Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. М. Штеренберг, Д. А. Филиппов, Моделирование процессов коагуляции на основе применения систем кинетических дифференциальных нелинейных уравнений, *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2006, выпуск 42, 207–209

DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu440>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.91.87.62

26 апреля 2023 г., 05:23:30

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КОАГУЛЯЦИИ НА ОСНОВЕ ПРИМЕНЕНИЯ СИСТЕМ КИНЕТИЧЕСКИХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

Рассматривается вид интегро-дифференциального кинетического уравнения коагуляции, учитывающего процессы образования кластерных или фрактальных комплексов. Обсуждаются особенности моделирования процессов коагуляции при изменении размеров дисперсных частиц в широком диапазоне. Описывается реализованный прикладной программный комплекс, который численно интегрирует системы уравнений методом Рунге-Кутты 5-го порядка точности.

Применение кинетических уравнений эффективно при моделировании процессов кластерообразования и коагуляции в объеме как газообразных, так и жидких сред. Развитие теоретических моделей позволяет получить ряд новых результатов по кинетике роста дисперсных частиц, рассчитать кинетические кривые и распределение по размерам кластеров и частиц дисперсной фазы при получении новых структур и материалов, при образовании дисперсных сред в процессах нефтегазового и химического производств и т.д.

Вид конкретных систем дифференциальных нелинейных уравнений зависит от природы моделируемых систем, от основных протекающих в них физических процессов, от принятых на основе теоретических и экспериментальных данных допущений и т.д. При образовании кластерных или фрактальных комплексов, формирующихся за счет увеличения количества первичных структурообразующих элементов (так называемых «мономеров»), кинетическое уравнение для структуры, содержащей i первичных элементов, в наиболее общем случае выглядит следующим образом:

$$\frac{dC_i}{dt} = I_i + 0.5K_{gk} \left(\sum_{g=1}^{g=\infty} C_g \times \sum_{k=1}^{g=\infty} C_k \right) - C_i \left(\sum_{g=1}^{g=\infty} K_{ig} C_g \right) - J_i, \quad (1)$$

где C_i , C_g , C_k – концентрации структурных элементов (кластеров или фракталов) из i , g и k первичных соответственно; K_{gk} – коэффициент скорости взаимодействия частиц классов g и k , приводящего к образованию частиц класса i ; K_{ig} и K_{ik} – коэффициенты скорости взаимодействия частиц классов i и g , i и k соответственно; K_{ii} – коэффициент скорости взаимодействия частиц класса i между собой; I_i и J_i – скорости генерации и гибели элементов класса i по каналам, не связанным с взаимодействием структурных элементов. Запись кинетического уравнения в подобном виде позволяет учитывать возникновение новых структурных элементов из i первичных не только при взаимодействиях частиц, когда $g < i$ и $k < i$, но когда и (или) $g > i$ и (или) $k > i$, например при взаимодействии двух «димеров», и образовании при этом не «тетрамера», а «мономера» и «тримера» и т.п. Если частицы класса i генерируются только при взаимодействии элементов i и $(i-j)$ классов, то второе слагаемое в уравнении принимает вид:

$$0.5K_{gk} \left(\sum_{g=1}^{g=\infty} C_g \times \sum_{k=1}^{g=\infty} C_k \right) = 0.5 \sum_{j=1}^{j=i-1} K_{j,i-j} C_j C_{i-j},$$

где C_j , C_{i-j} – концентрации структурных элементов из j и $i-j$ первичных элементов соответственно; $K_{j,i-j}$ – коэффициент скорости взаимодействия частиц классов j и $i-j$, приводящего к образованию частиц класса i , и тогда система кинетических уравнений сводится к уравнению Смолуховского и ему подобным. В реальных системах количество взаимодействующих частиц конечно, и модельные системы нелинейных дифференциальных уравнений содержат, что очевидно, конечное число слагаемых и уравнений. Конкретный вид кинетических уравнений зависит от полноты учета протекающих в системах физико-химических процессов и возможности применения параметров, значения которых не могут быть определены с достаточной точностью (точные размеры первичного или критического зародыша, энергетические характеристики процесса формирования новой фазы и т.д.). Фактически речь идет о правильности определения величин K – коэффициентов скорости взаимодействия частиц различных классов и величин I и J – скоростей генерации и гибели элементов частиц различных классов по каналам, не связан-

ным с взаимодействием структурных элементов.

Система указанного вида содержит бесконечное число уравнений с бесконечным числом членов в правой части. Для получения численного решения ограничивают число уравнений и применяют методы приближенного описания коагуляции. Учитывая, что размеры коагулирующих частиц меняются в диапазоне от D_0 до $100D_0$ [4], необходимо для описания кинетики коагуляции использовать $n = 10^6$ уравнений, что нереально. Поэтому частицы объединяются в группы по определенным критериям [4]. Для моделирования процессов роста дисперсных частиц были составлены две схемы систем нелинейных дифференциальных уравнений. Система, основанная на методе Розински – Сноу, состояла из 30 уравнений, описывающих изменения концентрации макрочастиц, объединенных в 30 групп. Система, основанная на схеме Лушникова – Сутугина, состояла из 50 уравнений. Уравнения вида (1) использовались для описания изменения концентрации частиц с массами от 1 до 24 масс первичной частицы. Кроме того использовались 26 уравнений типа Розински-Сноу с модифицированными членами прихода. Эти уравнения описывают изменения концентрации частиц с массами в 32, 64, 128 и т.д. раз превышающих первичные, то есть объединенных в группы со средней массой $2^n m$, где m – масса первичной частицы. Учет генерации и ухода частиц за счет притока и стока вызвал необходимость введения в уравнения соответствующих выражений.

С учетом вышеизложенного система уравнений, основанная на методе Розински – Сноу, приняла вид:

$$\begin{aligned}\frac{dZ_1}{dt} &= I_1 - F(m, \rho, T) \left(Z_1 \sum_{p=1}^{30} \psi C_{1p}'' Z_p \right) - K_1 Z_1, \\ \frac{dZ_2}{dt} &= F(m, \rho, T) \left(0.5 Z_1^2 - Z_2 \sum_{p=2}^{30} \psi C_{2p}'' Z_p \right) - K_2 Z_2, \\ \frac{dZ_n}{dt} &= F(m, \rho, T) \times \\ &\times \left(\sum_{p < n-1} 2^{p-n} C_{np}'' Z_n Z_p + 0.75 C_{n-1, n-2}'' Z_{n-1} Z_{n-2} + 0.5 C_{n-1, n-1}'' Z_{n-1}^2 - Z_n \sum_{p=n-1}^{30} \psi C_{np}'' Z_p \right) - K_n Z_n.\end{aligned}$$

Система уравнений, основанная на комбинированной схеме, выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned}\frac{dX_1}{dt} &= I_1 - F(m, \rho, T) X_1 \left(\sum_{j=1}^{24} C_{1j} X_j + \sum_{n=5}^{30} C_{1n}' Z_n \right) - K_1 X_1, \\ \frac{dX_g}{dt} &= F(m, \rho, T) \left(\sum_{j+k=g} \psi C_{jk} X_j X_k - X_g \left(\sum_{j=1}^{24} C_{gj} X_j + \sum_{n=5}^{30} C_{gn}' Z_n \right) \right) - K_g X_g, \\ \frac{dZ_5}{dt} &= F(m, \rho, T) \left(\sum_{j+k=25}^{48} \frac{j+k}{32} C_{jk} X_j X_k + Z_5 \left(\sum_{j=1}^{12} \frac{j}{32} C_{5j}' X_j + \sum_{k=13}^{24} C_{5k}' X_k - \sum_{p=5}^{30} \psi C_{5p}'' Z_p \right) \right) - K_5' Z_5, \\ \frac{dZ_6}{dt} &= F(m, \rho, T) \left(Z_5 \sum_{g=13}^{24} \frac{g+32}{64} C_{5g}' X_g + 0.5 C_{55}'' Z_5^2 + Z_6 \left(\sum_{g=1}^{24} \frac{g}{64} C_{6g}' X_g - \sum_{n=5}^{30} \psi C_{6n}'' Z_n \right) \right) - K_6' Z_6, \\ \frac{dZ_n}{dt} &= F(m, \rho, T) \times \\ &\times \left(Z_n \left(\sum_{p < n-1} 2^{p-n} C_{np}'' Z_p + \sum_{g=1}^{24} C_{gn}' X_g - \sum_{p=n-1}^{30} \psi C_{np}'' Z_p \right) + 0.75 C_{n-1, n-2}'' Z_{n-1} Z_{n-2} + 0.5 C_{n-1, n-1}'' Z_{n-1}^2 \right) - \\ &- K_n' Z_n.\end{aligned}$$

Здесь Z_n – концентрация частиц, состоящих из n первичных. Индексы при Z начинаются с 5, потому что $32 = 2^5$. При $p = n$ и $i = j$ принимается $\psi = 0,5$, а при $p \neq n$ и $i \neq j$ – $\psi = 1$. Коэффициенты коагуляции C определяются соответствующими выражениями [2].

Для решения системы дифференциальных уравнений был реализован прикладной программный комплекс, который численно интегрирует систему методом Рунге-Кутты 5-го порядка точности. Ниже приведены формулы, используемые при расчете:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{1}{2}(k_1 + 4k_4 + k_5) + O(h^5),$$

$$k_1 = \frac{1}{3}hf(t_n, x_n),$$

$$k_2 = \frac{1}{3}hf(t_n + \frac{1}{3}h, y_n + k_1),$$

$$k_3 = \frac{1}{3}hf(t_n + \frac{1}{3}h, y_n + \frac{1}{2}k_1 + \frac{1}{2}k_2),$$

$$k_4 = \frac{1}{3}hf(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{3}{8}k_1 + \frac{9}{8}k_3),$$

$$k_5 = \frac{1}{3}hf(t_n + h, y_n + \frac{3}{2}k_1 - \frac{9}{2}k_3 + 6k_4),$$

где h – шаг интегрирования; $f(t, y)$ – функция правой части.

Входными параметрами для инициации процесса расчета являются: t_0 – время начала процесса; t_n – время окончания процесса; h – шаг интегрирования; ρ – плотность активного вещества; T – температура в зоне коагуляции; α – вероятность слипания частиц; N – количество уравнений системы. Также входными параметрами являются массивы коэффициентов для каждого уравнения: I – интенсивность поступления частиц; K – коэффициент ухода частиц из зоны коагуляции; X_0 – начальное количество частиц данного размера. Все параметры, включая количество уравнений, могут варьироваться. При изменении количества уравнений необходимо учитывать, что первые 24 уравнения имеют тип уравнения Смолуховского, а остальные уравнения – Розински-Сноу. В процессе расчета прогресс выполнения отображается как в графической форме в виде полосы выполнения, так и в текстовой – в виде отображения текущего времени расчета. При необходимости возможен останов процесса расчета и продолжение его позднее. С помощью данной опции также возможно моделирование дополнительного вброса активных веществ в зону коагуляции и их стока, а также изменение параметров среды (дополнительные источники частиц или исчезновение имеющихся по различным каналам, изменение условий ухода, температуры, режим коагуляции – газокINETический или молекулярный). Также можно использовать остановку процесса расчета для просмотра и анализа полученных данных.

В реализованном ППК предусмотрен графический просмотр полученных данных. Просмотр данных возможен в двух разрезах: временном и по группам. В случае временного разреза отображается график количества частиц всех рассчитанных групп в конкретный момент времени. Форма отображения, привязанная к группам, позволяет определить количество частиц данного типа в каждый расчетный момент времени. Для большего удобства и наглядности результатов реализована функция анимации – автоматического отображения результатов в выбранном разрезе. Полученный график можно сохранить для последующего анализа.

Следует отметить, что как любой численный метод, представленная реализация чувствительна к выбору шага интегрирования и входных параметров. При слишком большом шаге процесс может выходить за границы приемлемых значений и вызывать переполнение числа, либо перескакивать интересные и информативные для изучения, но кратковременные и нерегулярные, процессы. При слишком малом шаге процесс расчета занимает очень длительное время. Исходя из сказанного, можно сделать вывод, что для получения наиболее близкого к истине результата необходимо изучить влияние на него варьируемых входных параметров. Также необходимо изучить зависимость между результатами расчета модели и опытных результатов, имеющих одинаковые параметры.

Очевидно, что модернизация алгоритма расчета состоит в введении переменного шага интегрирования на основе априорного анализа системы. Такое изменение повлечет за собой увеличение количества необходимых вычислений на каждом этапе, однако должно улучшить устойчивость процесса, а также определенным образом оптимизировать число итераций с целью нахождения компромисса между качеством полученных данных и временем расчета.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Штеренберг А.М., Потапов В.К. Макрокинетика формирования дисперсной фазы в газоразрядных системах. Самара: СамГТУ. 1997. С. 192.
2. Сутугин А.Г., Луишиков А.А. О моделировании коагуляции высокодисперсных аэрозолей // ТОХТ. 1975. № 2. С. 210-218.

Поступила 01.12.2005 г.