REPORTS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN
ISSN 2224-5227
Volume 2, Number 306 (2016), 47 – 52

UDC 530.1

MODELING THE AGGREGATION PROCESS WITH ALLOWANCE FOR THE AGGREGATES DISINTEGRATION IN A BIDISPERSE SUSPENSION

D.D. Dairabay[1], V.G. Golubev[1], O.S. Balabekov[2], Levdanskiy A.E[3]

din_303@mail.ru

[1]State University of South Kazakhstan after M. Auezov, Shymkent, Kazakhstan,
[2]South Kazakhstan State Pedagogical Institute, Shymkent, Kazakhstan,
[3]Belarusian State Technological University,Minsk, Belarus
din_303@mail.ru

Keywords: bi-disperse suspension, aggregation of particles, the disintegration of the aggregates, mathematical model, numerical experiment.

Abstract. It is presented a new mathematical model for calculating the concentrations of the different fractions of the bi-disperse suspension in the presence of the process of mutual aggregation (clotting) of fine and coarse fractions, as well as under the partial reversibility of this process, ie, in the presence of the partial disintegration of particle aggregates. Such processes occur in natural phenomena and can be specially arranged to create stabilized suspensions, and for the purification of liquid systems from contaminations. An analytical formula for calculating the concentration of aggregates which are formed in the system has been obtained. Results of numerical experiments for different values of the control parameters are submitted.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА АГРЕГАЦИИ С УЧЕТОМ КИНЕТИКИ РАСПАДА АГРЕГАТОВ В БИДИСПЕРСНОЙ СУСПЕНЗИИ

Дайрабай Д.Д[1], Голубев В.Г[1], Балабеков О.С[2],Левданский А.Э[3]

[1]Южно-Казахстанский государственный университет им. М.Ауэзова, г. Шымкент,Казакстан,
[2]Южно-Казахстанский государственный педагогический институт, г. Шымкент, Казакстан,
[3] Белорусский государственный технологический университет, г.Минск, Беларусь

din_303@mail.ru

Ключевые слова: бидисперсная суспензия, агрегация частиц, распад агрегатов, математическая модель, численный эксперимент.

Аннотация. Предложена новая математическая модель для расчета концентраций различных фракций бидисперсной суспензии при наличии процесса взаимной агрегации (коагуляции) частиц мелкой и крупной фракций, а также с учетом частичной обратимости этого процесса, т.е. происходящего в системе с некоторой скоростью распада образующихся агрегатов частиц. Такие процессы имеют место в природных явлениях и специально организуются при создании стабилизированных суспензий и в системах очистки жидкостей от загрязнений. Получена аналитическая формула для расчета концентрации образующихся в системе агрегатов. Приведены результаты численных экспериментов при различных значениях управляющих параметров.

Введение

Процессы агрегации частиц дисперсной фазы в суспензиях играют важную роль в различных технологических процессах и природных явлениях. Несмотря на внимание исследователей к этим процессам, многие вопросы в данной области остаются мало исследованными [1, 2]. Построение теоретических моделей агрегации в полидисперсных суспензиях даже при отсутствии взаимодействия между частицами представляет собой нетривиальную задачу и по сей не завершено [2, 3, 4]. Эта проблема играет, в частности, важную роль при создании стабильных суспензий в фармакологии.

В настоящей статье предлагается новая модель для расчета кинетики агрегации бидисперсной суспензии при наличии процесса взаимной агрегации (коагуляции) частиц мелкой и крупной фракций, а также частичной обратимости этого процесса, т.е. при наличии происходящего в системе с некоторой скоростью распада образующихся агрегатов частиц. Такие процессы имеют место в природных явлениях и специально организуются при создании стабилизированных суспензий и в системах очистки жидкостей от загрязнений [5, 6, 7].

Т.к.частицы дисперсной фазы в суспензиях часто отклоняются от сферической формы, для них определяется некоторый эффективный радиус частицы той же массы, движущейся с той же скоростью. Расстояние между частицами должно быть достаточно большим, чтобы движение одних частиц не сказывалось на скорости других. Резервуар, в котором происходит агрегация, должен иметь значительно большие габариты, чем размеры частиц. Тогда можно пренебречь влиянием стенок, в окрестности которых скорость движения частиц не следует закону Стокса. Предполагается также, что отсутствует проскальзывание между движущейся частицей и средой. т.е. частица хорошо смачивается жидкостью.

Процесс агрегации в таких системах будем описывать с помощью уравнения Смолуховского [4, 8].

Уравнение Смолуховского является на сегодняшний день базовой моделью, на основе которой описывается процесс бинарной коагуляции [1]. Бинарная коагуляция понимается в смысле предположения, что главную роль в процессе играют только парные столкновения частиц, образующих, локально хаотическое множество. Основные предположения физического характера, описывающие систему коагулирующих частиц и лежащие в основе вывода уравнений коагуляции, состоят в следующем:

-объемная плотность частиц и их общее количество достаточно велико, чтобы можно было применять функцию распределения частиц по массам и в координатном пространстве;

-предполагается также, что в течение всего процесса сохраняется пространственная однородность распределения частиц различных размеров в объеме.

Будем в дальнейшем, следуя работе [2], называть *i*-мерами частицу, образующуюся в результате объединения *i* мономеров. Тогда уравнение Смолуховского приобретает вид:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{i-1}\Phi_{i-j,j}C_{i-j}C_j - C_i\sum_{j=1}^{\infty}\Phi_{i,j}C_j, \qquad (1)$$

где C_i - концентрация *i*-мера; V_i - подвижность *i*-мера; x, t - пространственная и временная координаты.

Функция интенсивности слияния i и j - меров определяется с помощью соотношения:

$$\Phi_{i,j} = \sigma_{i,j}\left|V_i - V_j\right|, \qquad (2)$$

где $\sigma_{i,j}$ -сечение захвата [3], являющееся симметричной неотрицательной функцией порядков частиц i и j.

Уравнение Смолуховского должно решаться совместно с уравнениями, описывающими баланс массы в системе.

Этот баланс может быть записан в виде:

$$\sum_i iS(C_i) = 0. \qquad (3)$$

Математическая модель и численный эксперимент

В нашей модели мы предположим, что происходит агрегация частиц различных фракций бидисперсной суспензии [8, 9]. При этом все остальные перечисленные условия выполняются. Такой подход допустим для слабо концентрированных суспензий, в которых отсутствует влияние частиц одной фракции на гидродинамические условия осаждения другой фракции. Предположим также, что происходит агрегация частиц различных фракций бидисперсной суспензии, но частицы одной фракции не образуют агрегатов, а агрегаты третьего порядка не образуются вообще. Такой процесс возможен, например, в случае, когда частицы каждой фракции характеризуются определенным поверхностным зарядом. Однако, образующаяся третья фракция, фракция агрегатов, может быть не полностью устойчивой и частично распадаться на исходные фракции.

Таким образом получаем систему уравнений

$$\frac{d\rho_1}{dt} = -a\rho_1\rho_2 + b\rho_3, \quad (4)$$

$$\frac{d\rho_2}{dt} = -a\rho_1\rho_2 + b\rho_3, \quad (5)$$

$$\frac{d\rho_3}{dt} = a\rho_1\rho_2 - b\rho_3. \quad (6)$$

ρ_1 и ρ_2 - частичные объемные плотности двух исходных фракций суспензии, 1/м^3; ρ_3 - частичная объемная плотность агрегированных фракций, 1/м^3;

a - коэффициент скорости бинарной агрегации, м^3/с; b - коэффициент скорости распада, 1/с.

Начальные условия

$$\rho_1(0) = \rho_1^0, \quad \rho_2(0) = \rho_2^0, \ \rho_3(0) = 0. \quad (7)$$

Введем также обозначения

$$\rho_0 = \rho_1^0 + \rho_2^0, \quad \theta_0 = a\rho_1^0\rho_2^0. \quad (8)$$

Для производных запишем следующие начальные условия

$$\left.\frac{d\rho_1}{dt}\right|_{t=0} = \left.\frac{d\rho_2}{dt}\right|_{t=0} = -\theta_0, \left.\frac{d\rho_3}{dt}\right|_{t=0} = \theta_0. \quad (9)$$

Данная система имеет следующий инвариант, следующий из баланса массы в системе

$$\rho_1 + \rho_2 - \rho_0 = -2\rho_3. \quad (7)$$

Чтобы получить аналитическое выражение для третьей фракции, выполним следующие преобразования.

Продифференцируем третье уравнение системы по времени, получим

$$\frac{d^2\rho_3}{dt^2} = -\frac{d\rho_3}{dt}\left(a(\rho_1 + \rho_2) + b\right). \quad (10)$$

Используя инвариант (7), перепишем (10) следующим образом

$$\frac{d^2\rho_3}{dt^2} = -\frac{d\rho_3}{dt}\left(a(\rho_0 - 2\rho_3) + b\right). \quad (11)$$

Отсюда получаем

$$\frac{d\rho_3}{dt} = a\left(\rho_3^2 - \left(\rho_0 + \frac{b}{a}\right)\rho_3 + \rho_1^0\rho_2^0\right) \quad (12)$$

Данное дифференциальное уравнение имеет следующее интегральное представление

$$\int \frac{d\rho_3}{\rho_3^2 - \left(\rho_0 + \frac{b}{a}\right)\rho_3 + \rho_1^0\rho_2^0} = at. \quad (13)$$

Рассмотрим знаменатель подынтегрального выражения на наличие особенностей. Имеем квадратное уравнение

$$\rho_3^2 - \left(\rho_0 + \frac{b}{a}\right)\rho_3 + \rho_1^0\rho_2^0 = 0. \quad (14)$$

Дискриминант этого уравнения равен

$$D=\left(\rho_0+\frac{b}{a}\right)^2-4\rho_1^0\rho_2^0=\left(\rho_1^0-\rho_2^0\right)^2+2\rho_0\frac{b}{a}+\left(\frac{b}{a}\right)^2>0\cdot \qquad (15)$$

Дискриминант, как видно из (15), всегда положительная величина при $b>0$. Чтобы дискриминант стал равен нулю необходимы следующие условия:

$$\rho_1^0=\rho_2^0 \quad \text{и} \quad b=0\,. \qquad (16)$$

Квадратное уравнение имеет следующие корни:

$$(\rho_3)_1=\frac{\left(\rho_0+\frac{b}{a}\right)+\sqrt{\left(\rho_0+\frac{b}{a}\right)^2-4\rho_1^0\rho_2^0}}{2}, \qquad (17)$$

$$(\rho_3)_2=\frac{\left(\rho_0+\frac{b}{a}\right)-\sqrt{\left(\rho_0+\frac{b}{a}\right)^2-4\rho_1^0\rho_2^0}}{2}$$

Тогда решение уравнения (11) имеет вид

$$\frac{1}{(\rho_3)_1-(\rho_3)_2}\ln\frac{(\rho_3-(\rho_3)_1)}{(\rho_3-(\rho_3)_2)}-\frac{1}{(\rho_3)_1-(\rho_3)_2}\ln\frac{(\rho_3)_1}{(\rho_3)_2}=at\cdot \qquad (18)$$

Таким образом, получаем выражение для эволюции концентрации агрегатов

$$\rho_3=\frac{(\rho_3)_1(\rho_3)_2(1-\exp(a((\rho_3)_1-(\rho_3)_2)t))}{(\rho_3)_2-(\rho_3)_1\exp(a((\rho_3)_1-(\rho_3)_2)t)}\,. \qquad (19)$$

Графики зависимости (19) были построены при начальных условиях: $\rho_1(0)=10^8$ 1/м^3; $\rho_2(0)=3\cdot10^8$ 1/м^3 для разных значений управляющих параметров.

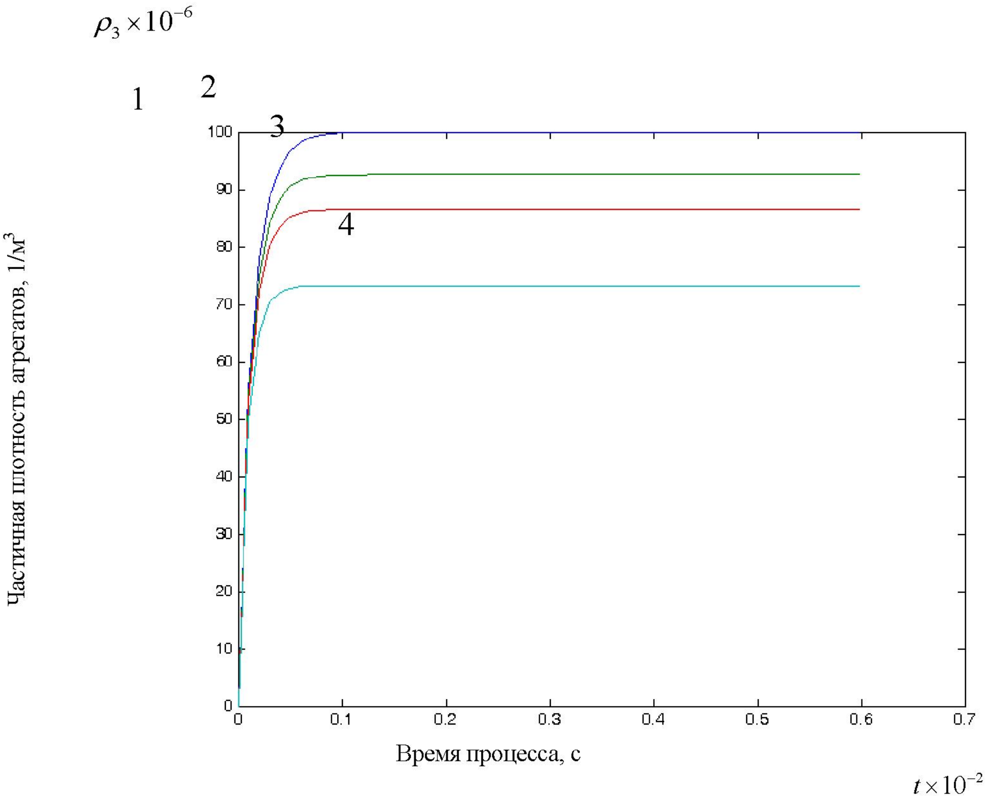

Рисунок 1- Изменение частичной плотности агрегатов согласно модели (4), (5), (6) при $a=0.1$. Коэффициент распада: 1- $b=0$; 2- $b=5$; 3-$b=10$; 4- $b=25$

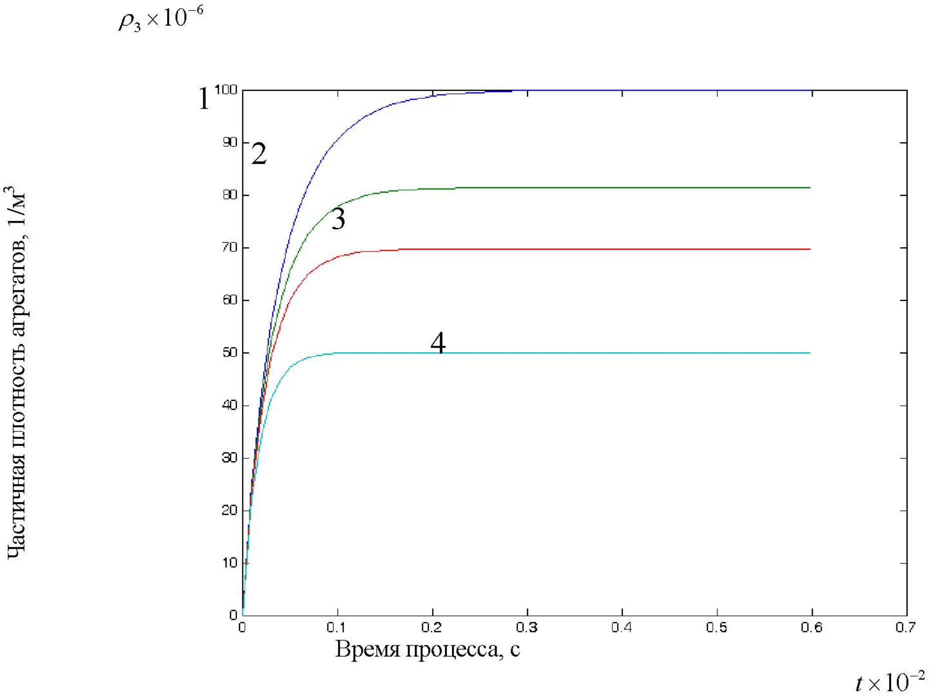

Рисунок 2- Изменение частичной плотности агрегатов согласно модели (4), (5), (6) при $a = 0.2$. Коэффициент распада: 1- $b = 0$; 2- $b = 5$; 3-$b = 10$; 4- $b = 25$

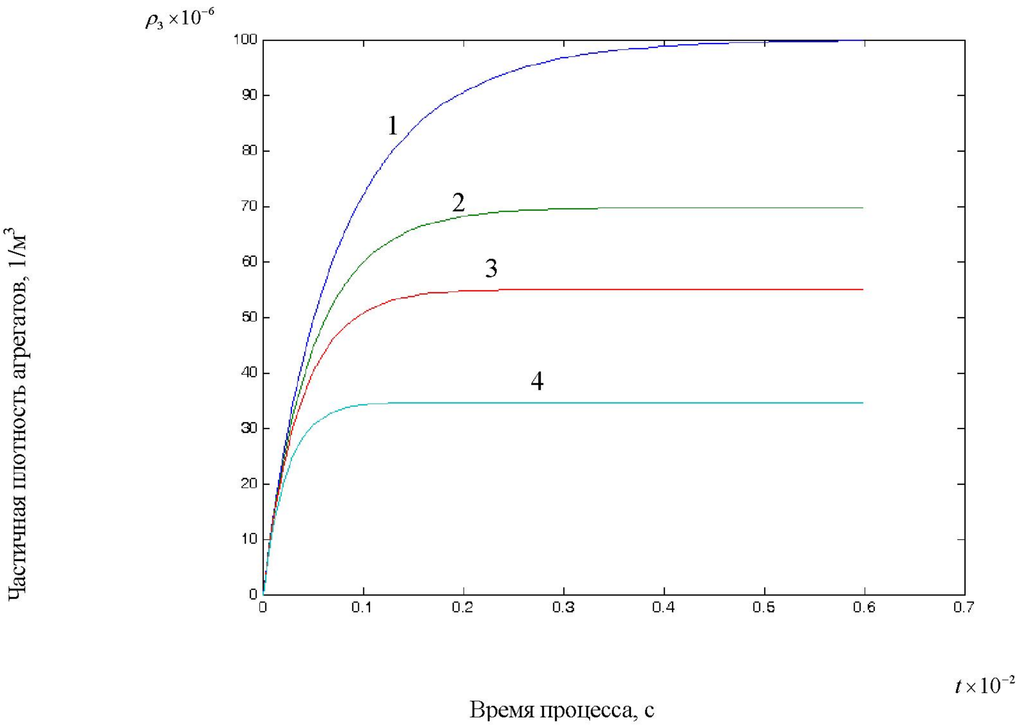

Рисунок 2- Изменение частичной плотности агрегатов согласно модели (4), (5), (6) при $a = 0.3$. Коэффициент распада: 1- $b = 0$; 2- $b = 5$; 3-$b = 10$; 4- $b = 25$

Заключение. Таким образом, представленная модель позволяет рассчитывать фракционный состав бидисперсной суспензии с учетом процесса агрегации исходных фракций и частичного распада фракции агрегатов. Анализ полученных зависимостей и вид графиков хорошо согласуются с известными экспериментальными данными и изученными закономерностями поведения нестабильных суспензий [8]. Для надежного практического применения данная модель требует проведения дополнительной работы для идентификации управляющих параметров применительно к конкретным физико-химическим системам.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Шакиров Б.С., Тажибаева Б.Т., Жамалова К.А. Особенности расчета эффективности процесса осаждения полидисперсных взвесей// Труды Межд. науч. конф. "Современные концепции естествознания и информационных технологий" . Алматы: КазГАСА, 2009. – Ч. 1. С.26-31.

[2] Волченок В.Ф. Моделирование свойств полидисперсных структур. – Минск: Наука и техника, 1991. - С. 125-132

[3] Волощук В. Кинетическая теория коагуляции. Л.: Гидрометиздат, 1974

[4] J.A.D. Wattis. An introduction to mathematical models of coagulation-fragmentation processes: A discrete deterministic mean-field approach, Physica D222, 2006, pp 1-20.

[5]. L.M. Lifshitz, V.V. Slyozov. Kinetics of a precipitation from supersaturated solid solutions, J. Phys. Chem. Sol. 19, 1961, pp 35-50.

[6]. Brener, A.M., Balabekov, B. Ch., Kaugaeva, A. M. (2009) Non-local model of aggregation in uniform polydispersed systems. *Chem. Eng. Transactions 17*, 783.

[7]. Fadda, S., Cincotti, A., Cao, G. (2009). Modelling breakage and reagglomeration during fine dry grinding in ball milling device. *Chem. Eng. Transactions 17*, 687.

[8]. J.C. Zahnov, J. Maerz, U. Feudel. Particle-based modelling of aggregation and fragmentation processes: Fractal-like aggregates. Physica D 240, 2011, pp. 882-893.

[9]. J.A. Blackman, A. Marshall. Coagulation and Fragmentation in cluster-monomer reaction models. J. Phys. A.: Math. Gen. 27, 1994, pp. 725-740.

REFERENCES

[1]. Shakirov B.S., Tazhibaeva B.T., Zhamalova K.A. Features of calculation of efficiency of polydisperse suspensions sedimentation process // Works of the international scientific conference « Modern concepts of natural sciences and information technologies », Almaty: KazGASA, 2009 – V.1. P.26-31.

[2]. Volchenok V.F. Modelling of properties of polydisperse structures. – Minsk: Science and technics, 1991. – P.125-132

[3]. Volchenok V.F. Modelling of properties of polydisperse structures. – Minsk: Science and technics, 1991. – P.125-132

[4]. J.A.D. Wattis. An introduction to mathematical models of coagulation-fragmentation processes: A discrete deterministic mean-field approach, Physica D222, 2006, pp 1-20.

[5]. L.M. Lifshitz, V.V. Slyozov. Kinetics of a precipitation from supersaturated solid solutions, J. Phys. Chem. Sol. 19, 1961, pp 35-50.

[6]. Brener, A.M., Balabekov, B. Ch., Kaugaeva, A. M. (2009) Non-local model of aggregation in uniform polydispersed systems. *Chem. Eng. Transactions 17*, 783.

[7]. Fadda, S., Cincotti, A., Cao, G. (2009). Modelling breakage and reagglomeration during fine dry grinding in ball milling device. *Chem. Eng. Transactions 17*, 687.

[8]. J.C. Zahnov, J. Maerz, U. Feudel. Particle-based modelling of aggregation and fragmentation processes: Fractal-like aggregates. Physica D 240, 2011, pp. 882-893.

[9]. J.A. Blackman, A. Marshall. Coagulation and Fragmentation in cluster-monomer reaction models. J. Phys. A.: Math. Gen. 27, 1994, pp. 725-740.

Бидисперсиялық суспензияда агрегаттардың ыдырау кинетикасын есепке алумен агрегация үдерісін үлгілеу

Дайрабай Д.Д[1], Голубев В.Г[1], Балабеков О.С[2],Левданский А.Э[3]

[1]М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан мемлекеттік университеті, Шымкент қаласы,Казакстан,

[2]Оңтүстік Қазақстан мемлекеттік педагогикалық институты, Шымкент қаласы,Казакстан,

[3] Беларусь мемлекеттік техникалық университеті, Минск қаласы, Беларусь

Түйін сөздер: бидиспериялық суспензия, бөлшектер агрегациясы, агрегаттардың ыдырауы, математикалық үлгі, сандық тәжірибе.

Аннотация. Ұсақ және ірі фракциялар бөлшектерінің өзара агрегациясы (коагуляциясы) үдерісі болған жағдайда, сонымен қатар, осы үдерістің ішінара кері қайтарымдылығын, яғни, жүйеде белгілі жылдамдықпен орын алатын бөлшектердің түзілетін агрегаттарының ыдырауын есепке алумен бидисперсиялық суспензияның әр түрлі фракцияларыны концентрациясын есептеудің жаңа математикалық үлгісі ұсынылды. Мұндай үдерістер табиғат құбылыстарында орын алады және тұрақтандырылған суспензияларды жасау кезінде және сұйықтықтарды ластанудан тазарту жүйелерінде арнайы ұйымдастырылады. Жүйеде түзілетін агрегаттардың концентрациясын есептеу үшін талдамалы формула алынды. Басқарушы параметрлердің әр түрлі мәндеріндегі сандық тәжірибелердің нәтижелері келтірілді.

Сведения об авторах

Дайрабай Динара Дастанқызы **-** PhD докторант по специальности технологические машины и оборудование. Южно-Казахстанского государственного университета им. М. Ауэзова, Республика Казахстан г. Шымкент. din_303@mail.ru

Голубев Владимир Григорьевич **-** д.т.н., профессор. Южно-Казахстанского государственного университета им. М. Ауэзова, Республика Казахстан г.Шымкент

Балабеков Оразалы Сатимбекович - д.т.н., Академик НАН РК. Южно-Казахстанского государственного педагогического института, Республика Казахстан г. Шымкент

Левданский Александр Эдуардович - д.т.н., профессор. Белорусского государственного технологического университета, Республика Беларусь, г.Минск.

Поступила 21.03.2016 г.