

Podstawy wzmożonej konwersji energii

Wprowadzenie

Energia elektryczna wciąż jeszcze jest podstawą naszej cywilizacji. Jej wytwarzanie z paliw kopalnych wymaga złożonego kaskadowego systemu przetwarzania form energii. Temu wytwarzaniu towarzyszy nieuchronna destrukcja egzergii paliwa i zanieczyszczenie środowiska. Naprzeciw tym klasycznym, brudnym technologiom wychodzi, nowa nauka – nanotechnologia, która bazuje na zjawiskach w skali nano, umożliwiającach zarówno wzmożony transport, jak i wzmożoną konwersję energii. Przy zastosowaniu nanotechnologii powstają nowe urządzenia wykorzystujące bezpośrednią konwersję dysponowanej energii, np. poprzez sterowanie przepływem ciepła. Dlatego zasadnym jest szukanie odpowiedzi na pytanie: na jakiej zasadzie wspomniane urządzenia działają?

Przykładowo wzrost strumienia masowego w mikrokanale może nastąpić wskutek wystąpienia gradientu ciśnienia oraz związanego z rozrzedzeniem i adhezją poślizgu prędkości na ścianie. Wówczas warunek mówiący o zerowaniu się prędkości płynu na granicy ośrodka nie jest spełniony i pojawia się niezerowa prędkość poślizgu, zazwyczaj o kierunku współprądowym, to jest zgodnym z kierunkiem przepływu głównego. Już wczesne obserwacje pokazały, że rzeczywisty wydatek w mikroprzepływie jest większy (niekiedy znacznie) od wydatku przewidzianego standardowym, bezpoślizgowym modelem. Rozpoczęte jeszcze przez Coulomba, Darcy'ego poszukiwania modelu nowego warunku brzegowego, w przypadku przepływu ośrodków rozrzedzonych prowadzą dzisiaj do modyfikowanego modelu, wyprowadzonego po raz pierwszy przez Maxwella [1] na gruncie kinetycznej teorii gazów. Główna modyfikacja dotyczy przede wszystkim założenia, że standardowy „maxwellowski” model stanowi, w ujęciu matematycznym, pierwszy wyraz szeregu Taylora rozwiniętego względem pochodnej prędkości. Tak zdefiniowany warunek brzegowy nakładany na układ równań mechaniki płynów wymaga przededefiniowania tensora naprężeń, czego jednak niektórzy autorzy nie robią [2].

Wykorzystywane do celu modelowania mikroprzepływów inne podejścia, jak stochastyczne modele LBM lub DSMC, albo dynamika molekularna MD nie spełniają niestety podstawowego warunku w przypadku obliczeń projektowych – są bardzo czaso- i pracochłonne, wymagając dużych stacji roboczych do przeprowadzenia symulacji na i tak małym układzie. Dlatego też praca nad udoskonaleniem modelu w ujęciu mechaniki kontinuum ma kluczowe znaczenie dla opracowania dobrego narzędzia do obliczeń urządzeń na skalę przemysłową, będącym jednocześnie tanim w aplikacji oraz solidnym z punktu widzenia niezawodności i poprawności otrzymanych wyników. Rozwijany w IMP PAN [3-9] model zjawisk w ośrodkach rozrzedzonych rokuje szanse na sformułowanie warunku brzegowego dającego satysfakcjonujące wyniki w bardzo szerokim zakresie stosowalności, to jest w szerokim zakresie stopnia rozrzedzenia ośrodka, czy rozmiarów kanałów przepływowych [3][4][5].

W niniejszym artykule przedstawiamy w sposób bardziej szczegółowy niektóre elementy naszej prezentacji, między innymi dyskutujemy modele zwiększonego transportu, oraz przedstawiamy wyniki symulacji tych modeli na tle wyników eksperymentalnych.

Model wzmożonego transportu

Punktem wyjściowym do opracowania modelu w IMP PAN jest, w przeciwieństwie do rozwijanego dzisiaj modelu Maxwella, warunek brzegowy zaproponowany w 1822 roku przez Naviera w postaci:

¹ P. Ziółkowski – Instytut Maszyn Przepływowych, Zakład Konwersji Energii. E: pziolkowski@imp.gda.pl

² J. Badur – Instytut Maszyn Przepływowych, Zakład Konwersji Energii. E: jb@imp.gda.pl

$$\mathbf{v} + \mu \frac{d\mathbf{v}}{dn} = 0, \quad (1)$$

gdzie:

- $\mathbf{v}$ – prędkość płynu,
- μ – lepkość objętości w objętości,
- $\mathbf{n}$ – wektor normalny,
- ν – lepkość zewnętrzną (na ścianie).

Współcześnie stosunek $\frac{\mu}{\nu} = l_s$ nazywa się długością poślizgu Naviera, a bezwymiarowa długość poślizgu nazywa się liczbą Naviera $Na = \frac{l_s}{L}$. Rozwinięcie tego warunku na postać ogólną zostało opracowane przez Cauchy'ego. Ogólna definicja tensora naprężeń, oraz definicja siły brzegowej oparta na pracy Naviera, daje interpretację fizyczną występujących w definicji warunku brzegowego członów, jako:

$$\mathbf{f} + \boldsymbol{\tau}_w = 0 \quad (2)$$

gdzie w definicji Cauchy'ego:

- $\mathbf{f}$ - odnosi się do sił tarcia brzegowego natomiast
- $\boldsymbol{\tau}_w$ - wiąże się z naprężeniami w płynie przy wyjściu na brzeg, tak zwane „wall stress”.

Warunek ten został następnie poszerzony przez Poissona na postać uwzględniającą występowanie sił kapilarnych, istotny zwłaszcza w przypadku przepływów wielofazowych, gdzie istniejące napięcia powierzchniowe mogą w znacznym zakresie wpływać na wartość tarcia i poślizgu. Objawia się to przez dodanie do warunku brzegowego Cauchy'ego dodatkowego członu w postaci:

$$\mathbf{f} + \boldsymbol{\tau}_w + \text{div}_s (\gamma \mathbf{I}_s) = 0, \quad (3)$$

gdzie:

- div_s – dwuwymiarowa dywergencja,
- $\mathbf{I}_s = \mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$ – powierzchniowy tensor metrycznym, gdzie $\mathbf{I}$ to idemfaktory Gibbsa,
- γ – napięcie powierzchniowe.

Wyrażenie na tensor napięć kapilarnych, oznaczony dalej przez $\mathbf{p}_s = \gamma \mathbf{I}_s$ zostaje rozszerzony definicją zaproponowaną w modelu IMP PAN w postaci:

$$\mathbf{p}_s = \mathbf{p}_s^{(c)} + \mathbf{p}_s^{(\nu)}, \quad (4)$$

gdzie:

- $\mathbf{p}_s^{(c)}$ – odnosi się napięć odwracalnych (sprężystych np. napięcie powierzchniowe, powierzchniowe zgięcie Gibbsa, skręcenie powierzchniowe Marragoniego, etc),
- $\mathbf{p}_s^{(\nu)}$ – wyraża napięcia dyssypujące wyrażone poprzez cztery anizotropowe współczynniki lepkości ściennej.

Każdy człon jest następnie zdefiniowany [3]:

$$\begin{cases} \mathbf{p}_s^{(c)} = \gamma_0 \mathbf{I}_s + \gamma_1 + \mathbf{n} \otimes \mathbf{I}_s \text{div}_s (\gamma_1 - \mathbf{I}_s \gamma_2); \\ \gamma_0 = \gamma \mathbf{I}_s; \\ \gamma_1 = C \mathbf{I}_s; \\ \gamma_2 = K \mathbf{I}_s; \\ \mathbf{p}_s^{(\nu)} = \lambda' (\text{tr} \mathbf{d}_s) \mathbf{I}_s + \lambda \nu_{n,n} \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + 2\mu' \mathbf{I}_s \mathbf{d}_s \mathbf{I}_s + 2\mu_s (\mathbf{d}_s - \mathbf{I}_s \mathbf{d}_s \mathbf{I}_s). \end{cases} \quad (5)$$

gdzie:

γ_0 – tensor napięcia powierzchniowego,
 γ_1 – tensor krzywizny powierzchniowej,
 γ_2 – tensor skręcenia powierzchni,
 C – napięcie krzywizny Gibbsa,
 K – napięcie skręcenia Gibbsa,
 $\mathbf{I}_d$ – powierzchniowy tensor metrycznym,
 λ' – objętościowy współczynnik lepkości z powierzchni,
 λ – objętościowy współczynnik lepkości na powierzchni,
 μ' – powierzchniowy współczynnik lepkości postaciowej z powierzchni,
 μ_s – powierzchniowy współczynnik lepkości postaciowej w powierzchni,
 $\mathbf{d}_s$ – powierzchniowy tensor prędkości deformacji.

Warunek brzegowy można rozbudować jeszcze bardziej, poprzez dodanie zaproponowanego przez Stokesa w 1845 [10] roku ciśnienia ściennego, oznaczonego przez ϖ . Stokes zauważył, bowiem, że ciśnienie w warstwie przyległej ścianie nie musi być wcale równe ciśnieniu płynu w pobliżu ścianki. Piszemy, zatem, warunek brzegowy równania bilansu pędu w formie:

$$\mathbf{f} + \mathbf{p}\mathbf{n} + \mathbf{div}_s(\gamma \mathbf{I}_s) + \varpi \mathbf{n} = 0, \quad (6)$$

gdzie:

$\mathbf{p}$ – tensor ciśnień, zostanie on zdefiniowany przez równanie (11),
 ϖ – ciśnienie ścienne,
 γ – napięcie powierzchniowe.

Ta ostateczna dla tensora ciśnień postać warunku brzegowego odrzuca wszystkie literaturowe spekulacje na temat, tak zwanych, warunków brzegowych drugiego rodzaju [11]. W świetle przedstawionych formuł i definicji można przedstawić uogólnioną definicję warunku brzegowego IMP PAN, niech będzie dla szczególnego przypadku kontaktu płynu z nieodkształcalną ścianką, które to założenie jest dobrze spełnione w przypadku przepływu gazu (zwłaszcza rozrzedzonego). Warunek poślizgu przybierze postać [8, 9]:

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho_s \mathbf{v}_s) + \mathbf{div}_s(\rho_s \mathbf{v}_s \otimes \mathbf{v}_{s\parallel}) - \omega_n \mathbf{I}_s \rho_s \mathbf{v}_s + \mathbf{div}_s(\mathbf{p}_s) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{p}_s \mathbf{n}) + (\mathbf{p}\mathbf{n} + \mathbf{f}) = \\ = \rho_s \mathbf{b}_s + \dot{m}_{fluid}(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s), \end{aligned} \quad (7)$$

gdzie:

ρ_s – powierzchniowa gęstość płynu,
 $\mathbf{v}_{s\parallel}$ – składowa równoległa wektora prędkości powierzchniowej płynu,
 $\mathbf{v}_s$ – wektor prędkości powierzchniowej płynu,
 $\mathbf{b}_s$ – powierzchniowa siła masowa,
 $\dot{m}_{fluid}$ – strumień masy cieczy osadzający się na powierzchni,
 ω_n – siła kohezji Stokesa (normalna do powierzchni).

Do tej pory zaprezentowano proponowaną postać warunku brzegowego w ogólnym modelu IMP PAN. Nie podano natomiast propozycji zdefiniowania występujących w warunku brzegowym wielkości siły tarcia brzegowego $\mathbf{f}$, ani naprężenia płynu wychodzącego na brzeg obszaru przepływowego, czyli τ_w .

Duhem [12] wykorzystał definicję na siłę tarcia płynu o brzeg w postaci zaproponowanej po raz pierwszy przez Coulomba:

$$\mathbf{f} = (a_0 \frac{1}{|\mathbf{v}_s|} + a_1 + a_2 |\mathbf{v}_s|) \mathbf{v}_s \quad (8)$$

gdzie:

a_0 – współczynnik części adhezyjnej niezależny od prędkości poślizgu,

a_1 – współczynnik części liniowej względem prędkości poślizgu,

a_2 – współczynnik części kwadratowej względem prędkości poślizgu.

Człon kwadratowy ma znaczenie przy określeniu modelu tzw. ściennej turbulencji (*the wall eddy viscosity*) i jest przedmiotem innych badań w IMP (patrz Lewandowski, Ochrymiuk, Czerwińska [6]). Model turbulizujących „krawędziaków” wyrzucanych z warstwy poślizgu został zaproponowany w oryginalnej pracy Stokesa i potwierdzony w turbulentnych przepływach w kapilarach przez Helmholtza i von Piotrowskiego [8]. Z drugiej strony, w modelu warunku brzegowego pojawia się naprężenie płynu na ścianie τ_w , które opisane jest w ujęciu zaproponowanym przez Cauchy’ego w formie:

$$\tau_w = \mathbf{t} \mathbf{n}, \quad (9)$$

gdzie:

$\mathbf{t}$ – jest tensorem Cauchy’ego.

W najprostszej postaci można tensor ten zdefiniować jako:

$$\mathbf{t} = -p\mathbf{I} + 2\mu \mathbf{d}. \quad (10)$$

gdzie:

$\mathbf{d}$ – tensor prędkości deformacji w objętości.

Wprowadzając za Stokes’em tensor ciśnień $\mathbf{p}$:

$$\mathbf{p} = p\mathbf{I} - 2\mu \mathbf{d} + \left(\frac{2}{3}\mu - \kappa\right)\mathbf{I}_d \mathbf{I}, \quad (11)$$

gdzie: κ – współczynnik lepkości objętościowej Stokesa

można dokonać dalszego uogólnienia definicji naprężenia w płynie w sąsiedztwie ścianki.

W latach 1846 i 1849 Graham, a później w roku 1879 Reynolds, zauważyli zjawiska dziś za Reynoldsem nazywane transpiracją. Efekt transpiracji polega na powstaniu przy ścianie przepływu w kierunku zgodnym z gradientem pewnej wielkości charakteryzującej układ. Jeżeli mówić będziemy o zjawiskach zaobserwowanych przez Grahama to mamy tu do czynienia z efektem transpiracji składnikowej, czyli przepływie składnika z miejsca o mniejszym jego stężeniu do miejsca o jego stężeniu większym. Podczas, gdy ten przepływ zwrotny jest obserwowany w pobliżu ścianki, w objętości zachodzi naturalny, zgodny z ujemnym gradientem ciśnienia przepływ sugerowany przez prawa znane z makroskali. W przypadku eksperymentu Reynoldsa, obserwowany efekt dotyczy gradientu temperatury i znany jest powszechnie jako zjawisko termicznej transpiracji. Uwzględnienie tych efektów można dokonać poprzez wprowadzenie w definicji siły tarcia następującego uogólnienia:

$$\mathbf{f} = \nu(\mathbf{v} - \mathbf{v}_{\text{wall}}) - (c_{s,\varpi} \text{grad}_s \varpi + c_{s,c} \text{grad}_s c + c_{s,\theta} \text{grad}_s \theta), \quad (12)$$

gdzie:

$\mathbf{v}_{\text{wall}}$ – prędkość ścianki,

c – stężenie składnika na powierzchni

θ – temperatura powierzchni,

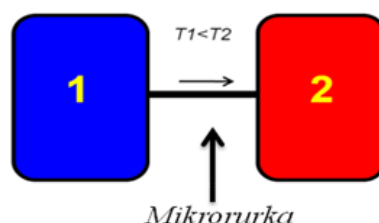
$c_{s,\varpi}$ – współczynnik ciśnieniowej transpiracji,

$c_{s,c}$ – współczynnik składnikowej transpiracji Grahama,

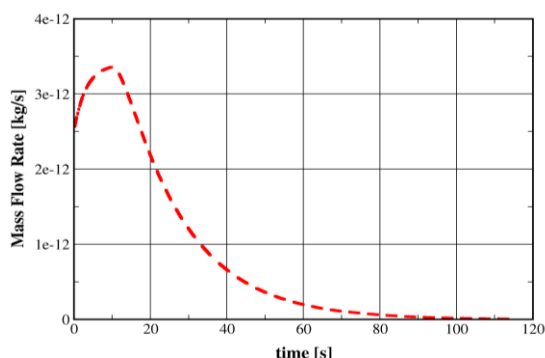
$c_{s,\theta}$ – współczynnik transpiracji termicznej Reynoldsa.

Badając efekt transpiracji termicznej zachodzący między dwoma zbiornikami równomiernie wypełnionymi powietrzem o tym samym ciśnieniu, Reynolds odkrył szereg zależności, które nazwał prawami transpiracji [11]. Czwarte prawo transpiracji oceniało czas potrzebny do tego, aby ustał przepływ w rurce łączącej oba zbiorniki (rysunek 1).

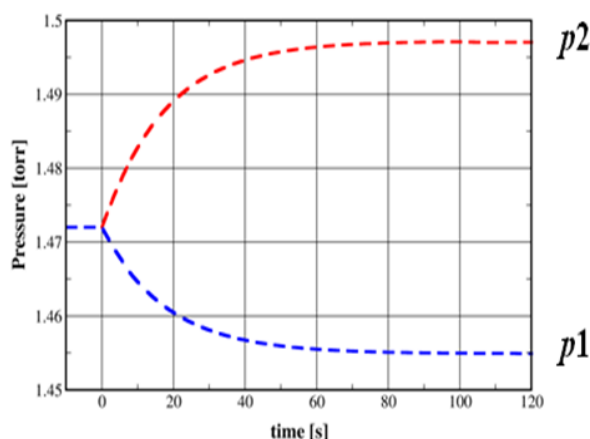
Pragnąc sprawdzić to prawo i model termicznej transpiracji Reynoldsa wykonaliśmy jego implementację do kodu komercyjnego i przeprowadziliśmy obliczenia przepływu transpiracyjnego helu, przez kapilarę długości 2 cm, średnicy 0,001 mm łączącą oba zbiorniki. Początkowe ciśnienia helu w obu zbiornikach przyjęliśmy za 45 kPa, a napędzającą ruch transpiracyjny różnicę temperatur między zbiornikami przyjęliśmy za 100 stopni Kelvina. Numerycznie wyznaczony czas przepływu w rurce wynosił 1,96 minuty, co dobrze zgadza się z czasem wyznaczonym przez eksperymentalne prawo Reynoldsa (rysunek 2). W wyniku przepływu napędzanego transpiracją termiczną ze zbiornika zimnego do zbiornika gorącego i hamowanego narastającą różnicą ciśnień (moda Poissella) ostatecznie ustaliły się ciśnienia zbiornika gorącego 65 kPa i zbiornika zimnego 36 Pa (rysunek 3).



Rys. 1. Eksperyment Reynoldsa pokazujący przepływ gazu z zimnego do gorącego zbiornika. Zjawisko to nazwane przez Reynoldsa „thermal transpiration” nosi też w literaturze nazwę „thermal creep”. Słowo „pełzanie” sugeruje, że siła mobilności napędzająca ruch gazu nie jest znaczna, a przynajmniej nie prowadzi do znacznych efektów. Tymczasem eksperymenty pokazują, że kropla umieszczona na płytce zimnej na jednym końcu, a gorącej na drugim $\Delta T \approx 60^\circ\text{C}$, porusza się transpirując w kierunku płytki gorącej z prędkością 5-6 m/s [8].



Rys 2. Wyniki symulacji przepływu transpiracyjnego przebiegu zmiany strumienia masowego w rurce.



Rys 3. Wyniki symulacji przepływu transpiracyjnego przebiegu zmian ciśnienia w zbiornikach.

Mając wprowadzone w poprzednich rozdziałach składniki brzegowej siły tarcia, zaproponowano w IMP PAN równania konstytutywne uogólnionej siły brzegowej jako sumy sił tarcia i sił mobilności. Siły tarcia odnoszą się do efektów związanych z oddziaływaniem płynu roboczego z materiałem ścianki. Taki podział pozwala zapisać, że siła tarcia brzegowego:

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}_{(f)} + \mathbf{f}_{(m)}, \quad (13)$$

gdzie:

indeks $_{(f)}$ odnosi się do sił tarcia,

indeks $_{(m)}$ tyczy się sił mobilności.

Siłę tarcia zdefiniowano następująco:

$$\mathbf{f}_{(f)} = f_{static} N \frac{\mathbf{v} - \mathbf{v}_{wall}}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}_{wall}|} + \nu (\mathbf{v} - \mathbf{v}_{wall}) + f_{\kappa} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_{wall})^2 \frac{\mathbf{v} - \mathbf{v}_{wall}}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}_{wall}|}, \quad (14)$$

gdzie:

f_{static} – współczynnik tarcia statycznego,

N – siła docisku Coulomba,

ν – współczynnik lepkości zewnętrznej płynu Naviera,

f_{κ} – współczynnik tarcia kinematyczny.

Z kolei siłę mobilności zapisujemy jako:

$$\mathbf{f}_{(m)} = -(c_{s,\varpi} \text{grad}_s \varpi + c_{s,\theta} \text{grad}_s \theta + c_{s,c} \text{grad}_s c + c_{s,\phi} \text{grad}_s \phi + c_{s,x} \text{grad}_s x), \quad (15)$$

gdzie, aż pięć gradientów odnosi się odpowiednio do transpiracji:

ϖ – ciśnieniowej,

θ – termicznej,

c – składnikowej,

ϕ – potencjału elektrycznego,

x – postępu przemiany fazowej oraz dodatkowo pojawiają się współczynniki,

$c_{s,\phi}$ – współczynnik transpiracji potencjału elektrycznego

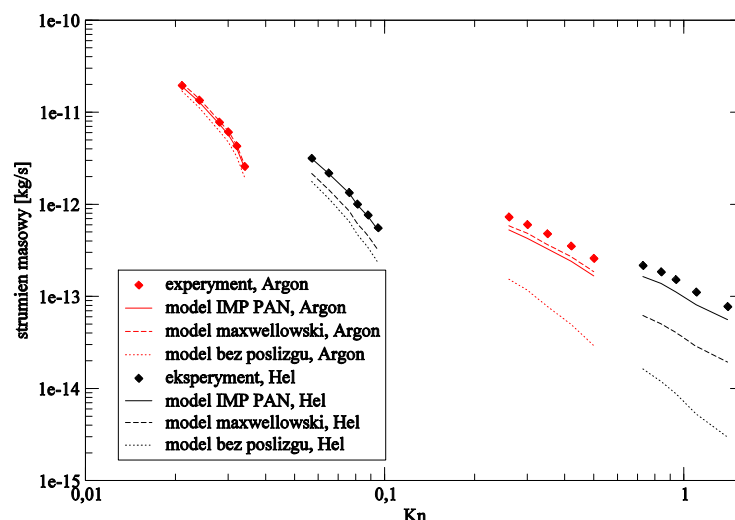
$c_{s,x}$ – współczynnik transpiracji postępu przemiany.

Zaprezentowana definicja siły brzegowej odnosi się naturalnie do przypadku najbardziej ogólnego, który w pewnych szczególnych okolicznościach można znacznie uprościć. Przyświeca nam jednak cel jak najdokładniejszego zaadresowania występujących efektów w mikroskali, lub bardziej poprawnie stwierdzając: efektów, które w mikroskali mają istotne znaczenie z uwagi na silną dominację warstwy przyściennej w całym przepływie (szczególnie dla dużego rozrzedzenia lub małej średnicy hydraulicznej kanału).

Jako przykład wykorzystania modelu w obliczeniach CFD zaprezentowano na wykresie (rysunek 4) obraz symulacji w porównaniu do wyników eksperymentu wykonanego przez Pitakarnnop [13]. Model zaimplementowany do solwera komercyjnego jest szczególnym przypadkiem, bardzo uproszczoną wersją modelu rozwijanego w IMP PAN. Ponieważ układ badany przez Pitakarnnop [13] dotyczył przepływu laminarnego gazu jednoatomowego przez kanał w warunkach izotermicznych, toteż uproszczenia modelu były daleko idące ale odpowiadające sytuacji przepływowej badanego układu.

Z wykresu (rysunek 4) widać, że model IMP PAN zachowuje dużą spójność niezależnie od przepływającego gazu. Model standardowy Maxwella tej spójności nie ma, porównując uzyskane rozbieżności dla helu i argonu. Mimo wszystko jednak, w zakresie dużych rozrzedzeń zgodność z eksperymentem pogarsza się. Wynika to, jak uważamy z niewiedzy na temat formy i wartości

współczynnika statycznego w domknięciu na siłę tarcia ściennego, współczynnika f_{static} . Trzeba dodać, iż współczynnik ten był rozważany w literaturze już przez Duhema [12], który wychodząc z lokalnej postaci drugiego prawa termodynamiki zaproponował nierówność (ścienną), która winna być spełniona przez współczynnik równania (14).



Rys. 4. Wykres porównawczy wyników otrzymanych różnymi modelami (standardowy, Maxwell, IMP) z wynikami pomiaru za Pitakarnnop et. al. [13].

Skok temperatury i koncentracji składnika

Poza wystąpieniem zjawiska wzmożonego transportu wskutek przyściennych efektów manifestujących się silnie zwłaszcza w przepływach zdominowanych warstwą przyścienną, to jest, gdzie wymiar charakterystyczny kanału (średnica hydrauliczna) jest porównywalnego rzędu co długość drogi swobodnej molekuł płynu, występują również nieciągłości pola temperatury oraz koncentracji składnika chemicznego w kierunku normalnym do ścianki. Te nieciągłości, popularnie zwane skokami odpowiednio temperatury i koncentracji składnika, badane były w literaturze [2][7][14][15].

Na wstępie należy poczynić uwagę, by efektu skoku temperatury nie utożsamiać z efektem termicznej transpiracji. O ile ten drugi wnosi przyczynek do zjawiska zwiększenia transportu w kierunku przepływu, o tyle ten pierwszy wiąże się z nieciągłością, lub też niejednoznacznością temperatur ścianki i płynu w jej pobliżu, w kierunku normalnym do powierzchni ścianki. Zaproponowany już w 1896 roku przez Smoluchowskiego model [14] zakłada, że da się wprowadzić pewien parametr charakterystyczny, l_θ , czyli długość skoku, która wiąże się z modelem strumienia ciepła Stokesa (1851) w następujący sposób:

$$h(\theta - \theta_{\text{wall}}) + \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (16)$$

gdzie:

h – współczynnik przejmowania ciepła,

θ_{wall} – temperatura ścianki,

θ – temperatura płynu w objętości,

$\mathbf{q}$ – Fourierowski strumień ciepła.

Przy strumieniu ciepła zdefiniowanym prawem Fouriera:

$$\mathbf{q} = \lambda \text{ grad } \theta. \quad (17)$$

gdzie:

λ – współczynnik Lamberta przewodzenia ciepła w objętości.

Długość skoku temperatury zdefiniował Smoluchowski jako:

$$l_\theta = \frac{\lambda}{h}, \quad (18)$$

w analogii do długości poślizgu Naviera. Uogólnione sformułowanie warunku zaproponowane w IMP PAN ma natomiast postać:

$$\begin{aligned} \partial_t (c_{p,s} \theta_s) + \operatorname{div}_s (c_{p,s} \theta_s \mathbf{v}_{s\parallel}) - \theta_s \mathbf{I}_s \mathbf{v}_s \mathbf{n} + \operatorname{div}_s (\lambda_s \operatorname{grad}_s \theta_s) + \\ + h(\theta - \theta_{\text{wall}}) + \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Pojawia się tu temperatura warstwy Smoluchowskiego θ_s oraz przewodnictwo cieplne warstwy λ_s i powierzchniowa objętość cieplna $c_{p,s}$.

W przypadku przepływu mieszaniny płynów może zachodzić zjawisko skoku koncentracji. Szczególnie, gdy jest to mieszanina reagująca, a ścianki kanału katalizują reakcję, ma to istotne znaczenie. Model zaproponowany przez Lewisa w 1924 roku na warunek brzegowy dla koncentracji ma postać [15][16]:

$$\alpha(c - c_{\text{wall}}) + \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (20)$$

gdzie strumień składnika zdefiniowanym prawem dyfuzji Ficka:

$$\mathbf{j} = D \operatorname{grad} c. \quad (21)$$

Domknięcie na odpowiednią długość skoku koncentracji zaproponowano w literaturze [7], gdzie opisuje się ją jako:

$$l_c = \frac{D}{\alpha} \approx 0.03 \text{ mm} \quad (22)$$

Uogólniony model IMP PAN dla skoku koncentracji zdefiniowano następująco [5]:

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho_s c_s) + \operatorname{div}_s (\rho_s c_s \mathbf{v}_{s\parallel}) - c_s \mathbf{I}_s \mathbf{v}_s \mathbf{n} + \operatorname{div}_s (D_s \operatorname{grad}_s c_s) + \\ + \alpha(c - c_{\text{wall}}) + \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} = 0, \end{aligned} \quad (23)$$

czyli w postaci analogicznej do postaci na skok temperatury.

Z punktu widzenia wysokotemperaturowych tlenkowych ogniw paliwowych (SOFC) ważne jest modelowanie dwóch typów prądu elektrycznego: prądu elektronowego (w obrębie złączy i kolektorów) i prądu jonowego (w obrębie elektrolitu). Liczne badania eksperymentalne nad prądem jonowym, podsumowane w przeglądowej pracy Hui i innych [17], pokazały wzmożony przepływ prądu jonowego, powodowany obecnością niezwykle wysokiego przewodnictwa powierzchniowego związanego z nanostrukturą powierzchni elektrolitu. Zgodnie z wynikami modelowania prądu ogniwa paliwowego opracowanego przez M. Karcza [18], proponujemy, aby klasyczny warunek zanikania prądu na brzegu $\mathbf{j} \cdot \mathbf{n} = 0$ – gdzie prąd jonowy $\mathbf{j} = \sigma \operatorname{grad} \phi$ jest wyrażony przez prawo Ohma oparte o objętościową stałą przewodnictwa σ_s – zastąpić warunkiem „elektrycznego skoku”:

$$\mathbf{j} \cdot \mathbf{n} + \operatorname{div}_s (\sigma_s \operatorname{grad}_s \phi) = 0. \quad (24)$$

Pojawia się tu mierzone przez eksperymentatorów powierzchniowe przewodnictwo σ_s [17], a sam warunek brzegowy przestaje być trywialny i staje się równaniem różniczkowym drugiego rzędu.

Wnioski

Dokonano krótkiego przeglądu modeli do tej pory proponowanych i niekiedy używanych, jednocześnie z propozycjami modelu opracowanymi przez IMP PAN. Modele te dotyczą zjawisk zwiększenia transportu wskutek zjawisk związanych z dominacją warstwy przyściennej w przepływie i dużym wpływie efektów transpiracji termicznej, ciśnieniowej, stężeniowej, przemiany fazowej, potencjału elektrycznego. Przedstawiono również propozycję IMP PAN opisu zjawisk skoku temperatury i stężenia składnika pojawiających się w warstwie przyściennej. Wytlumaczenie tych efektów oraz ich dobre modelowanie pogłębią wiedzę na temat mechaniki płynów i być może również przybliżą zagadnienie powstawania turbulencji w warstwie przyściennej [11]. Dobrze skonstruowany model pomoże jednak przede wszystkim stworzyć dobre narzędzie numeryczne do obliczeń projektowych mikro i nano układów (MEMS) jednocześnie umożliwiając szybki postęp w rozwoju takich urządzeń.

Streszczenie

O wzmożonej konwersji energii możemy mówić, gdy następuje zmniejszenie rozmiarów urządzenia, w którym zachodzi ilościowo ten sam proces i przez to zachodzi objętościowe zwiększenie gęstości transportu i konwersji energii. Zjawisko to jest szczególnie widoczne na granicach kontaktu między fazami. Wzmożenie konwersji zachodzi uwidacznia się zwłaszcza w przypadku nanotechnologii. W pracy zaprezentowano model wzmożonego transportu zachodzącego w skali nano, w którym sformułowano warunki brzegowe, sformułowano wyrażenie na postać tarcia i naprężeń w płynie oraz omówiono efekt transpiracji. Przedstawiano model skoku temperatury, model skoku koncentracji składnika oraz model skoku prądu elektrycznego.

Słowa kluczowe: transport energii, nanotechnologia, wzmożona konwersja energii, model matematyczny.

BASIS OF THE ENHANCEMENT ENERGY CONVERSION

Abstract

Enhancement energy conversion based of a reduction the size of the device in which there is quantitatively the same process, and thus there is a increase of the density of transport and energy conversion. This phenomenon is particularly evident at the borders of contact between the phases. Increasing conversion occurs particularly evident in the case of nanotechnology. The paper presents a model of enhanced transport in nano-scale setting in which the formulated boundary conditions, formulated expression in the form of friction and stress in the fluid, and discusses the effect of transpiration. Presented model of temperature jump, model component concentration of jump and model of electric current jump.

Keywords: enhancement transport energy, nanotechnology, enhancement energy conversion, mathematical model.

Literatura

- [1]Maxwell J.C.: *On stresses in rarefied gases arising from inequalities in temperature*, "Phil. Trans. Royal Soc.", London 1879, 170, s. 231–256.
- [2]Badur J., Karcz M.: *On evolution of the motion of a capillary tensor*, "Shell Structure Theory and Applications", Bulkema, 2010, s. 262–269.

- [3]Badur J., Karcz M., Lemanski M.: *On the mass and momentum transfer in the Navier – Stokes slip layer*, „Microfluidics and Nanofluidics”, 10, 2011, s. 32–61.
- [4]Badur J., Karcz M., Lemanski M., Nastalek L.: *Enhancement transport phenomena in the Navier-Stokes shell-like slip layer*, ICCES Conference, 19–21 April 2011, Nanjing, China.
- [5]Stokes G.G.: *On the theories of the internal friction of fluids in motion, and of equilibrium and motion of elastic solids*, “Transactions of the Cambridge Philosophical Society”, 8, 1845, s. 287.
- [6]Duhem M.P.: *Rechercher sur l’Hydrodynamique, Principes Fundamentaux de l’Hydrodynamique*, vol. 1,2,3, Paris1901.
- [7]Lewandowski T., Ochrymiuk T., Czerwińska J.: *Modelling of heat transfer in microchannels gas flow*, „Journal of Heat Transfer” (submitted).
- [8]Pitakarnnop J., Varoutis S., Valougeorgis D., Geottroy S., Baldas L., Colin S.: *A novel experimental setup for gas microflows*, „Microfluidics and Nanofluidics”, 8, 2010, s. 57–72.
- [9]Jóźwik P., Karcz M., Badur J.: *Numerical modelling of the microreactor for thermocatalytic decomposition of toxic compounds*, „Chem. Proc. Eng.”, submitted.
- [10]von Smoluchowski M.: *Zur kinetischer Theorie der Transpiration und Diffusion verdunnter Gase*, „Pogg. Ann.”, 338, 1910, s. 1559–1570.
- [11]Xu B., Ju Y.: *Concentration slip and its impact on homogeneous combustion in a microscale chemical reactor*, „Chem. Eng. Sci.”, 60, 2005, s. 3561–3572.
- [12]Karniadakis G., Beskok A., Aluru N.: *Microflows and Nanoflows*, Springer-Verlag, USA 2005.
- [13]Badur J., *Rozwój pojęcia energii*, Wydawnictwo IMP PAN, Gdańsk 2009, s. 1–1186.
- [14]Hui S., Roller J., Yick S., Hang X., Deces-Petit C., Xie Y., Maric R., Glosch D.: *A brief review of The ionic conductivity enhancement for selected oxide electrolytes*, „Journal of Power Sources”, 172, 2007, s. 493–502.
- [15]Karcz M., *Prediction of the electric current flux in a tubular fuel cell by means of a 1D model*, „Chemical and Process Engineering”, 30, 2009, s. 267–278.
- [16]Badur J., Karcz M., Lemański M., Nastalek L.: *Foundation of the Navier-Stokes boundary conditions in fluid mechanics*, „Transactions of the Institute of Fluid-Flow Machinery”, nr 123, 2011, s. 3–55.
- [17]Badur J., Ziółkowski P., *Zasady wzmożonej konwersji energii w nano-skali*, Ref. Plen. 52 Sympozjon “Modelowanie w Mechanice”, Ustroń 23–27 luty 2013.
- [18]Badur J., Ziółkowski P., *Further remarks on the surface vis impressa caused by a fluid solid contact*, 12th Joint European Thermodynamics Conference Brescia, July 1–5, 2013.