

УДК 004.9:620.93:532.517.4

ГАРМОНИЗАЦИЯ СТРУКТУРЫ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ ПРИ СОВМЕЩЕНИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМАХ

Розенцвайг А.К.

*ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет»,
Набережночелнинский институт (филиал), Набережные Челны, e-mail: a_k_r@mail.ru*

Работа посвящена вопросам моделирования неоднородных процессов переноса в многофазных смесях жидкостей и газов при проектировании технологических процессов на основе многофакторных физических явлений различной природы. Рассмотрена гармонизация структуры сложных процессов при целенаправленном совмещении взаимодействующих друг с другом механизмов кинетических, фазовых и химических превращений. Она необходима при доработке модельных средств, недостающих для отражения технико-экономических требований к результатам проектируемых технологических объектов в новых условиях. Рассмотрена настройка недостаточно детализированных общих моделей, необходимая для представления реальных особенностей предметной области. Дискретизация сложных технологических процессов на элементарные составные операции, включающих разнородные физические явления, способствует их адекватной формализации. Такие модели отражают вклад каждого элементарного физического явления и характер их взаимодействия в проектируемый технологический процесс. Рассмотрены особенности целевой спецификации различных классов математических моделей для моделирования заданного поведения сложных дисперсных систем. Отмечается, что гармонизация внутренней структуры компенсирует недостающую общность теоретических моделей, необходимую при использовании их для прогнозирования условий и технологических параметров сложных процессов на стадии проектирования. Представлены примеры дискретизации несовместимых конкурирующих процессов при разрушении нефтяных эмульсий и отделения дисперсной фазы, а также гармоничного совмещения различных механизмов дробления жидких капель в неоднородном сдвиговом потоке, при движении эмульсии в турбулентном режиме.

Ключевые слова: дисперсные системы, моделирование процессов переноса, механизмы физических явлений, целевая настройка моделей, гармонизация структуры технологических процессов

HARMONIZATION OF THE STRUCTURE OF PHYSICO-CHEMICAL PHENOMENA WHEN COMBINING TECHNOLOGICAL PROCESSES IN DISPERSED SYSTEMS

Rozentsvayg A.K.

*Kazan (Volga region) Federal University, Naberezhnye Chelny Institute (branch),
Naberezhnye Chelny, e-mail: a_k_r@mail.ru*

The work is devoted to the modeling of inhomogeneous transfer processes in multiphase mixtures of liquids and gases in the design of technological processes based on multifactorial physical phenomena of various nature. The article considers the harmonization of the structure of complex processes with the purposeful combination of mechanisms of kinetic, phase and chemical transformations interacting with each other. It is necessary when finalizing model tools that are missing to reflect the technical and economic requirements for the results of the designed technological facilities in the new conditions. The configuration of insufficiently detailed general models is considered, which is necessary to represent the real features of the subject area. The discretization of complex technological processes into elementary composite operations involving heterogeneous physical phenomena contributes to their adequate formalization. Such models reflect the contribution of each elementary physical phenomenon and the nature of their interaction in the projected technological process. The features of the target specification of various classes of mathematical models for modeling the specified behavior of complex dispersed systems are considered. It is noted that the harmonization of the internal structure compensates for the missing generality of theoretical models necessary when using them to predict the conditions and technological parameters of complex processes at the design stage. Examples of the discretization of incompatible competing processes during the destruction of oil emulsions and separation of the dispersed phase, as well as the harmonious combination of various mechanisms of crushing liquid droplets in an inhomogeneous shear flow, during the movement of the emulsion in a turbulent regime are presented.

Keywords: dispersed systems, modeling of transfer processes, mechanisms of physical phenomena, target adjustment of models, harmonization of the structure of technological processes

Многофазные, многокомпонентные среды эффективно используются при разработке инновационных, а также при совершенствовании существующих технологических процессов в самых разнообразных отраслях промышленности [1]. В этих условиях при реализации новых технологий или внедрении нового производственного

оборудования актуальной становится задача оценки и выбора оптимальных технологических параметров. Методы решения подобных задач для гомогенных сред, которые рассматриваются как однородные и изотропные независимо от масштабных ограничений, хорошо обоснованы теоретическими моделями. Они отража-

ют природу отдельных, достаточно простых физических процессов и позволяют анализировать и прогнозировать их поведение при заданных параметрах и граничных условиях. В гетерогенных средах из-за недостатка полного понимания характера физических явлений отсутствуют общие однозначные методы решения прикладных задач. Многофазные и многокомпонентные процессы носят неоднозначный и нелинейный характер. Их сложность предопределена несколькими аспектами, одним из которых является совместное протекание нескольких простых, но разнородных физических явлений. Другим аспектом является неоднородность самих этих явлений, каждый из которых может иметь несколько механизмов реализации в зависимости от режимных параметров и граничных условий. Наконец, разнородные физические явления в многофазной среде испытывают взаимное влияние. В рамках моделируемой предметной области в каждом частном случае формируется как возможный состав механизмов, так и степень их завершения. Модели для прогнозирования поведения таких процессов требуют обоснования для каждой предметной области адекватными физическими представлениями [2].

Таким образом, решение практических задач при различных геометрических и технологических параметрах оборудования во многом предопределено механизмами происходящих физических, кинетических и тепловых процессов и характером их взаимосвязи. В условиях недостатка априорной информации и универсальных теоретических представлений спецификация прикладных моделей неизбежно связана с ограничениями по детализации всех возможных сценариев развития процессов. Эти ограничения, как по составу модели, так и сложности физических явлений, носят частный характер и справедливы только в пределах конкретных решаемых задач. Они обеспечивают настройку недостаточно общих моделей на достижение конкретной поставленной цели и предметную интерпретацию полученных результатов. Такая настройка представляет собой важный этап формализации дальнейших исследований, общий для различных методов моделирования и классов моделей. Ее содержанием является систематизация неформализованной априорной информации, которая позволяет модифицировать обычные методы применительно к специфике предметной области. Для разных классов моделей и решаемых задач настройка учитывает в той или иной мере требования, как к результатам расче-

тов, так и эффективности моделируемого технологического процесса.

Цель исследования – обобщение различных подходов к спецификации математических моделей для сложных и малоизученных технологических процессов в неоднородных дисперсных системах; классификация модельных средств описания сложных физических явлений; гармонизация механизмов физических явлений, обоснованных адекватными физическими представлениями и данными экспериментальных исследований; повышение прогностических возможностей теоретических и эмпирических моделей.

Моделирование сложных процессов переноса в дисперсных системах

Энергосбережение и рациональное использование дефицитных и невозобновляемых ресурсов являются актуальными проблемами для современного развития всех отраслей экономики. Решению их во многом способствует повышение достоверности планирования и прогнозирования результатов инновационных и малоизученных технологических процессов, а также эффективности работы производственного оборудования. Одним из путей совершенствования методов проектирования является повышение качества модельных представлений поведения дисперсных систем с неоднородными физико-химическими превращениями [3]. Взаимосвязанный перенос массы, импульса и энергии в многофазных и многокомпонентных средах играет решающую роль при разработке и совершенствовании технологических процессов и аппаратов. Создание благоприятных условий для всех разнородных явлений в составе технологического процесса является важным ресурсом энергосбережения.

Согласование большого числа механизмов простых физических явлений, протекающих в составе сложного процесса, является сложной неформализуемой задачей. Ее нельзя решить с помощью общих методов теоретического анализа без учета индивидуальных, частных особенностей предметной области. Для замыкания неполной модельной системы уравнений, настройки ее на решение частной поставленной задачи необходимо дополнительно привлекать разного рода априорную информацию и данные экспериментальных исследований. Чтобы обеспечить непротиворечивость разнородных модельных структур, обеспечить достижение плановых результатов, необходима своего рода гармонизация их в составе полной модели. Гармонизация может также способствовать достижению

не менее важных целей, таких как достижение уровня развития передовых технологий и инновационного оборудования, поддержание экологического состояния окружающей среды, улучшение социально-экономических условий.

Пути проведения гармонизации обычно определяются для каждого класса моделей в связи с ограничениями, связанными с индивидуальными особенностями материалов (дисперсных сред) и технико-экономическими требованиями, принятыми в каждой предметной области. Среди них на практике для компенсации неполноты существующих моделей часто используют следующие подходы:

- декомпозиция сложного процесса на ряд последовательных операций с ограниченным числом механизмов простых, элементарных физических явлений [4, 5];

- совмещение взаимодополняющих и стимулирующих друг друга механизмов физических явлений с фазовыми и химическими превращениями [6–8];

- согласование масштабных характеристик, определяющих возможность совмещения механизмов физических явлений в пространстве и времени [9, 10];

- использование резонансного взаимодействия в дисперсных средах для локальной концентрации дефицитных энергетических ресурсов [11, 12].

Инструментами предпроектных исследований, средствами обоснования проектных решений и оценки технологических параметров технологических процессов могут служить модели различного рода. Выбор их определяется полнотой имеющихся научных знаний, степенью изученности и новизны предметной области. Это могут быть теоретические модели, которые носят часто исследовательский, познавательный характер. Они основываются на законах сохранения массы, импульса и энергии [1]. Другие теоретические модели связаны с прямым аналитическим или численным компьютерным воспроизведением детального протекания физических процессов.

Модели, относящиеся ко второму классу, носят эмпирический характер, они обобщают практический опыт и экспериментальные исследования существующих технологических процессов. Это могут быть априорные модели, хорошо зарекомендовавшие себя аналоги в условиях, близких к проектируемому объектам. Часто эмпирические модели представляют в параметрической форме в виде регрессионных выражений, связывающих целевые показатели с размерными переменными процесса и эмпирическими константами. Также

используют обобщенные регрессионные выражения с безразмерными критериями в качестве факторных переменных, которые отражают физическое содержание моделируемых процессов [7, 8].

Все эти модели хорошо зарекомендовали себя в типовых, хорошо изученных условиях для достаточно простых, однородных процессов. Сложные физические процессы в дисперсных системах состоят из разнородных физико-химических явлений. Структура их носит неаддитивный характер, а механизмы каждого из них взаимосвязаны и влияют на характер протекания других. Большое количество размерных переменных, участие их в составе различных механизмов, взаимодействие между фазами и фазовые превращения усложняют единый подход к моделированию таких процессов. Они обуславливают неоднозначность общих модельных представлений и расхождение результатов расчетов при анализе и проектировании реальных процессов.

Гармонизация носит характер настройки для каждого из возможных и наиболее приемлемых модельных представлений, необходимых для формализации целевых, проектных требований к технологическому процессу. Недостаток полноты каждого класса простых, классических моделей она восполняет индивидуальной модификацией их для условий, складывающихся в сложных физических явлениях.

В практике моделирования сложных явлений аналитическими или численными методами принято дополнять классические модели для однородных сред новыми явлениями, происходящими в дисперсных системах, аддитивными членами. Затем они сопоставляются с экспериментальными данными и приводятся с помощью эмпирических констант в соответствии с одной из конкретных предметных областей [13]. Такой подход носит характер частной аппроксимации закономерностей новых объектов исследования на основе существующих представлений. Он позволяет сопоставлять их с известными данными, и отражать их отличия статистическими оценками модельных констант. Но такие модели не могут использоваться для прогнозирования результатов сложных процессов без учета возможного изменения взаимодействия механизмов физических явлений в новых условиях.

Параметрический анализ используют и в сложных дисперсных системах для оценки влияния каждой из совокупности независимых переменных физических процессов, отдельные значимые факторы. Когда взаимодействуют несколько простых

физических явлений, одни и те же параметры могут одновременно участвовать в нескольких из них. При этом различные механизмы могут либо стимулировать другие явления, либо подавлять, снижая их эффективность. Суммарный результат влияния таких параметров обычно не является аддитивным, и оценить роль каждого механизма по отдельности оказывается невозможным. Поэтому такие модели также не носят общего характера, необходимого для прогнозирования проектных параметров на основе параметрического моделирования.

Примеры гармоничного совмещения разнородных физических явлений

Пример дискретизации несовместимых конкурирующих процессов. Совмещение технологических операций подготовки нефти, газа и воды оказывается исключительно плодотворным методом для повышения эффективности нефтепромысловых процессов [14]. Для разрушения водонефтяной эмульсии обычно использовались предварительный нагрев, обработка ее в смесительных устройствах деэмульгатором и отделение пластовой воды после длительного отстоя в технологических аппаратах. При этом необходимо выполнить три основные технологические операции, связанные с а) разрушением бронирующих оболочек на каплях пластовой воды путем смешения ее с реагентами-деэмульгаторами, б) укрупнением мелкодисперсных капель пластовой воды и в) разделением эмульсии на обезвоженную нефть и пластовую воду (рис. 1).

Совмещение этих технологических операций по разрушению стойких эмульсий с транспортированием в промысловых трубопроводах использует энергию пластового давления и температуру. В результате это снижает потребности в специализирован-

ном оборудовании, снижает энергетические и эксплуатационные затраты на подготовку нефти. Но с другой стороны, в целом процесс разрушения нефтяных эмульсий представляет сложное для моделирования и контроля физическое явление. Дело в том, что каждая из технологических операций эффективно выполняется в различных условиях, препятствующих их одновременному эффективному выполнению. Для разрушения нефтяной эмульсии вначале необходимо диспергировать пластовую воду, увеличивая площадь контакта с деэмульгатором. Поэтому выполнение операции а) требует интенсивного перемешивания, достигаемого высоким уровнем турбулентности потока эмульсии. Следующая операция б) связана с умеренным уровнем турбулентности, обеспечивающим укрупнение дисперсной фазы при столкновениях капель, лишенных бронирующих оболочек, до заданного уровня. Наконец, последняя операция в) состоит в подготовке условий для седиментации укрупненных капель в потоке и отделения пластовой воды при соответствующем режиме движения.

Такие технологические соображения позволяют дискретизировать сложный процесс на простые операции массообмена, коалесценции и седиментации, что позволяет избежать негативного влияния их друг на друга [5]. В свою очередь, при целевом упрощении сложности существенно упрощаются модельные представления, необходимые для выполнения технических расчетов на стадии проектирования обустройства нефтяных месторождений. Использование трубопроводных коммуникаций в технологических целях снижает необходимость в специализированном оборудовании, которое требует больших эксплуатационных затрат.

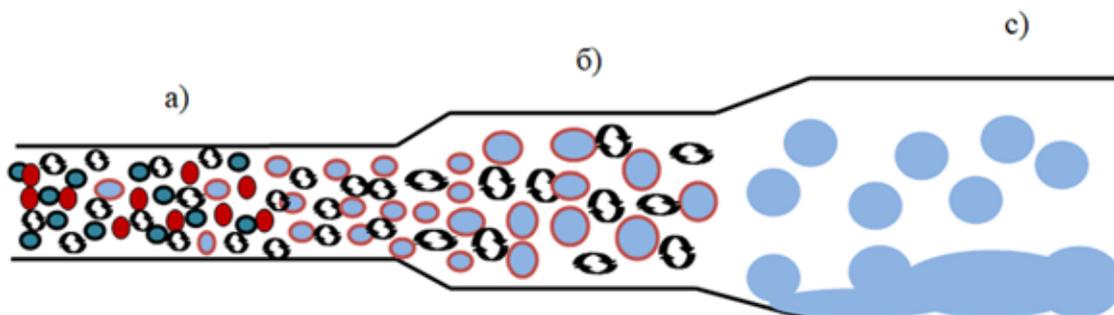


Рис. 1. Схема дискретизации конкурирующих технологических операций

Условные обозначения: ○ – турбулентные вихри; ● – капли пластовой воды:

● – с бронирующими оболочками, ● – обработанные реагентом, ● – без бронирующих оболочек

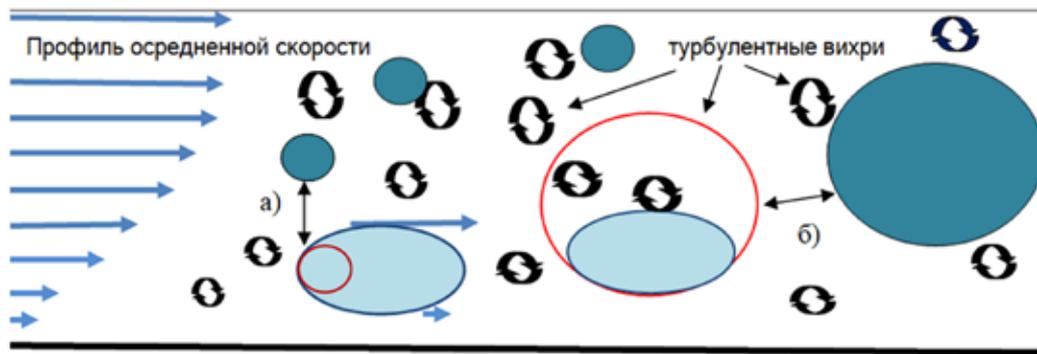


Рис. 2. Взаимодействие вихрей с эллипсоидальной поверхностью капли в области а) большой и б) малой кривизны

Пример гармоничного совмещения процессов. Исходя из опытных фактов поведения капель жидкости под влиянием сдвиговых напряжений в пристенной зоне, ограничивающей турбулентный поток, естественно учитывать степень деформации, которая влияет на эффективность их разрушения. Состояние дисперсной фазы в неоднородном турбулентном потоке эмульсии связано с двумя механизмами элементарных физических явлений дробления капель – градиентным и пульсационным. Вязкие сдвиговые напряжения вследствие градиента осредненной скорости у стенок трубопровода и инерциальные силы турбулентных пульсаций взаимодействуют неизвестным нам образом. Выбор безразмерных критериев, входящих в модельную зависимость, определяется существующими физическими представлениями о характере взаимодействия диспергированных капель жидкости с турбулентным потоком сплошной среды эмульсии.

Теоретическим представлениям о разрушении деформируемых капель жидкости в турбулентном потоке соответствуют инерциальный и градиентный критерии Вебера, представляющие механизмы этих элементарных явлений. Структура их функциональной взаимосвязи не является аддитивной, а нелинейная форма ее может быть оценена с помощью экспериментальных данных и специального метода включения элементарных процессов дробления [3].

Так, естественно рассматривать в качестве основного элементарного процесса инерциальный механизм разрушения капель дисперсной фазы пульсациями скорости сплошной среды эмульсии. Стабильность капель поддерживается поверхностным натяжением, величина которого пропорциональна кривизне поверхности. При деформировании сдвиговыми

напряжениями сферическая форма переходит к форме, близкой к вытянутому эллипсоиду с переменной кривизной. Боковая поверхность вытянутого вдоль потока эллипсоида, представленного на рис. 2, может значительно уменьшать кривизну исходной сферы. Обобщение инерциального механизма разрушения Колмогорова – Хинце

$$\rho_c d v^{-2} / \sigma = C$$

состоит в замене кривизны капли с диаметром d эффективной величиной деформированной сферы $d_s = d f(F)$, которая связана с диаметром исходной сферы того же объема величиной. Деформация F , которая учитывает влияние вязких сил градиентного механизма в пристенной зоне трубопровода, записывается как [3]:

$$F = \frac{\sqrt{\lambda} \mu_c \cdot \bar{U}}{\sigma} \cdot \varphi \left(\frac{\mu_d}{\mu_c} \right).$$

Показатель степени нелинейной функции $f(F) = F^\alpha$ отражает неизвестное влияние степени деформации межфазной поверхности на разрушение капель турбулентными пульсациями. Величина $\alpha = 0,5$ представляет характер взаимосвязи этих двух механизмов с учетом эмпирической связи $d_{max} \approx \bar{U}^{-2,5}$, которая установлена ранее для дробления в неоднородном турбулентном потоке [15]. В результате взаимодействия суммарный результат их оказывается эффективнее каждого по отдельности. Таким образом, замена исходного диаметра капель эффективной величиной, определяемой степенью деформации градиентом скорости, позволяет формализовать сложное физическое явление.

Заключение

Структура технологического процесса принимается на основе целевых требований

к качеству продукции и условиям его проведения. Она отображается в структуре модели ее совокупностью элементарных физических явлений, механизмы которых могут способствовать решению поставленных задач. Выбор их предполагает использование механизмов физических явлений, взаимодействующих друг друга и стимулирующих эффективность фазовых и химических превращений. В других случаях, когда конкуренция механизмов явлений снижает их эффективность, необходимо дискретизировать моделируемый процесс на отдельные подпроцессы, где отсутствует негативное влияние их взаимосвязи. Подобная гармонизация внутренней структуры компенсирует недостающую общность теоретических моделей, необходимую при использовании их для прогнозирования условий и технологических параметров сложных процессов на стадии проектирования.

Список литературы

1. Ishii M., Hibiki T. *Thermo-fluid dynamics of two-phase flow*. NY: Springer Science + Business Media Inc., 2006. 462 p.
2. Розенцвайг А.К. Моделирование структуры сложного теплообмена в жидкостной эмульсии // *Современные наукоемкие технологии*. 2020. № 9. С. 64–69.
3. Rozentsvaig A.K., Strashinskii Ch.S. Identification of models of transfer processes in complex disperse systems. *Applied Mathematical Sciences*. 2016. No. 10 (21–24). P. 1151–1161.
4. Розенцвайг А.К. Использование целевых структур при проектировании промышленных установок водоочистки // *Энергосбережение и водоподготовка*. 2005. № 1 (33). С. 29–31.
5. Rozentsvaig A.K., Strashinskii Ch.S. Modeling of complex processes in turbulent flow of unstable emulsions of immiscible liquids. *Periodica Polytechnica Chemical Engineering*. 2017. No. 61 (3). P. 216–226.
6. Sankaya M., Gupta M., Tomaz I., Krolczyk G., Khanna N., Karabulut S., Prakash Ch., Buddhi D. Resource savings by sustainability assessment and energy modeling methods in mechanical machining process: A critical review. *Journal of Cleaner Production*. 2022. Vol. 10. 133403. 21 p.
7. Lima A., Rufino C., Gomes F., Gallo W. Parametric analysis through the second law of thermodynamics of ethanol droplet injection and evaporation in a variable temperature environment. Conference: CERES 2020. Natal. RN. Brazil. 11 p.
8. Kuczynski W., Kruzel M., Chliszcz K. A regressive model for periodic dynamic instabilities during condensation of R1234yf and R1234ze refrigerants. *Energies*. 2022. No. 15 (6). P. 2117.
9. Wei G., Chang Q., Li C., Wang J. Multiscale structures in particle–fluid systems: Characterization, modeling, and simulation. *Chemical Engineering Science*. 2019. Vol. 98. P. 198–223.
10. Yang J.R., Wong S.C. On the discrepancies between theoretical and experimental results for microgravity droplet evaporation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2001. Vol. 44 (23). P. 4433–4443.
11. Zhang B., Gong S., Dong S., Xiong Z., Guo Q. Experimental investigation on vibration characteristics of subcooled and saturated pool boiling. *Applied Thermal Engineering*. 2023. Vol. 218. № 3164. P. 119297.
12. Ono J., Unno N., Yuki K., Taniguchi J., Satake S. Visualization and Sound Measurements of Vibration Plate in a Boiling Bubble Resonator. *Fluids*. 2021. Vol. 6 (12). P. 443.
13. Pawlus P., Reizer R., Wiczorowski M., Krolczyk G. Parametric description of one-process surface texture. *Measurement*. 2022. Vol. 204. P. 112066.
14. Розенцвайг А.К. Системные аспекты совмещения технологий сбора, транспорта и подготовки нефти // *Нефтяная провинция*. 2020. № 4 (24). С. 230–242.
15. Slecher C.A., Jr. Maximum stable drop size in turbulent flow. *A.I.Ch.E. Journal*. 1962. Vol. 8. P. 471–477.