

Описание кинетики измельчения на основе энтропийного обобщения распределения Максвелла-Больцмана

В.П. Жуков, А.Н. Беляков, А.В. Митрофанов, М.Ю. Зорин, D. Urbaniak
ФГБОУВПО «Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина»,
г. Иваново, Российская Федерация
E-mail: zhukov-home@yandex.ru

Авторское резюме

Состояние вопроса: В настоящее время для моделирования процессов хаотичного движения частиц сыпучего материала в кипящем или псевдооживленном слое успешно применяются подходы статистической физики. Классическое распределение Максвелла-Больцмана не учитывает распределение частиц по размерам зерен в струйных мельницах. В связи с этим актуальным является обобщение распределения Максвелла-Больцмана для учета распределения частиц по размерам.

Методы и материалы: Предложенный подход для определения распределения частиц по скоростям, высоте и крупности зерен в кипящем слое основан на принципе максимума энтропии.

Результаты: Найдено обобщение распределения Максвелла-Больцмана по скорости, высоте слоя и крупности частиц в кипящем слое. Дан сравнительный анализ расчетных и экспериментальных распределений. Выявлено адекватное описание модельным распределением опытных данных.

Выводы: Использование подходов статистической физики позволяет прогнозировать поведение ансамбля частиц в кипящем слое и разрабатывать на их основе методы расчета технологического оборудования.

Ключевые слова: статистическая физика, распределение Максвелла-Больцмана, кинетика измельчения, баланс энергии, баланс массы, принцип максимума энтропии.

Description of Grinding Kinetics on the Basis of Entropic Generalization of Maxwell-Boltzmann Distribution

V.P. Zhukov, A.N. Belyakov, A.V. Mitrofanov, M.Yu. Zorin, D. Urbaniak
Ivanovo State Power Engineering University, Ivanovo, Russian Federation
E-mail: zhukov-home@yandex.ru

Abstract

Background: At present the methods of statistical physics are successfully applied for modeling the processes of chaotic motion of granular material particles inside boiling and fluidized beds. The classical Maxwell-Boltzmann distribution does not take into account the particles distribution of grains sizes in the jet mills. So, it is the urgent problem to generalize the Maxwell-Boltzmann distribution for accounting the particles according with their sizes.

Materials and methods: The authors suggest the approach based on the principle of maximum entropy to define the particle distribution over velocities, height and particle size in boiling bed.

Results: The generalized Maxwell-Boltzmann distribution of particles over velocities, height and particle size in boiling bed is found. The comparison analysis of calculated and experimental distributions is given in the article. The adequate description of the experimental data by means of the model distribution is provided.

Conclusions: The usage of the statistical physics approaches allows predicting the behavior of the group of particles in boiling bed and developing the calculation methods for technological equipment on their basis.

Key words: statistical physics, the Maxwell-Boltzmann distribution, grinding kinetics, energy balance, mass balance, principle of maximum entropy.

Хаотичное движение частиц сыпучего материала в кипящем или псевдооживленном слое внешне напоминает поведение молекул жидкости или газа [1, 2]. Это сходство обуславливает попытки использования закономерностей статистической физики для описания поведения частиц в кипящем слое [2]. В струйных мельницах кипящего слоя [3] наряду с распределением по скоростям и высоте слоя частицы распределяются по размерам зерен, что в традиционном распределении Максвелла-Больцмана [4] не учитывается. В предлагаемом исследовании делается попытка обобщить статистическое распределение Мак-

свелла-Больцмана для дополнительного учета распределения частиц по крупности в кипящем слое.

Целью исследования является определение распределения частиц по скоростям, высоте слоя и размерам частиц в струйной мельнице кипящего слоя.

Для достижения поставленной цели решаются следующие задачи:

– выделение системы моделирования и составление для нее балансовых соотношений для энергии и массы с учетом измельчения частиц;

– определение распределения частиц по размерам, скоростям и высоте кипящего слоя на основе принципа максимума энтропии;

– сравнение полученного распределения с экспериментальными данными.

В качестве системы моделирования выбирается мельница кипящего слоя, схематично представленная на рис. 1,а. Рассматривается мельница, работающая в периодическом режиме, при котором масса измельчаемого порошка не меняется со временем. Энергия в систему подводится вместе с газом, который подается в аппарат через входной патрубков 1 и покидает мельницу через выходной патрубков 2.

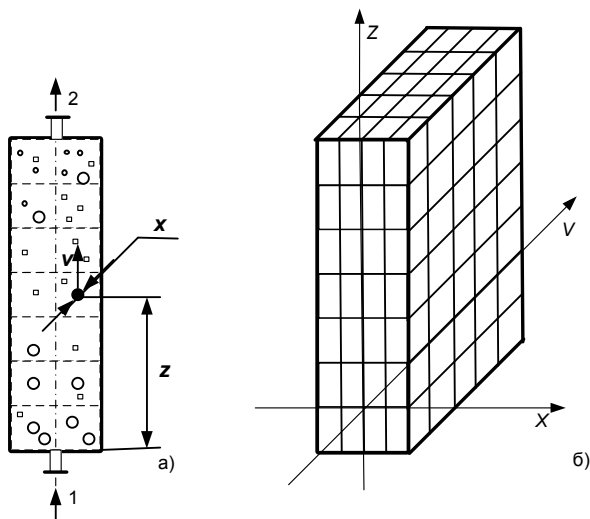


Рис. 1. Эскиз (а) и расчетное фазовое пространство (б) струйной мельницы кипящего слоя: 1 – подача газа; 2 – выход газа

В качестве определяющих координат процесса выбраны размер частиц x , скорость частиц v и высота положения частиц в слое z . Структура расчетного фазового пространства с указанием направления выбранных осей координат представлена на рис. 1,б. Искомая функция распределения частиц по крупности, скорости и положению частиц в кипящем слое $f(z, v, x)$ показывает плотность распределения материала в расчетном пространстве. Для расчетного пространства, представленного на рис.1 в виде совокупности ячеек, искомая функция для отдельной ячейки в интегральном виде записывается следующим образом:

$$F_{i,j,k} = f(z, v, x) \cdot \Delta z \cdot \Delta v \cdot \Delta x,$$

где Δz , Δv , Δx – размер ячейки вдоль осей z , v , x соответственно; индекс i – номер ячейки вдоль координаты z ; j – вдоль оси скорости v ; k – вдоль оси размера x .

Баланс массы измельчаемого материала может быть записан в виде условия нормировки искомой функции:

$$\sum_{i,j,k} F_{i,j,k} = 1. \quad (1)$$

Баланс энергии для выделенной системы составляется на основе анализа потоков энергии. Считается, что энергия, подводимая в систему с газом, расходуется на изменение кинетической энергии частиц, потенциальной энергии высоты положения и потенциальной энергии крупности частиц.

Выражение для удельной потенциальной энергии положения частиц представляется через произведение координаты частицы на ускорение свободного падения g :

$$e_i = g z_i. \quad (2)$$

Удельная кинетическая энергия частиц определяется как половина квадрата скорости:

$$e_j = \frac{v_j^2}{2}. \quad (3)$$

Энергия измельчения, согласно закону Риттингера [5], определяется из выражения

$$e_x = C_R \left(\frac{1}{\langle x'' \rangle} - \frac{1}{\langle x' \rangle} \right),$$

где e_x – удельная энергия измельчения; C_R – постоянная Риттингера; $\langle x' \rangle$, $\langle x'' \rangle$ – средние размеры частиц до и после разрушения соответственно.

При измельчении исходных зерен большего размера (при $x' \rightarrow \infty$) выражение для энергетического закона Риттингера записывается в виде

$$e_x = e_k = \frac{C_R}{\langle x_k \rangle}. \quad (4)$$

В дальнейшем при описании измельчения в качестве параметра, характеризующего крупность частиц, используется математическое ожидание или средний размер зерен $x = \langle x \rangle$. Энергия измельчения, согласно (4), зависит только от конечного значения координаты x или состояния системы и не зависит от собственно кинетики или процесса разрушения. Совпадение зависимости (4) и выражения для потенциала электростатического поля [4] свидетельствует о потенциальности энергии измельчения.

Постоянную в законе Риттингера, согласно [6], можно вычислить следующим образом:

$$C_R = r_t d_0,$$

где r_t – удельная теплота испарения при сублимации; d_0 – размер молекулы измельчаемого вещества.

Для выбранного фазового пространства, представленного на рис. 1,б совокупностью ячеек, удельная энергия для ячейки определяется суммой потенциальной энергии положения, потенциальной энергии размера и кинетической энергии зерен:

$$e_{i,j,k} = g z_i + \frac{v_j^2}{2} + \frac{C_R}{x_k}. \quad (5)$$

Баланс энергии записывается через равенство суммарной энергии всех частиц значению подведенной к системе энергии E :

$$\sum_{i,j,k} e_{i,j,k} F_{i,j,k} = E. \quad (6)$$

Для нахождения искомого распределения воспользуемся принципом максимума энтропии, который успешно применяется для моделирования сложных систем [5, 7]. Для анализируемой структуры фазового пространства выражение для энтропии H записывается в виде

$$H = - \sum_{i,j,k} F_{i,j,k} \ln F_{i,j,k} \Rightarrow \max. \quad (7)$$

Оптимизационную задачу для нахождения искомого распределения сформулируем следующим образом: определить оптимальное распределение частиц по положению, скорости и размеру частиц, которому соответствует максимальное значение энтропии (7) при выполнении ограничений (1) и (6). Решение оптимизационной задачи, найденное методом неопределенных множителей Лагранжа [7], представляется в виде

$$F_{i,j,k} = \frac{\exp(\mu e_{i,j,k})}{\sum_{i,j,k} \exp(\mu e_{i,j,k})}, \quad (8)$$

где μ – неопределенный множитель Лагранжа, значение которого находится из ограничения (6).

Подстановка зависимости (5) в выражение (8) позволяет получить искомое распределение в виде

$$f(z, v, x) = A \cdot \exp\left(\mu \left(g z + \frac{v^2}{2} + \frac{C_R}{x}\right)\right), \quad (9)$$

где A – параметр нормировки.

Зависимость (9) совпадает с видом распределения Максвелла-Больцмана [4] и позволяет дополнительно определить распределение частиц по размерам. Сопоставление найденного распределения с распределением Максвелла-Больцмана позволяет также записать выражение для неопределенного множителя Лагранжа в виде

$$\mu = \frac{m_\mu}{R_\mu T}, \quad (10)$$

где m_μ – масса моля измельчаемого вещества; R_μ – универсальная газовая постоянная; T – температура распределения.

Температура может быть представлена, согласно (10), через неопределенный множитель Лагранжа:

$$T = \frac{m_\mu}{R_\mu \mu}. \quad (11)$$

Согласно выражению (11), температура распределения однозначно определяется значением неопределенного множителя Лагранжа, который, в свою очередь, однозначно определяется из баланса энергии (6). Таким образом, температура является мерой суммарной энергии ансамбля частиц. Абсолютное значение температуры распределения связано с выбором шкалы для ее измерения, обсуждение которой не входит в задачи исследования.

Вид найденного решения проанализирован в ходе специальных расчетных исследований. Фазовое пространство представляется трехмерным массивом ячеек (рис. 1). Значения фазовых координат задаются следующими матрицами-строками: $z = [0, 0,1, 0,2, 0,3, 0,4, 0,5, 0,6, 0,7, 0,8, 0,9, 1]$, $m; v = [0, 0,1, 0,2, 0,3, 0,4, 0,5, 0,6, 0,7, 0,8, 0,9, 1]$, $m/c; x = [0,001, 0,101, 0,201, 0,301, 0,401, 0,501, 0,601, 0,701, 0,801, 0,901, 1,001]$, mm . Подача исходного материала ($C_R = 12,51 \cdot 10^{-3}$, Дж/кг [6]) осуществляется в точку фазового пространства с координатами $z = z_{\min}, v = v_{\min}, X = X_{\max}$.

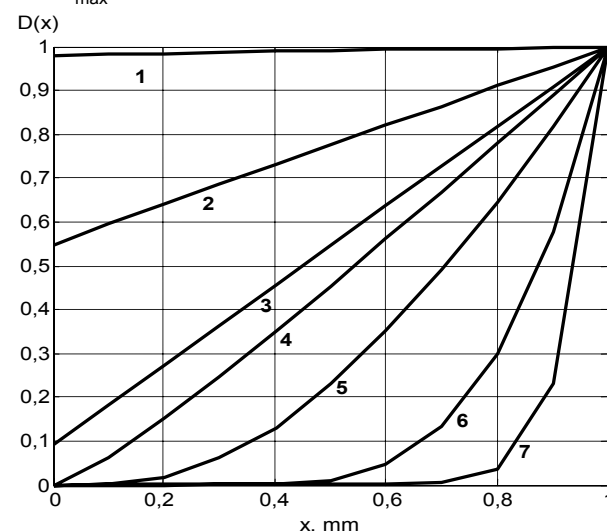


Рис. 2. Зависимость массовой доли прохода через контрольное сито от размера ячеек сита при разных значениях параметра распределения (8): 1 – $\mu = -1$; 2 – $\mu = -0,3$; 3 – $\mu = -0,05$; 4 – $\mu = -0,005$; 5 – $\mu = -0,001$; 6 – $\mu = 0,0002$; 7 – $\mu = 0,0005$

На рис. 2 представлены расчетные распределения частиц по крупности в кипящем слое при различных значениях энергии (параметра распределения μ). Распределения представлены в виде интегральных зависимостей массовой доли прохода порошка через контрольное сито от размера ячеек этого сита. Величина прохода определялась суммированием найденного распределения (8) по скоростям и по высоте слоя:

$$D(x_{k_1}) = \sum_{k=1}^{k_1} \sum_{i,j} F_{i,j,k},$$

где $D(x_{k_1})$ – проход через сито с размером X_{k_1} в загрузке аппарата.

Для представления трехмерного распределения (8) в виде однопараметрической зависимости выполняется предварительное суммирование по двум остальным координатам:

$$F_z = \sum_{j,k} F_{i,j,k}, \quad F_v = \sum_{i,k} F_{i,j,k}, \quad F_x = \sum_{i,j} F_{i,j,k}.$$

Найденные расчетные распределения частиц в кипящем слое по осям z , v , x представлены на рис. 3.

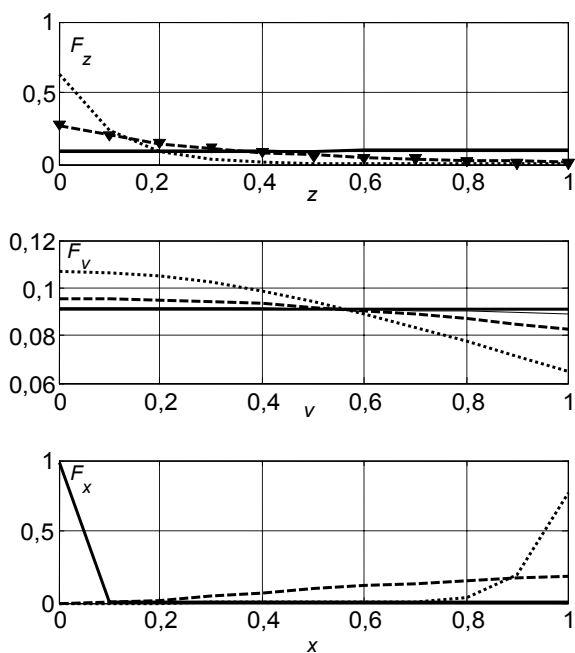


Рис. 3. Распределение частиц: а – по высоте слоя; б – по скоростям; в – по размерам зерен; пунктирные линии – $\mu = -0,0005$; штриховые линии – $\mu = -0,0001$; сплошные линии – $\mu = 0,0005$; экспериментальное распределение частиц по высоте слоя [8] показано треугольниками

На рис. 3,а треугольниками показано экспериментальное распределение частиц, полученное в ходе специальных экспериментальных исследований [8]. Сопоставление расчетных и экспериментальных распределений показывает хорошее качество описания экспериментальных результатов найденным расчетным распределением.

Проведенные исследования показали, что модели, построенные на основе подходов

статистической физики, адекватно описывают поведение ансамбля частиц в кипящем слое с учетом их измельчения, что делает возможным и целесообразным использование указанных подходов для моделирования технологических процессов.

Список литературы

1. Гильперин Н.И., Айнштейн В.Г., Кваша В.Б. Основы техники псевдооживления. – М.: Химия, 1967. – 664 с.
2. Беляков А.Н., Жуков В.П., Otwinowski H. Формирование фракционных и энергетических потоков в струйных мельницах кипящего слоя // Вестник ИГЭУ. – 2012. – Вып. 1. – С. 48–51.
3. Milioli F.E., Foster P.J. A model for particle size distribution and elutriation in fluidized beds // Powder Technology. – 83 (1995) 265–280.
4. Яворский Б.М., Детлаф А.А. Справочник по физике. – М.: Наука, 1980. – 508 с.
5. Mizonov V., Zhukov V., Bernotat S. Simulation of Grinding: New approaches. – ISPEU Press, 1997. – 108 p.
6. Жуков В.П., Беляков А.Н. Термодинамический подход к описанию механических процессов в сыпучих средах // Вестник ИГЭУ. – 2012. – Вып. 6.
7. Вильсон А. Энтропийные методы моделирования сложных систем. – М.: Наука, 1978. – 248 с.
8. Митрофанов А.В. Моделирование и расчетно-экспериментальные исследования гидромеханических и тепловых процессов в псевдооживленном слое: дис. ... канд. техн. наук : 05.17.08. – Иваново, 2011. – 114 с.

References

1. Gil'perin, N.I., Aynshteyn, V.G., Kvasha, V.B. *Osnovy tekhniki psevdoozhivleniya* [Foundations of Fluidization Technology]. Moscow, Khimiya, 1967. 664 p.
2. Belyakov, A.N., Zhukov, V.P., Otwinowski, H. Formirovanie fraktsionnykh i energeticheskikh potokov v struynykh mel'nitsakh kipyashchego sloya [Fractional and Power Engineering Steams Formation in Jet Mills of Boiling Bed]. *Vestnik IGEU*, 2012, no. 1, pp. 48–51.
3. Milioli F.E., Foster P.J. A model for particle size distribution and elutriation in fluidized beds. *Powder Technology* 83 (1995) 265–280.
4. Yavorskiy, B.M., Detlaf, A.A. *Spravochnik po fizike* [Reference Book on Physics]. Moscow, Nauka, 1980. 508 p.
5. Mizonov, V., Zhukov, V., Bernotat, S. Simulation of Grinding: New approaches. ISPEU Press. Ivanovo, 1997. 108 p.
6. Zhukov, V.P., Belyakov, A.N. *Termodinamicheskiy podkhod k opisaniyu mekhanicheskikh protsessov v syuchikh sredakh* [Thermodynamic Approach to Describing Mechanical Processes in Grinding Media]. *Vestnik IGEU*, 2012, no. 6.
7. Vil'son, A. *Entropiynye metody modelirovaniya slozhnykh sistem* [Entropic Methods of Complex Systems Simulations]. Moscow, Nauka, 1978. 248 p.
8. Mitrofanov, A.V. *Modelirovanie i raschetno-eksperimental'nye issledovaniya gidromekhanicheskikh i teplovykh protsessov v psevdoozhivlennom sloe*. Diss. kand. tekhn. nauk [Simulation and Experiment and Calculated Researches of Hydromechanical and Thermal Processes in Fluidized Bed. Cand. tech. sci. diss.]. Ivanovo, 2011. 114 p.

Жуков Владимир Павлович,
ФГБОУВПО «Ивановский государственный энергетический университет им. 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

Беляков Антон Николаевич,
ФГБОУВПО «Ивановский государственный энергетический университет им. 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.

Митрофанов Андрей Васильевич,
ФГБОУВПО «Ивановский государственный энергетический университет им. В.И. Ленина»,
кандидат технических наук, доцент кафедры прикладной математики,
адрес: г. Иваново, ул. Рабфаковская, д. 34, кор. А, ауд. 202,
телефон (4932) 26-97-45.

Зорин Михаил Юрьевич,
ФГБОУВПО «Ивановский государственный энергетический университет им. В.И. Ленина»,
кандидат технических наук, доцент кафедры тепловых электрических станций,
адрес: г. Иваново, ул. Рабфаковская, д. 34, кор. В, ауд. 408,
телефон (4932) 41-60-56, 26-99-31.

Urbaniak Darek,
Ченстоховский политехнический институт (Польша),
кандидат технических наук,
e-mail: otwinowski@kkt.pcz.czyst.pl