

## РАСЧЕТ ДИФфуЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ ДЛЯ НЕКОТОРЫХ ПРИРОДНЫХ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ В ВОЗДУХ

Ю.И. Жаврин, М.Т. Бекетаева, О.В. Федоренко

*НИИЭТФ, Казахский национальный университет им. аль-Фараби, г. Алматы*

Проведен расчет диффузионных процессов для пяти природных углеводородных газовых смесей в воздух при  $T = 298,0$  К и  $P = 0,101$  МПа. Определены эффективные коэффициенты диффузии и матричные коэффициенты многокомпонентной диффузии. Показаны преимущества применения эффективных коэффициентов при описании массопереноса. Вычисленные коэффициенты могут быть использованы в качестве справочных данных.

Результаты исследований диффузии в многокомпонентных углеводородных газовых смесях, представленные в настоящей статье, – это фактически продолжение работ начатых еще в советское время. Сейчас они выполняются в Научно-исследовательском институте экспериментальной и теоретической физики (НИИ ЭТФ) при Казахском национальном университете им. Аль-Фараби [1-4].

На сегодняшний день природный газ одно из наиболее дешевых и экологически чистых видов топлива. Также он служит исходным сырьем для производства различных веществ и материалов. Как правило, от места добычи газа до пункта назначения для его транспортировки используются трубопроводные сети, безопасная эксплуатация которых должна обеспечиваться полной информацией о теплофизических свойствах природных газов в широком интервале температур и давлений. Это утверждение также относится к использованию природных газов в технологических процессах, связанных с теплообменом. Однако в большинстве справочников и руководств, приведена очень краткая (либо вообще отсутствует см., например, [5]) информация о массообменных свойствах углеводородных газов, их смесей, а также природных газов, хотя такие данные крайне необходимы.

Тем не менее, реализовать на практике (имеется в виду проведение экспериментальных исследований с их тщательной обработкой) такую задачу довольно сложно и в некоторой степени накладно. Поэтому на современном уровне развития науки для решения данного вопроса большая роль отводится вычислительной технике, которая позволяет получать исчерпывающую информацию о переносных и других свойствах газов и их смесей в компактной форме в виде функциональных зависимостей, таким образом, обеспечивая выбор оптимальных режимов работы оборудования и технологических процессов. Такой подход значительно снижает затраты на весь производственный цикл.

Так как основной целью данной работы является описание диффузии в многокомпонентных газовых смесях и нахождение диффузионных констант, то мы сочли необходимым обратиться к распространенному в практике подобных исследований методу – методу эффективного коэффициента диффузии (ЭКД), как к одному из простых и достаточно точных. Мы не будем детально останавливаться на процедуре его введения, свойствах, физическом смысле и т. д., а отсылаем читателя к соответствующей литературе (см., например, [6-9]).

Метод ЭКД основан на том предположении, что процесс многокомпонентного массопереноса можно описать ЭКД, который в случае бинарной системы будет тождественно равен обычному коэффициенту взаимной диффузии (КВД). Формально это утверждение для одномерного случая записывается в виде первого закона Фика

$$j_i = -D_i^{y\delta} \frac{dc_i}{dx}, \quad (1)$$

где  $j_i$ ,  $c_i$  – плотность диффузионного потока и концентрация  $i$  – го компонента

соответственно.

Таким образом, поток  $i$  – го компонента в  $n$  – компонентной газовой смеси определяется только градиентом данного компонента и его ЭКД.

На данный момент имеется достаточно информации по изучению многокомпонентного массопереноса (для самых общих случаев) с использованием ЭКД. Наряду с экспериментальными исследованиями разрабатывались методы расчета многокомпонентной диффузии, основу которых составляли уравнения Стефана-Максвелла. Апробация этого метода на многочисленных экспериментах показала, что он физически правильно описывает диффузионный процесс с достаточной для практики точностью и кроме того прост в использовании [10-12].

В литературе приводится ряд записей выражений для ЭКД. Мы будем использовать выражение из работ [9,13], которое легко проверяется в диффузионных экспериментах

$$D_i^{\phi} = D_{ii}^* + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n-1} D_{ij}^* \frac{dc_j}{dc_i}, \quad (2)$$

где  $D_{ii}^*$ ,  $D_{ij}^* = f(D_{ij}, y_i, y_j)$  – главные и перекрестные «практические» коэффициенты диффузии (ПКД) или их иногда называют матричными коэффициентами многокомпонентной диффузии (МКМД);  $dc_j / dc_i$  – отношение, связывающее изменение концентрации  $j$  – го компонента с изменением концентрации  $i$  – го компонента;  $D_{ij}$  – КВД пары газов  $i$  и  $j$ ;  $y_i, y_j$  – мольные доли компонентов  $i$  и  $j$ .

Выражение (2) в локальных величинах достаточно сложно для применения, поэтому его упрощают, переходя к приближенному вычислению интегрального (усредненному по всему диффузионному слою) ЭКД  $i$  – го компонента в  $n$  компонентной смеси. Величины  $D_{ii}^*$ ,  $D_{ij}^*$  рассчитываются для усредненных (среднее арифметическое) мольных долей, а отношение градиентов заменяют отношением разностей концентраций компонентов между точками  $\theta$  и  $L$  на границах диффузионного слоя

$$\bar{D}_i^{\phi} = \bar{D}_{ii}^* + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n-1} \bar{D}_{ij}^* \left( \frac{c_j^L - c_j^0}{c_i^L - c_i^0} \right) \quad (3)$$

Из (3) следует, что от распределения компонентов внутри системы зависит знак ЭКД, который может быть как положительный, так и отрицательный. Для простейшей многокомпонентной системы – тройной смеси – выражение для расчета ЭКД имеет вид

$$\bar{D}_i^{\phi} = \frac{(1 - \bar{y}_i) \bar{D}_{ij} \bar{D}_{ik} + \bar{y}_i \bar{D}_{jk} \bar{D}_{ik} + \bar{y}_i (\bar{D}_{ik} \bar{D}_{jk} - \bar{D}_{ij} \bar{D}_{jk}) \left( \frac{c_j^L - c_j^0}{c_i^L - c_i^0} \right)}{\bar{y}_i \bar{D}_{jk} + \bar{y}_j \bar{D}_{ik} + \bar{y}_k \bar{D}_{ij}}, \quad i, j, k = 1, 2, 3 \quad (4)$$

где  $\bar{y}_i, \bar{y}_j, \bar{y}_k$  – усредненные (среднее арифметическое) мольные доли компонентов.

При измерении ЭКД в большинстве задач нами использовался метод двух колбового диффузионного прибора [14]. Конструкция диффузионного аппарата, приборов и узлов, входящих в экспериментальную установку, а также методика работы детально описаны в [15]. Один из аппаратов, который использовался в работе, имел следующие параметры: объемы верхней и нижней колб –  $V_a = V_n = 76,9 \text{ см}^3$ ; длина и диаметр диффузионного канала  $L = 7,055 \text{ см}$  и  $d = 0,4 \text{ см}$  соответственно. Для данного аппарата комплекс геометрических размеров  $B = L \cdot V_a \cdot V_i / S \cdot (V_a + V_i)$  (постоянная прибора, где  $S$  – площадь поперечного сечения канала) был равен  $2261 \text{ см}^2$ . Для имеющихся у нас аппаратов, геометрические характеристики могли незначительно отличаться, а их постоянные находились в пределах от  $2100$  до  $2600 \text{ см}^2$ . В представленных расчетах нами использовались геометрические параметры диффузионного аппарата, постоянная которого была равна  $2500 \text{ см}^2$ .

В данной работе через численный эксперимент была исследована диффузия пяти природных углеводородных газовых смесей в воздух при  $T = 298,0$  К и  $P = 0,101$  МПа. Состав и концентрации компонентов в смесях были взяты из справочного пособия [5]. При этом выбор того или иного газового месторождения не был связан с классификацией предложенной в [5], а обуславливался только концентрацией основного газа – метана. Этот диапазон составлял от минимальных его значений в смеси до максимальных. В расчетах нами учитывались все компоненты, хотя многие из газов присутствовали в виде «следов». (В понятие «следовой» концентрации вкладывается следующий смысл: когда молекулы данного газа не испытывают соударений между собой, а сталкиваются только с молекулами других газов. В количественном отношении (смотря, какие газы в смеси) – это может достигать до 5-7 %). Ниже перечислены газовые месторождения, приведен их состав и концентрации компонентов в мольных долях (отметим, что в дальнейшем для удобства нами будут использоваться не химические символы газов, а их цифровая нумерация, приведенная после них):

I. Марковское (Балыхтинский пласт) (с. 182). Исследуемая система: Air(1) – 0,7240 CH<sub>4</sub>(2) + 0,0930 C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>(3) + 0,0780 C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>(4) + 0,0490 n-C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>(5) + 0,0305 n-C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>(6) + 0,0100 CO<sub>2</sub>(7) + 0,0155 N<sub>2</sub>(8);

II. Уренгойское месторождение (с. 182). Исследуемая система: Air(1) – 0,8531 CH<sub>4</sub>(2) + 0,0581 C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>(3) + 0,0536 C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>(4) + 0,0200 n-C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>(5) + 0,0018 n-C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>(6) + 0,0044 CO<sub>2</sub>(7) + 0,0090 N<sub>2</sub>(8);

III. Березанское месторождение (средний состав) (с. 182). Исследуемая система: Air(1) – 0,8878 CH<sub>4</sub>(2) + 0,0475 C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>(3) + 0,0056 C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>(4) + 0,0015 n-C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>(5) + 0,0129 n-C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>(6) + 0,0387 CO<sub>2</sub>(7) + 0,0060 N<sub>2</sub>(8);

IV. Средне-Вилуйское месторождение (средний состав) (с. 178). Исследуемая система: Air(1) – 0,9220 CH<sub>4</sub>(2) + 0,0510 C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>(3) + 0,0090 C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>(4) + 0,0025 n-C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>(5) + 0,0009 n-C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>(6) + 0,0075 CO<sub>2</sub>(7) + 0,0071 N<sub>2</sub>(8);

V. Газли-ХII месторождение (средний состав) (с. 178). Исследуемая система: Air(1) – 0,9444 CH<sub>4</sub>(2) + 0,0258 C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>(3) + 0,0031 C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>(4) + 0,0015 n-C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>(5) + 0,0039 n-C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>(6) + 0,0020 CO<sub>2</sub>(7) + 0,0193 N<sub>2</sub>(8);

VI. Усть-Вилуйское месторождение (с. 182). Исследуемая система: Air(1) – 0,936 CH<sub>4</sub>(2) + 0,024 C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>(3) + 0,006 C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>(4) + 0,003 n-C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>(5) + 0,002 n-C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>(6) + 0,029 N<sub>2</sub>(8). Расчеты для этой системы выполнены ранее (см. [4]).

Для проведения расчетов были необходимы КВД пар газов, входящих в системы. Вычисления КВД проводились согласно теории Чепмена-Энскога с использованием потенциала Леннарда-Джонса [16] при  $T = 298,0$  К,  $P = 0,101$  МПа. К сожалению, экспериментальных данных очень мало, поэтому нами использовались только расчетные значения (при желании читатель может сопоставить эти результаты с экспериментом, если таковой он имеет). Значения КВД следующие:  $D_{12} = 0,217$ ;  $D_{13} = 0,144$ ;  $D_{23} = 0,151$ ;  $D_{14} = 0,111$ ;  $D_{24} = 0,121$ ;  $D_{34} = 0,077$ ;  $D_{15} = 0,79$ ;  $D_{25} = 0,105$ ;  $D_{35} = 0,066$ ;  $D_{45} = 0,050$ ;  $D_{16} = 0,082$ ;  $D_{26} = 0,092$ ;  $D_{36} = 0,057$ ;  $D_{46} = 0,043$ ;  $D_{56} = 0,036$ ;  $D_{17} = 0,151$ ;  $D_{27} = 0,165$ ;  $D_{37} = 0,104$ ;  $D_{47} = 0,079$ ;  $D_{57} = 0,067$ ;  $D_{67} = 0,058$ ;  $D_{18} = 0,203$ ;  $D_{28} = 0,217$ ;  $D_{38} = 0,144$ ;  $D_{48} = 0,112$ ;  $D_{58} = 0,096$ ;  $D_{68} = 0,083$ ;  $D_{78} = 0,151$  см<sup>2</sup>/с.

Также воздух полагался, как один компонент. Это вполне оправдано, если считать, что концентрации кислорода и азота не подвергаются сильным изменениям [16].

Ниже приведены вычисленные значения ЭКД и МКМД для начального распределения концентраций компонентов пяти систем природных газов при  $T = 298,0$  К,  $P = 0,101$  МПа.

**ЭКД** компонентов системы I: 1 – 0,181; 2 – 0,206; 3 – 0,138; 4 – 0,107; 5 – 0,068; 6 – 0,079; 7 – 0,144; 8 – 0,193 см<sup>2</sup>/с.

**МКМД** системы I для независимых потоков и градиентов (первые семь компонентов):  $D(1,1) = 0,1868$ ;  $D(1,2) = -0,0066$ ;  $D(1,3) = 0,0273$ ;  $D(1,4) = 0,0430$ ;  $D(1,5) = 0,0623$ ;  $D(1,6) =$

0,0570;  $D(1,7) = 0,0246$ ;  $D(2,1) = 0,0004$ ;  $D(2,2) = 0,1968$ ;  $D(2,3) = 0,0209$ ;  $D(2,4) = 0,0299$ ;  $D(2,5) = 0,0316$ ;  $D(2,6) = 0,0382$ ;  $D(2,7) = 0,0164$ ;  $D(3,1) = 0,0001$ ;  $D(3,2) = -0,0005$ ;  $D(3,3) = 0,1346$ ;  $D(3,4) = 0,0042$ ;  $D(3,5) = 0,0045$ ;  $D(3,6) = 0,0055$ ;  $D(3,7) = 0,0025$ ;  $D(4,1) = 0,0001$ ;  $D(4,2) = -0,0006$ ;  $D(4,3) = 0,0023$ ;  $D(4,4) = 0,1063$ ;  $D(4,5) = 0,0039$ ;  $D(4,6) = 0,0048$ ;  $D(4,7) = 0,0023$ ;  $D(5,1) = 0,0009$ ;  $D(5,2) = -0,0004$ ;  $D(5,3) = 0,0015$ ;  $D(5,4) = 0,0023$ ;  $D(5,5) = 0,0831$ ;  $D(5,6) = 0,0031$ ;  $D(5,7) = 0,0015$ ;  $D(6,1) = 0,0001$ ;  $D(6,2) = -0,0003$ ;  $D(6,3) = 0,0009$ ;  $D(6,4) = 0,0015$ ;  $D(6,5) = 0,0016$ ;  $D(6,6) = 0,0783$ ;  $D(6,7) = 0,0009$ ;  $D(7,1) = 0,00001$ ;  $D(7,2) = -0,0001$ ;  $D(7,3) = 0,0003$ ;  $D(7,4) = 0,0005$ ;  $D(7,5) = 0,0005$ ;  $D(7,6) = 0,0006$ ;  $D(7,7) = 0,1397 \text{ см}^2/\text{с}$ .

**ЭКД** компонентов системы II: 1 – 0,199; 2 – 0,212; 3 – 0,141; 4 – 0,107; 5 – 0,064; 6 – 0,077; 7 – 0,146; 8 – 0,198  $\text{см}^2/\text{с}$ .

**МКМД** системы II для независимых потоков и градиентов (первые семь компонентов):  
 $D(1,1) = 0,1985$ ;  $D(1,2) = -0,0069$ ;  $D(1,3) = 0,0287$ ;  $D(1,4) = 0,0455$ ;  $D(1,5) = 0,0669$ ;  $D(1,6) = 0,0605$ ;  $D(1,7) = 0,0259$ ;  $D(2,1) = 0,0002$ ;  $D(2,2) = 0,2071$ ;  $D(2,3) = 0,0261$ ;  $D(2,4) = 0,0372$ ;  $D(2,5) = 0,0392$ ;  $D(2,6) = 0,0476$ ;  $D(2,7) = 0,0203$ ;  $D(3,1) = 0,00001$ ;  $D(3,2) = -0,0003$ ;  $D(3,3) = 0,1415$ ;  $D(3,4) = 0,0028$ ;  $D(3,5) = 0,0030$ ;  $D(3,6) = 0,0036$ ;  $D(3,7) = 0,0017$ ;  $D(4,1) = 0,0001$ ;  $D(4,2) = -0,0004$ ;  $D(4,3) = 0,0017$ ;  $D(4,4) = 0,1119$ ;  $D(4,5) = 0,0029$ ;  $D(4,6) = 0,0035$ ;  $D(4,7) = 0,0017$ ;  $D(5,1) = 0,0004$ ;  $D(5,2) = -0,0002$ ;  $D(5,3) = 0,0006$ ;  $D(5,4) = 0,0010$ ;  $D(5,5) = 0,0865$ ;  $D(5,6) = 0,0014$ ;  $D(5,7) = 0,0006$ ;  $D(6,1) = 0,0000$ ;  $D(6,2) = -0,00002$ ;  $D(6,3) = 0,0001$ ;  $D(6,4) = 0,0001$ ;  $D(6,5) = 0,0001$ ;  $D(6,6) = 0,0817$ ;  $D(6,7) = 0,0007$ ;  $D(7,1) = 0,0000$ ;  $D(7,2) = -0,00004$ ;  $D(7,3) = 0,0001$ ;  $D(7,4) = 0,0002$ ;  $D(7,5) = 0,0002$ ;  $D(7,6) = 0,0003$ ;  $D(7,7) = 0,1487 \text{ см}^2/\text{с}$ .

**ЭКД** компонентов системы III: 1 – 0,206; 2 – 0,214; 3 – 0,142; 4 – 0,107; 5 – 0,063; 6 – 0,077; 7 – 0,146; 8 – 0,200  $\text{см}^2/\text{с}$ .

**МКМД** системы III для независимых потоков и градиентов (первые семь компонентов):

$D(1,1) = 0,2029$ ;  $D(1,2) = -0,0070$ ;  $D(1,3) = 0,0292$ ;  $D(1,4) = 0,0464$ ;  $D(1,5) = 0,0685$ ;  $D(1,6) = 0,0618$ ;  $D(1,7) = 0,0264$ ;  $D(2,1) = 0,00003$ ;  $D(2,2) = 0,2108$ ;  $D(2,3) = 0,0277$ ;  $D(2,4) = 0,0394$ ;  $D(2,5) = 0,0414$ ;  $D(2,6) = 0,0505$ ;  $D(2,7) = 0,0214$ ;  $D(3,1) = 0,0000$ ;  $D(3,2) = -0,0002$ ;  $D(3,3) = 0,1440$ ;  $D(3,4) = 0,0023$ ;  $D(3,5) = 0,0025$ ;  $D(3,6) = 0,0030$ ;  $D(3,7) = 0,0014$ ;  $D(4,1) = 0,00001$ ;  $D(4,2) = -0,0001$ ;  $D(4,3) = 0,0002$ ;  $D(4,4) = 0,1118$ ;  $D(4,5) = 0,0003$ ;  $D(4,6) = 0,0004$ ;  $D(4,7) = 0,0002$ ;  $D(5,1) = 0,00003$ ;  $D(5,2) = -0,00001$ ;  $D(5,3) = 0,0001$ ;  $D(5,4) = 0,0001$ ;  $D(5,5) = 0,0871$ ;  $D(5,6) = 0,0001$ ;  $D(5,7) = 0,0001$ ;  $D(6,1) = 0,00002$ ;  $D(6,2) = -0,0001$ ;  $D(6,3) = 0,0004$ ;  $D(6,4) = 0,0007$ ;  $D(6,5) = 0,0007$ ;  $D(6,6) = 0,0842$ ;  $D(6,7) = 0,0004$ ;  $D(7,1) = 0,0000$ ;  $D(7,2) = -0,0004$ ;  $D(7,3) = 0,0013$ ;  $D(7,4) = 0,0020$ ;  $D(7,5) = 0,0021$ ;  $D(7,6) = 0,0026$ ;  $D(7,7) = 0,1530 \text{ см}^2/\text{с}$ .

**ЭКД** компонентов системы IV: 1 – 0,210; 2 – 0,215; 3 – 0,142; 4 – 0,107; 5 – 0,062; 6 – 0,076; 7 – 0,148; 8 – 0,201  $\text{см}^2/\text{с}$ .

**МКМД** системы IV для независимых потоков и градиентов (первые семь компонентов):

$D(1,1) = 0,2054$ ;  $D(1,2) = -0,0071$ ;  $D(1,3) = 0,0296$ ;  $D(1,4) = 0,0470$ ;  $D(1,5) = 0,0697$ ;  $D(1,6) = 0,0627$ ;  $D(1,7) = 0,0267$ ;  $D(2,1) = 0,00003$ ;  $D(2,2) = 0,2131$ ;  $D(2,3) = 0,0291$ ;  $D(2,4) = 0,0415$ ;  $D(2,5) = 0,0435$ ;  $D(2,6) = 0,0532$ ;  $D(2,7) = 0,0225$ ;  $D(3,1) = 0,0000$ ;  $D(3,2) = -0,0003$ ;  $D(3,3) = 0,1460$ ;  $D(3,4) = 0,0025$ ;  $D(3,5) = 0,0027$ ;  $D(3,6) = 0,0033$ ;  $D(3,7) = 0,0015$ ;  $D(4,1) = 0,00001$ ;  $D(4,2) = -0,0001$ ;  $D(4,3) = 0,0003$ ;  $D(4,4) = 0,1136$ ;  $D(4,5) = 0,0005$ ;  $D(4,6) = 0,0006$ ;  $D(4,7) = 0,0003$ ;  $D(5,1) = 0,0001$ ;  $D(5,2) = -0,00002$ ;  $D(5,3) = 0,0001$ ;  $D(5,4) = 0,0001$ ;  $D(5,5) = 0,0884$ ;  $D(5,6) = 0,0002$ ;  $D(5,7) = 0,0001$ ;  $D(6,1) = 0,00000$ ;  $D(6,2) = -0,00001$ ;  $D(6,3) = 0,00003$ ;  $D(6,4) = 0,0001$ ;  $D(6,5) = 0,0001$ ;  $D(6,6) = 0,0847$ ;  $D(6,7) = 0,00003$ ;  $D(7,1) = 0,0000$ ;  $D(7,2) = -0,0001$ ;  $D(7,3) = 0,0002$ ;  $D(7,4) = 0,0004$ ;  $D(7,5) = 0,0004$ ;  $D(7,6) = 0,0005$ ;  $D(7,7) = 0,1543 \text{ см}^2/\text{с}$ .

**ЭКД** компонентов системы V: 1 – 0,212; 2 – 0,216; 3 – 0,142; 4 – 0,107; 5 – 0,061; 6 – 0,075; 7 – 0,148; 8 – 0,202  $\text{см}^2/\text{с}$ .

**МКМД** системы V для независимых потоков и градиентов (первые семь компонентов):  
 $D(1,1) = 0,2071$ ;  $D(1,2) = -0,0072$ ;  $D(1,3) = 0,0298$ ;  $D(1,4) = 0,0474$ ;  $D(1,5) = 0,0704$ ;  $D(1,6) =$

0,0632;  $D(1,7) = 0,0269$ ;  $D(2,1) = 0,00002$ ;  $D(2,2) = 0,2146$ ;  $D(2,3) = 0,0301$ ;  $D(2,4) = 0,0428$ ;  $D(2,5) = 0,0449$ ;  $D(2,6) = 0,0549$ ;  $D(2,7) = 0,0232$ ;  $D(3,1) = 0,0000$ ;  $D(3,2) = -0,0001$ ;  $D(3,3) = 0,1464$ ;  $D(3,4) = 0,0013$ ;  $D(3,5) = 0,0014$ ;  $D(3,6) = 0,0017$ ;  $D(3,7) = 0,0008$ ;  $D(4,1) = 0,0000$ ;  $D(4,2) = -0,00003$ ;  $D(4,3) = 0,0001$ ;  $D(4,4) = 0,1143$ ;  $D(4,5) = 0,0002$ ;  $D(4,6) = 0,0002$ ;  $D(4,7) = 0,0001$ ;  $D(5,1) = 0,00003$ ;  $D(5,2) = -0,00001$ ;  $D(5,3) = 0,0001$ ;  $D(5,4) = 0,0001$ ;  $D(5,5) = 0,0891$ ;  $D(5,6) = 0,0001$ ;  $D(5,7) = 0,0001$ ;  $D(6,1) = 0,00001$ ;  $D(6,2) = -0,00004$ ;  $D(6,3) = 0,0001$ ;  $D(6,4) = 0,0002$ ;  $D(6,5) = 0,0002$ ;  $D(6,6) = 0,0857$ ;  $D(6,7) = 0,0001$ ;  $D(7,1) = 0,0000$ ;  $D(7,2) = -0,00002$ ;  $D(7,3) = 0,0001$ ;  $D(7,4) = 0,0001$ ;  $D(7,5) = 0,0001$ ;  $D(7,6) = 0,0001$ ;  $D(7,7) = 0,1555 \text{ см}^2/\text{с}$ .

Так как диффузионный процесс в двухколбовом аппарате является нестационарным, то естественно представляет интерес поведение коэффициентов диффузии компонентов в системах с течением времени. В качестве примера такая зависимость представлена в таблице 1 для Уренгойского месторождения (система II).

Таблица 1. Текст файла отчета с результатами вычислений для системы Air(1) – 0,8531 CH<sub>4</sub>(2) + 0,0581 C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>(3) + 0,0536 C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>(4) + 0,0200 n-C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>(5) + 0,0018 n-C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>(6) + 0,0044 CO<sub>2</sub>(7) + 0,0090 N<sub>2</sub>(8). T = 298,0 K и P = 0,101 МПа [12].

| имя                            | концентрации |         | разность | мгновен.           | интегр.            |
|--------------------------------|--------------|---------|----------|--------------------|--------------------|
| газа                           | компонентов, |         | концен., | значения           | значения           |
|                                | мольные доли |         | мольные  | эффект.            | эффект.            |
|                                | -----        |         | доли     | коэфф.             | коэфф.             |
|                                | верхняя      | нижняя  |          | диффузии,          | диффузии,          |
|                                | колба        | колба   |          | см <sup>2</sup> /с | см <sup>2</sup> /с |
| -----                          |              |         |          |                    |                    |
| t = 0 мин                      |              |         |          |                    |                    |
| Air                            | 1,00000      | 0,00000 | 1,00000  | 0,19871            | 0,19871            |
| CH <sub>4</sub>                | 0,00000      | 0,85310 | -0,85310 | 0,21208            | 0,21208            |
| C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>  | 0,00000      | 0,05810 | -0,05810 | 0,14082            | 0,14082            |
| C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>  | 0,00000      | 0,05360 | -0,05360 | 0,10720            | 0,10720            |
| C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> | 0,00000      | 0,02000 | -0,02000 | 0,06445            | 0,06445            |
| C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> | 0,00000      | 0,00180 | -0,00180 | 0,07718            | 0,07718            |
| CO <sub>2</sub>                | 0,00000      | 0,00440 | -0,00440 | 0,14646            | 0,14646            |
| N <sub>2</sub>                 | 0,00000      | 0,00900 | -0,00900 | 0,19826            | 0,19826            |
| t = 300 мин                    |              |         |          |                    |                    |
| Air                            | 0,62184      | 0,37816 | 0,24367  | 0,19298            | 0,19610            |
| CH <sub>4</sub>                | 0,33554      | 0,51756 | -0,18202 | 0,21775            | 0,21455            |
| C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>  | 0,01864      | 0,03946 | -0,02083 | 0,14404            | 0,14247            |
| C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>  | 0,01461      | 0,03899 | -0,02437 | 0,11124            | 0,10946            |
| C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> | 0,00409      | 0,01591 | -0,01181 | 0,07920            | 0,07316            |
| C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> | 0,00039      | 0,00141 | -0,00101 | 0,08231            | 0,08021            |
| CO <sub>2</sub>                | 0,00145      | 0,00295 | -0,00151 | 0,15126            | 0,14892            |
| N <sub>2</sub>                 | 0,00344      | 0,00556 | -0,00212 | 0,20355            | 0,20064            |
| t = 600 мин                    |              |         |          |                    |                    |
| Air                            | 0,53133      | 0,46867 | 0,06266  | 0,18355            | 0,19236            |
| CH <sub>4</sub>                | 0,40833      | 0,44477 | -0,03644 | 0,23107            | 0,21897            |
| C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>  | 0,02540      | 0,03270 | -0,00730 | 0,14711            | 0,14401            |
| C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>  | 0,02137      | 0,03223 | -0,01085 | 0,11327            | 0,11091            |
| C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> | 0,00673      | 0,01327 | -0,00653 | 0,08436            | 0,07768            |
| C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> | 0,00062      | 0,00118 | -0,00055 | 0,08392            | 0,08175            |
| CO <sub>2</sub>                | 0,00195      | 0,00245 | -0,00050 | 0,15592            | 0,15124            |
| N <sub>2</sub>                 | 0,00426      | 0,00474 | -0,00047 | 0,21408            | 0,20439            |

Как видно из таблицы 1, изменение ЭКД компонентов системы за интервал времени в 600 минут не превышает 5 %, хотя изменение концентраций в колбах аппарата достигло значений близких к равновесным. Такое поведение газов объясняется тем, что их КВД в воздух отличаются незначительно. Аналогичные результаты были получены и для других исследованных систем.

Отметим очень важный момент в использовании ЭКД и МКМД при вычислениях диффузионных потоков компонентов в системах. В данном случае при использовании ЭКД их необходимо всего 8, а МКМД для независимых потоков – 48. Естественно, отсюда следует, что по числу необходимых коэффициентов описать многокомпонентную диффузию легче и проще, используя ЭКД, чем МКМД.

Таким образом, вычисленные коэффициенты диффузии (ЭКД и МКМД) для диффузионных процессов природных углеводородных газовых систем в воздух могут служить в качестве справочной информации в практических приложениях.

### **Литература**

1. Айткожаев А.З., Бычков А.Г., Жаврин Ю.И. и др. Исследование диффузии в системе (водород+метан) – воздух при различных давлениях и концентрациях компонентов бинарной смеси / Каз. ун-т, НИИ ЭТФ. – Алма-Ата, 1993. – 22 с. – Деп. В КазНИИНКИ 15.01.93, № 3984. Ка-93.

2. Кульжанов Д.У., Сериков Т.П., Жаврин Ю.И., Косов В.Н. Исследование диффузии бинарной смеси водорода с метаном в воздух // Нефть и газ. – 2001. – № 2. – С. 66-72.

3. Жаврин Ю.И., Косов В.Н., Кульжанов Д.У., Каратаева К.К. Исследование массопереноса в некоторых углеводородсодержащих газовых смесях // Теплофизика и аэромеханика. – 2001. – Т. 8, № 2. – С. 245-249.

4. Жаврин Ю.И., Поярков И.В., Егорова М.А., Котелевская Е.А., Торопыгина А.В. Диффузия некоторых многокомпонентных углеводородных газовых смесей в воздух // Вестник КазНУ. Сер. физ. – Алматы, 2007. – № 2(24). – С. 8-12.

5. Теплотехнические расчеты процессов транспорта и регазификации природных газов. Справочное пособие / Загорученко В.А., Бикчентай Р.Н., Вассерман А.А. и др. – М.: Недра, 1980. – 320 с.

6. Тирский Г.А. Вычисление эффективных коэффициентов диффузии в ламинарном диссоциированном многокомпонентном пограничном слое // ПММ. – 1969. – Вып. 1. – С. 180-182.

7. Жаврин Ю.И., Косов Н.Д., Новосад З.И. Описание нестационарной диффузии в многокомпонентных газовых смесях методом эффективных коэффициентов // ЖФХ. – 1975. – Т. 49, № 3. – С. 706-709.

8. Лайтфут Э. Явления переноса в живых системах. Биомедицинские аспекты переноса количества движения и массы: Пер. с англ. – М.: Мир, 1977. – 520 с.

9. Косов Н.Д., Жаврин Ю.И., Новосад З.И. Диффузия в многокомпонентных газовых смесях // Теплофизические свойства веществ и материалов. – М.: Изд-во стандартов, 1982 – Вып. 17. – С. 86-112.

10. Жаврин Ю.И., Косов Н.Д., Новосад З.И. Расчет эквимоллярной диффузии в многокомпонентных газовых смесях методом эффективных коэффициентов // Диффузия в газах и жидкостях. – Алма-Ата: МВ и ССО КазССР, 1974. – С. 12-19.

11. Жаврин Ю.И., Косов Н.Д. и др. Расчет диффузионного процесса в двухколбовом аппарате для случая многокомпонентной газовой смеси / Каз. ун-т, НИИ ЭТФ. – Алматы, 1995. – 26 с. Деп. В КазгосИНТИ 05.07.95. № 6239. Ка-95.

12. Жаврин Ю.И., Жаврин В.Ю., Косов В.Н., Поярков И.В. Расчет многокомпонентного массопереноса в двухколбовом аппарате с применением языка программирования DELPHI // Вестник КазНУ. Сер. физ. – Алматы, 2006. – № 2 (22). – С. 73-79.

13. Новосад З.И., Косов Н.Д. Эффективные коэффициенты диффузии трехкомпонентных газовых смесей гелия, аргона и углекислого газа // ЖТФ. – 1970. – Т. 40, № 11. – С. 2368-2375.

14. Andrew S.P.S. A simple Method of Measuring Gaseous Diffusion Coefficient // Chem. Eng. Sci. – 1955. - V. 4. – P. 269-272.

15. Жаврин Ю.И., Косов Н.Д., Белов С.М., Семидоцкая Н.И. О применении метода эффективных коэффициентов диффузии к диффузии в многокомпонентных газовых смесях при повышенных давлениях // Тепломассоперенос в жидкостях и газах. – Алма-Ата, 1982. – С. 3-12.

16. Берд Р., Стьюарт В., Лайтфут Е. Явления переноса: Пер. с англ.– М.: Химия, 1974.– 688 с.

### **АУАДАҒЫ КЕЙБІР ТАБИҒИ КӨПКOMPONENTTІ КӨМІРСУТЕКТІ ГАЗДАР ҚОСПАСЫНЫҢ ДИФФУЗИЯ ПРОЦЕССИН ЕСЕПТЕУ**

**Ю.И. Жаврин, М.Т. Бекетаева, О.В. Федоренко**

Ауадағы бескомпонентті көмірсутекті газдар қоспаларының  $T = 298,0$  К және  $P = 0,101$  МПа болған кезіндегі диффузиялық процессіне есептеулер жүргізілді. Көпкомпонентті диффузияның матрицалық коэффициенттері мен эффективтік диффузия коэффициенттері анықталды. Масса тасымалдауды сипаттау үшін эффективтік коэффициенттерді пайдаланудың артықшылықтары көрсетілді. Алынған коэффициенттер анықтамалық ақпарат ретінде қолданыла алады.

### **CALCULATION OF DIFFUSIVE PROCESSES FOR SOME NATURAL HYDROCARBONIC GAS MIXTURES INTO AIR**

**Yu.I. Zhavrin, M.T. Beketayeva, O.V. Fedorenko**

The analysis of diffusive processes for five natural hydrocarbonic gaseous mixtures into air at  $T = 298,0$  K and  $P = 0,101$  MPa is carried out. The effective diffusion coefficients and matrix coefficients of multicomponent diffusion are defined. Advantages of effective coefficients application for the mass transfer description are shown. The calculated diffusion coefficients can be used as the reference data.