УДК 794:622.765.55

В.Ф. ПОЖИДАЕВ, Н.С. ПРЯДКО, О.В. ГРАЧЕВ

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАССОПЕРЕНОСА ПРИ ОСАЖДЕНИИ ТВЕРДОЙ ФРАКЦИИ СУСПЕНЗИЙ

Цель работы – разработать имитационную модель процессов массопереноса в системах осаждения при обогащении полезных ископаемых. Рассмотрено сведение уравнений массопереноса к схеме случайных блужданий, что позволяет реализовать численные решения дифференциальных уравнений при заданных граничных условиях. Полнота описания обеспечивается возможностью вводить необходимые гипотезы относительно вида переходных вероятностей. Практическая реализация идеи использования теории массопереноса в процессах осаждения позволяет находить частные решения уравнения Фоккера – Планка. Предложенная имитационная модель может быть обобщена на более сложные случаи массопереноса частиц в обобщенных силовых полях.

Мета роботи – розробити імітаційну модель процесів масопереносу в системах осадження при збагаченні корисних копалин. Розглянуто зведення рівнянь масопереносу до схеми випадкових блукань, що дозволяє реалізувати чисельні рішення диференціальних рівнянь при заданих граничних умовах. Повнота опису забезпечується можливістю введення необхідних гіпотез щодо виду перехідних ймовірностей. Практична реалізація ідеї використання теорії масопереносу в процесах осадження дозволяє знаходити частинний розв'язок рівняння Фокера – Планка. Запропоновану імітаційну модель може бути узагальнено на більш складні випадки масопереносу часток в узагальнених силових полях.

The work's aim is developing the imitating model of mass transfer processes in sedimentation systems for enrichment of minerals. We consider the reduction of mass transfer equations to the scheme of random walks, which allows for the numerical solution of differential equations with given boundary conditions. Completeness of the description provided the opportunity to introduce the necessary hypotheses about the form of the transition probabilities. Practical realization of idea of use the mass transfer theory during sedimentation allows to find particular decisions of the Foker-Plank equation. The offered imitating model can be generalized on more complex cases mass transfer particles in the generalized power fields.

Введение. Процессы переноса энергии и вещества имеют самое широкое распространение в природе и технике. Этим объясняется исключительно важное научное и практическое значение теории, установления закономерностей их протекания и создания эффективных методов решения задач переноса.

Решение ряда задач, весьма далеких друг от друга, как по физическому смыслу, так и по сфере их применения, приводит к уравнениям случайного блуждания. К таким задачам относят: броуновское движение, случайное блуждание на оси, простейшие случаи марковской цепи с тремя состояниями, «задача о разорении игрока», изменение стоимости ценных бумаг, развитие популяций. В целом, это большая совокупность физических, инженерных, экономических и социологических задач.

Все большая степень измельчения при интенсификации разработок горных пород приводит к тенденции повышения содержания шламовых суспензий в продуктах добычи и обогащения полезных ископаемых [1, 2, 3, 4, 5]. После уменьшения содержания полезного продукта шламовые воды попадают в отстойники и переходят к пассивному процессу – осаждению суспензий. Поэтому все более актуальными становятся проблемы прогнозирования результатов осветления оборотной воды.

Анализ последних исследований и публикаций. Развитие теории переноса происходит по двум направлениям. Основоположником первого, исторически более раннего направления является Фурье. В основе этого направления лежит использование феноменологических соотношений между макроскопическими параметрами, характеризующими состояние системы (аналитическая теория тепла, термодинамика необратимых процессов).

Второе направление, продолжающее классические работы Гиббса и

Больцмана, основано на рассмотрении и непосредственном учете реальной дискретной структуры систем и привлечении для исследования их эволюции математического аппарата теории вероятностей и методов статистической механики.

Основные результаты в построении математической теории процессов переноса получены Толубинским Е. В. [6]. Эта теория находится в стадии становления. Ее результаты могут служить основой для продолжения чисто математических построений, но от практических применений эти методы еще очень далеки.

В феноменологической теории строится решение задачи переноса при общих условиях. Предложен метод, позволяющий по заданным эвристикам, характеризующим качественное поведение процесса, строить марковскую цепь, разрешимую относительно предельных вероятностей.

Толубинским Е. В. доказаны результаты, полученные в развитии линейной статистической теории переноса. Эти результаты могут быть использованы во многих конкретных разделах теории переноса технологических процессов и вообще для решения всех тех задач, когда взаимодействием между собой частиц одного типа, вследствие сравнительно малой их числовой плотности, можно пренебречь, а взаимодействие их с частицами другой физической природы приводит к относительно небольшому изменению состояния последних.

Возможное применение результатов общей теории не ограничивается областью чисто физических проблем, так как с марковским процессом с дискретным вмешательством случая связано много конкретных моделей, представляющих практический интерес, в том числе, например, теория массового обслуживания.

Цель исследования – разработка имитационной модели процессов массопереноса в системах осаждения.

Результаты исследования. Изучение процесса осаждения сводится к исследованию вероятностных схем, либо уравнений случайного блуждания частиц в среде. Начальная информация о полидисперсной смеси частиц, поступающей на вход технологического аппарата, должна задаваться в виде функции распределения частиц по размерам $\Phi(S)$, представляющей собой отношение числа появления частиц узкого класса $(S, S+dS)$ к общему числу наблюдаемых событий. Функция $\Phi(S)$ находится по функции распределения частиц по размерам в весовых долях $F(S)$:

$$\Phi(S) = \left(\int_0^D \frac{dF(S)}{S}\right)^{-1} \int_0^S \frac{dF(S)}{S}, \quad F(S) = \left(\int_0^D S d\Phi(S)\right)^{-1} \int_0^S S d\Phi(S),$$

где S – размер частицы; D – максимальный размер в смеси.

Возможны различные представления для функции $F(S)$ применительно к угольным шламам. Принимая закон сопротивления движению частицы (например, закон Стокса) и используя связь между функциями распределения частиц по размерам, можно перейти к функции распределения по скоростям оседания $\Psi(W)$.

Процесс осаждения представляется диффузионным оператором

$$L = \frac{\partial C_w}{\partial t} - D_Z \frac{\partial C_w}{\partial z^2} - W \frac{\partial C_w}{\partial z} + U \frac{\partial C_w}{\partial x}.$$

Здесь Dz – коэффициент диффузии; C_w – случайная величина; W, U – скорости сноса по оси Z и оси X соответственно. Его решение с соответствующими граничными условиями дает значение концентрации “неразличимых” частиц в пространстве и времени. Для полидисперсной смеси частиц, заданной своей функцией распределения $\Psi(W)$, концентрация неоднородной по составу примеси может быть найдена как математическое ожидание случайной величины C_w:

$$C^*(x,z,t) = \int_0^{W_D} C_w d\Psi(W).$$

где W_D – граница интервала изменения случайной величины C_w.

Вероятности перехода частиц в смежные слои по высоте предполагаются постоянными, что следует из рассмотрения дискретной схемы случайного блуждания:

$$L = C_j^i(t+\Delta t) - \sum_{l=i-1}^{l=i+1} C_j^l(t) \cdot P_j^{l,i},$$

где i – номер слоя; j – номер узкого класса частиц со скоростью ожидания W_j; $P_j^{l,i}$ – вероятности перехода в смежные слои случайной величины $C^l{}_j$, причем $\sum_{l=i-1}^{l=i+1} P_j^{l,i} = 1$. При $t = 0$ C_j заданы своей функцией распределения $\Psi(W)$ или, что тоже самое, $\Phi(S)$.

Допущение о постоянстве переходных вероятностей может быть справедливым в случае осаждения в слабо концентрированных суспензиях. О предельной плотности (минимальном соотношении жидкого к твердому) суспензии, для которой еще справедливо уравнение диффузии, можно судить по рассогласованию дисперсии случайной величины C_w с опытными данными. Воздействие оператора L приводит к непрерывной “деформации” функции распределения исходной смеси в пространстве и времени так, что в любой заданный момент времени t становится известной наиболее полная информация о процессе в виде истинной функции распределения частиц по размерам в каждой точке пространства (x,z) (либо в каждом слое i - для дискретной модели).

В случаях, когда концентрацией частиц нельзя пренебречь и массоперенос происходит в среде, создаваемой этими же частицами, переходные вероятности уже нельзя считать постоянными. Они зависят от хода процесса. При этом возможно использование дискретных цепей Маркова [4].

Рассмотрим способ построения матрицы переходных вероятностей на примере процесса турбулентной диффузии (осаждения) многокомпонентной смеси частиц в поле сил тяжести, когда концентрацией их в среде нельзя пренебречь. Это приводит к интегро-дифференциальному уравнению массопереноса

$$\frac{\partial\gamma}{\partial t}=D\nabla^2\gamma-\operatorname{div}[g\gamma/\alpha\cdot(\rho-\int\limits_{-\infty}^{\infty}\rho\gamma d\rho)].$$

Здесь D – коэффициент диффузии; g – сила тяжести; α – коэффициент стоксового сопротивления; $\gamma(x,y,z,\rho,t)d\rho$ – концентрация фракции (ρ, $\rho+d\rho$) в точке (x,y,z,t); $\int\limits_{-\infty}^{\infty}\rho\gamma d\rho=\overline{\rho}$ – локальная средняя плотность смеси частиц.

В частном случае одномерного пространства $x\geq g$ будем иметь:

$$\frac{\partial\gamma}{\partial t}=D\frac{\partial^2\gamma}{\partial x^2}-\frac{g}{\alpha}\frac{\partial}{\partial}[\gamma(\rho-\int\limits_{-\infty}^{\infty}\rho\gamma(\rho,x,t)d\rho)].$$

Переписывая его в конечных разностях для заданных значений Δx и Δt имеем в точке x_i:

$$\lambda(x_i,t+\partial t)=\gamma(x_i,t)+\frac{\Delta\gamma}{\Delta t}|_{(x_{i,j})}\cdot\Delta t.$$

В обозначениях: $\gamma_-=\gamma(x_i-\Delta x,t,\rho)$, $\gamma_+=\gamma(x_i+\Delta x,t,\rho)$, $\gamma_0=\gamma(x_i,t,\rho)$, $\overline{\rho}_-=\int\limits_0^{\infty}\rho\gamma_-d\rho$, $\overline{\rho}_+=\int\limits_0^{\infty}\rho\gamma_+d\rho$, выполненные преобразования позволяют определить функцию γ в момент $t+\Delta t$ как линейную комбинацию $\gamma_-,\gamma_0,\gamma_+$ в момент времени t

Обозначим: $\hat{p}_1=\frac{D}{\Delta x^2}+\frac{g(\rho-\overline{\rho}_-)}{2\alpha\Delta x}$, $\hat{p}_2=1-\frac{2D}{\Delta x^2}\Delta t$, $\hat{p}_3=\frac{D}{\Delta x^2}-\frac{g(\rho-\overline{\rho}_+)}{2\alpha\Delta x}$.

Нетрудно видеть, что $\hat{p}_1\,\Delta t$, $\hat{p}_2$ и $\hat{p}_3\,\Delta t$ есть аналоги переходных вероятностей в схеме Маркова, причем $\hat{p}_1\,\Delta t$ аналогично вероятности из верхнего слоя попасть в средний; $\hat{p}_2$ – вероятность остаться в своем слое; $\hat{p}_3\,\Delta t$ аналогично вероятности попасть частице из нижнего слоя в средний.

Из физического смысла на рассматриваемом интервале $(\rho_{\min},\rho_1)-\hat{\rho}_1<0$, $(\rho_1,\rho_{\min})-\hat{\rho}_2>0$, $(\rho_{\min},\rho_2)-\hat{\rho}_3>0$, $(\rho_2,\rho_{\max})-\hat{\rho}_3<0$.

Получим марковскую цепь со следующими переходными вероятностями (рис. 1): p_1 – вероятность частице перейти из среднего слоя в верхний; p_2 – вероятность частице попасть в средний слой из верхнего; p_3 – остаться в среднем слое; p_4 – вероятность в средний слой попасть из нижнего; p_5 – попасть из среднего слоя в нижний.

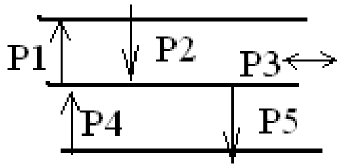

Рис.1

Нетрудно видеть, что из $\hat{p}_1 \Delta t$, $\hat{p}_2$ и $\hat{p}_3 \Delta t$ можно получить пять перечисленных переходных вероятностей, если расчленить $\hat{p}_1$ и $\hat{p}_3$ на положительную и отрицательную часть, а $\hat{p}_2$ оставить без изменения. При этом неравенство $\hat{p}_2 > 0$ может служить условием для выбора значений Δx и Δt при численной реализации метода Эйлера. По определению переходных вероятностей p_1, p_2, p_3, p_4, p_5 имеем

$$p_1 = -[\frac{D}{\Delta x^2} + \frac{g(\rho - \overline{\rho}_-)}{2\alpha\Delta x}][1 - \eta(\rho - \rho_1)]\Delta t,$$

$$p_2 = [\frac{D}{\Delta x^2} + \frac{g(\rho - \overline{\rho}_-)}{2\alpha\Delta x}]\eta(\rho - \rho_1)]\Delta t, \; p_3 = 1 - \frac{2D}{\Delta x^2}\Delta t$$

$$p_4 = [\frac{D}{\Delta x^2} - \frac{g(\rho - \overline{\rho}_+)}{2\alpha\Delta x}]\eta(\rho - \rho_2)]\Delta t,$$

$$p_5 = -[\frac{D}{\Delta x^2} - \frac{g(\rho - \overline{\rho}_+)}{2\alpha\Delta x}][1 - \eta(\rho - \rho_2)]\Delta t,$$

где $\eta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$.

При этом $\hat{p}_1 \Delta t = p_2 - p_1$, $\hat{p}_2 = p_3$ и $\hat{p}_3 \Delta t = p_4 - p_5$. Кроме того, p_1, p_3, p_5 связаны условием $p_1 + p_2 + p_5 = 1$.

Для $\gamma(x_i, t + \Delta t)$ имеем

$$\begin{aligned} \gamma(x_i, t + \Delta t) &= p_2\gamma(x_i - \Delta x, t) + p_3\gamma(x_i, t) + p_4\gamma(x_i + \Delta x, t) - \\ &- p_1\gamma(x_i - \Delta x, t) - p_5\gamma(x_i + \Delta x, t). \end{aligned}.$$

Окончательно, получаем марковскую цепь со следующим правилом пересчета функции γ от времени:

$$\gamma(x_i, t + \Delta t) = p_2\gamma_- + p_3\gamma_0 + p_4\gamma_+ - p_1\gamma_0 - p_5\gamma_0.$$

Для переходных вероятностей p_1, p_2, p_3, p_4, p_5 получены явные выражения, учитывающие физические условия протекания процесса под действием определенной системы сил.

Выводы. Сведение уравнений массопереноса к схеме случайных блужданий позволяет реализовать численные решения дифференциальных уравнений при заданных граничных условиях и дополнительно вводить необходимые гипотезы относительно вида переходных вероятностей с целью более полного описания изучаемого процесса. Таким образом, предложена практическая реализация идеи использования теории массопереноса в процессах осаждения, позволяющая находить частные решения уравнения Фоккера-Планка. Предложенная имитационная модель может быть обобщена на более сложные случаи массопереноса частиц в обобщенных силовых полях.

1. *Yusa M.* Mechanisms of pelleting flocculation / *M. Yusa* // Intern. Journal of Mineral Processing. – 1977. – № 4. – P. 293 – 305.
2. Particle deposition and aggregation: Measurement, modeling and simulation / *M. Elimelich, J. Gregory, X. Jia, R. William.* – Oxford : Butterworth-Heinemann, 1995.
3.. *Fellows C.* M. Insights into bridging flocculation / *C. M. Fellows, W. O. S. Doherty* // Macromol. Symp. – 2006. – Vol. 231. – P. 1 – 10.
4. The fractal analysis of aggregates formed via a bridging flocculation mechanism / *S. Biggs, M. Habgood, G. J. Jameson, Yao-de Yan* // Proc. of the 26th Australian Chemical Engineering Conf. (Chemeca 98), Port Douglas, Australia. 1998. – Port Douglas, 1998. – 8 p.
5. Количественный фазовый анализ отходов добычи и обогащения углей */ Р. Я. Клейман, Г. Б. Скрипченко, М. Я. Шпирт, Ю. В. Иткин* // Химия твердого топлива. – 1989. – № 3.– С. 130 – 132.
6. *Толубинский Е. В.* Теория процессов переноса / *Е. В. Толубинский.* – К. : Наукова думка, 1969. – 256 с.

Институт технической механики
НАН Украины и НКА Украины,
Днепропетровск

Получено 15.01.13,
в окончательном варианте 5.03.13

Восточноукраинский национальный
Университет им. В. Даля,
Луганск