ТЕОРЕТИЧНІ АСПЕКТИ КОАГУЛЯЦІЇ ДОМІШОК У ДИСПЕРСНИХ ПОТОКАХ

Осадчук П. І., канд. техн. наук, доцент
Одеський державний аграрний університет

Анотація. У даний час виробництво рослинних жирів має дуже важливе значення, у зв'язку з їх широким застосуванням в різних галузях народного господарства. Надзвичайно висока їх харчова цінність полягає в тому, що вони легко засвоюються організмом людини і є високо енергетичним продуктом. Екологічна чистота рослинних олій досягається технологічними обробками, що приводять до видалення небажаних з'єднань і домішок. На підставі аналізу літературних джерел, наприклад запропонованої фізико-математичної моделі, заснованої на рівнянні Смолюховського, що описує динаміку зміни функції розподілу часток рідинно-крапельних аерозолів за розмірами та побудованих модифікацій чисельних методів для вирішення завдань, пов'язаних з процесами коагуляції у гетерогенних системах для частинок, що стикаються, описуваних рівняннями Больцмана і Смолюховського. Наведено запропонований математичний опис протікання процесу коагуляції при очищенні рослинних олій. Який дозволить розраховувати оптимальний час коагуляції на обладнанні, яке використовується при первинному і вторинному очищенні рослинних олій. Розглянута зміна дисперсного складу домішок при коагуляції на основі поняття анізотропії вільного пробігу частинки. Розроблена спеціальна шкала класових інтервалів гістограми розподілу їх розмірів. Розраховані ймовірності класових інтервалів методами теорії марковських ланцюгів. Слідуючи цій методиці, розрахована таблиця перехідних ймовірностей часток у класових інтервалах у результаті злипання після першого зіткнення. З представленого розрахованого початкового розподілу часток по розмірах видно, що найбільша ймовірність припадає на четвертий клас. Наведені результати були використані при виборі оптимального часу перебування олій в робочій зоні машини.

Ключові слова: дисперсний потік, коагуляція, марковські ланцюги, матриця.

THEORETICAL ASPECTS OF COAGULATION OF IMPURITIES IN DISPERSED FLOWS

Osadchuk P. I., PhD, associate professor
Odesa State Agrarian University, Odesa

Abstract. Nowadays, the production of vegetable fats is very important, due to their widespread use in various sectors of the national economy. Their extremely high nutritional value lies in the fact that they are easily absorbed by the human body and are a highly energetic product. The ecological purity of vegetable oils is achieved by technological treatments leading to the removal of undesirable compounds and impurities. Based on the analysis of literature sources, for example, the proposed physical and mathematical model based on the Smolukhovsky equation, which describes the dynamics of changes in the particle size distribution function of liquid-drop aerosols and the constructed modifications of numerical methods for solving problems related to coagulation processes in a heterogeneous system for colliding particles described by the Boltzmann and Smoluchowsky equations. The proposed mathematical description of the coagulation process during the purification of vegetable oils is presented. This will allow to calculate the optimal coagulation time on equipment for primary and secondary refining of vegetable oils. The change in the dispersed composition of impurities during coagulation is considered on the basis of the concept of anisotropy of the free path of a particle. A special scale of class intervals for the histogram of their size distribution has been developed. The probabilities of class intervals are calculated by the methods of the theory of Markov chains. Following this technique, a table of transition probabilities of fractions in class intervals as a result of sticking after the first collision was calculated. From the presented calculated histogram of the initial particle size distribution, it can be seen that the highest probability falls on the fourth class. The above results were used to select the optimal residence time for the oil in the working area of the machine.

Keywords: dispersed flow, coagulation, Markov chains, matrix.

Вступ. Біологічна повноцінність і екологічна безпека харчових, зокрема жирових, продуктів - найважливіше завдання при їхньому виробництві [1].

У виробництві рослинних олій екологічна чистота досягається технологічними обробками, що приводять до видалення небажаних з'єднань і домішок [1].

Актуальність. Для створення необхідного встаткування є потреба у розробці математичних апаратів для розрахунків протікання тих або інших технологічних процесів на різноманітному обладнанні [2, 3].

Аналіз літературних джерел. Аналізуючи літературні джерела ознайомились з роботами пов'язаними з використанням математичних моделей прирізних засобах коагуляції рідинних субстанцій, так у роботі [4] запропонована фізико-математична модель, заснована на рівнянні Смолуховського, що описує динаміку зміни функції розподілу часток рідинно-крапельних аерозолів за розмірами з урахуванням ультразвукового впливу. Отримані вирази для кінетики коагуляції залежно від основних параметрів впливу, властивостей аерозолу і середовища: концентрації і дисперсного складу вихідного аерозолу, в'язкості і температури середовища, фізико-хімічних властивостей матеріалу частинок. У роботі [5, 6] розроблено математичну модель зближення ферочастиць в магнітному полі. Наявність відштовхуючих сил між намагніченими частками в поперечному напрямку до магнітних ліній і короткий час з'єднання пар частинок в подовжньому напрямку до них в порівнянні з дифузійно-броунівським механізмом зближення, призводить до відмінності кінетики магнітної коагуляції від теорії Смолуховського. Запропоновано математичну модель ймовірності дисперсного розподілу часток (агрегатів), засновану на принципі об'єднання пар сусідніх частинок уздовж магнітних ліній. Отримано статистичне інваріантне рівняння для законів розподілу дисперсності механічних домішок при коагуляції. У роботі [7] побудовані модифікації чисельних методів для вирішення завдань, пов'язаних з процесами коагуляції у гетерогенних системах для частинок, що стикаються, описуваних рівняннями Больцмана і Смолуховського. У роботі [8] розглядаються властивості фундаментальних математичних результатів, пов'язаних між собою з базовими моделями, які описують процеси коагуляції. В якій розмір кластера є дискретною величиною. Розглядається рівняння Смолуховського, Беккера-Дорінга та більш загальні моделі, включаючи коагуляцію.

На підставі аналізу літературних джерел прийшли к висновку практичної відсутності математичних моделей розрахунку процесу коагуляції у в'язких рідинах, якими є рослинні олії [9]. Процес коагуляції є одним з основних при очищенні рослинних олій, тому рішення цієї задачі є актуальною.

Мета досліджень. Отримати математичний опис протікання процесу коагуляції при очищенні рослинних олій. Який дозволить розраховувати оптимальний час коагуляції на обладнанні, яке використовується при первинному і вторинному очищенні рослинних олій.

Для досягнення цієї мети необхідно: - розглянути зміну дисперсного складу домішок при коагуляції на основі поняття анізотропії вільного пробігу частинки; - розробити спеціальну шкалу класових інтервалів гістограми розподілу їх розмірів; - розрахувати ймовірності класових інтервалів методами теорії марковських ланцюгів.

Результати досліджень. У дисперсних потоках зважено несуче середовище має поле швидкостей, що породжує друге поле швидкостей, де є присутнім новий параметр - розмір частки δ . Цей параметр входить у розподіл часток по швидкостях, що є основною причиною принципової відмінності кінетики молекул газу від кінетики часток домішки. Якщо в кінетичній теорії газів довжина вільного пробігу не залежить від напрямку, то ймовірність зіткнення частки залежить від напрямку її руху. Звідси потреба доцільності введення поняття анізотропії вільного пробігу часток. У роторних машинах варто розрізняти довжини вільних пробігів у радіальному й тангенціальному напрямку, а при пласко - паралельному русі - у поздовжньому й поперечному напрямку. Тому надалі під швидкістю частки будемо розуміти одну з її компонентів (ту, у напрямку якої відбувається найбільше число зіткнень)

Позначимо $g(\delta)$ - швидкість частки діаметра δ . Тут під діаметром будемо розуміти діаметр кулі, еквівалентний по обсязі частці. На відстані довжини вільного пробігу λ еквівалентна куля витісняє простір, що має обсяг:

$$B = \frac{\pi \delta^2}{4} \lambda$$

Тому що обсяг еквівалентної частці кулі дорівнює

$$B = \frac{\pi \delta^3}{6},$$

то за час вільного пробігу куля займала частку простору, витиснутого їм, рівну:

$$C = \frac{B_0}{B} = \frac{2\delta}{3\lambda}$$

Ця частка є локальною моделлю об'ємної концентрації, звідки слідує формула довжини вільного пробігу часток:

$$\lambda = \frac{2\delta}{3c}, \quad (1)$$

де c - об'ємна концентрація часток у дисперсному потоці.

У рівності (1) всі три величини мають середні значення. Більше точна формула (1) має вигляд:

$$\lambda = \frac{2m_3}{3cm_2},$$

де m_2, m_3 - початкові моменти розподілу часток по діаметрах:

$$m_2 = \int_0^{\infty} \delta^2 f(\delta) d\delta, \quad m_3 = \int_0^{\infty} \delta^3 f(\delta) d\delta$$

$f(\delta)$ - щільність імовірності розподілу часток по розмірах.

Для більшості домішок $f(\delta)$ - щільність імовірності логнормального закону розподілу.

Щоб вийти на залежність ефективності коагуляції від часу, запишемо час вільного пробігу

$$t = \frac{\lambda}{g}, \quad (2)$$

де g - дифузійна швидкість, рівна середньому квадратичному відхиленню,

Приймаючи час вільного пробігу за одиницю дискретного часу, можна будувати матриці перехідних ймовірностей Марковського ланцюга.

Коагуляцію часток дисперсного середовища визначає не стаціонарний випадковий процес із функцією розподілу часток по розмірах для будь-якого моменту часу. Якщо діапазон розмірів $x_0 \leq x \leq x_n$ розділити на n класів $(x_{i-1} \leq x \leq x_i, i = 1; 2; \dots; n)$, то стан системи яка складається із цих класів буде описувати вектор

$$\bar{p}(t) = (p_1(t), p_2(t), \dots, p_i(t), \dots, p_n(t)), \quad (3)$$

де $p_i(t)$ - імовірність приналежності розміру частки до i -го класу в момент t .

У такий спосіб дослідження коагуляції часток можна звести до вивчення систем з дискретним числом станів, застосовуючи для цього теорію марковських ланцюгів, графічну інтерпретацію стану марковського ланцюга зображує гістограма гранулометричного состава в момент t . Щоб одержати вектор $\bar{p}$, треба визначити границі класів так щоб матриця перехідних ймовірностей p_{ij} мала найбільш простий вид, тобто мала як можна більше число нулів. Очевидно що $p_{ij} = 0$, якщо $i \neq j$. Ця властивість слідує з того, що при склеюванні двох часток нова частка не може мати еквівалентний розмір менше кожної з них.

Покажемо, що при відношенні:

$$\frac{x_k}{x_{k-1}} = \sqrt[3]{2}$$

діагональні елементи матриці перехідних ймовірностей дорівнюють нулю. Дійсно, якщо дві мінімальні частки i -го класу утворили нову частку, то новий еквівалентний діаметр δ_j отриманий з рівності

$$\delta_j^3 = 2\delta_{i-1}^3$$

Звідки отримаємо

$$\frac{\delta_j}{\delta_{i-1}} = \sqrt[3]{2}$$

Тому для будь-яких двох часток δ' і δ'' з інтервалу $\delta_{i-1} \leq \delta \leq \delta_i$ має місце нерівність

$$(\delta')^3 + (\delta'')^3 \geq 2(\delta_{i-1})^3 = \delta_i^3$$

Тоді за умови $p_{ii} = 0$ матриця перехідних ймовірностей має вигляд

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \dots & p_{12} & p_{13} & \dots & p_{1i} & \dots & p_{1,n-2} & p_{1,n-1} & p_{1n} \\ 0 & \dots & 0 & \dots & p_{23} & \dots & p_{2i} & \dots & p_{2,n-2} & p_{2,n-1} & p_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & p_{n-2,n-1} & \dots & p_{n-2,n} \\ 00000 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & \dots & p_{n-1,n} \\ 00000 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

Останній рядок матриці А дає діагональний елемент $p_{nn} = 1$, якщо номер n приписати класовому інтервалу $x_{n-1} \leq x < x_n$.

Обчислимо перехідні ймовірності першого рядка матриці А. Для цього запишемо границі класів у порядку зростання

$$x_0 \leq \sqrt[3]{2}x_0 < \sqrt[3]{4}x_0 < 2x_0 < 2\sqrt[3]{2}x_0 < 2\sqrt[3]{4}x_0 < \dots < \sqrt[3]{2^i}x_0 < \dots < \sqrt[3]{2^n}x_0 < \dots$$

Якщо поєднуються частки першого класу, то вони утворюють частки в інтервалі

$$\sqrt[3]{2}x_0 \leq x < \sqrt[3]{2(\sqrt[3]{2}x_0)^3} = \sqrt[3]{2}x_0 < \sqrt[3]{4}x_0 \leq x < \sqrt[3]{4(2x_0)^3} = 2x_0 < \dots$$

Аналогічно одержимо інтервали нових часток, утворених у результаті злипання часток першого класу із частками інших класів.

Кожний інтервал можна представити лінійною комбінацією класів гістограми та одержати рівність

$$\sum_{i=1}^n S_{ij} = L_j = (\sqrt[3]{2} - 1) \sqrt[3]{1 + 2^{j-1}} x_0$$

Ліву частину цієї рівності можна перетворити до виду

$$\sum_{i=1}^n S_{ij} = \sum_{i=1}^n \theta_{ij} l_i$$

Де θ_{ij} - коефіцієнт, значення якого лежать в інтервалі $[0,1]$.

Після підстановки

$$l_i = \sqrt[3]{2^{i-1}} (\sqrt[3]{2} - 1) x_0$$

знаходимо

$$(\sqrt[3]{2} - 1) x_0 \sum_{i=1}^n \theta_{ij} \sqrt[3]{2^{i-1}} = (\sqrt[3]{2} - 1) x_0 \sqrt[3]{1 + 2^{j-1}} \quad (4)$$

Тепер можна обчислити перехідну ймовірність P_{ij} , що дорівнює геометричній ймовірності, тобто відношенню суми відрізків з довжинами S_{ij} до сум відрізків з довжинами L .

$$P_{ij} = \frac{\sum_{j=1}^n S_{ij}}{\sum_{j=1}^n L_j}$$

Після скорочень з урахуванням (4) одержимо

$$P_{ij} = \frac{\theta_{ij}}{\sum_{i=1}^n \sqrt[3]{1 + 2^{i-1}}} \quad (5)$$

Аналогічно обчислюються всі перехідні ймовірності P_{ij} . Поняття щільності потоку подій a_{ij} даної системи стану визначаються відношенням

$$a_{ij} = \frac{P_{ij}}{t}$$

де t - середній час вільного пробігу частки дисперсної фази. При відомих значеннях щільності потоків обчислення вектора (3) зводиться до рішення системи рівнянь Колмогорова з початковими умовами

$$P_1(0) = p_{01}; P_2(0) = p_{02}; \dots; P_n(0) = p_{0n}; \sum_{i=1}^n p_{0i} = 1.$$

Для розрахунку процесу коагуляції використовуємо (5) і одержимо матрицю перехідних ймовірностей

$$A = \|p_{ij}\| = \begin{pmatrix} 0,0,165 & 0,0,168 & 0,0,145 & 0,0,135 & 0,0,131 & 0,0,129 & 0,0,127 \\ 0,0 & 0,199 & 0,180 & 0,165 & 0,157 & 0,150 & 0,150 \\ 0,0 & 0 & 0,231 & 0,210 & 0,194 & 0,181 & 0,183 \\ 0,0 & 0 & 0 & 0,276 & 0,252 & 0,249 & 0,221 \\ 0,0 & 0 & 0 & 0 & 0,347 & 0,317 & 0,339 \\ 0,0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0,462 & 0,538 \\ 0,0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0,0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

У цих розрахунках будемо використовувати концентрацію домішок C_0 і середню довжину вільного пробігу

$$l_0 = \frac{2m_3}{3c_0m_2}$$

Де l_0 - середня довжина вільного пробігу часток домішок до її злиття з іншою часткою,

Якщо середня швидкість руху частки дорівнює $\mathcal{G}_0$, то час шляху дорівнює

$$\tau_1 = \frac{l_0}{\mathcal{G}_0} = \frac{2m_{31}}{3c_0m_{21}\mathcal{G}_0}$$

Другий індекс обох моментів показує номер розрахункового кроку програми.

Розглянемо докладно процес зміни гранулометричного складу часток домішок в результаті коагуляції за перший інтервал τ_0 . Відповідно до теорії марковських ланцюгів за перший крок зміни стану системи вектор стану її стане рівним

$$\overline{P}_1 = (P_{01}, P_{02}, P_{03}, \dots, P_{08}) * A$$

Тут P_{0i} - класова ймовірність перебування частки в i класі.

$$\sum_{i=1}^8 P_{0i} = 1$$

Таблиця 1

Дані гістограми в табличному виді

№	Клас	Імовірність P_i
1	$\delta_0 - \sqrt[3]{2}\delta_0$	0,02
2	$\sqrt[3]{2}\delta_0 - \sqrt[3]{4}\delta_0$	0,08
3	$\sqrt[3]{4}\delta_0 - 2\delta_0$	0,10
4	$2\delta_0 - 2\sqrt[3]{2}\delta_0$	0,33
5	$2\sqrt[3]{2}\delta_0 - 2\sqrt[3]{4}\delta_0$	0,29
6	$2\sqrt[3]{4}\delta_0 - 4\delta_0$	0,15
7	$4\delta_0 - 4\sqrt[3]{2}\delta_0$	0,02
8	$4\sqrt[3]{2}\delta_0 - \infty$	0,01

Запишемо матрицю - рядок вектора початкового стану

$$\overline{P}_0 = (0,02; 0,08; 0,10; 0,33; 0,29; 0,15; 0,02; 0,01) \quad (6)$$

За комп'ютерною програмою обчислюємо вектор $\overline{P}_1$ методом множення матриці рядок $\overline{P}_0$ на квадратну матрицю перехідних ймовірностей A . У результаті розрахунку отриманий новий розподіл більших часток:

$$\overline{P}_1 = (0; 0,033; 0,019; 0,04; 0,128; 0,199; 0,254; 0,302) \quad (7)$$

Отже, за час τ_1 початковий дисперсний склад(6) внаслідок процесів коагуляції змінився за рахунок укрупнення часток (7).

Перший крок: $P_1 = P_0 A$

$$\overline{P}_1 = (0; 0,033 ; 0,019 ; 0,041 ; 0,129 ; 0,198 ; 0,255 ; 0,302)$$

$$\Delta P_1 = 1 - 0,975 = 0,025$$

Другий крок:

$$\overline{P}_1 = (0; 0; 0,007 ; 0,01 ; 0,021 ; 0,061 ; 0,148 ; 0,729)$$

$$\Delta P_1 = 1 - 0,97 = 0,03$$

Аналогічно обчислюється гранулометричний склад отриманий за час

$$\tau_2 = \tau_1 + \frac{2 m_{32}}{3 c_0 m_{22} g_0}$$

Після n кроків програми дисперсний склад буде підкорятися формулі

$$\overline{P}_n = \overline{P}_0 * A^n$$

$$\left(\begin{array}{l} \overline{P}_1 = \overline{P}_0 * A \\ \overline{P}_2 = \overline{P}_1 * A = P_0 * A * A = P_0 * A^2 \\ \overline{P}_3 = P_2 * A = (P_0 * A^2) * A = P_0 * A^3 \end{array} \right)$$

Час, за який сформувався дисперсний склад $\overline{P}_n$, дорівнює:

$$\tau_n = \frac{2}{3 c_0 V} \sum_{k=1}^n \frac{m_{3k}}{m_{2k}}$$

На кожному кроці обчислюється щільність імовірності $f_k(\delta)$, по якій обчислюються обидва моменти

$$m_{2k} = \int_0^{\infty} \delta^2 f_k(\delta) d\delta \quad m_{3k} = \int_0^{\infty} \delta^3 f_k(\delta) d\delta$$

Щільність імовірності $f_k(\delta)$ апроксимується згладжуванням гістограми розподілу P_k .

З розрахунку початкового розподілу часток по розмірах бачимо, що найбільша імовірність P_i припадає на четвертий клас.

Висновки. Слідуючи цій методиці, розрахована таблиця перехідних ймовірностей часток у класових інтервалах у результаті злипання після першого зіткнення. Наведені результати були використані при виборі оптимального часу перебування олії в робочій зоні машини.

References

1. O'Brian, R. (2007). Giry and oils. Production, composition and properties, application. / trans. from English 2nd ed. V. D. Shirokova, D. A. Babekenkoy, N. S. Selivanova, N. V. Magly, St. Petersburg: Profession
2. Voloshchuk, V. M. (1984) Kinetic theory of coagulation. L. Hidrometeoizdat
3. Voloshchuk, V. M., Sedunov, U. S. (1975). Coagulation processes in dispersed systems. L. Hidrometeoizdat.
4. Collet, J. F. (2014). Some modelling issues in the theory of fragmentation-coagulation systems. *Comm Math Sci*, 1, 35-54.
5. Menon, G., Pego, R. L. (2014). Approach to self-similarity in Smoluchowski's coagulation equations. *Commun Pure & Appl Math*, 57, 1197-1232.
6. Menon, G., Pego, R. L. (2015). Dynamical scaling in Smoluchowski's coagulation equations: uniform convergence. *SIAM J Math Anal*, 36, 1629-1651.
7. Wattis, J. (2016). Exact solutions for cluster-growth kinetics with evolving size and shape profiles. *J Phys A: Math Gen*, 39, 7283-7298.
8. Laurencot, P. (2015). Convergence to self-similar solutions for a coagulation equation. *ZAMP*, 56, 398-411.
9. Osadchuk, P. I., Domuschi, D. P., Enakiev, Y. I., Peretiaka, S. N., Lipin, A. P. (2020). Study of the effect of ultrasonic field in purifying sunflower oil. *Bulgarian Journal of Agricultural Science*, 26 (2), 486–491.

Отримано в редакцію: 30.06.2020

Прийнято до друку: 01.10.2020

Received: 30.06.2020

Approved: 01.10.2020