POLITECHNIKA WARSZAWSKA
Wydział Inżynierii Chemicznej i Procesowej

Praca dyplomowa inżynierska

Od równania Liouville'a do bilansu populacji

Autor: Grzegorz Tyl

Nr albumu: 234963

Promotor: prof. dr hab. inż. Jerzy Bałdyga

Rok akademicki: 2013/2014

Wprowadzenie

Procesy, w których występuje faza rozproszona są szeroko stosowane w przemyśle. Obejmują one krystalizację, rozdrabnianie, procesy zachodzące w układach ciecz-ciecz, procesy mikrobiologiczne oraz wiele innych. Do modelowania układów dyspersyjnych stosuje się często równania bilansu populacji. Równania bilansu populacji są także ściśle związane z klasycznymi równaniami mechaniki statystycznej takimi jak teoremat Liouville'a oraz równania Boltzmanna i Maxwella.

Cel i zakres pracy

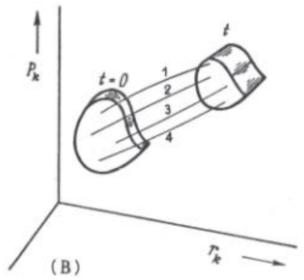
Celem pracy jest konfrontacja równań bilansu populacji z klasycznymi równaniami mechaniki statystycznej, z którymi są one bezpośrednio związane. Zakres pracy obejmuje:

- Przedstawienie teorii zespołów statystycznych oraz przestrzeni fazowych
- Wyprowadzenie teorematu Liouville'a
- Wprowadzenie równań bilansu populacji
- Ilustracja wpływu wzrostu oraz nukleacji na rozkład wielkości kryształów
- Wyprowadzenie równania Boltzmanna oraz pokazanie jego zastosowania w opisie koagulacji i agregacji cząstek

Równania mechaniki statystycznej

- równanie Liouville'a

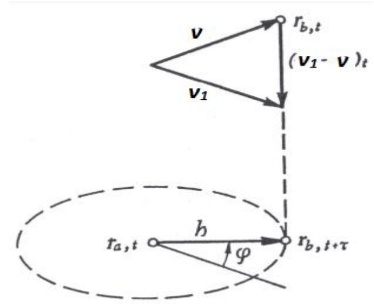
$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\sum_{k=1}^{N}\left(\dot{\boldsymbol{r}}_k\cdot\nabla_{r_k}+\dot{\boldsymbol{p}}_k\cdot\nabla_{p_k}\right)\right)F_N=0$$



Dla tych samych warunków makroskopowych realizacje mikroskopowe są odmienne, co tłumaczy sens średniej z realizacji.

- **równanie Boltzmanna**

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\nabla+\boldsymbol{f}\cdot\nabla_v\right)f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v},t)=$$
$$=\int\left(f'f_1'-ff_1\right)|\boldsymbol{v}_1-\boldsymbol{v}|\,d\varphi\,h\,dh\,d\boldsymbol{v}_1$$



Bilans populacji

Odpowiednio zmodyfikowane równania mechaniki statystycznej zostały wykorzystane do opisu nukleacji, wzrostu, rozpadu oraz aglomeracji kryształów (Hulburt, Katz; 1963) i zaprezentowane jako równania bilansu populacji.

- równania bilansu populacji

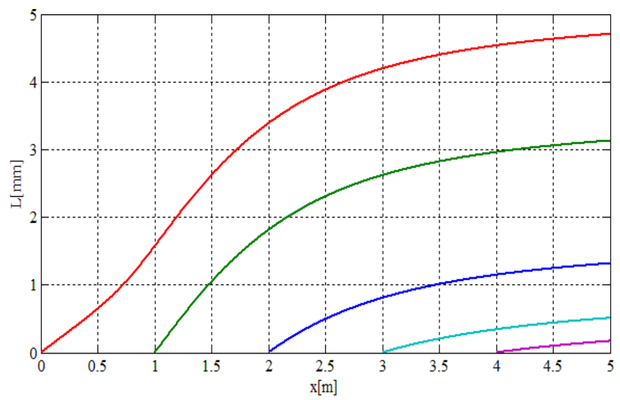
$$\frac{\partial f}{\partial t}+\sum_i\frac{\partial(u_i(\xi,t)f)}{\partial\xi_i}=h(\xi,t)$$

Równanie to jest analogiczne do równania ciągłości dla płynu oraz jest wersją klasycznego równania Liouville'a użyteczną przy opisie procesów z udziałem cząstek.

- agregacja cząstek

$$\beta=\int_{S_c}\left(\overline{\overline{D_B}}\,\vec{\nabla}c-\vec{u}_f c-\vec{u}_{int}c\right)\cdot\vec{n}\,dS_c$$

Podobnie jak równaniu Boltzmanna w rdzeniu agregacji występuje różnica prędkości wynikająca w tym wypadku z ruchów Browna, konwekcyjnego ruchu cząstek oraz efektów sił DLVO, czyli przyciągania i odpychania.



Wykres 1. Zależność rozmiaru kryształów od położenia w krystalizatorze dla modelu uwzględniającego wzrost oraz nukleację. c=0.014mol/dm³

Wnioski

W pracy przedstawione zostały podstawowe równania mechaniki statystycznej oraz ich związek z równaniami bilansu populacji. Poprzez rozwiązanie tych równań metodą momentów przedstawiony został wpływ przesycenia w krystalizatorze na szybkość wzrostu kryształów i rozkład ich wielkości oraz wpływ nukleacji na ten rozkład dla przypadku krystalizacji zachodzącej w krystalizatorze rurowym z przepływem tłokowym. Korzystając z równania Boltzmanna wyprowadzona została zaleznośćna szybkość koagulacji dla przypadku szybkiej koagulacji oraz przedstawione zostały inne rdzenie koagulacji wykorzystywane do modelowania procesu agregacji cząstek.