

Ж. Б. КАЛДЫБЕКОВА, А. М. БРЕНЕР, К. К. СЫРМАНОВА

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ ДВУХФАЗНОЙ ЖИДКОСТИ В СЛОЕ ПОРИСТОГО АДСОРБЕНТА

В настоящее время считается установленным, что вермикулит, пропитанный раствором гидрофобизатора, является эффективным сорбентом для очистки воды и почвы от разлитой нефти и нефтепродуктов. [1]

Вермикулит – слюдоподобный магнезиально-железистый алюмосиликат непостоянного химического состава с расширяющейся структурной ячейкой, обладающий разнообразием ценных свойств, что и обусловило его применение в разных отраслях промышленности, строительства и сельского хозяйства.

Химический состав вермикулитов переменный, %: MgO – 14-15, FeO – 1-3, Fe_2O_3 – 3-17, Al_2O_3 – 10-17, SiO_2 – 34-42, H_2O – 8-15, имеются и такие примеси как Ti, Ni, Zn, Cu, Na, K. Межслоевые и межпакетные промежутки структуры

вермикулита можно рассматривать как пластинчатые микропоры с размерами 0,3-1,2 нм. Установлено также, что пористый вермикулит обладает наиболее подходящими параметрами геометрической структуры для осуществления процессов адсорбции [1, 2].

Обычно основным источником данных о дисперсных системах являются результаты реологических экспериментов. В то же время известно, что при течении многокомпонентных многофазных жидкостей в пористых структурах наблюдаются нелинейные эффекты, которые проявляют себя как в виде адсорбционных эффектов, что влияет на динамику показателей эффективности адсорбции, так и на уровне специфических реологических эффектов, например, в форме эффекта запирания потока [3, 4]. Поэтому динамические

свойства сложных дисперсных систем не определяются только реологическими характеристиками.

Необычные режимы течения сложных многокомпонентных жидкостей в пористых средах проявляются в неоднородном распределении адсорбированного вещества в адсорбционном слое [5]. Это объясняется взаимодействием компонентов друг с другом и их конкуренцией при заполнении свободных адсорбционных центров на твердой поверхности, поскольку многие многокомпонентные смеси являются коллоидными системами, в которых поверхностно-активные компоненты образуют дисперсную fazу.

В статье представлена математическая модель движения двухкомпонентной дисперсной фазы с учетом конкурентной адсорбции и неравновесного характера массообмена между адсорбционной поверхностью пористого слоя и дисперсной fazой.

Согласно [2] базовая система уравнений модели для проточной одномерной схемы слоя выглядит следующим образом:

$$\varepsilon \frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial a_i}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial x^2} - u \frac{\partial c_i}{\partial x}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \tilde{a}_i}{\partial t} = \beta_i \left(c_i - b_i a_i^2 \left(1 - \sum_k \lambda_k a_k \right)^{-2} + \sum_{j \neq i} k_{ij} a_i a_j \right), \quad (2)$$

где c_i , a_i – концентрации первого и второго компонента в потоке и в адсорбированном состоянии; D_i – коэффициент диффузии i -го компонента; ε – пористость; \tilde{a}_i – неравновесное значение концентрации вещества в адсорбированном состоянии; u – скорость фильтрации; b_i – коэффициент адсорбции, равный отношению скоростей десорбции к адсорбции, β_i – эффективный коэффициент массообмена, характеризующий скорость адсорбции; λ_k – коэффициент, характеризующий степень заполненности монослоя; k_{ij} – коэффициент межмолекулярного взаимодействия адсорбирующихся компонентов

Система уравнений (1), (2) решается при следующих начальных и граничных условиях [5, 6]:

$$c_i(0, t) = c_i^0, \quad \left. \frac{\partial c_i}{\partial x} \right|_{x=L} = 0, \quad t \geq 0, \quad (3)$$

$$a_i(x, 0) = 0, \quad c_i(x, 0) = 0, \quad 0 < x < L. \quad (4)$$

Математическая модель (1)-(4) является незамкнутой и должна быть дополнена соотношением для связи между равновесными и неравновесными концентрациями компонентов в адсорбированном состоянии.

В [3, 4] предлагается использовать простейшую форму такой связи:

$$\tau \frac{\partial a_i}{\partial t} + a_i = \tilde{a}_i, \quad (5)$$

где τ – время релаксации.

Однако, как показано в работе [7], учет времени релаксации требует модификации основного уравнения переноса (1). Поэтому мы предлагаем использовать методологию работ [7, 8], основанную на представлении о релаксационных ядрах переноса [9].

Релаксационными ядрами переноса называются ядра интегральных преобразований, связывающих в статистической теории диссипативных процессов потоки и термодинамические силы [9].

Общая структура потока имеет при этом следующий вид [7]:

$$J_n(R, t) = J_n(R, t_0) + J_{n0}(R, t) + \sum \iint dt_1 dR' N_{ni}(R, R', t, t_1) F_i(R', t), \quad (6)$$

где J_n – поток n -го компонента; R, t – пространственная и временная координаты; N_{ni} – релаксационные ядра переноса; F_i – движущие силы процесса.

Необходимо отметить широкие возможности моделирования с помощью релаксационных ядер переноса при минимуме феноменологических соображений, что делает данный метод полезным при изучении влияния эффектов пространственно-временной нелокальности на явления тепломассопереноса. Перспективен расчет релаксационных ядер переноса методами, использующими различные аппроксимации. В частности, в работе [10] показано, что для расчета ядер переноса можно использовать дифференциальное уравнение вида:

$$\frac{\partial}{\partial t} N(R, s) + \frac{N(R, s)}{\tau} f(t) = 0, \quad (7)$$

где $f(t)$ – некоторая функция времени и пространственных координат.

Так как процесс адсорбции многокомпонентных смесей сопровождается эффектами перекрестной диффузии, то целесообразно использовать

обобщенный подход, предложенный в работе [10] основе эвристической модели для описания процессов переноса тепла и массы с учетом перекрестных эффектов в виде системы:

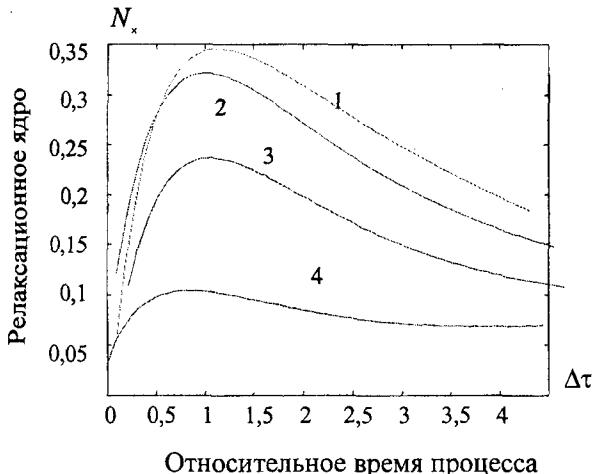
$$\frac{\partial N_m}{\partial t} = -N_m \tau_m^{-1} + N_h \tau_x^{-1}, \quad (8)$$

$$\frac{\partial N_h}{\partial t} = N_m \tau_x^{-1} - N_h \tau_h^{-1}. \quad (9)$$

Здесь τ_m – диффузионное время релаксации; τ_h – тепловое время релаксации; τ_x – время релаксации перекрестных эффектов.

Кроме того, подобный подход позволяет исследовать влияние неизотермичности процесса на интенсивность адсорбции.

Можно показать, что зависимость перекрестного ядра переноса от времени проходит через



1 – $z = 0,2$; 2 – $z = 0,4$; 3 – $z = 0,6$; 4 – $z = 0,8$

Рис. 1. Развитие перекрестного релаксационного возмущения – $\alpha_1 = 0,6$

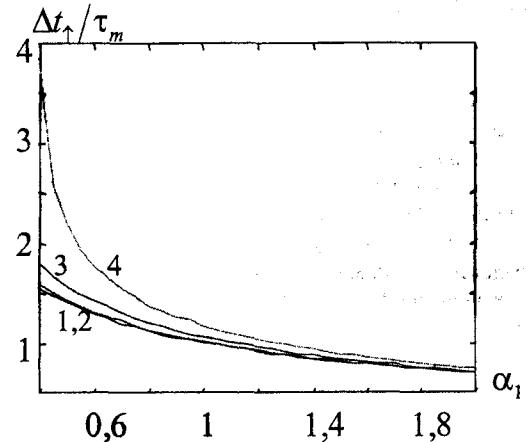
Реализуя данный подход для двухкомпонентной системы [7], получим систему уравнений переноса массы и тепла, которая существенно отличается от системы уравнений (1):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^3 (\varepsilon c_i + a_i)}{\partial t^3} - \left(\frac{1}{\tau_{m_i}} + \frac{1}{\tau_h} \right) \frac{\partial^2 (\varepsilon c_i + a_i)}{\partial t^2} + \\ & + \left(\frac{1}{\tau_{m_i} \tau_h} - \frac{1}{\tau_x^2} \right) \frac{\partial (\varepsilon c_i + a_i)}{\partial t} + \frac{\eta_{m_i}}{\tau_h} \nabla (\nabla v_i / T) + \\ & + \frac{\eta_x}{\tau_x} \Delta(1/T) + \eta_{m_i} \frac{\partial}{\partial t} \nabla (\nabla v_i / T) = 0, \quad (10) \end{aligned}$$

максимум [10]. Это специфическое явление, обусловленное влиянием термодиффузии или эффекта Соре. Максимум зависимости перекрестного ядра переноса от времени определяет период нарастания начальных возмущений температурного и концентрационного полей, обусловленный воздействием перекрестных термодинамических эффектов.

На рис. 1, 2 показаны некоторые результаты численного исследования времени нарастания возмущения, обусловленного перекрестными эффектами типа термодиффузии и эффекта Соре.

Приняты следующие обозначения: $\alpha_1 = \frac{\tau_m}{\tau_h}$; $\alpha_2 = \frac{\tau_m}{\tau_x}$; $\alpha_2 = z \sqrt{\alpha_1}$.



1 – $\alpha_2 = 0,1$; 2 – $\alpha_2 = 0,2$; 3 – $\alpha_2 = 0,4$; 4 – $\alpha_2 = 0,625$

Рис. 2. Период возрастания возмущений в системах с перекрестными эффектами

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^3 E}{\partial t^3} - \left(\frac{1}{\tau_m} + \frac{1}{\tau_h} \right) \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} + \\ & + \left(\frac{1}{\tau_m \tau_h} - \frac{1}{\tau_x^2} \right) \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\eta_x}{\tau_x} \nabla (\nabla v / T) + \\ & + \frac{\eta_h}{\tau_m} \Delta(1/T) + \eta_h \frac{\partial}{\partial t} (\Delta(1/T)) = 0, \quad (11) \end{aligned}$$

где v_i – химические потенциалы компонентов смеси; T – температура; E – внутренняя энергия смеси компонентов.

В работах [2-4] отмечается, что анализ устойчивости нелинейных уравнений кинетики адсорбции показал возможность существования двух типов решений модели, а именно: решения типа бегущей концентрационной волны для случая, когда один из компонентов явно превосходит другой либо по скорости, либо по степени активности адсорбции на поверхность пористой среды, а также решения, описывающие колебательные концентрационные процессы более сложной динамики.

Отметим, что система уравнений (10), (11) содержит все многообразие обнаруженных решений и соответствующих им режимов протекания адсорбционных процессов. Это дает основания предложить изложенный в нашей статье подход для детального описания течения двухфазной жидкости в слое пористого адсорбента сложной структуры.

ЛИТЕРАТУРА

1. Тарасевич Ю.И., Овчаренко Ф.Д. Адсорбция на глинистых минералах // Киев: Наукова думка, 1995. С. 351.
2. Ahmetov A., Telin A., Glukhov V., Mavletov M. Flow of Emulsion through Slot and Pore Structures / Progress in Mining and Oilfield Chemistry. 2003. V. 5. P. 287-295.
3. Ахметов А.Т., Глухов В.В., Мавлетов М.В., Телин А.Г. Парадоксы, возникающие при течении инвертных водонефтяных дисперсий в каналах / Труды Математического центра имени Н. И. Лобачевского. «Актуальные проблемы математики и механики» (Материалы международной научной конференции). Казань: Издательство Казанского математического общества. Т. 25. 2004. С. 35-36.
4. Ахметов А.Т., Телин А.Г., Глухов В.В., Мавлетов М.В. Нелинейные явления и хаос при течении эмульсий / Сб. трудов международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах». Махачкала, 2004. С. 320-322.

5. Мавлетов М.В. Различные режимы адсорбции при фильтрации многокомпонентных систем // Сб. трудов региональной школы-конференции для студентов, аспирантов и молодых ученых по математике и физике: Том II. Физика. Уфа: РИО БашГУ, 2003. С. 137-142.

6. Ахметов А.Т., Мавлетов М.В. Массоперенос эмульсионных систем в элементах пористой породы / Сборник трудов XXVIII Сибирского теплофизического семинара. Новосибирск, 2005. Электронная версия, статья № 011. С. 1-8.

7. Ким Л.А., Бренер А.М. Временная нелокальность уравнений переноса тепла и массы в интенсивных технологических процессах // ТОХТ. 1996. №30. С. 258-262.

8. Бренер А.М. Нелокальные уравнения переноса тепла и массы в технологических процессах // Теор. Основы хим. технол. 2006. Т. 40, №6. С. 604-612.

9. Рудак В.Ю. Статистическая теория диссипативных процессов в газах и жидкостях. Новосибирск: Наука, 1987.

10. Brener A.M., Muratov A.S., Tashimov L. Non-linear model of time dependent relaxation cores for the systems with cross transfer effects // Proceedings of the Advan. Comp. Methods in Heat Transfer, VIII, Lisbon, 2004. P. 321-332.

Резюме

Дисперсті фаза мен адсорбциялық беткі поралық қабат арасындағы тенсіздік қасиеті бар массалық алмасуы мен адсорбцияға қабілеттілігі ескерілген, екі компонентті дисперсті фаза көзғалысының математикалық моделі келтірілген. Адсорбциялық процестерді сипаттау үшін тасымалдаудың релаксациялық ядролар өдісінің колданылу жетістіктері қарастырылған.

Summary

The mathematical model of two-component emulsion flow through a layer of pore adsorbent with allowing for both the concurrent adsorption and non-equilibrium mass transfer between adsorption surface and disperse phase has been submitted. The perspectives for applying the relaxation cores method to describing adsorption processes have been considered.

УДК 513.83

Поступила 10.01.08г.