A. Nasyrova

Natural fluctuations of the liquid in vertical and horizontal wells (in Russian) 125–131

Profiles

For the anniversary of Raisa Khakimovna Bolotnova (in Russian) 132–134