

Секция 1:

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

ДИФфуЗИОННО-КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ОСАЖДЕНИЯ МАЛОКОНЦЕНТРИРОВАННОЙ ВЗВЕСИ СТОКСОВСКИХ ЧАСТИЦ В ПЕРЕМЕШИВАЕМОМ ПЛОСКОМ СЛОЕ С ДВИЖУЩЕЙСЯ СВОБОДНОЙ ГРАНИЦЕЙ*

В.И. Ряжских, А.В. Ряжских

Воронежский государственный технический университет

На основе конвективно-диффузионных представлений о переносе твердой фазы в суспензиях сформулирована и решена задача об осаждении малоцентрированных стоксовских частиц в перемешиваемом плоском слое с равномерно движущейся по нормали свободной границей дисперсионной среды в направлении “смоченной” поверхности.

Установление закономерностей перераспределения дисперсной фазы в малоцентрированных взвесах с движущейся свободной границей необходимо для обоснования рациональных технологических режимов, например, при концентрировании суспензий выпариванием дисперсионной среды [1], фильтрации [2], переливе криожидкостей из резервуара с наличием в них взрывоопасных высококипящих отвержденных микропримесей [3] и т.д. Имеющиеся математические формулировки задач с движущимися границами и методы их решения [4,5] ориентированы, в основном, на гомогенные среды с фазовыми переходами на самой движущейся границе в виде задачи Стефана и ее модификаций и не позволяют учесть конвективную составляющую переноса твердой фазы в объеме взвеси. С другой стороны применение в этом случае подходов механики гетерогенных сред [6] вызывает пока ряд непреодолимых трудностей – корректная постановка условий на межфазной границе, существенная нелинейность интегро-дифференциальных уравнений высокого порядка и т.п. Альтернативой для решения такого класса задач является синтез и анализ математических моделей в рамках конвективно-диффузионных представлений о переносе твердой фазы в суспензиях [7], который апробирован при описании различных процессов в дисперсных системах [8-10].

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ по гранту № 13-08-00261

В связи с вышесказанным рассматривается сначала постановка задачи для монодисперсной твердой фазы. Пусть в начальный момент времени свободная граница плоского слоя малоцентрированной однородной суспензии монодисперсных частиц, осаждающихся по закону Стокса в условиях перемешивания, начинает двигаться с постоянной скоростью по нормали в направлении поверхности осаждения, проницаемой только для несущей среды. В предположении, что проскальзывание фаз не существенно, и используя конвективно-диффузионные представления о переносе твердой фазы в слое суспензии [11], сформулирована математическая модель:

$$\frac{\partial N(X, \theta)}{\partial \theta} = \frac{\partial N(X, \theta)}{\partial X} + \frac{1}{Bo} \frac{\partial^2 N(X, \theta)}{\partial X^2}; \quad (1)$$

$$N(X, 0) = 1; \quad (2)$$

$$(1 - K)N(0, \theta) + \frac{1}{Bo} \frac{\partial N(0, \theta)}{\partial X} = 0; \quad (3)$$

$$N[H(\theta), \theta] + \frac{1}{Bo} \frac{\partial N[H(\theta), \theta]}{\partial X} = 0; \quad (4)$$

$$H(\theta) = 1 - \alpha\theta, \quad (5)$$

где $\theta = (w + v)t/h_0$; $X = x/h_0$; $Bo = (w + v)h_0/D$; $K = k/(w + v)$; $N(X, \theta) = n(x, t)/n_0$;

$\alpha = v/(w + v)$; t - время; x - координата; h_0 - высота слоя при $t = 0$; w - Стоксовская скорость осаждения частиц взвеси; v - скорость движения свободной границы; D - коэффициент перемешивания; k - скорость встраивания частиц в структур осадка.

Считая $H(\theta)$ параметром и применяя одностороннее интегральное преобразование Лапласа по θ , получено аналитическое решение системы (1) – (5). Для нивелирования ошибки допущения о том, что $H(\theta)$ параметр в данный момент безразмерного времени θ , потребовано выполнение балансового соотношения частиц в системе

$$K \int_0^\theta N(0, \theta) d\theta + \frac{1}{H(\theta)} \int_0^{H(\theta)} N(X, \theta) dX = 1,$$

из которого определена нормирующая невязка к решению $\Omega(K, Bo, \theta)$. Окончательное решение записывается в виде

$$\tilde{N}(X, \theta) = \Omega(K, Bo, \theta) N(X, \theta), \quad (6)$$

которое является приближенным в том смысле, что оно удовлетворяет граничным условиям (2) – (4), а уравнению (1) с точностью до

$$N(X, \theta) \frac{d \ln \Omega(K, Bo, \theta)}{d\theta} \ll 1.$$

Для подтверждения корректности предложенного метода решения было проведено численное интегрирование системы (1) – (5), которая путем замены

$$N(X, \theta) = \Phi(X, \theta) \exp \left[-\frac{Bo}{2} \left(X + \frac{1}{2} \theta \right) \right]$$

и введения функционального преобразования

$$\xi = \frac{X}{1 - \alpha\theta}, \quad \eta = \frac{\theta}{1 - \alpha\theta}$$

с якобианом, отличным от нуля, сведена к задаче с неподвижными границами

$$\frac{\partial \Psi(\xi, \eta)}{\partial \eta} = -\frac{\alpha\xi}{1 + \alpha\eta} \frac{\partial \Psi(\xi, \eta)}{\partial \xi} + \frac{1}{Bo} \frac{\partial^2 \Psi(\xi, \eta)}{\partial \xi^2}, \quad (7)$$

$$\Psi(\xi, 0) = \exp \left(\frac{Bo}{2} \xi \right), \quad (8)$$

$$\left(\frac{1}{2} - K \right) \Psi(0, \eta) + \frac{(1 + \alpha\eta)}{Bo} \frac{\partial \Psi(0, \eta)}{\partial \xi} = 0, \quad (9)$$

$$\frac{1}{2} \Psi(1, \eta) + \frac{(1 + \alpha\eta)}{Bo} \frac{\partial \Psi(1, \eta)}{\partial \xi} = 0, \quad (10)$$

где $\Psi(\xi, \eta) = \Phi \left[X(\xi, \eta), \theta(\xi, \eta) \right]$.

Линейный характер системы (7) – (10) позволил адаптировать в расчетах устойчивую и сходящуюся классическую маршевую конечно-разностную схему первого порядка точности по η и второго по ξ на равномерной сетке с аппроксимацией граничных условий односторонними конечными разностями третьего порядка точности.

Вычислительный эксперимент подтвердил правомочность приближенного аналитического решения (6). Это позволило обобщить модель (1) – (5) на случай малоцентрированной полидисперсной взвеси применением принципа суперпозиции концентрированных полей различных размеров частиц в предположении выполнения гипотезы сплошности в виде локальной функции плотности распределения частиц по размерам

$$\tilde{F} \left[X, L, \theta(L, t) \right] = F_0(L) \Omega \left[(K(L), Bo(L), \theta(L, t)) \right] N \left[X, L, \theta(L, t) \right],$$

где под $N \left[X, L, \theta(L, t) \right]$ понимается $N(X, \theta)$, в котором учтена зависимость Bo , K и θ

о относительного размера частиц $L = l/\bar{l}$; l , \bar{l} – текущей и среднечисленный размер

дисперсной фазы; $F_0(L)$ – функция плотности распределения частиц по размерам при

$t = 0$.

Для проведения расчетов Bo и K идентифицированы из следующих соображений. Т.к. перемешивание дисперсной фазы характеризуется конвективным механизмом и броуновской диффузией, то согласно [12,13]

$$D(l) = (1 + \varepsilon_c) \frac{k_B T}{3\pi l \nu \rho},$$

где ε_c - коэффициент конвекции; k_B - постоянная Больцмана; T - температура; ν, ρ - кинематическая вязкость и плотность несущей среды. Кинетический коэффициент k определен по аналогии с [14]: приблизившись к поверхности осаждения, частицы взвеси утрачивают конвективную составляющую движения, но сохраняют броуновскую и седиментационную, т.е.

$$k(l) = \frac{k_0(l)}{1 + [k_0(l) - w(l) - v]/u_v},$$

где

$$k_0(l) = [2\pi/\bar{v}_b^2(l)]^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}[w(l) + v]^2/\bar{v}_b^2(l)\right\} + \frac{1}{2}[w(l) + v] \left\langle 1 + \operatorname{erf}\left\{[w(l) + v]/[2\bar{v}_b^2(l)]^{1/2}\right\} \right\rangle,$$

$$\bar{v}_b^2(l) = \frac{6k_B T}{\pi l^3 \rho}, \quad u_v = (1 + \varepsilon_c) \frac{k_B T}{3\pi l \nu \rho h_0} = \frac{D(l)}{h_0}, \quad w(l) = \frac{g(\rho_T - \rho)}{18\rho\nu} l^2;$$

g - ускорение свободного падения; ρ_T - плотность частиц.

Синтезированная модель позволила определить локальную массовую концентрации частиц по высоте слоя и ответить на вопрос о влиянии скорости движения свободной границы на кинетику ее изменения в процесс осаждения.

Литература

1. Таубман Е.И. Выпаривание (Процессы и аппараты химической и нефтехимической технологии). – М.: Химия, 1982. – 328с.
2. Ельшин А.И. Теоретические и технологические аспекты разделения дисперсных систем фильтрованием. – Новополюк: ПГУ, 1994. – 96с.
3. Flynn M.T. Cryogenic engineering. – New York: Marcel Dekker, 2005. – 873p.
4. Crank J. Free and moving boundary problems. – Oxford: Clarendon Press, 1984. – 425p.
5. Terzia D.A. A bibliography on moving – free boundary problems for the heat-diffusion equation. The Stefan and related problems // NAT, Serie A: - 2000. - №2. – pp. 297-301.
6. Нигматулин Р.Н. Основы механики гетерогенных сред. – М.: Наука, 1978. – 336с.
7. Броунштейн В.Б. Диффузионная модель классификации частиц в разряженных суспензиях // Журн. прикл. химии. – 1983. – Т.56. - №8. – с. 1788-1793.
8. Веригин А.Н., Васильев С.В. Диффузия и седиментация мелкодисперсной однородной взвеси в отстойниках // Теор. основы хим. технол. – 1982. – Т16. - №3. – с. 374-380.
9. Пономаренко В.Г. и др. Математическая модель процесс гидроклассификации суспензии в кристаллизаторах // Теор. основы хим. технол. – 1980. – Т.11. - №4. – с. 582-589.
10. Харин В.М., Ряжских В.И., Завадских Р.М. Кинетика осаждения примесей при испарительном охлаждении криогенных жидкостей // Теор. основы хим. технол. – 1996. – Т.30. - №5. – с. 453-457.
11. Харин В.М., Ряжских В.И. К теории осаждения // Теор. основы хим. технол. – 1989. – Т.23. - №5. – с. 651-658.
12. Берд Р., Стьюарт В., Лайтфут Е. Явления переноса. – М.: Химия, 1974. – 688с.
13. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. В 10т. Т.VI. Гидродинамика. – М.: Наука, 1988. – 736с.
14. Седунов Ю.С. Некоторые вопросы броуновской диффузии стоксовских частиц в пространственно-неоднородном внешнем поле // Изв. АН СССР, Сер. геофиз. – 1964. - №4. – с.1093-1102.