

Mathematical modeling of planar and spherical vapor–liquid phase interfaces for multicomponent fluids

David Celný^{1,2,a}, Václav Vinš¹, and Jan Hrubý¹

¹ Institute of Thermomechanics, Czech Academy of Sciences, v. v. i., Dolejškova 1402/5, 182 00 Prague 8, Czech Republic

² Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, Czech Technical University in Prague, Břehová 78/7, 115 19 Prague 1, Czech Republic

Abstract.

– English abstract

We focus on planar and spherical vapor-liquid phase interfaces for binary mixtures relevant to carbon capture and storage. A robust mathematical method was developed to compute the density profiles based on the Cahn-Hilliard gradient theory and the PC-SAFT equation of state [1]. The multicomponent problem is transformed into a system of differential equations which is modified into a shape suitable for iterative computation employing the Newton-Raphson and shooting methods. As an example, we computed the density profiles and the associated surface tensions for CO₂ – C₄H₁₀ mixture for both planar and spherical geometries. The planar surface tensions agree with available experimental data [2,3].

– Český abstrakt

Předmětem našeho zkoumání je fázové rozhraní mezi kapalinou a párou pro binární směsi. Tyto směsi jsme zvolili tak, aby měli souvislost s technologií Carbon capture and storage. Za účelem fázových rozhraní směsí jsme vyvinuli matematický model schopný spočítat hustotní profily pro dva základní typy geometrií fázového rozhraní, jedná se o rovinné rozhraní a sférické rozhraní. Náš matematický model vychází z poznatků Cahnovy-Hilliardovy gradientní teorie [4,5] a zároveň využíváme k výpočtu stavovou rovnici PC-SAFT [1]. Problém získaný z teorie ve formě soustavy diferenciálních rovnic následně v naší metodě upravíme do tvaru, který pak s výhodou řešíme iterativně. Při tomto řešení uplatňujeme Newtonovu-Raphsonovu metodu a metodu střelby. Pomocí těchto metod jsme schopni zjistit hustotní profily vstupního systému a příslušná povrchová napětí pro oba typy geometrií fázového rozhraní. V závěru pak provádíme srovnání spočtených hodnot povrchového napětí a experimentálních výsledků [2,3] pro směs složenou z CO₂ – C₄H₁₀. Pro porovnatelný případ rovinného fázového rozhraní jsme zjistili že naše predikce dobře odpovídá experimentálním datům.

References

1. J. Gross, G. Sadowski, Ind. Eng. Chem. Res. **40**, 1244 (2001)
2. J.J. Hsu, C.N. Nagarajan, R.L. Robinson, J. Chem. Phys. **30**, 485 (1985)
3. E.B. Brauer, E. Hough, Producers Monthly **29**, 13 (1965)
4. J.W. Cahn, J.E. Hilliard, J. Chem. Phys. **28**, 258 (1958)
5. J. Hrubý, D.G. Labetski, M.E.H. van Dongen, J. Chem. Phys. **127**, 164720 (2007)

^a e-mail: : celný@it.cas.cz