

УДК 621.926

Обобщение кинетического уравнения Больцмана для описания совмещенных процессов измельчения и классификации

В.П. Жуков, В.Е. Мизонов, А.Н. Беляков
ФГБОУВПО «Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина»,
г. Иваново, Российская Федерация
E-mail: zhukov-home@yandex.ru

Авторское резюме

Состояние вопроса: Процессы измельчения, смешения и классификации сыпучих материалов традиционно описываются отдельно в рамках специфических для этих процессов моделей. Однако в ряде аппаратов, например в струйной мельнице кипящего слоя, порошки одновременно измельчаются, перемешиваются и классифицируются, что требует специальных комбинированных моделей.

Методы и материалы: Для описания комбинированных процессов в механике сыпучих материалов использованы кинетическое уравнение Больцмана и популяционно-балансовая модель измельчения.

Результаты: Предложен подход для совместного описания процессов измельчения, классификации и перемешивания сыпучих материалов в технологических аппаратах. Получено обобщение кинетического уравнения Больцмана, позволяющее описывать поведение ансамбля частиц в совмещенных процессах.

Выводы: Выполненное обобщение кинетического уравнения Больцмана позволяет описывать протекание совмещенных процессов и решать задачи по их оптимизации, что актуально для энергетики и смежных отраслей промышленности.

Ключевые слова: кинетическое уравнение Больцмана, измельчение, классификация, совмещенные процессы, сыпучие материалы.

Generalization of Boltzmann Kinetic Equation for Describing Combined Processes of Grinding and Classification

V.P. Zhukov, V.E. Mizonov, A.N. Belyakov
Ivanovo State Power Engineering University, Ivanovo, Russian Federation
E-mail: zhukov-home@yandex.ru

Abstract

Background: Processes of grinding, mixing and classification are usually described separately according to their specific models. However, in some apparatuses, such as fluidized bed jet mills, materials are ground, mixed and classified simultaneously which requires special combined models.

Materials and methods: The description of combined processes in mechanics of granular materials is based on the Boltzmann kinetic equation and population balance model.

Results: A complex approach to description of grinding, mixing and classification processes has been proposed. The Boltzmann kinetic equation was generalized which made it possible to describe particle ensemble behavior in combined processes.

Conclusions: The obtained generalization of the Boltzmann kinetic equation allows describing the combined processes and solving the problems of their optimization which is urgent for power industry and related industrial branches.

Key words: Boltzmann kinetic equation, grinding, classification, combined processes, granular materials.

К механическим процессам в сыпучих материалах относятся измельчение, транспорт частиц материала, их внутренняя классификация и т.д. Каждый из этих процессов имеет более или менее ясно выраженную стохастическую составляющую, что делает весь процесс вероятностным. Ниже предпринимается попытка описать всю совокупность механических процессов на основе одного кинетического уравнения, записанного для многомерного фазового пространства, координатами которого являются пространственные координаты частицы, проекции ее скорости и ее размер. Этот подход представляет собой обобщение кинетического уравнения Больц-

мана [1–2], которое широко используется в статистической физике.

Вывод обобщенного кинетического уравнения. Вывод обобщенного кинетического уравнения может быть выполнен двумя способами: на основе балансовых соотношений для элементарного фазового объема или на основе обобщения популяционно-балансовой или селективной модели измельчения [3]. Рассмотрим оба эти подхода и покажем, что они приводят к одинаковому результату.

Следует отметить, что в классической форме уравнения Больцмана [1] рассматриваются пространственные координаты частиц и проекции скорости частиц на эти координаты, что не позволяет

описывать кинетику измельчения, в ходе которого изменяется размер зерен. Для описания кинетики измельчения в фазовое пространство вводится дополнительная координата крупности зерен. На рис. 1 показана схема потоков вещества через поверхность элементарного объема вдоль одной пространственной координаты x .

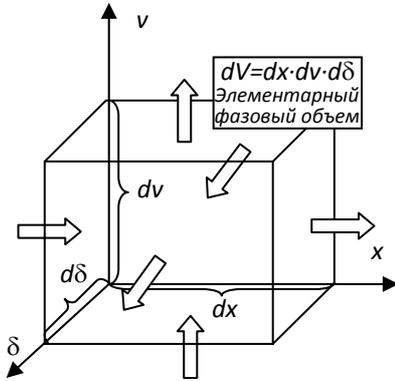


Рис. 1. Схематичное представление элементарного фазового объема при анализе одной пространственной координаты x , скорости вдоль нее v и размера частиц δ

В общем случае пространственных координат может быть три и, соответственно, три проекции скорости вдоль этих координат. В этом случае в качестве искомой функции $f(\vec{r}, \vec{v}, \delta, t)$ рассматривается плотность распределения вещества по координатам $\vec{r}(x_1, x_2, x_3)$, скоростям $\vec{v}(v_1, v_2, v_3)$ и размерам частиц δ . Произведение функции $f(\vec{r}, \vec{v}, \delta, t)$ и фазового объема $dV = dx_1 dx_2 dx_3 dv_1 dv_2 dv_3 d\delta$ показывает вероятность в момент времени $(t, t + dt)$ частицы размера $(\delta, \delta + d\delta)$, находящейся в точке с координатами $(x_1, x_1 + dx_1)$, $(x_2, x_2 + dx_2)$, $(x_3, x_3 + dx_3)$, двигаться со скоростью $(v_1, v_1 + dv_1)$, $(v_2, v_2 + dv_2)$, $(v_3, v_3 + dv_3)$. В общем случае изменение функции распределения в фазовом объеме dV обусловлено, во-первых, физическим перемещением частиц ($div_r(\vec{v}f)$), во-вторых, изменением скорости частиц ($div_v(\vec{a}f)$) и, в-третьих, переходом частиц в другой класс крупности за счет разрушения (\dot{f}_c). В дифференциальной форме уравнение Больцмана для совмещенного процесса принимает вид

$$\dot{f}_i + (v_k f)_{x_k}' + (a_k f)_{v_k}' = \dot{f}_c, \quad (k = 1, 2, 3), \quad (1)$$

где $\vec{a}(a_1, a_2, a_3)$ – ускорение; \dot{f}_c – источниковый член уравнения, описывающий внешние потоки и переходы частиц между фракциями при измельчении; повторение индекса « k » в слагаемых левой части показывает суммирование по этому индексу.

Уравнение (1) совпадает с известным уравнением Больцмана для распределения одинаковых молекул (в нашем случае частиц одного размера). При описании полидисперсного ансамбля уравнение (1) записывается для каждой

фракции. Для конечного числа выделенных фракций уравнение (1) превращается в систему уравнений, число которых совпадает с числом фракций, а связь между этими уравнениями осуществляется через функции \dot{f}_c в правых частях уравнений системы. Правая часть при эволюции размера частиц за счет измельчения может быть записана на основе селективной модели измельчения в виде [3]

$$\dot{f}_i + (v_k f)_{x_k}' + (a_k f)_{v_k}' = -fS + \int_{\delta}^{\delta_{\max}} fSbd\varepsilon, \quad (2)$$

где S, b – селективная и распределительная функции разрушения [3]; a – ускорение; δ, ε – наблюдаемый и текущий размеры частиц.

Второй вариант вывода обобщенного уравнения Больцмана основывается на известном уравнении кинетики селективного измельчения, которое может быть представлено в виде [3]

$$\dot{f}_i = -fS + \int_{\delta}^{\delta_{\max}} fSbd\varepsilon. \quad (3)$$

С учетом конвективного переноса материала в выделенном координатном пространстве со скоростью v_k уравнение (3) записывается, согласно [3], в виде

$$\dot{f}_i = -fS + \int_{\delta}^{\delta_{\max}} fSbd\varepsilon - (v_k f)_{x_k}'. \quad (4)$$

Последнее слагаемое в правой части представляет собой суммарный поток материала через выделенный фазовый объем вдоль пространственных координат. При введении в выделенное пространство координат проекций скорости частиц уравнение баланса масс (4) необходимо дополнить соответствующим дивергентным слагаемым $div_v(\vec{a}f)$. После данной подстановки и формальных преобразований уравнение (4) принимает вид

$$\dot{f}_i + (v_k f)_{x_k}' + (a_k f)_{v_k}' = -fS + \int_{\delta}^{\delta_{\max}} fSbd\varepsilon. \quad (5)$$

Аналогичный вид уравнений (2) и (5), полученных двумя разными способами, подтверждает обоснованность используемых для выводов подходов и достоверность самого уравнения.

Полученное уравнение, с одной стороны, является обобщением кинетического уравнения Больцмана на случай учета крупности частиц и, с другой стороны, обобщением модели селективного измельчения [3], позволяющей учитывать конвективный перенос частиц и силы, действующие на эти частицы при различной реализации технологических процессов переработки сыпучих материалов.

Для уравнения Больцмана разработан метод решения, алгоритм и их программное обеспечение, на которое получено свидетельство о регистрации программного продукта [4, 5]. Для численного решения уравнения Больцмана используется ячеечный подход, построенный на балансах энергии и массы в каждой ячейке фазового пространства. Искомая плотность распре-

деления вещества по ячейкам представляется вектором $f = \{f_i\}$, где индекс i соответствует номеру ячейки. Сначала для каждой ячейки фазового пространства определяются номера ячеек, с которыми она может взаимодействовать. Затем составляются уравнения балансов вещества и энергии и определяются потоки энергии или вещества между этими ячейками. Известные потоки энергии и массы позволяют определить вероятности переходов (p_{ij}) за рассматриваемый промежуток времени Δt . Указывая для каждой ячейки адреса ячеек, в которые возможен переход, и вероятности этих переходов, определяется состояние системы в следующий момент времени. Расчет искомого распределения f в произвольные моменты времени (k) выполняется согласно выражению

$$f^{k+1}_i = \sum_j p_{ij} f^k_j. \quad (6)$$

Предложенное расчетное выражение, по сравнению с традиционным матричным описанием процессов [3], позволяет существенно экономить машинные ресурсы за счет исключения операций с нулевыми элементами.

Тестирование метода решения уравнения Больцмана, алгоритма и компьютерной программы, проведенное на задаче движения ансамбля частиц [5], показало хорошее совпадение результатов численного и аналитического решений.

Рассмотрим два примера использования обобщенного уравнения Больцмана для решения задач технологии сыпучих материалов, которые наглядно показывают преимущества и возможности моделирования совмещенных процессов в рамках предложенного подхода.

Классификация дисперсных сред при высокой концентрации твердой фазы в аппарате. В промышленных условиях при высокой концентрации твердой фазы в потоке частицы сталкиваются друг с другом и с ограждающими стенками, что существенно влияет на показатели процесса классификации [6]. Для учета влияния концентрации частиц на процесс разделения в кинетическое уравнение вводится дополнительная сила взаимодействия (столкновения) частиц $(F_m)_{ij}$ [6]. После этого выражение для ускорения записывается в виде

$$a_i = -g + \frac{(F_c)_i}{m_i} + \frac{(F_m)_{ij}}{m_i} = -g + \frac{k_f(w_0 - v)|(w_0 - v)|^{n-1}}{m} + \frac{3(1+k)(\delta_i + \delta_j)^2}{2(\delta_i^3 + \delta_j^3)}(v_i - v_j)|v_i - v_j|\beta(\delta, v, x_j), \quad (7)$$

где β_j – объемная концентрация частиц j -го класса крупности в фазовом объеме; δ – размер частиц; k – коэффициент восстановления скорости при ударе.

Результаты решения уравнения (2) с учетом (7) приводятся на рис. 2 в виде зависимости граничного размера классификации от концен-

трации твердой фазы в аппарате при разной крупности зерен исходного порошка. Под граничным размером разделения понимается размер частицы, вероятность попадания которой в тонкий продукт разделения равна 0,5. Анализ полученных результатов показывает, что значение граничного размера с ростом концентрации может и повышаться, и понижаться, что соответствует известным результатам экспериментальных исследований.

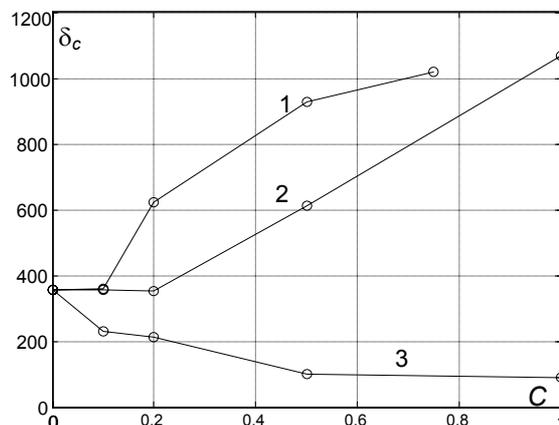


Рис. 2. Зависимость граничного размера (δ_g , мкм) от концентрации твердой фазы (C , кг/м³) для исходных продуктов с различными средними размерами зерен: 1 – 157; 2 – 455; 3 – 758 мкм

Измельчение и классификация дисперсных систем в аппарате кипящего слоя. В струйных мельницах кипящего слоя [7] процессы измельчения и классификации протекают совместно. Для описания измельчения материала в аппарате производится оценка энергии разрушения e_{ij} , которая в первом приближении принимается пропорциональной диссипации (потере) энергии при ударе частиц:

$$e_{ij} = -\frac{3(1-k)(\delta_i + \delta_j)^2}{2(\delta_i^3 + \delta_j^3)}(v_i - v_j)|v_i - v_j|\beta(\delta, v, x)\nu\Delta t. \quad (8)$$

Результаты расчетного анализа совместного протекания процессов измельчения и классификации в струйной мельнице кипящего слоя приведены на рис. 3, 4.

На рис. 3 приведено распределение вещества по фазовому пространству в виде изолиний в координатах δ - v на разной высоте сечения аппарата x .

На рис. 4 представлено суммарное распределение частиц по высоте аппарата, при этом суммирование выполняется по скоростям и по размерам зерен при выбранной высоте сечения аппарата x :

$$m_i = \sum_{k=1}^{k_{\max}} \sum_{j=1}^{j_{\max}} f(x_i, v_j, \delta_k). \quad (9)$$

Полученные распределения позволяют описывать формирование слоя и распределение частиц по крупности как в произвольном сечении аппарата, так и на выходе из него в готовом продукте.

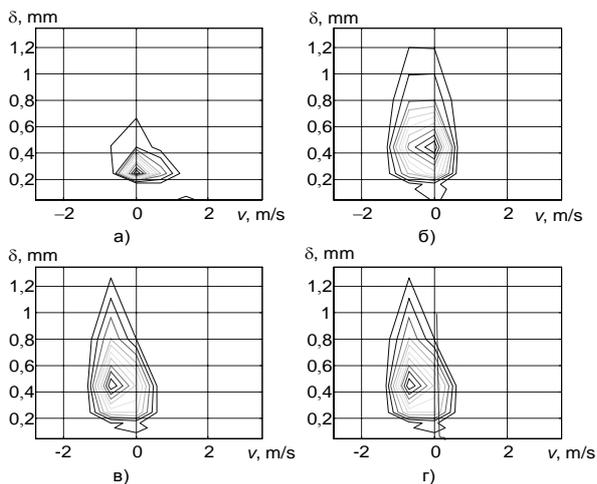


Рис. 3. Распределение вещества по фазовому пространству в виде изолиний в координатах δ - v на разной высоте сечения аппарата: а – $x = 0,7$ м; б – $x = 0,5$ м; в – $x = 0,4$ м; г – $x = 0,2$ м

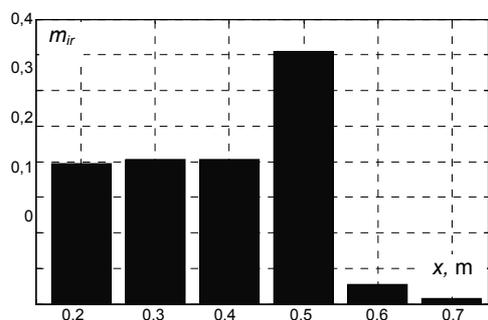


Рис. 4. Распределение вещества по высоте аппарата

Преимуществом предложенного подхода является построение на его основе универсального вычислительного алгоритма для моделирования практически всех механических процессов с участием сыпучих сред. Интересным и перспективным, на наш взгляд, является объединение предложенного подхода с оптимизационными принципами, например с принципом максимума энтропии [8], что позволяет в ряде случаев прогнозировать наиболее вероятное установившееся равновесное стационарное состояние системы.

Жуков Владимир Павлович,
 ФГБОУВПО «Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина»,
 доктор технических наук, профессор кафедры прикладной математики,
 адрес: г. Иваново, ул. Рабфаковская, д. 34, кор. А, ауд. 202,
 телефон (4932) 26-97-45,
 e-mail: zhukov-home@yandex.ru

Мизонов Вадим Евгеньевич,
 ФГБОУВПО «Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина»,
 доктор технических наук, заведующий кафедрой прикладной математики,
 адрес: г. Иваново, ул. Рабфаковская, д. 34, кор. А, ауд. 208,
 телефон (4932) 26-97-45,
 e-mail: mizonov46@mail.ru,

Беляков Антон Николаевич,
 ФГБОУВПО «Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина»,
 кандидат технических наук, докторант кафедры прикладной математики,
 адрес: г. Иваново, ул. Рабфаковская, д. 34, кор. А, ауд. 202,
 телефон (4932) 26-97-45,
 e-mail: ab_pm@mail.ru

Список литературы

1. Вулис Л.А. Теория и расчет магнитогазодинамических течений в каналах. – М.: Атомиздат, 1971.
2. Веденяпин В.В. Кинетическое уравнение Больцмана и Власова. – М.: Физматлит, 2001.
3. Mizonov V., Zhukov V., Bernotat S. Simulation of Grinding: New Approaches. – Ivanovo, 1997.
4. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2010612671 от 19.04.2010 / А.Н. Беляков, В.П. Жуков, А.А. Власюк, А. Е. Барочкин.
5. Беляков А.Н., Жуков В.П. Влияние режимных и конструктивных параметров на эффективность аэродинамической классификации // Изв. вузов. Химия и хим. технология. – 2012. – Т. 55. – Вып. 1. – С. 108–111.
6. Бабуха Г.Л., Рабинович М.И. Механика и теплообмен потоков полидисперсной газовой смеси. – Киев: Наук. думка, 1969.
7. Palaniandy S., Azizli K., Hussin H., Hashim S. Effect of operational parameters on the breakage mechanism of silica in a jet mill // Minerals Engineering. – 2008. – 21. – P. 128–136.
8. Zhukov V., Mizonov V., Filitchev P., Bernotat S. Application of the principle of maximum entropy to model grinding kinetics // Powder Technology. – 1998. – 95. – P. 248–253.

References

1. Vulis, L.A. *Teoriya i raschet magnetogazodinamicheskikh techeniy v kanalakh* [Theory and calculation of magnetogasdynamic flows in channels], Moscow, Atomizdat, 1971.
2. Vedenyapin, V.V. *Kineticheskoe uravnenie Boltzmana i Vlasova* [The Boltzmann-Vlasov kinetic equation], Moscow, Fizmatlit, 2001.
3. Mizonov, V., Zhukov, V., Bernotat, S. Simulation of Grinding: New Approaches, Ivanovo, 1997.
4. Belyakov, A.N., Zhukov, V.P., Vlasjuk, A.A., Barochkin, A.E. Svidetel'stvo o gosudarstvennoy registratsii programmy dlya EVM [Certificate of state registration of computer program], no. 2010612671, 2010.
5. Belyakov, A.N., Zhukov, V.P. Vliyaniye rezhimnykh i konstruktivnykh parametrov na effektivnost' aerodinamicheskoy klassifikatsii [Influence of operating and design parameters on the aerodynamic classification efficiency]. *Izvestiya vuzov. Khimiya i khimicheskaya tekhnologiya*, 2012, vol. 55, issue 1, pp. 108–111.
6. Babukha, G.L., Rabinovich, M.I. *Mekhanika i teploobmen potokov polidispersnoy gazovzvesi* [Mechanics and heat exchange of polydispersed gas mixture flows]. Kiev, Naukova dumka, 1969.
7. Palaniandy, S., Azizli, K., Hussin, H., Hashim, S. Effect of operational parameters on the breakage mechanism of silica in a jet mill. *Minerals Engineering*, 2008, 21.
8. Zhukov, V., Mizonov, V., Filitchev, P., Bernotat, S. Application of the principle of maximum entropy to model grinding kinetics. *Powder Technology*, 1998, 95, pp. 248–253.