УДК 621.929

Ячеечная модель диффузии жидкости в погружающееся в нее пористое тело

В.Е. Мизонов[1], Н.Л. Овчинников[2], Л.Н. Овчинников[2], H. Berthiuax[3]
[1] ФГБОУВПО «Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина», Иваново, Российская Федерация
[2] ФГБОУВПО «Ивановский государственный химико-технологический университет», Иваново, Российская Федерация
[3] Ecole des Mines d'Albi-Carmaux, France
E-mail: mizonov46@mail.ru, ovchinnikovnl1972@newmail.ru, berthiau@enstimac.fr

Авторское резюме

Состояние вопроса: Физическим содержанием рассматриваемой задачи является диффузия примеси в пористое тело, которое погружается в жидкость, по мере его насыщения жидкостью. Аналитический расчет кинетики этого процесса на основе решения дифференциального уравнения диффузии невозможен в силу нелинейности и нестационарности краевых условий. Поэтому расчет базируется на трудоемких и продолжительных экспериментах. Рассматриваемая задача является актуальной, например, при расчете сбора нефтяной пленки с поверхности воды пористыми гранулами при аварийном сбросе нефти.
Материалы и методы: Предлагаемая математическая модель процесса основана на теории цепей Маркова. Сечение пористого тела представлено двухмерной сеткой ячеек, переходные вероятности между которыми состоят из вероятностей конвективного и диффузионного переносов, а краевые условия заданы на меняющейся по мере погружения границе.
Результаты: Разработана математическая модель поглощения жидкости плавающим на ее поверхности и погружающимся в нее пористым телом. Установлены закономерности поглощения жидкости пористым телом и его погружения при различных числах Пекле. Показано, что погружающаяся гранула абсорбирует жидкость быстрее, чем стационарно плавающая гранула.
Выводы: Предложенная модель может использоваться в качестве теоретической и расчетной основы для описания поглощения пленки жидкости пористым телом с очищаемой поверхности воды (например, нефтяной пленки при аварийном сбросе нефти).

Ключевые слова: пористое тело, ячеечная модель, переходная матрица, распределение концентрации, кинетика поглощения, погружение в жидкость.

Cell model of liquid diffusion in porous body submerging into it

V.E. Mizonov[1], N.L. Ovchinnikov[2], L.N. Ovchinnikov[2], H. Berthiaux[3]
[1] Ivanovo State Power Engineering University, Ivanovo, Russian Federation
[2] Ivanovo State University of Chemical Technology, Ivanovo, Russian Federation
[3] Ecole des Mines d'Albi-Carmaux, France
E-mail: mizonov46@mail.ru, ovchinnikovnl1972@newmail.ru, berthiau@enstimac.fr

Abstract

State of the Art: The problem in question can be used, for example, for calculation of absorption of the oil film from water surface by porous granules after escape of oil. Its physical essence is diffusion of impurity into a porous body, which is submerging into the liquid while it absorbs the liquid. Analytical calculation of the process kinetics is impossible as the boundary conditions are non-linear and not steady-state. Therefore, the calculation is based on labor and time consuming experiments.
Materials and methods: The proposed mathematical model is based on the theory of Markov chains. The cross section of a porous body is presented as a two-dimensional array of cell, transition probabilities between which consist of probabilities of diffusion and convection transfer, and boundary conditions are set on the boundary that varies while the body is submerging into the liquid.
Results: A mathematical model of absorption of liquid by floating on its surface and submerging into it porous body is developed. The features of liquid absorption by a porous body and its submerging at different values of the Peclet number are found. It is shown that a submerging granule absorbs liquid faster than a stationary floating one.
Conclusions: The proposed model can be used as theoretical and calculated base to describe liquid film absorption by porous body from the clear water surface (for example, oil film in case of oil emergency discharge).

Keywords: porous body, cell model, transition matrix, concentration distribution, kinetics of absorption, submerging into liquid.

Задача о поглощении жидкости пористым телом, плавающим на ее поверхности, возникает при расчете очистки поверхности воды от пленки загрязняющей жидкости (например, нефти), при расчете флотации и в ряде других процессов химической технологии. Физическим содержанием этого процесса является диффузия жидкости внутрь тела через поверхность его контакта с жидкостью, осложненная тем, что, во-первых, ей приходится преодолевать силу тяжести, а во-вторых, тем, что по мере насыщения пор тела жидкостью оно погружается в нее, изменяя поверхность контакта. Все это делает задачу нестационарной и нелинейной, в результате чего не приходится рассчитывать на получение аналитических решений задачи на основе дифференциального уравнения конвективной диффузии. В работах [1, 2] показано, что эффективным инструментом численного решения параболических уравнений в частных производных, к которым относится уравнение диффузии, являются ячеечные модели и связанный с ними математический аппарат теории цепей Маркова. Именно этот подход и использован нами.

Не нарушая общности, предположим, что поглощающее пористое тело представляет собой вытянутую гранулу с квадратным поперечным сечением. В этом случае задача сводится к двухмерной модели, схема которой показана на рис. 1.

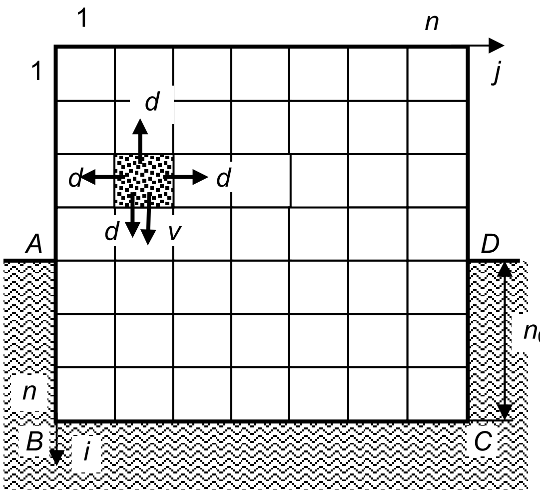

Рис. 1. Расчетная схема процесса и его ячеечное представление

Квадратное сечение размером $b \times b$ разбито на квадратную же сетку $n \times n$ ячеек со стороной $\Delta x = b/n$. Все параметры состояния процесса считаются равномерно распределенными внутри каждой ячейки. Состояние всего сечения характеризуется набором этих параметров, например, набором концентрации жидкости во всех ячейках. Этот набор удобно представить квадратной матрицей **Cm**, однако для дальнейших расчетов ячейки сечения должны быть пронумерованы последовательно по столбцам, а матрица **Cm** должна быть развернута в вектор-столбец **C** в соответствии с этой нумерацией:

$$\mathbf{C} = [C_1\ C_2 \ldots C_n\ C_{n+1} \ldots C_{2n} \ldots C_{n\times n}]. \qquad (1)$$

Состояние процесса рассматривается через малые промежутки времени Δt. Тогда текущее дискретное время процесса определится как $t^k = (k-1)\Delta t$, где $k = 1,2, \ldots$ – номер временного перехода, который может рассматриваться как целочисленный аналог времени.

Изменение распределения концентрации по ячейкам внутри сечения от перехода к переходу описывается рекуррентным матричным равенством

$$\mathbf{C}^{k+1} = \mathbf{P}\mathbf{C}^{k}, \qquad (2)$$

где **P** – переходная матрица, элементы которой показывают доли жидкости, переносимой в течение Δt из данной ячейки в соседние с ней. Это квадратная матрица размера $n^2 \times n^2$, каждый столбец которой принадлежит ячейке в соответствии с их сквозной нумерацией. В этом столбце в строках с номерами ячеек, куда разрешен перенос жидкости, размещены доли ее переноса в этом направлении. В [1, 2] показано, что эти доли рассчитываются следующим образом: $d = D\Delta t/\Delta x^2$ – доля чисто диффузионного переноса, где D – коэффициент диффузии жидкости в теле; $v = V\Delta t/\Delta x$ – доля конвективного переноса, где V – скорость движения жидкости в направлении массовой силы. Например, выделенная на рис. 1 ячейка имеет номер 10 в сквозной нумерации по столбцам. В матрице **P**, имеющей для этого сечения размер 49×49, ей принадлежит столбец 10. В этом столбце ненулевыми будут следующие элементы: $p_{3,10} = d$, $p_{9,10} = d$, $p_{17,10} = d$, $p_{11,10} = d+v$, $p_{10,10} = 1-4d-v$ (последнее равенство вытекает из условия равенства единице суммы всех элементов в любом столбце).

Построенная таким образом матрица **P** описывает эволюцию концентрации жидкости в изолированном сечении, когда на всей его границе заданы краевые условия второго рода. В рассматриваемом процессе жидкость поступает в сечение через показанную на рис. 1 линию ABCD, то есть через n ячеек снизу и $2n_0$ ячеек с боковых сторон. Если ограничиться рассмотрением краевых условий первого рода, когда концентрация на линии контакта считается заданной постоянной величиной C_0, то ячейкам, примыкающим к этой линии, после каждого временного перехода, описываемого равенством (2), следует присваивать значение C_0, что легко сделать при программировании вычислительной процедуры. Однако задача усложняется тем, что число погруженных в жидкость ячеек при плавающей грануле n_0 не остается постоянным, а увеличивается по мере насыщения сечения жидкостью, так как при этом меняются все гранулы. Текущая глубина погружения может быть рассчитана следующим образом:

$$y^k = y_0 + (y_{\max} - y_0)\sum C_{ij}^{\,k}/(C_{\max} n^2), \qquad (3)$$

где y_0 – глубина погружения «сухой» гранулы; $y_{\max}$ – глубина погружения полностью насыщенной жидкостью гранулы при ее концентрации в ячейках $C_{\max}$.

В соответствии с ячеечной структурой сечения, величина y^k может принимать только целочисленные значения, а погружение осуществляется дискретно с шагом в одну ячейку или величину Δx. Программирование этой процедуры также не вызывает трудностей.

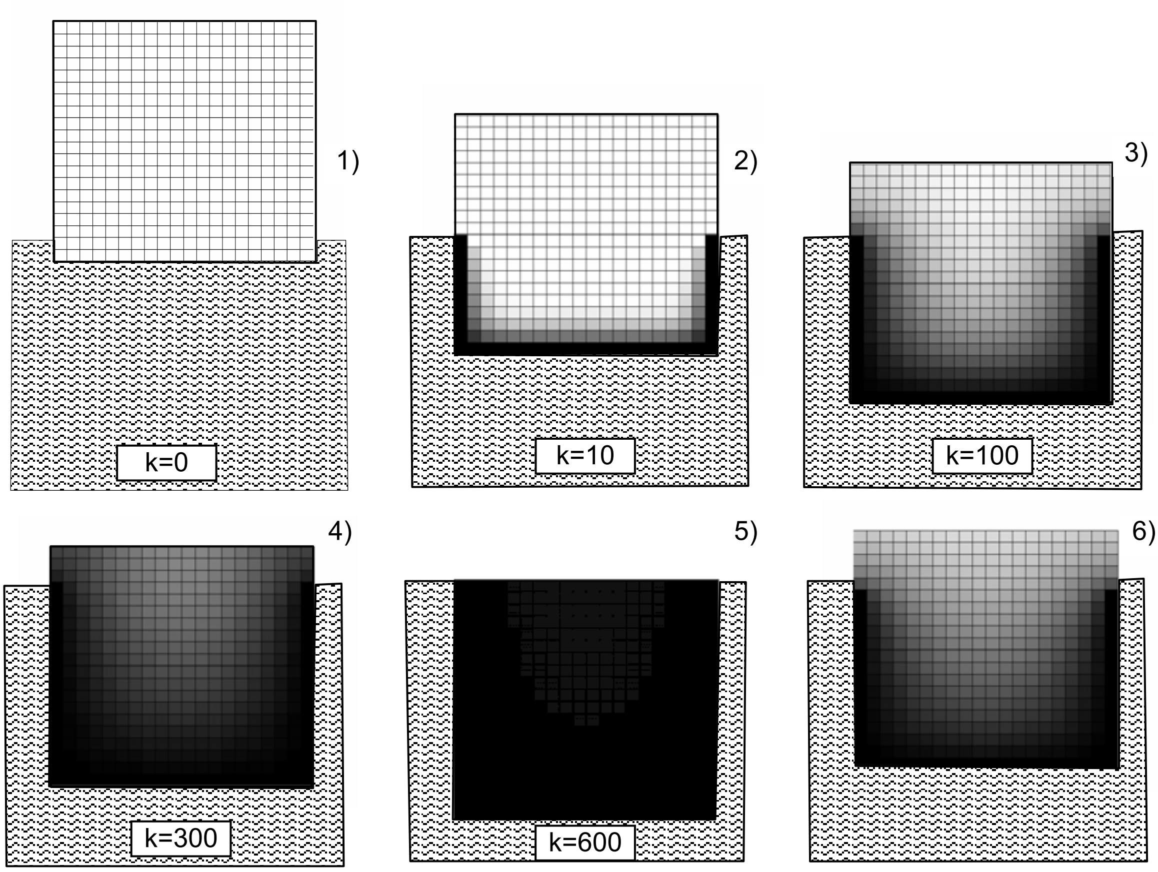

Рис. 2. Взаимодействие сечения с жидкостью: 1 … 5 – насыщение сечения жидкостью и его погружение в нее при Pe = 0; 6 – асимптотическое состояние сечения при Pe = 4,5

Таким образом, сформулированное выше краевое условие оказывается нестационарным, так как длина линии контакта сечения с жидкостью возрастает по мере протекания процесса.

На рис. 2 показаны иллюстрации поглощения жидкости плавающим сечением. В расчетах принято, что плотность каркаса пористого тела равна плотности жидкости, то есть полностью насыщенное жидкостью сечение полностью погружается в жидкость. Графики 1–5 на рис. 2 иллюстрируют поглощение жидкости сечением и его погружение в различные моменты времени, представленные числом переходов k в чисто диффузионном процессе (V = 0, число Пекле Pe = 0). Асимптотически сечение полностью насыщается жидкостью (рис. 2, график 5) и находится в жидкости в состоянии безразличного равновесия.

График 6 на рис. 2 показывает асимптотическое состояния сечения, когда диффузии жидкости в него препятствует сила тяжести ($V \neq 0$, число Пекле Pe = 4,5). В этом случае полное равномерное насыщение сечения жидкостью не достигается, а сечение сохраняет запас плавучести.

Предложенная модель является теоретической и расчетной основой для описания, например, поглощения пленки жидкости пористым телом с очищаемой поверхности воды.

Список литературы

1. **Berthiaux H., Mizonov V.** Applications of Markov Chains in Particulate Process Engineering: A Review // *The Canadian Journal of Chemical Engineering*. – 2004. – V. 85. – No.6. – P. 1143–1168.

2. **Mizonov V.,** et al (2011). Modeling the Moisture Content Distribution over a Rotating Porous Cylinder using Markov Chains. Chemical Engineering & Technology, 34: 1185–1190. doi: 10.1002/ceat.201100015

References

1. Berthiaux, H., Mizonov, V. Applications of Markov Chains in Particulate Process Engineering: A Review. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 2004, vol. 85, no. 6, pp. 1143–1168.

2. Mizonov, V., et al (), Modeling the Moisture Content Distribution over a Rotating Porous Cylinder using Markov Chains. Chemical Engineering & Technology, 2011, 34, pp. 1185–1190. doi: 10.1002/ceat.201100015.

Мизонов Вадим Евгеньевич,
ФГБОУВПО «Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина»,
доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой прикладной математики,
e-mail: mizonov46@mail.ru

Овчинников Николай Львович,
ФГБОУВПО «Ивановский государственный химико-технологический университет»,
кандидат химических наук, доцент кафедры технологии керамики и наноматериалов,
e-mail: ovchinnikovnl1972@newmail.ru

Овчинников Лев Николаевич,
ФГБОУВПО «Ивановский государственный химико-технологический университет»,
доктор технических наук, профессор кафедры процессов и аппаратов химической технологии,
e-mail: ovchinnikovnl1972@newmail.ru

Berthiaux Henri,
Ecole des Mines d'Albi-Carmaux, France,
Dr.-Eng., Professor,
e-mail: berthiau@enstimac.fr