

Моделирование влияния масштаба пористой среды на извилистость

(Полоцкий государственный университет, Беларусь)

В данной работе путем моделирования движения точки-трассера в трехмерной сетке капилляров с кубической решеткой и моделированной ортоэдральной сеткой в режиме градиентной диффузии и фильтрации изучено влияние масштаба пористой среды на извилистость. Установлена функция перехода от двухмерной извилистости к трехмерной. Определена плотность распределения извилистости, которая в области макромасштаба представляет собой смещенное нормальное распределение, что может служить дополнительным признаком представительного размера пористой среды. Сделано допущение о зависимости извилистости от характера процесса переноса в пористой среде, которое подтверждается рядом исследователей. Показано, что эта зависимость связана с особенностями структуры пористой среды и при определенных условиях извилистость измеренная в градиентной диффузии совпадает с фильтрационной извилистостью.

Введение.

Пористые среды и, в частности, зернистые слои широко используются в различных областях науки и техники. Среди важнейших характеристик пористых сред, таких как пористость, средний размер частиц или эквивалентный диаметр пор, распределение частиц или пор по размерам и др., присутствует коэффициент извилистости T или извилистость поровых каналов. Чаще всего извилистость определяют как отношение длины поры L_l к толщине пористого слоя [1,2]. Ввиду пересеченности порового пространства и случайного распределения длин поровых каналов, извилистость присутствует в уравнениях переноса как осредненная величина.

В капиллярной модели пористого тела проницаемость среды k характеризуется соотношением [2]:

$$k = \frac{\varepsilon^3 d^2}{36K(1 - \varepsilon)^2}, \quad (1)$$

где ε - пористость; d - средний эквивалентный размер частиц слоя; K - коэффициент, $K = K_0 T^2$; K_0 - константа в большинстве случаев равная 2.

Диффузионный перенос вещества характеризуется коэффициентом эффективной диффузии De [1]:

$$De = D_0 \frac{\varepsilon}{\tau} = D_0 \frac{\varepsilon}{T^2}, \quad (2)$$

где D_0 - коэффициент диффузии вещества в неограниченной среде и τ - фактор извилистости, $\tau = T^2$ [3,4].

Как правило, величина T принимается постоянной, если изменение скорости невелико, и независимый от масштаба пористой среды, т.е. размера (толщины) пористого тела. Однако, для большинства параметров, характеризующих случайную пористую среду существует порог, разделяющий микро- и макро- показатели пористой среды [5]. Схематично это может быть представлено рис. 1, где в качестве измеряемого параметра могут выступить пористость, поперечное сечение поры, извилистость и т.п.

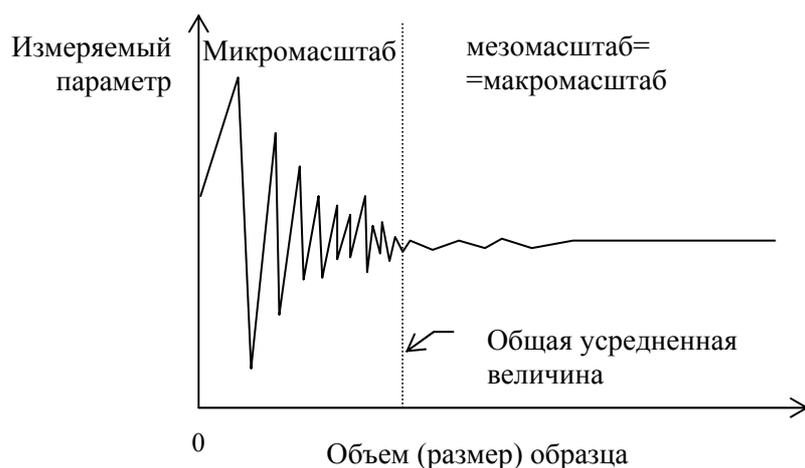


Рис.1. Схема зависимости измеряемого параметра случайной пористой среды от объема (размера) образца.

Граница перехода от микро- к макромасштабу изучена для пористости (пристенный эффект), когда флуктуации пористости затухают на расстоянии равном примерно 5 диаметрам сфер от стенки аппарата [2, 6]. Однако вопрос о том, на каком масштабе пористой среды извилистость можно считать равной ее усредненной глобальной величине остается открытым.

Модель пористого тела базирующаяся на методе локального осреднения по объему [7, 8] следующим образом формулирует требования к размеру представительного объема пористой среды. Представительный объем пористой среды, v должен удовлетворять условиям:

1. Осредненные величины не должны зависеть от размера и формы объема.
2. Средние величины должны быть непрерывны и дифференцируемы по времени и пространству.
3. Если l - длина характеризующая v , а d - характерный размер твердой фазы, характеризующий микроскопическую негетомогенность из-за присутствия пор, то $l \gg d$.
4. Если L макроскопическая характеристическая длина части пористой среды на которой наблюдается значительные изменения в осреднениях (макроскопических) параметрах, то $L \gg l$.

Совместно условия 3 и 4 обеспечивают такой выбор S , который будет исключать микроскопическую неоднородность без исключения макроскопической неоднородности.

Оценка величины l для извилистости пор позволила бы уточнить модели пористых сред на микроуровне и динамику их формирования: пористые мембраны, катализаторы, биопленки, а также формирование осадков на начальной стадии разделения дисперсных систем. Определение границы масштаба пористой среды для которого извилистость равна ее усредненной величине и постоянна, позволит определить и масштабную границу k и De (уравнения 1 и 2) выше которой они могут быть, при прочих равных условиях, приняты независимыми от флуктуации T на микроуровне.

Возможно, что ниже перечисленные эффекты связаны с масштабным эффектом извилистости.

Для пористых листовых материалов установлено, что при пористости $\varepsilon < 0,35$ извилистость $T = 1,8 \div 2,4$, тогда как при $\varepsilon = 0,35 \div 0,4$ эта величина составляет $T = 3,63 \div 3,76$ [9, 10]. По всей видимости аномально высокая средняя извилистость может быть связана с ее нестационарностью. Для двух образцов с одинаковой толщиной, но разной плотностью (пористостью) характерный размер (протяженность элементарного участка канала, аппроксимируемого прямой) будет различаться: он меньше для более плотного образца.

Следовательно, масштабный эффект в более пористом образце будет проявляться на больших длинах чем в плотном образце.

Зависимость среднего размера пор от толщины у пористых волокнистых материалах наблюдалась при толщинах меньше «критической» с одновременным увеличением извилистости до 3,0 [11, 12, 13]. Чем тоньше волокна и ниже пористость, тем меньше «критическая» толщина [12].

Аналогичные явления наблюдались у пористых материалов из сеток, что связывают с нерегулярностью структуры и наличием участка течения с неустановившемся профилем скорости [14]. По данным автора достаточно восьмикратного утолщения образцов с первоначальной толщины 75-200 микрон, чтобы получить регулярную структуру.

Вопрос извилистости пор тонких зернистых материалов изучен в недостаточной степени ввиду экспериментальной сложности точных измерений всех характеристик слоя. Если исходить из предположения, что при определенных условиях извилистость пор в тонких слоях выше средней величины, то для некоторой области толщин попадающих в микромасштабную область можно ожидать следующие эффекты: более высокое гидравлическое сопротивление, более низкий коэффициент эффективной диффузии, интенсивную забивку пор в фильтрационном процессе с тонкодисперсной фазой частиц суспензии.

В чистом виде эффект извилистости на практике выделить затруднительно из-за наложения других эффектов, поэтому представляет интерес моделирование извилистости как функции толщины модельной пористой среды. Результаты будут полезны и для правильного представления механизма формирования некоторых осадков в начальный период фильтрации, когда проявляется эффект аномально высокого гидравлического сопротивления осадка.

Целью данного исследования является качественная оценка масштаба l путем применения метода случайного блуждания точки в трехмерной решетке.

Моделирование.

Метод случайного блуждания используется с 1950-х годов [15] для моделирования движения трассера через пористую среду. Метод основывается на аналогии между теорией диффузии и стохастических процессов и включает изучение поведения дискретных частиц в заданном поле течения [16]. Поле потока определяется знанием поровой структуры и соответствующих граничных и начальных условий.

Основные исследования проводились на трехмерной сетке, ориентированной по осям x , y и z . Размер каждого элемента принят равным единице.

Алгоритм случайного блуждания состоял из трех частей. 1. Трассер-частица помещается на вход модели. 2. Генератором случайных чисел задается случайное RN в диапазоне $[0, 1]$ и на основании граничных условий определяется направление ее движения в трехмерной сетке. 3. Затем частица проходит определенной (детерминированное) расстояние Δl , что соответствует скорости w и временному интервалу Δt . В данной модели принимаем $\Delta l = v \cdot \Delta t = 1$, что соответствует расстоянию от одной узловой точки сети до следующего ближайшего узла. Условие $\Delta l = 1$ делает процесс независимым от времени.

Исследовалось два случая блуждания точки: «градиентная» диффузия и фильтрация при начальных условиях $x = 0$, $y = 0$ и $z = 0$.

Граничные условия градиентной диффузии. Движущая сила совпадает с направлением оси Z . Движение точки в плоскости xu , перпендикулярной направлению движущей силы не ограничивалось, т.е. она могла совершать движение в зависимости от RN как вперед, так и назад:

$$\begin{aligned}x_i &= x_{i-1} \pm \Delta l, \\y_i &= y_{i-1} \pm \Delta l,\end{aligned}$$

если $a > RN \geq 0$, то $(x + \Delta l; y + 0; z + 0)$,

если $b > RN \geq a$, то $(x - \Delta l; y + 0; z + 0)$,

если $c > RN \geq b$, то $(x + 0; y + \Delta l; z + 0)$,

если $d > RN \geq c$, то $(x + 0; y - \Delta l; z + 0)$,

если $0 \geq RN \geq d$, то $(x + 0; y + 0; z + \Delta l)$.

Градиента по оси Z задавался условием:

$$z_i > z_{i-1},$$

т.е. попятное движение точки в направлении оси Z запрещено.

Извилистость определялась как отношение пути, пройденного точкой к расстоянию пройденному в направлении действия движущей силы

$$T_n = \frac{\sum_{i=1}^n \Delta l_i}{\sum_{i=1}^n \Delta z_i},$$

в частном случае, когда $\Delta l = \Delta z = 1$, $T_n = \frac{n}{z} = \frac{L}{z}$,

где n - число шагов (итераций) точки-трассера и $L \equiv n$ - расстояние пройденное точкой. Таким образом «диффузионная» извилистость представляет собой извилистость пути пройденного точкой.

Флуктуации движения точки в плоскости xu можно сравнить с диффузионным процессом в котором инертная молекула может входить в тупиковые поры и возвращаться в основной поток.

В случае фильтрационного процесса исходили из условия минимального пути, т.е. если локальная траектория движения точки замыкалась, то такие циклы опускались. Это условие запрещает попятное движение точки во всех направлениях.

Например, если после очередной итерации $n + 1$ точка-трассер меняет свои координаты с $(x_n; y_n; z_n)$ на $(x_{n+1}; y_{n+1}; z_{n+1})$ и затем, в результате одной или нескольких итераций оказывается в координате $(x_{n+k} = x_n; y_{n+k} = y_n; z_{n+k} = z_n)$, то таким образом локальная траектория движения точки-трассера замыкается и происходит попятное движение. В данной модели попятные движения могут образовываться только в плоскости xu , причем $k \geq 2$.

Это сходственно с идеализированным фильтрационным процессом, когда среда движется по основным каналам и наличие застойных зон не влияет на длину пути.

Обсуждение результатов.

Число моделированных частиц составило 120 для каждого случая, а число итераций 1000. Использование большего числа тестируемых частиц и итераций не повышало точности модели.

Как и предполагалось, извилистость является функцией масштаба L , рис.2, $L = T \cdot z$, где z совпадает с «толщиной» модели. При малых $z = \frac{L}{T} \left(\frac{n}{T} \right)$ флуктуации средней извилистости достигают значительных величин. Для градиентной диффузии можно оценить границу микромасштаба как $n = 100 \div 150$, что соответствует средней толщине слоя модели $z = 20 \div 30$ единиц.

Анализ функции плотности распределения извилистости $p(T)$, в зависимости от толщины модели z , проведенный на результатах моделирования движения 120 точек-трассеров:

- при $z \approx 8$ ($n = 50$), средняя извилистость $T_{av} = 5,49$, $\sigma = 2,17$;
- при $z \approx 28$ ($n = 150$), средняя извилистость $T_{av} = 5,2458$, $\sigma = 0,87$;
- при $z \approx 60$ ($n = 300$), средняя извилистость $T_{av} = 5,11$, $\sigma = 0,6075$;
- при $z \approx 200$ ($n = 1000$), средняя извилистость $T_{av} = 5,031$, $\sigma = 0,35$,

показывает, что даже при $z \approx 60$ ($n = 300$) распределение не является унимодальным распределением, что следует связать с наличием мезо-масштабной (переходной) области. Только при условной толщине $z \approx 150$ функция $p(T)$ принимает вид нормального распределения. Для $z \approx 200$ ($n = 1000$) распределение $p(T)$ характеризуется $T_{av} = 5$ и среднеквадратичным отклонением $\sigma = 0,3$. Однако, поскольку вариации T_{av} в мезообласти существенно не отличаются от T_{av} на макромасштабе, то особое внимание следует обратить на пороговую величину Z_n перехода микромасштаба в макро, который оценивается при градиентной диффузионной модели величиной $Z_n = 20 \div 30$ единиц.

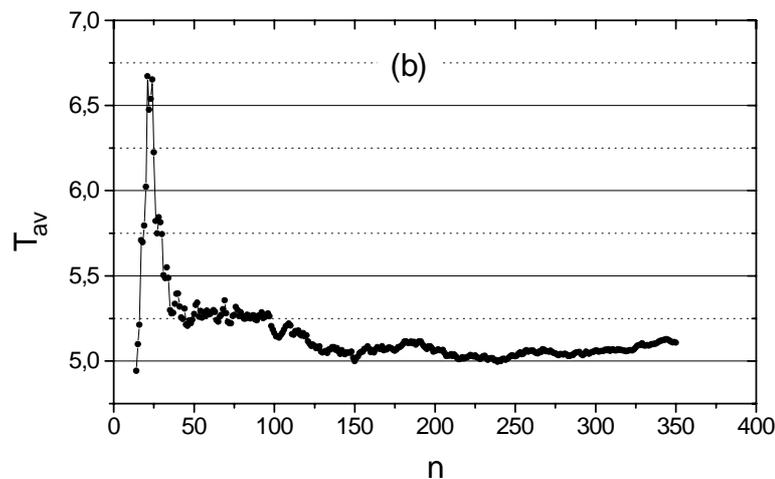


Рис. 2. Примеры вариации средняя извилистость T_{av} в направлении оси Z для 35 каналов и числе шагов итерации $n = 350$.

Методически важным является условие корректного перехода от двухмерной извилистости к трехмерной, так как многие модели переноса в пористых средах оперируют двумерными приближениями [7]. Проекция трехмерного канала на плоскости показаны на рис. 3.

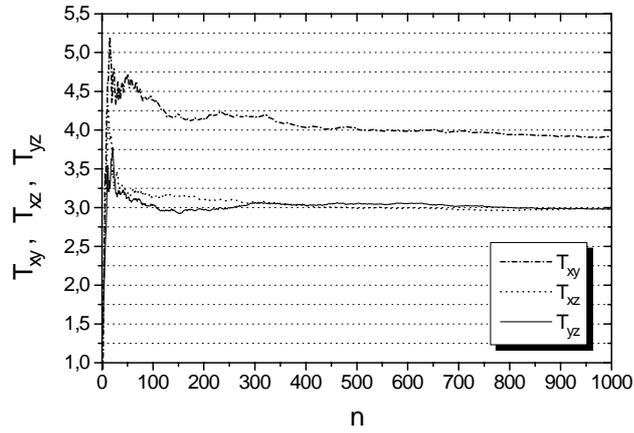


Рис. 3. Двумерная извилистость T_{xy} , T_{xz} и T_{yz} как проекция осредненной трехмерной извилистости на плоскости xy , xz и yz .

Поскольку в двумерных моделях актуальной является извилистость в направлении переноса, то определим переходную функцию от двумерной извилистости T_{2D} к трехмерной T_{3D} для направления z ($T_{xz} \approx T_{yz} \approx 3$). В рамках рассматриваемой модели переходная формула для извилистости диффузионного пути трассера будет:

$$T_{3D} = (T_{2D})^{1,47}. \quad (3)$$

Для фильтрационной модели величина T_{3D} была определена как $T_{3D} \approx 3$ и для двумерного случая $T_{2D} \approx 2$, откуда переходная функция будет:

$$T_{3D} = (T_{2D})^{1,58}. \quad (4)$$

Следует отметить то, что извилистость является зависимой от природы процесса переноса в пористой среде. Для условий моделирования отношение «диффузионной» извилистости к «фильтрационной» равна 1,67. В экспериментах по течению в высокопористых средах показано, что извилистость является функцией числа Рейнольдса [17]. Например при пористости $\varepsilon = 0,8$ извилистость измеренная при $Re \leq 0,01$ равна 1,6, тогда как при $Re > 10$ она составляет только 1,23, что близко к извилистости определяемой как $\frac{1}{\varepsilon} = 1,25$ [1].

Чувствительность извилистости к характеру процесса переноса определяется структурой пористой среды и при определенных условиях может быть исключена из числа определяющих параметров.

Дополнительное моделирование на модифицированной октоэдральной решетке без ребер в плоскости xy , может служить примером индифферентности извилистости к условиям процесса переноса. Для данного типа решетки градиентная диффузия совпадает с фильтрацией. Однако и в этом случае присутствует микромасштабная область, где извилистость имеет значительные флуктуации относительно средней величины, рис. 4, причем осредненная извилистость практически постоянна: для $n = 50$, $T_{av} = 1,41$ и при $n = 1000$, $T_{av} = 1,4144 \approx \sqrt{2}$ единиц.

Область затухания флуктуаций оценивается $n \approx 200$ ($z \approx 150$ единиц).

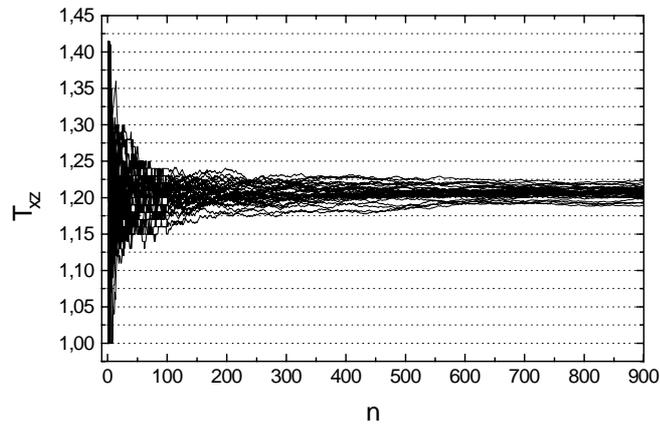


Рис. 4. Проекция извилистости пути точки-трассера на модифицированной октоэдральной решетке в плоскости xz в зависимости от числа итераций n , (b) данные измерений для 35 каналов.

В проекциях на плоскости xz и yz двумерная извилистость равна 1,207, $\sigma = 0,007$ при $n = 1000$. Переходная функция равна $T_{3D} = (T_{2D})^{1,84}$.

В качестве примера приведем некоторые оценки использования полученных данных для интерпретации экспериментальных данных в биопленках и при фильтровании воды через мембрану.

Ян и Левандовский [18] выполняя измерение локального коэффициента массопередачи в смешанной биопленке микроорганизмов *Pseudomonas aeruginosa*, *Pseudomonas fluorescens* и *Klebsiella pneumoniae*, обнаружили существенные флуктуации коэффициента для биопленки толщиной до 150-200 микрон от подложки. С увеличением толщины биопленки эти флуктуации затухали, что предположительно было связано наличием извилистых каналов. Если за характерный масштаб в смешанной биопленке принять 1,5 микрона [19], а в качестве микромасштабного фактора $l_n = 100$, то оценка масштабного перехода $h_n = 1,5 \cdot 100 = 150$ микрон совпадает с приведенной выше толщиной биопленки.

Исследования по прямому фильтрованию водопроводной воды на мембране МИФИЛ ПА-20 в режиме тупикового фильтрования, рис. 5, показали наличие

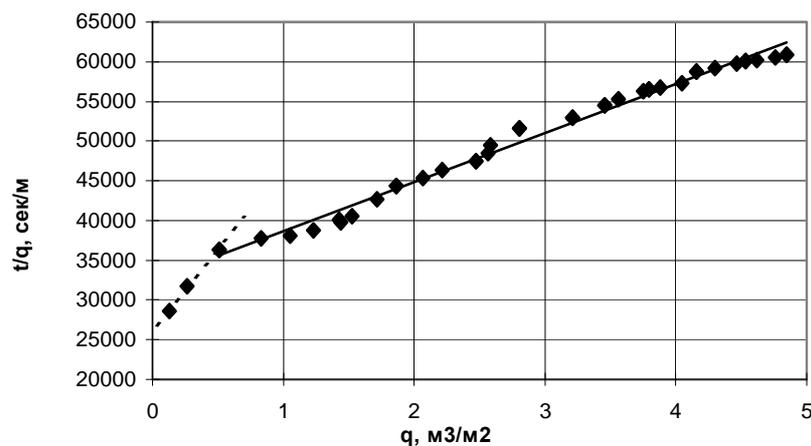


Рис. 5 Зависимость обратной средней скорости фильтрования водопроводной воды t/q от удельного объема фильтрата q на мембране МИФИЛ ПА-20. Средний перепад давления 0,2 МПа.

нелинейного участка на зависимости $t/q - q$, где t - время фильтрования, с; q - удельный объем фильтрата, м³/м²:

$$\frac{t}{q} = \frac{\mu \cdot r_0 \cdot x_0}{2 \cdot \Delta p} q + \frac{\mu \cdot R_m}{\Delta p} \quad (*)$$

Здесь μ - динамическая вязкость, r_m - удельное объемное сопротивление осадка; x_0 - отношение объема осадка к объему фильтрата; Δp - перепад давления; R_m - гидравлическое сопротивление мембраны.

Уравнение (*) соответствует фильтрованию с образованием осадка. Такой режим формирования следует ожидать на мембране при среднем размере частиц загрязнений 2 микрона. Обработка данных в координатах $t/q - t$, соответствующих фильтрованию с постепенным закупориванием пор также дало отклонение начального периода фильтрования от линейного, что указывает на действие иных факторов. Протяженность начального периода фильтрования составляет около 6 часов, что соответствует удельному объему фильтрата $q \approx 0,5$ м³/м². Анализ показателя сжимаемости осадка показал, что этим эффектом можно пренебречь. Так как отношение $r_{0_1} / r_{0_2} \approx 4 \div 3.38$, где r_{0_1} и r_{0_2} - удельное массовое сопротивление осадков в начальный период и в период фильтрования с постоянным сопротивлением осадка соответственно, то можно предположить влияние выше обсуждаемого эффекта извилистости.

Удельное массовое сопротивление осадка связано с проницаемостью, k , следующим образом:

$$r_0 \cdot k \cdot (1 - \varepsilon) = 1, \\ k = \frac{d_s^2 \cdot \varepsilon^3}{K \cdot T^2 \cdot (1 - \varepsilon)^2},$$

где ε - пористость осадка; d_s - эквивалентный диаметр частиц осадка; T - извилистость; K - константа.

Толщина осадка в конце начального периода фильтрования составила $h = 70$ микрон. Используя средний размер частиц $d_s = 2$ микрон как характерный размер получим $L = 70 / 2 = 35$, что лежит в пределах границ установленных с помощью описанной выше модели. Полагая, что отношение извилистости на микро- и макромасштабах $1,7 \div 1,9$ (см. модель), можно записать:

$$\frac{r_{0_1}}{r_{0_2}} \sim \left(\frac{T_1}{T_2} \right)^2 = 2.89 \div 3.61.$$

Таким образом предварительная оценка указывает на возможность вклада эффекта извилистости в кинетику начального периода фильтрования.

Следует отметить, что данная оценка носит предварительный характер и в дальнейшем требует более детального изучения свойств осадка, так как на ряду с извилистостью возможно изменение пористости в зоне прилегающей к мембране. Однако измерение пористости на столь тонких осадках представляет сложную техническую проблему. Можно предположить, что вклад пористости будет также увеличивать сопротивление на начальном участке в пропорции $\sim 1,5$.

Выводы.

Путем моделирования движения точки-трассера в трехмерной сетке капилляров с кубической решеткой и моделированной ортоэдральной сеткой в режиме градиентной диффузии и фильтрации установлено, что для средней извилистости траектории движения точки существует область микромасштабных толщин модели на которых извилистость отклоняется от средней в виде флуктуаций на 50-100 %. В масштабе модели эта область соответствует 20-30 единицам.

Для условий модели установлено, что масштабный переход от микро- к макро размеру модели лежит в пределах 60-100 единиц характеристического размера, за который принята длина канала соединяющая два узла капиллярной сети. Отмечено наличие переходной области (мезомасштаб) в пределах 30-60 единиц.

Определена плотность распределения извилистости, которая в области макромасштаба представляет собой смещенное нормальное распределение, что может служить дополнительным признаком представительного размера пористой среды.

Установлена функция перехода от двумерной сети капилляров с извилистостью T_{2D} к трехмерной сети с извилистостью T_{3D} в форме $T_{3D} = (T_{2D})^m$, где показатель $m \geq 1$ зависит от структуры пористого тела.

Сделано допущение о зависимости извилистости от характера процесса переноса в пористой среде, которое подтверждается рядом исследователей. Причем, на примере модифицированной ортоэдральной сети без ребер в плоскости xu показано, что эта зависимость связана с особенностями структуры пористой среды и при определенных условиях извилистость измеренная в градиентной диффузии совпадает с фильтрационной извилистостью. Индифферентность извилистости возрастает с уменьшением осредненного угла вектора движения трассера с вектором движущей силы, что может быть вызвано как анизотропией пористой среды, так и особенностями течения.

Литература.

1. Саттерфинд Ч.Н. Массопередача в гетерогенном катализе. – М.: Химия, 1976. – 240 с.
2. Аэров М.Э., Тодес О.М., Наринский Д.А. Аппараты со стационарным и зернистым слоем. – Л.: Химия, 1979. – 176 с.
3. Пусьман Л.М. Диффузия в пористых средах случайной структуры // Докл. АН СССР. – 1973. – 212, №5, - с. 1172-1175
4. Рудобашта С.П., Тепляков Ю.А. Расчет коэффициента извилистости и фактора формы пор при диффузии в однородно-пористых материалах // Пром. Теплотехника. 1987. – 9, № 1, с. 61-66
5. Lessmann R.C. A conceptual framework for predicting the filtration performance of woven fibrous filter media // Fluid / Particle Sep. Journal. – 1988. – 1, № 6, p. 35-43
6. Govindarao, W.H. and Froment, G.F., Voidage profiles in packed beds of spheres // Chem. Eng. Sci. – 1986. – 41, №3. – p. 533-539
7. Хейфец Л.И., Неймарк А.В. Многофазные процессы в пористых средах. – М.: Химия, 1982. – 320 с.;
8. Bear J. And Bachmat Y. Transport phenomena in porous media – basic equations. // Fundamentals of Transport Phenomena in Porous Media. Eds. J. Bear and M.Y. Corapcioglu, NATO ASI Series E: Applied Sciences. – 1984. - №82. – p. 3-61
9. Сорокин В.К. О связи грязеемкости с параметрами структуры металлических листовых материалов // Изв. Вузов. Машиностр. – 1976. - №9. – с. 129-132;
10. Сорокин В.К., Хренов В.А. Прогнозирование фильтрующих и механических свойств пористой холоднодеформированной стали // Порошковая металлургия. – 1984. - №9. – с. 88-89
11. О структурных характеристиках пористых материалов из металлических волокон / А.Г. Косторнов и др. // Порошковая металлургия. – 1977. - № 11. – с. 30-36;

12. Косторнов А.Г. Количественный критерий пористой структуры проницаемых волоконных материалов // Порошковая металлургия. – 1977. - № 4. – с. 80-87;
13. Федорченко И.М. Развитие работ в области высокопористых материалов из металлических порошков и волокон // Порошковая металлургия. – 1977. - № 9. – с. 25-35;
14. Косторнов А.Г. Параметры пористой структуры проницаемых материалов. 1. Теоретические предпосылки и модельные исследования // Порошковая металлургия. – 1978. - № 4. – с. 34-40
15. Sterberg, S.P.K., Cushman, J.H. and Greenkorn, R.A. Random walks in prefractal porous media // AdChE Journal, 1996. – 42, №4, p. 921-926
16. Lyklema, J. Fundamentals of cluterface and colloid Science. Vol. 1: Fundamentals. – London, Academic Press, 1991. – p. 6.19
17. Mauret, E., Renaud, M. Trauspor phenomena in multi-particle systems – II. Proposed new model based on flow around submerged objects for sphere and fiber beds-transition between the capillary and particulate representations // Chem. Eng. Sci. – 1997. – 52, №11, pp. 1819-1834
18. S. Yang and Z. Lewandowski, Measurement of local mass transfer coefficient in biofilms, Biotechnology and Bioengineering, 1995. – 48, №6, pp. 737-744
19. Microbial Biofilms: Formation and Control. Eds. S.P. Denyer, S.P. Gorman, M. Sussman, Oxford, Blackwell Sci. Publ., 1993

Кафедра «Химическая техника»

Поступила в редакцию