На правах рукописи

Дьяченко Евгений Николаевич

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОРИСТЫХ СТРУКТУР И ФИЛЬТРОВАНИЯ СУСПЕНЗИИ МЕТОДОМ ДИСКРЕТНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

01.02.05 – Механика жидкости газа и плазмы

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Томск – 2010

Работа выполнена на кафедре математической физики Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Томский государственный университет»

Научный руководитель:	кандидат физико-математических наук, доцент Миньков Леонид Леонидович
Научный консультант:	doctor rerum naturalium Johann Dueck (Университет Эрланген-Нюрнберг, г. Эрланген, Германия)
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, профессор Воеводин Анатолий Федорович,
	доктор физико-математических наук, профессор Старченко Александр Васильевич
Ведущая организация:	Институт прикладной механики УрО РАН, г. Ижевск

Защита состоится 24 сентября 2010 г. на заседании диссертационного совета Д 212.267.13 при ГОУ ВПО «Томский государственный университет» по адресу: 634010, г. Томск, пр. Ленина 36, 10 корпус.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке ГОУ ВПО «Томский государственный университет» по адресу: 634010, г. Томск, пр. Ленина 34а.

Автореферат разослан «30» июля 2010 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета
доктор технических наук Ю.Ф.Христенко

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Предметом исследования настоящей работы является процесс фильтрования суспензии, который включает в себя ряд других процессов: фильтрацию жидкости, осаждение частиц на фильтре и образование слоя седимента за счет механического блокирования и сил адгезии, седиментацию, коагуляцию частиц. При этом учитываются силы, возникающие ввиду наличия жидкой среды между частицами твердого материала.

Актуальность темы

Фильтрование нашло широкое применение во многих отраслях промышленности для сгущения твердой фазы суспензии и осветления жидкостей, в том числе сбросовых вод промышленных предприятий (например, целлюлозно-бумажных, угледобывающих) и коммунального хозяйства.

Ввиду того, что за последние десять лет требования на величину нижнего предела по содержанию твердой примеси в сбросовых водах уменьшились на порядок, имеется необходимость разработки новых моделей фильтрования суспензий, которые с использованием современных супервычислительных ресурсов позволят провести оптимизацию характеристик очистных сооружений и их режимов работы. При этом дальнейшее использование насыпных и тканевых фильтров обусловлено их высокой энеркоэффективностью, по сравнению с другими способами очистки воды (например, гидроциклонированием).

Задача фильтрования суспензии, в виду своей природной сложности, до сих пор решалась лишь в приближении механики сплошных сред, при этом пренебрегались явления, которые происходят на микроуровне - уровне отдельных частиц и пор. Физико-химические эффекты, возникающие ввиду наличия поверхностных зарядов, и гидрофобность/гидрофильность частиц суспензии или слоя фильтра так же не включались в классические модели фильтрования. В рамках данной работы разработана новая модель фильтрования, в которую включаются указанные выше аспекта, с целью более адекватного описания этого процесса.

Особое внимание при этом необходимо уделить структуре пористых сред насыпных фильтров и слоя седимента, который образуется в процессе фильтрования и на котором, по сути, продолжается процесс, поскольку структура определяет скорость

фильтрования и другие характеристики процесса. С другой стороны, сама структура слоя зависит от скорости фильтрования.

Цели и задачи исследований

- разработка численной модели формирования пористых слоев, процессов фильтрования на тканевых и насыпных фильтрах; реализация этой модели в виде программы для ЭВМ, ее верификация при помощи экспериментальных данных;
- выявление закономерностей процессов формирования пористых слоев; исследование характеристики слоев, сформированных при различных уровнях адгезии и гранулометрических составах порошков;
- получение закономерностей процесса фильтрования на тканевых и насыпных фильтрах.

Научная новизна

1. Разработана статическая и динамическая модель формирования пористых сред.
2. Получены научные результаты по поведению частиц и структур на микроуровне, которые были недоступны ранее в виду недостаточной вычислительной мощности ЭВМ и при использовании классических подходов механики сплошных сред.
3. На основе метода дискретных элементов разработана численная модель фильтрования суспензии на насыпных фильтрах.
4. Получены результаты моделирования фильтрования суспензии, показывающие пути увеличения производительности фильтров и оптимизации их работы.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Численная модель формирования пористых гранулированных сред; численная модель процесса фильтрования суспензий на тканевых и насыпных фильтрах при малых числах Рейнольдса.
2. Методика лучевой идентификации пор и измерения анизотропии при трехмерном моделировании пористых сред.
3. Результаты численных расчетов параметров пористых сред.
4. Результаты моделирования фильтрования суспензии.

Теоретическая и практическая значимость

1. Полученные результаты являются новыми и дают представление о структуре пористых гранулированных сред на микро- и мезоуровне и протекании процесса фильтрования.

2. Приведенные теоретические положения могут быть использованы при численном моделировании фильтрования.
3. Представлена методика численного решения задачи фильтрования в виде программного комплекса [1,2] для персонального компьютера (статическая модель) и кластерных ЭВМ (динамическая модель).
4. Результаты моделирования могут быть использованы для оптимизации характеристик очистных сооружений и их режимов работы. Эти результаты представляются качественными зависимостями глубины проникновения частиц примеси в фильтр, степени очистки, грязеёмкости фильтра от соотношения размеров частиц фильтрующего материала и частиц примеси, сил адгезии между частицами
5. Полученные результаты относительно колебания локальной пористости у стенок контейнера, структуры пор для случаев наличия и отсутствия адгезионной силы между шарами упаковки, анизотропии структуры упаковки, связанной с действием адгезии, повышения пористости упаковки при наличии адгезии имеют большое теоретическое значение для изучения таких процессов, как горение порошкового топлива, СВС, химических процессов, протекающих вблизи границ контейнера.
6. Получены данные, которые могут быть использованы для создания порошковых материалов с заданной пористостью или наименьшей возможной, а именно, определены роли сил адгезии и гранулометрического состава смеси порошков (средний размер частиц каждой фракции и ее доля, «размытость» распределения частиц по размерам) на величину пористости упаковки.

Метод исследований

В качестве основного инструмента для численного моделирования был выбран современный метод дискретных элементов (DEM). Этот метод имеет принципиальные отличия от используемых на практике более полувека и малоприменимых к рассматриваемой задаче расчетных схем, основанных на подходах механики сплошной среды. Ввиду того, что задача является крайне сложной: в рассмотрение входит огромное количество частиц, различные физические силы взаимодействия между частицами и между частицами и средой – поиски численного решения возможны только на современных

кластерных компьютерах, таких например, как СКИФ Cyberia Томского государственного университета.

Достоверность результатов

обеспечивается следующим:

- построенные физико-математические модели базируются на фундаментальных законах механики;
- все полученные численные решения обладают свойствами сходимости и устойчивости;
- полученные численные результаты согласуются с экспериментальными данными, не противоречат результатам других авторов;
- результаты тестовой задачи динамической модели хорошо согласуются с аналитическим решением;
- наблюдается идентичность результатов, которые были получены двумя различными методами моделирования – статическим и динамическим.

Апробация работы

Основные результаты работы докладывались на международных конференциях:

- международная школа-конференция молодых ученых «Физика и химия наноматериалов» (Томск, Россия, 2005 г.);
- международный конгресс технологии частиц, International Congress on Particle Technology (Нюрнберг, Германия, 2007 г.);
- Filtech 2007 (Висбаден, Германия, 2007 г.);
- XXII Международная конференция «Воздействие интенсивных потоков энергии на вещество» (Эльбрус, 2007 г.);

и всероссийских конференциях:

- Всероссийская научная конференция «Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики» (Томск, 2004 г.);
- III всероссийская конференция молодых ученых «Физика и химия высокоэнергетических систем» (Томск, 2007 г.);
- IV всероссийская конференция молодых ученых «Физика и химия высокоэнергетических систем» (Томск, 2008 г.);
- VI Всероссийская научная конференция «Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики» (Томск, 2008 г.);
- Пятая сибирская конференция по параллельным и высокопроизводительным вычисления (Томск, 2009 г.).

В 2009 году так же был сделан доклад на кафедре инженерной экологии и переработки университета Эрланген-Нюрнберг.

Опубликовано 8 статей в ведущих российских и международных рецензируемых журналах, относящихся к перечню ВАК, получено 6 авторских свидетельства на программные разработки. Полный список печатных работ автора включает 32 публикации.

Вклад автора

При получении результатов представляемой к защите работы автором сделан определяющий вклад, включающий в себя участие в постановке задачи, разработку методики численного моделирования, реализацию программы вычислений для персональных компьютеров, распараллеливание алгоритма, реализацию программы для супервычислительных кластеров, получение численных результатов, участие в анализе результатов и верификацию полученных результатов при помощи экспериментальных данных.

Благодарности

Автор благодарен своему научному руководителю Леониду Леонидовичу Минькову за руководство, бесценные советы и помощь в исследованиях.

Большой вклад в работу внес доктор Johann Dueck из Фридерико-Александровского университета Эрланген-Нюрнберг – за что автор выражает ему глубокую признательность.

Благодаря профессору Томасу Нессе появилась возможность проводить данные исследования на кафедре инженерной экологии и переработки в Университете Эрланген-Нюрнберг (Германия) при непосредственном участии автора.

Исследование было выполнено при финансовой поддержке стипендии Президента РФ для обучения за рубежом (2008 г.), Германской службы академических обменов DAAD и Министерства образования и науки РФ (стипендия двухмесячной стажировки студентов 2005 г., стипендии Леонарда Эйлера 2009 г., Михаила Ломоносова II 2010 г., гранта ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России»), научно-образовательного центра «Физика-химия высокоэнергетических систем», американского фонда гражданских исследований и разработки CRDF.

Объём и структура работы

Диссертация состоит из введения, 3-х глав и заключения. Полный объем диссертации составляет 166 с. Список источников литературы 13 с. и содержит 126 названий.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность и практическая значимость проводимых в диссертации исследований, сформулированы цели и задачи, перечислены основные научные результаты, представлены положения, выносимые на защиту, описана структура диссертации.

Первая глава носит обзорный характер. В ней рассматриваются источники по фильтрованию суспензий, а также аспекты, которые необходимы для численного моделирования фильтрования: фильтрация жидкости, оседание частиц на фильтре, седиментация частиц суспензии, силы, которые действуют между твердыми частицами суспензии; так же подробно рассматривается выбранный метод моделирования – метод дискретных элементов. В рамках данного метода выделено два подхода к моделированию дисперсных систем: статический (в некоторых источниках называется «кинематический») и динамический.

Вторая глава посвящена статическому методу моделирования процессов упаковки, седиментации и фильтрации частиц.

Суть этого метода заключается в последовательном запуске частиц сферической формы со случайно выбранной координатой на верхней грани куба с ребром единичной длины в направлении его дна. В процессе движения частица может столкнуться с уже осевшими ранее частицами или достигнуть дна контейнера.

Принимается, что в рассматриваемый момент времени может двигаться только текущая рассматриваемая частица, а все другие, которые оказались в контейнере ранее, не могут менять свое положение. Это значительное упрощение вызвано необходимостью сокращения вычислительных затрат, но, к сожалению, оно влечет за собой отсутствие в модели таких физических эффектов как уплотнение структуры частиц под действием внешних сил и уплотнение нижних слоев под весом вышележащего слоя. Хотя последнее можно моделировать опосредованно, прибавляя к весу текущей частицы вес слоя, который предположительно будет образован выше.

Начальная скорость оседания для всех частиц задается одинаковая. После создания сферы на верхней грани, производится слежение за ее положением. Начальные координаты x и y сферы определяются генератором случайных чисел.

Предполагается, что на частицу, находящуюся в точке (x, y, z), могут действовать следующие силы:

1. Сила адгезии, которую можно записать в виде:

$$F_{ad} = \frac{A}{6H^2} r, \qquad (1)$$

где A — константа Гамакера; H – расстояние между поверхностями взаимодействующих частиц (обычно межмолекулярное расстояние), $r = \frac{2r_i r_j}{r_i + r_j}$ – эффективный радиус двух частиц.

2. Сила гидродинамического увлечения частицы потоком (в случае моделирования образования осадка при фильтрации), например, записанная в виде силы Стокса:

$$F_{st} = 6\pi\mu r v, \qquad (2)$$

где μ — вязкость жидкости; v — скорость потока.

3. Сила тяжести частицы. Ее проекция на плоскость касания есть $mg\cos(\alpha)$, где α — угол между прямой, проходящей через центры взаимодействующих сфер, и горизонтальной плоскостью. Учет тяжести свода упаковки производится прибавлением к весу частицы веса вышележащих слоев $m + m(1-z)\langle\varepsilon\rangle$, где $\langle\varepsilon\rangle$ — средняя пористость слоя между z (положением рассматриваемого слоя по оси Oz) и 1. В случае зависимости ε от z (имеет место при наличии адгезионных сил) для нахождения $\langle\varepsilon\rangle$ применяются итерации.

Частица может остановиться в трех случаях:

1. при достижении нижней грани куба;
2. при столкновении с другими частицами и боковыми гранями куба так, что образуются три точки опоры, и в проекции на плоскость XY центр сферы находится внутри треугольника, образованного этими тремя точками опоры;
3. при прилипании к другим частицам в результате действия адгезионных сил.

При столкновении частица с одной из уже осевших частиц между ними происходит адгезионное взаимодействие, в результате которого

рассматриваемая частица может либо прилипнуть к уже осевшей частице, либо изменить вектор своей скорости и продолжить движение. Условие остановки (прилипания) частицы определяется равновесием сил, действующих вдоль поверхности контакта. В общем случае условие равновесия можно записать в виде критического значения для угла: $\cos(\alpha) < K_{ad}$, где K_{ad} — коэффициент адгезии, представляющий собой отношение сил, удерживающих частицу на поверхности и пытающихся сдвинуть ее с места. Если частица не прилипла, то она продолжает свое движение по касательной к поверхности осевшего шара со скоростью, определяемой по формуле: $\vec{v}' = \vec{v} - \vec{n}(\vec{v}\vec{n})$, где $\vec{v}'$ — скорость частицы после столкновения; $\vec{v}$ — скорость частицы до столкновения; $\vec{n}$ — единичный вектор, выходящий из центра осевшего шара к центру движущегося шара.

В данной модели рассматривается возможность заполнять куб совокупностями частиц трех видов:

- монодисперсной – все частицы одинакового размера;
- бидисперсной – каждая из частиц имеет один из двух заданных размеров, задается объемная (или массовая) доля мелких частиц;
- полидисперсной.

В качестве функции распределения дисперсных частиц обычно применяют функцию RRSB (Rosin–Rammler–Sperling–Bennett):

$$Q_i(r) = 1 - \exp\left[-\left(\frac{r}{r_m}\right)^a\right]. \qquad (3)$$

При рассмотрении двухмерной упаковки дисков не представляет особой сложности определить пору, ее границу, форму и прочие характеристики, считая, что пора образуется замкнутым контуром. В трехмерной постановке границу поры определить крайне тяжело, так как все поры связаны между собой полостями упаковки.

Для того чтобы иметь возможность оценивать параметры пор, вводится понятие прерывистости – одномерного аналога пористости. В выбранном направлении проведем прямую и будем вести подсчет, сколько вдоль этой прямой встречалось полостей и какой длины они были. Длины этих полостей можно рассматривать как длины пор в выбранном направлении.

На Рисунке 1 представлены данные о пористости монодисперсной упаковки в зависимости от расстояния до стенки и экспериментальные точки (Brauer H. Grundlagen der Einphasen- und Mehrphasenstromungen / H. Brauer. – Aarau: Sauerlander. – 1971. - 955 p.), по оси абсцисс отложено расстояние от стенки, выраженное в диамертах частиц. Видно, что расчетные данные качественно согласуются с результатами эксперимента.

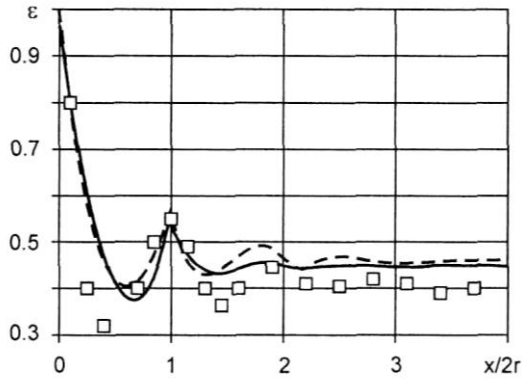

Рисунок 1 – Пористость монодисперсной упаковки в зависимости от расстояния до стенки. Квадратные символы — экспериментальные данные; линии-расчеты: сплошная — в направлении X, пунктирная — в направлении Z

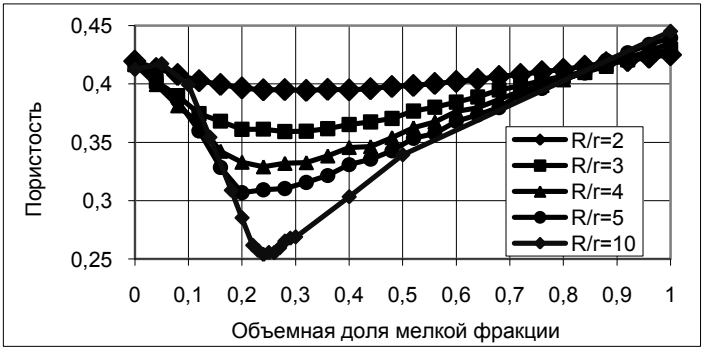

Рисунок 2 - Зависимость пористости бидисперсной упаковки от объемной доли мелкой фракции V_r/V для различных соотношений размеров части R/r

На рисунке 2 показана зависимость пористости бидисперсной упаковки от объемной доли мелкой фракции V_r/V для различных

соотношений размеров части R/r. Видно, что зависимость пористости бидисперсной упаковки от объемной доли мелкой фракции имеет минимум при V_r/V от 0.2 до 0.4. Для соотношения размеров частиц R/r = 10 минимум имеет значение пористости 0.25, что на 40 % меньше, чем для монодисперсной упаковки. Этот минимум наблюдается при доле мелкой фракции V_r/V = 0.24.

Проанализирована структура пор для случаев наличия и отсутствия адгезионной силы между частицами упаковки. Обнаружена анизотропия структуры упаковки, связанная с действием адгезии. Подтверждено известное из экспериментов повышение пористости упаковки при наличии адгезии. Показана роль «размытости» распределения частиц по размерам на величину пористости упаковки. Изучена зависимость координационных чисел упаковок от различных параметров, которая имеет большое значение для задач теплопроводности и расчетов на прочность пористых материалов.

Кроме того, выявлены зависимости локальной пористости моно-, би- и полидисперсных упаковок частиц от расстояния до границ контейнера для широкого диапазона коэффициента адгезии и гранулометрического состава; зависимость пористости упаковки от уровня адгезии и гранулометрического состава смеси частиц (размеры и доля каждой фракции либо дисперсия для полидисперсного случая) для различных уровней адгезии.

Проведено моделирование осаждения твердых частиц в насыпных фильтрах. Очистка жидкости (газа) от примеси твердых частиц осуществляется, как правило, фильтрованием через слой пористой среды, разновидностью которого является насыпной фильтр.

Задача фильтрования суспензии в пористых средах распадается на две части. В первой рассматривается движение жидкости в фильтрационных каналах – фильтрация. Перепад давления в слое фильтра толщиной dx, вызванный движением в ней жидкости можно оценить по формуле Эргуна:

$$dp = \left[\frac{150\mu_l u(1-\varepsilon)^2}{D_f{}^2\varepsilon^3} + \frac{1.75\rho_l u^2(1-\varepsilon)}{D_f\varepsilon^3} \right] dx, \qquad (4)$$

где μ_l, ρ_l – вязкость и плотность жидкости; D_f – диаметр частиц фильтрационного материала; ε – пористость фильтра.

Описание процессов формирования насыпного слоя фильтра, блокирующего слоя частиц являются второй частью задачи фильтрования суспензии.

На рисунке 3 показана зависимость степени осаждения N от соотношения размеров частиц фильтрационного материала R и размера частиц примеси r за время формирования блокирующего слоя. Здесь $N=n_1/n_2 \cdot 100$ % (n_1 – число задержанных частиц примеси в фильтре, n_2 – число частиц примеси входящих в фильтр); кривая 1 соответствует расчету при коэффициенте адгезии равным K_{ad} =0.5; кривая 2 – K_{ad} =0.2; кривая 3 – K_{ad} =0.

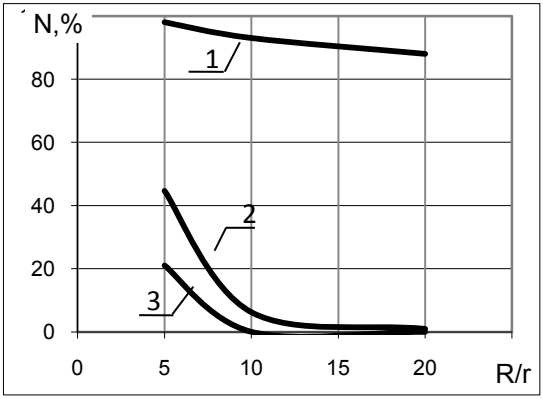

Рисунок 3 – Зависимость степени осаждения от соотношения размера частиц

Если размер частиц много меньше сечения фильтрационного канала, то степень осаждения зависит, в основном, от коэффициента адгезии. При слабых адгезионных свойствах частицы примеси не образуют блокирующего слоя, они оседают по всему объему фильтра. Это приводит к увеличению грязеёмкости, но степень осаждения уменьшается, т.к. значительное количество частиц проходит сквозь фильтрационный слой. Так в приведенном расчете (рисунок 3, кривая 2 при R/r =10 и K_{ad} =0.2) число задержанных частиц примеси составляет 7 % от числа поступивших на фильтр.

В реальности частицы примеси представляют собой полидисперсный ансамбль; моделирование этого случая проведено следующим образом. Первоначально формируется насыпной слой, состоящий из твердых частиц радиуса R. Расчетный объем

заполняется на половину (z=0.5), коэффициент адгезии между частицами фильтрационного материала задается K_{ad}=0. Затем «рассеиваются» частицы примеси трех размеров $r_1=R/2$, $r_2=R/5$, $r_3=R/10$. Массовое содержание трех фракций одинаковое, коэффициент адгезии между частицами примеси и частицами фильтрационного материала задается K_{ad} = 0.3.

Рисунок 4 иллюстрирует степень осаждения от времени работы фильтра при указанных условиях; обезразмеривание проводится по времени заполнения расчетного объема частицами примеси. Так на начальном этапе работы в фильтре задерживалось только 30% частиц примеси, затем в моменты времени T>0.4 степень фильтрации достигает более 95 %, и дальнейшая работа фильтра регламентируется перепадом давления несущей среды в пористом слое, который состоит из частиц фильтрационного материала и примеси.

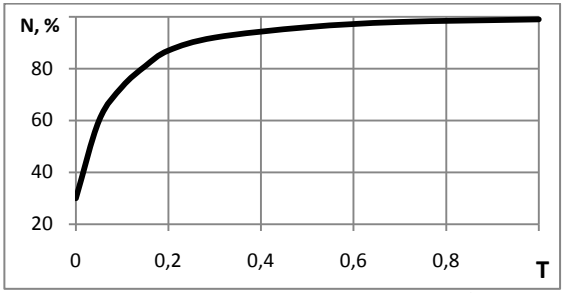

Рисунок 4 – Степень осаждения от времени работы фильтра

Кроме того, на базе разработанной методики создан программный инструмент для генерации структур композиционных материлов со сферическими включениями.

Третья глава посвящена динамическому моделированию седиментации и фильтрования суспензии.

Скорость седиментации зависит от массы, размера, формы и плотности вещества частицы, от вязкости и плотности среды, а также от внешних массовых сил. В поле гравитационных сил седиментируют частицы мелкодисперсных систем; в поле центробежных сил возможна седиментация коллоидных частиц и макромолекул. Седиментацию используют в промышленности при обогащении

полезных ископаемых, различных продуктов химической и нефтехимической технологии, при водоочистке и др.

Фильтр-прессы применяются для фильтрации широкого класса суспензий, а также они пригодны для разделения суспензий с небольшой концентрацией твердых частиц и суспензий с повышенной температурой, охлаждение которых недопустимо вследствие выпадения кристаллов из жидкости.

Математическая постановка формулируется в терминах метода дискретных элементов. Полагается, что все частицы в данном рассмотрении имеют сферическую форму.

Для каждой частицы решается уравнение движения:

$$\frac{\vec{F}_i}{m_i} = \frac{d^2\vec{x}_i}{dt^2}, \tag{5}$$

где m_i – масса частицы: $m_i = \rho\pi r_i^3 4/3$, t – время, $\vec{F}_i$ – результирующая сила, действующая на частицу, $\vec{x}_i$ – положение центра частицы в пространстве, ρ – плотность материала частиц.

Если частица i в некоторый момент времени касается других частиц и/или границ расчетной области в количестве N_i штук, тогда сила $\vec{F}_i$ выражается в виде:

$$\vec{F}_i = \sum_{j=1}^{N_i}\left(\vec{f}(\vec{x}_i,\vec{x}_j,r_i,r_j) + \vec{F}_{ad}(r_i,r_j)\right) + \vec{F}_{fr,i} + \vec{F}_{sh} + \vec{g}m_i + \vec{F}_{st,i}, \tag{6}$$

где $\vec{g}$ – ускорение свободного падения, r_i – радиус частицы i,

$\vec{F}_{ad}(r_i,r_j)$ – сила адгезии двух частиц, находящихся в контакте,

$\vec{F}_{fr,i}$ – обобщенная сила трения скольжения и качения,

$\vec{F}_{st,i}$ – сила сопротивления движению, вычисляемая по закону Стокса с учетом поправки Эйнштейна к вязкости,

$\vec{F}_{sh} = \vec{F}_{sh}(t)$ – сила, обусловленная утряской и изменяющаяся во времени, например, по гармоническому закону,

$\vec{f}(\vec{x}_i,\vec{x}_j,r_i,r_j)$ – сила упругого взаимодействия двух частиц i и j может быть найдена из решения задачи Коши для упругих шаров – задачи Герца.

Поскольку задача решается в терминах дискретных элементов, граничные условия должны быть сформулированы в тех же терминах. Рассмотрим расчетную область в виде прямоугольного параллелепипеда, с основанием 1 на 1 единиц длины и необходимой высотой. Границы контейнера представляются частью поверхностей псевдочастич с радиусами $r=r_{bound}>>1$, (где r_{bound} – константа, величина которой определяется из тех соображений, что в рамках рассматриваемого куба отклонение поверхности сферы от плоскости незначительно, например, $r_{bound}=1000$) и координатами:

1. (0.5, 0.5, - r_{bound}) – частица снизу;
2. (-r_{bound}, 0.5,0.5) – частица слева;
3. (r_{bound}+1;0.5, 0.5) – частица справа;
4. (0.5, -r_{bound}, 0.5) – частица сзади;
5. (0.5, r_{bound}+1, 0.5) – частица спереди.

Граничные условия формулируются в виде следующих условий на граничных частицах:

1)-5) $\vec{x}_{bi} = const$ – положение псевдочастиц не меняется;

1)-5) $\left|\vec{v}_{bi}\right| = 0$; $\left|\vec{a}_{bi}\right| = 0$ – скорость и ускорения равны нулю;

2)-5) $\left|\vec{F}_{fr}\right|_{x=0,x=1,y=0,y=1} = 0$ – сила трения на границах 2-5 равна нулю;

6) $\vec{x}_{b6}\big|_{t=0} = r_{bound} + h$ – начальное положение частицы.

Для моделирования процесса прессовки можно использовать шестую псевдочастицу, которая должна располагаться сверху расчетного куба и с определенной силой давить на нижележащие частицы.

Граничное условие по скорости поршня может быть записано двумя способами:

1. Движение с постоянной скоростью:

$$\vec{v}_{b6} = \begin{cases} (0,0,v_{press}), & P_{part} < P_{press}; \\ (0,0,0), & P_{part} \geq P_{press}; \end{cases}$$

где v_{press} – заданная постоянная скорость поршня, P_{part} – давление на поршень со стороны частиц суспензии, P_{press} – внешнее постоянное давление на поршень.

2. В случае движения поршня с постоянным давлением скорость движения поршня определяется из закона Дарси:

$$v_p = k_D \frac{\Delta p}{\mu h}, \tag{7}$$

где v_p – скорость движения жидкости, а, следовательно, и скорость движения поршня, Δp – перепад давления на слое h (в данном случае высота слоя частиц), μ – вязкость жидкости, k_D – коэффициент фильтрации Дарси, который для насыпного слоя частиц радиусом r и пористости слоя ε определяется как:

$$k_D = \frac{r^2 \varepsilon^3}{37.5 \cdot (1-\varepsilon)^2}. \tag{8}$$

Перепад давления Δp определяется как разность между заданным давлением поршня и давлением, которое частицы слоя оказывают на поршень: $\Delta p = p_{press} - p_{part}$.

Давление частиц на поршень выражается уравнением:

$$p_{part} = \sum_{j=1}^{N_p} f_{pj} / S_{press}, \tag{9}$$

где N_p – количество частиц, которое касается поршня, f_{ij} – сила, с которой частицы упруго взаимодействую с поршнем, S_{press} – площадь поршня.

Начальные координаты частиц задаются случайным образом:

$$\vec{x}_{i,initial} = random; \qquad \vec{v}_{i,initial} = 0; \qquad \vec{a}_{i,initial} = 0; \tag{10}$$

где *random* – случайное вещественное число от 0 до 1 с равномерным законом распределения.

При этом проверяется условие непересечения частиц для любых *i* и *j*: $\left|\vec{x}_i - \vec{x}_j\right| > r_i + r_j$.

Была проведена верификация модели сравнением с аналитическим решением.

При моделирование седиментации рассматривалась система из 2000, 4000, 6000, 8000 или 10000 частиц с характеристиками: r = 0.05 мм, модуль Юнга E = 100 ГПа, g = 9.8 м/с^2, k_{fr} = 0.1, K_{ad} = 100 Н/м, ρ = 2500 кг/м^3, μ = 1·10^{-3} Па·с.

На Рисунке 5 представлена зависимость средней пористости седимента от высоты слоя.

Видно, что при увеличении высоты слоя пористость падает, что объяснимо: с увеличением высоты увеличивается масса частиц в верхних слоях седимента, эта масса давит на нижележащие уровни и уплотняет их. Расчетные данные находятся в качественном согласии с результатами натурного эксперимента (Дик И.Г. К теории пористости мелкозернистых седиментов. / И.Г. Дик, Д. Пурэвжав, Д.Ю. Килимник //Инженерно-физический журнал. – 2004. – №1. – С. 77-85.) .

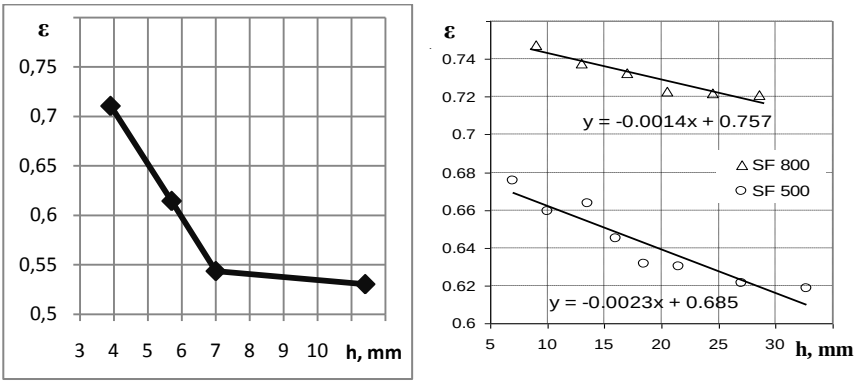

Рисунок 5 – Зависимости пористости от высоты слоя: результаты расчетов (слева) и экспериментальные данные (справа)

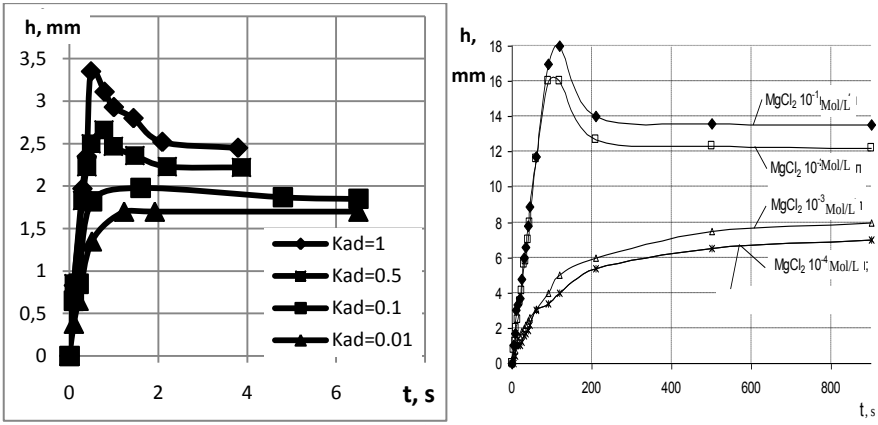

Рисунок 6 – Динамика роста слоя седимента (результаты моделирования) : результаты расчетов (слева) и экспериментальные данные (справа)

На Рисунке 6 показано сравнение результатов моделирования динамики роста седименты с результатами натурного эксперимента

(тот же источник). Видно качественное сходство полученных результатов. Добиться количественного совпадения результатов с экспериментами не удалось ввиду того, что в эксперименте присутствует на порядки больше частиц со значительно меньшими размерами.

При моделировании седиментации бидисперсной суспензии рассматривалась система 4000 частиц с характеристиками: E = 100 ГПа, k_{fr} = 0.2, K_{ad} = 100 Н/м, ρ = 2500 кг/м^3, μ = 1·10^{-3} Па·с. Все частицы имели два размера r = 0.0025мм, R = 0.05 мм, т.о. R/r = 2. Начальная высота суспензии – 10 мм, начальная концентрация мелких и крупных частиц равна друг другу и равна C_1=C_2=2.5 %, распределение и мелких и крупных частиц в начальный момент времени принимается равномерным по всему объему.

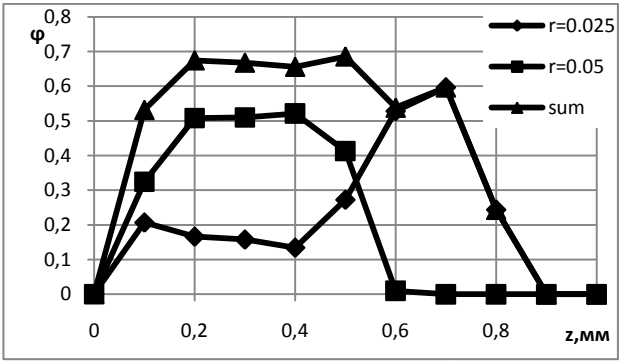

Рисунок 7 – Распределение концентрации частиц суспензии (мелкой и крупной фракции) по высоте слоя в момент времени 40 с (K_{ad} = 0 Н/м)

На Рисунке 7 представлено распределение концентрации по высоте мелкой и крупной фракции в момент времени, когда все частицы осели. Видно значительное разделение фракций по высоте слоя: внизу расположены крупные частицы, сверху – мелкие.

Для случая наличия значительных сил адгезии (K_{ad} = 100 Н/м) наблюдалось явление хлопьеобразование, расслоение слоя седимента по фракциям практически отсутствовало. Эти результаты качественно совпадают с экспериментальными данными.

Проведено моделирование фильтрации в пресс-фильтре при тех же значениях параметров процесса и внешнем давлении на поршень 1 МПа. На рисунке 8 представлена зависимость распределения

плотности слоя по высоты для различных времен. Из рисунка 8 видно, что в момент времени 3 с, до того, как поршень начал действовать на слой, плотность уменьшается с увеличением высоты. После процесса фильтрации плотность слоя стала примерно равной 0.6.

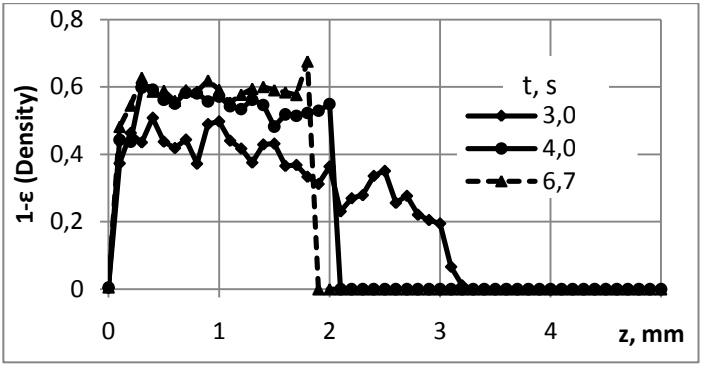

Рисунок 8 – Распределение плотности слоя по высоте

В заключении диссертации сформулированы основные результаты и выводы, полученные в работе.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В работе получены следующие результаты.

1. Разработана методика моделирования формирования пористых слоев. Данная методика реализована в виде программы для персонального компьютера (статическая модель) и для супервычислительного кластера (динамическая модель).
2. Получена зависимость локальной пористости моно-, би- и полидисперсных упаковок частиц от удаления от границ контейнера для различных параметров упаковок. Получена зависимость пористости упаковки от уровня адгезии и гранулометрического состава смеси частиц (размеры и доля каждой фракции либо дисперсия для полидисперсного случая) для различных уровней адгезии.
3. Предложена методика лучевой идентификации пор в трехмерном моделировании и получены зависимости распределения длин пор для различных значений параметров упаковок. Создана методика измерения анизотропии упаковки и получены данные по

анизотропии упаковок с различными значениями параметров (гранулометрический состав, коэффициент адгезии).

4. Получены данные по координационным числам для частиц упаковок в зависимости от гранулометрического состава и уровня адгезии частиц.
5. Получены зависимости глубины проникновения частиц примеси в фильтр, степени очистки, грязеёмкости фильтра от соотношения размеров частиц фильтрующего материала и частиц примеси, сил адгезии между частицами.
6. Получены качественные данные по динамике протекания процессов седиментации и осветления жидкости в фильтр-прессе (распределение плотности и давления слоев седимента), недоступные ранее из экспериментов.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Дьяченко Е.Н. Моделирование образования двухмерного насыпного слоя / И.Г. Дик, Е.Н. Дьяченко, Л.Л. Минков // Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики : доклады IV Всероссийской научной конференции. – Томск : Изд-во ТГУ. – 2004. – С. 295-297.
2. **Дьяченко Е.Н. Компьютерное моделирование случайных упаковок дисков / Е.Н. Дьяченко, Л.Л. Миньков, И.Г. Дик // Изв. ВУЗов «Физика». – 2005. – Вып. 11. – С. 83-91.**
3. Дьяченко Е.Н. Численное моделирование пористости насыпного слоя фильтра // Физика и химия наноматериалов : сборник материалов международной школы-конференции молодых ученых. – Томск : Изд-во ТГУ. – С. 855-857.
4. **Дьяченко Е.Н. Моделирование случайной упаковки шаров / И.Г. Дик, Е.Н. Дьяченко, Л.Л. Миньков // Физическая мезомеханика. – 2006. – Т. 9, № 4. – С. 63-69.**
5. **Дьяченко Е.Н. Генерация структуры композиционных материалов со сферическими включениями / Л.Л. Миньков, А.В. Коношонкин, Е.Н. Дьяченко // Изв. ВУЗов «Физика». – 2007. – №9. – С. 136-140.**
6. **Diatschenko E. Computersimulation von Filterkuchenstrukturen / J. Dueck, E. Diatschenko, Th. Neesse // Chemie Ingenieur Technik. – 2007. – N 11. – Pp. 1913-1919.**
7. **Дьяченко Е.Н. Моделирование процесса осветления жидкости на слое насыпного фильтра / Н.Н. Дьяченко, Е.Н. Дьяченко // Изв. ВУЗов “Горный журнал”. – 2007. – №4. – С. 112-114.**

8. Diatschenko E. Computer Simulation of filter cake structure / J. Dueck, Th. Neesse, E. Diatschenko, L. Minkov // Filtech 2007 : conference proceedings. – 2007. – V.1. – Pp. 62-70.
9. Дьяченко Е.Н. Разработка модели материала со стохастической структурой для расчетов технологических процессов порошковой металлургии / Е.Н. Дьяченко, В.А. Скрипняк, И.Г. Дик // Сборник материалов III всероссийской конференции молодых ученых «Физика и химия высокоэнергетических систем». – Томск: Изд-во ТГУ. – 2007. – С. 154-156.
10. Дьяченко Е.Н. Pora3D: программа моделирования процессов упаковки, фильтрации, засыпки и напыления. М.: ВНТИЦ. – 2007. – №50200701104.
11. Дьяченко Е.Н. SpherStruct: программа генерации структур стохастических композиционных материалов со сферическими включениями / А.В. Коношонкин, Е.Н. Дьяченко. М.: ВНТИЦ. – 2007. – №50200701679.
12. Дьяченко Е.Н. ComplexCalc: модуль интерпретации строковых комплексных выражений. М.: ВНТИЦ. – 2007. - №50200701217.
13. Дьяченко Е.Н. GridVisualizator: программа визуализации результатов расчетов методом конечных элементов / Сержантов Т.М., Дьяченко Е.Н. М.: ВНТИЦ. – 2007. — №50200701678.
14. **Дьяченко Е.Н. Компьютерное моделирование осаждения твердых частиц в насыпных фильтрах / Н.Н. Дьяченко, Е.Н. Дьяченко // Изв. ВУЗов «Горный журнал». – 2008. – №8. – С. 80-83.**
15. **Дьяченко Е.Н. Моделирования полидисперсных упаковок сферических частиц // Изв. ВУЗов "Физика". – 2008. – №8/2. – С. 153-156.**
16. Дьяченко Е.Н. Компьютерное моделирование фильтрации жидкости в насыпных фильтрах // Сборник материалов IV всероссийская конференция молодых ученых «Физика и химия высокоэнергетических систем». – Томск: Изд-во ТГУ. – 2008. – С. 342-344.
17. Дьяченко Е.Н. Компьютерное моделирование формирования блокирующего слоя в насыпных фильтрах / Е.Н. Дьяченко, Н.Н. Дьяченко, Л.Л. Миньков // Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики : доклады VI Всероссийской научной конференции. – Томск: Изд-во ТГУ. – 2008 г. – С. 363-364.
18. **Djatchenko E. Simulation of filter cake porosity in solid/liquid separation / Th. Neesse, J. Dueck, E. Djatchenko // Powder Technology. – N 193. – 2009. – Pp. 332–336.**
19. Дьяченко Е.Н. Моделирование очистки воды от механических примесей методом дискретных элементов : труды Пятой сибирской конференции по параллельным и высокопроизводительным вычислениям. – Томск: Изд-во ТГУ. – 2009. – С.58-61.

Тираж 100 экз.
Отпечатано в ООО «Позитив-НБ»
634050 г. Томск, пр. Ленина 34а