



دانشگاه صنعتی امیرکبیر
(پلی تکنیک تهران)

پروژه‌ی درس فرایند های تصادفی

شبه سازی حرکت و ته نشینی ذرات معلق در آب با حرکت براونی

استاد درس:

دکتر حسین عباسی

ارائه دهنده:

بهنود بندی

تیر ۱۳۹۸

* چکیده

همواره در آب ذرات معلق وجود دارند، از گل و لای گرفته تا محلول های سوسپانسیون تولید شده در صنعت. ته نشین شدن این ذرات همیشه مورد بررسی بوده، در بعضی موارد این اتفاق باید تسریع شود و در برخی موارد دیگر باید جلوی ته نشینی گرفته شود. در این پروژه ما قصد داریم با شبیه سازی حرکت براونی ذرات معلق در آب راکد، شکل و زمان مورد نیاز برای ته نشینی را بررسی کنیم. همچنین در آینده میتوان با تعمیم این شبیه سازی و وارد کردن شرایط پیچیده تر، از این شبیه سازی در صنعت نیز استفاده کرد و مسائل واقعی تر را بررسی کرد.

* مقدمه

از دیرباز جداسازی مواد معلق در آب و یا جلوگیری از ته نشینی آن ها مورد بحث و تحقیق بوده. وجود بعضی از این ذرات در آب می تواند باعث ایجاد مشکلات شدید برای صنایع و یا بهداشت شوند و یا ته نشین شدن مواد میتواند باعث بلا استفاده شدن برخی دارو ها یا مواد غذایی شود بنابر این در تصفیه آب و فاضلاب و یا صنایع غذایی این مباحث اهمیت فراوان دارند. در گذشته برای مدل کردن و محاسبه زمان و شکل ته نشینی مواد آزمایش هایی انجام می شد و برای شرایط مختلف پارامتر ها اندازه گیری می شدند که این آزمایش ها با زمان بسیار زیاد و هزینه بالا انجام می شدند و نتایج آن در جدول هایی در اختیار دانشمندان، مهندسين و صنعت قرار داده می شد. امروزه با پیشرفت روش های شبیه سازی، بسیاری از این فرآیند ها با کامپیوتر شبیه سازی میشوند و نیازی به انجام خیلی از آزمایش های هزینه بر و زمان بر نیست. حرکت براونی حرکت تصادفی ذرات در بین مولکول های سیالات است که فرمول بندی ریاضی آن نخستین بار توسن آلبرت انشتین نوشته شد و بعد از او پاول لانژوین آن را کامل کرد.

* حرکت براونی، فرایند O-U و معادله لانژوین

انشتین ابتدا حرکت براونی را صرفا ناشی از یک حرکت تصادفی به شکل زیر دانست:

$$X(t + dt) - X(t) = \sqrt{\delta^2 dt} N_t^{t+dt}(0,1)$$

اما لانژوین بعد از او با وارد کردن آثار تصادفی به قانون دوم نیوتون، شکل کامل تر معادله بالا را نوشت که متشکل از یک قسمت fluctuation و یک قسمت dissipation است.

$$dX = V(t)dt$$

$$dV = \left[\frac{F(t)}{M} \right] dt$$

با اضافه کردن جمله تصادفی به نیرو خواهیم داشت:

$$dV = -\gamma V(t)dt + \sqrt{\beta^2 dt} N_t^{t+dt} \quad (0,1)$$

و اگر ذره مان علاوه بر حرکت بالا، یک سرعت سوق (v_d) داشته باشد، در حالت کلی می توانیم اینگونه معادله لانژوین را بنویسیم:

$$dV = -\gamma(V(t) - v_d)dt + \sqrt{\beta^2 dt} N_t^{t+dt} \quad (0,1)$$

از قضیه Fluctuation-Dissipation برای مقادیر γ و β داریم:

$$\begin{aligned} \frac{\beta^2}{2\gamma} &= \frac{kT}{M} \\ \rightarrow \beta^2 &= \frac{2\gamma kT}{M} \\ \gamma &= \frac{5\pi\eta r}{M} \end{aligned}$$

که در رابطه بالا، η ویسکوزیته سیال، r شعاع ذره حرکت کننده و M جرم آن ذره است

* حرکت براونی سه بعدی در حضور نیروی گرانش در داخل سیال

در مسئله مورد بررسی ما، ذرات در یک سیال (آب) به صورت سه بعدی و با تاثیر نیروی گرانش زمین در جهت $-Z$ حرکت می کنند.

در جهت های X و Y شتاب نداریم و حرکت ها بدون v_d حرکت می کنند. برای این دو جهت داریم:

$$dV_x = -\gamma V_x dt + \sqrt{\beta^2 dt} N_{t,x}^{t+dt} \quad (0,1)$$

$$dV_y = -\gamma V_y dt + \sqrt{\beta^2 dt} N_{t,y}^{t+dt} \quad (0,1)$$

و

$$dX = V(t)dt$$

$$dY = V(t)dt$$

اما در جهت Z نیروی گرانش با شتاب g بر روی حرت ذرات اثر می گذارد و سرعتی سوقی به اندازه $v_d = \frac{-g}{\gamma}$ ایجاد می کند.

بنابر این برای حرکت در جهت Z داریم :

$$dV_z = -\gamma(V_z - v_d)dt + \sqrt{\beta^2 dt} N_{t,z}^{t+dt} \quad (0,1)$$

$$\rightarrow Z(t) = N_0^t \left(\frac{v_{z,0}}{\gamma} (1 - \exp(-\gamma t)) - \frac{g}{\gamma^2} (\gamma t + \exp(-\gamma t) - 1) \cdot \frac{\beta^2}{\gamma^3} \left[t\gamma - 2(1 - \exp(-\gamma t)) + \frac{1}{2}(1 - \exp(-2\gamma t)) \right] \right)$$

در این مساله ما فرض میکنیم تمام ذرات بدون سرعت اولیه و به صورت همگن در تمام ظرف پخش شده باشند، پس $v_{0x}=v_{0y}=v_{0z}=0$

* روند شبیه سازی سیستم

حال به سراغ شبیه سازی سیستم می رویم.

فرض می کنیم ذرات در یک ظرف آب بدون جریان به اندازه X, Y, Z به صورت یکنواخت پراکنده شدند و در $t=0$ در دمای T از حالت تعادل اولیه شروع به حرکت می کنند. همچنین فرض می کنیم سیستم با محیط تبادل جرم و انرژی ندارد.

در این شرایط برای جهت های X و Y میتوانیم اینطور بنویسیم:

$$V(i+1) = v(i) * \exp(-\gamma \Delta t) + \sqrt{\left(\frac{\beta^2}{2\gamma}\right) (1 - \exp(-2\gamma \Delta t))} N_t^{t+\Delta t} (0,1)$$

و

$$\begin{aligned} X_{(i+1)} &= X_{(i)} + V_{(i)} \Delta t \\ Y_{(i+1)} &= Y_{(i)} + V_{(i)} \Delta t \end{aligned}$$

و برای جهت Z

$$Z(i) = N_0^t \left(-\frac{g}{\gamma^2} (\gamma * i\Delta t + \exp(-\gamma * i\Delta t) - 1) \cdot \frac{\beta^2}{\gamma^3} \left[\gamma * i\Delta t - 2(1 - \exp(-\gamma * i\Delta t)) + \frac{1}{2}(1 - \exp(-2\gamma * i\Delta t)) \right] \right)$$

برای این که ذرات در شبیه سازی از جعبه خارج نشوند، شرایط مرزی را اینگونه وارد مساله می کنیم که اگر ذره در حرکت خود از دیواره عبور کرد، برنامه مکان مرز را به عنوان مکان ذره قرار دهد.

* نتایج شبیه سازی یک مثال

ما به ابتدا این شبیه سازی را برای ذرات معلق قهوه در آب هنگام دم کشیدن و ته نشین شدن آن ها انجام دادیم.

شرایط اولیه و پارامتر های سیستم:

$$X=Y=10\text{cm}, Z = 15\text{cm}$$

$$T = 360\text{K}$$

$$P = 560\text{kg/m}^3$$

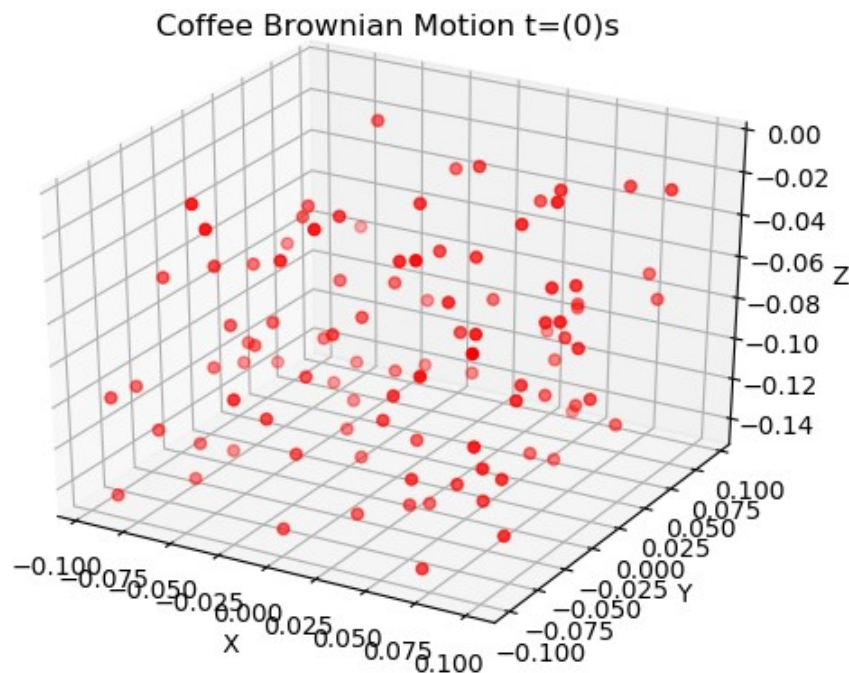
$$r = 0.00066\text{m}$$

$$n = 100 \text{ تعداد ذرات}$$

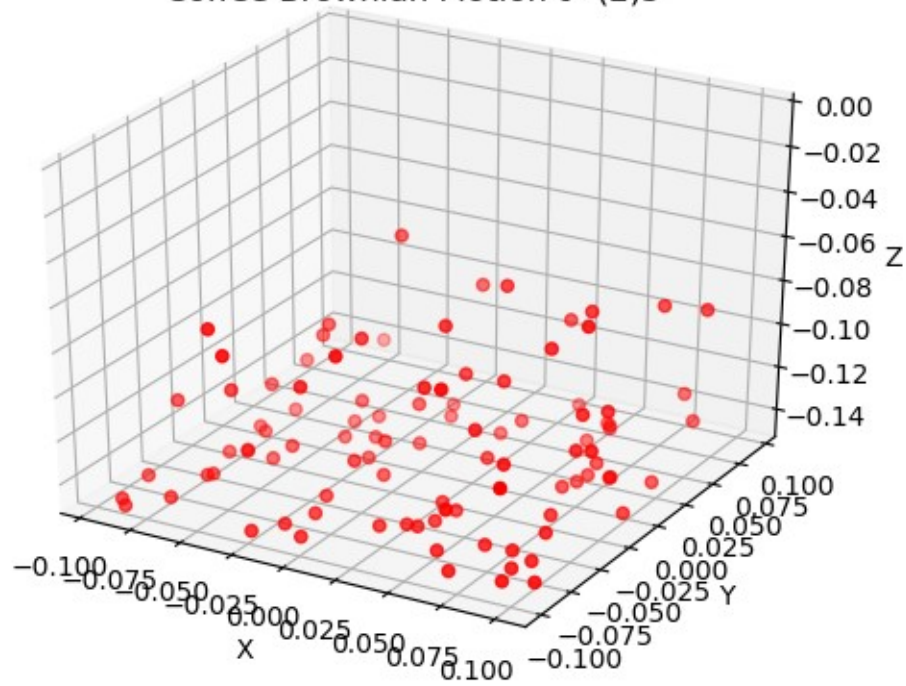
$$N = 600 \text{ تعداد گام های زمانی}$$

$$\Delta t = 0.01\text{s}$$

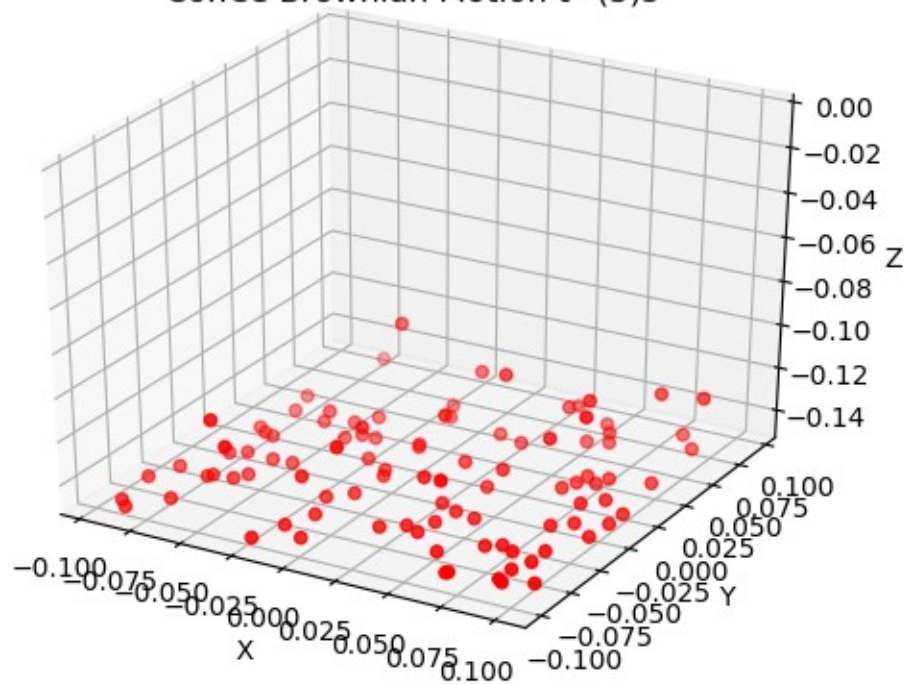
$$\eta = 0.0003124 \text{ pa}\cdot\text{s}$$

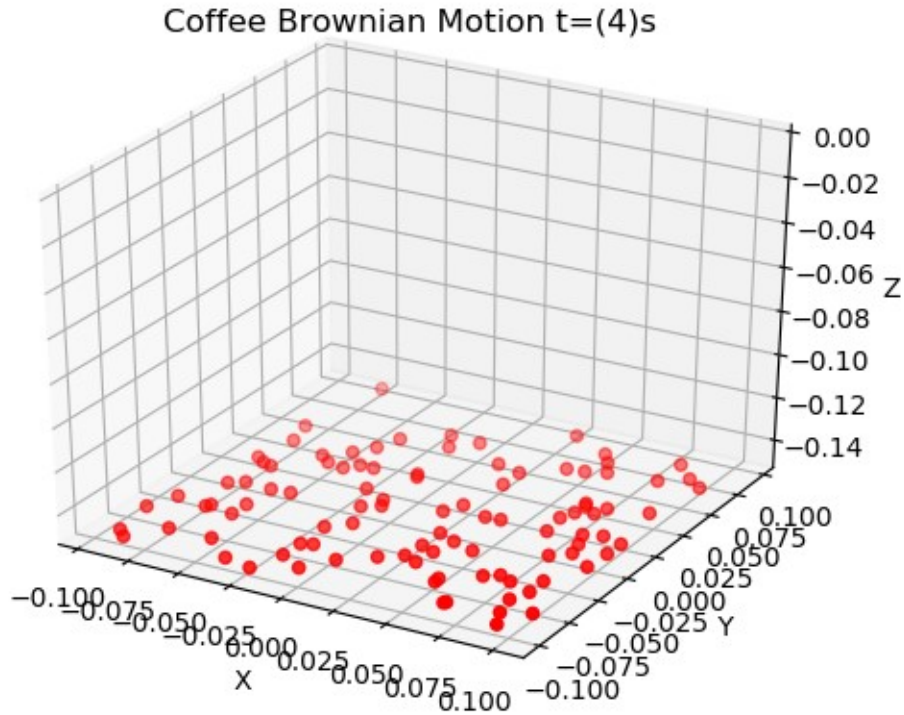


Coffee Brownian Motion $t=(2)s$



Coffee Brownian Motion $t=(3)s$





مشاهده می کنیم برای ذراتی با اندازه حدود ۶۰۰ میکرومتر، حدود ۴ ثانیه طول می کشد تا ذرات ته نشین شوند و عملاً ته نشینی مانند سقوط آزاد در آب انجام می شود و حرکت های تصادفی در راستای Z نمود چندانی ندارند با حداقل با این مدل قابل بررسی نیستند.

حال شبیه سازی را با ذراتی که در حدود ۱۰ میکرون اندازه دارند اما جرم برابری دارند تکرار می کنیم. همچنین ابعاد ظرف را بزرگ تر می کنیم.

$$X=Y=1m, Z = 15cm$$

$$T = 360K$$

$$P = 560kg/m^3$$

$$r = 0.000016m$$

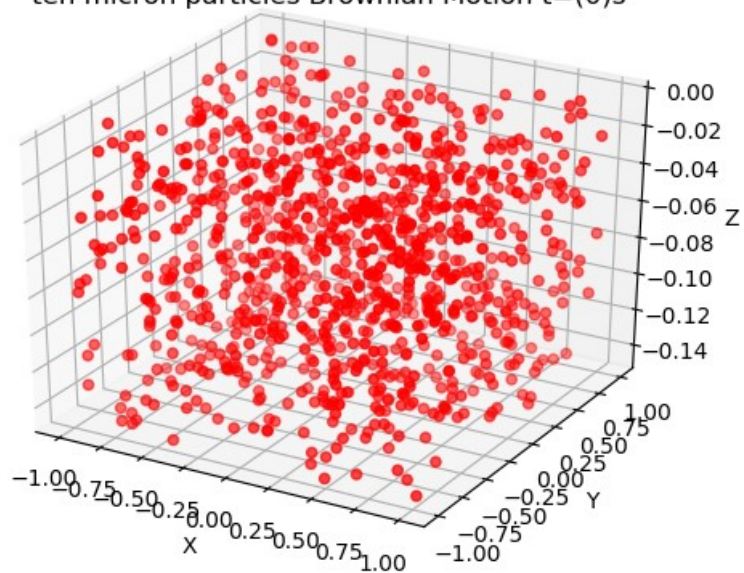
$$n = 1000 \text{ تعداد ذرات}$$

$$N = 650 \text{ تعداد گام های زمانی}$$

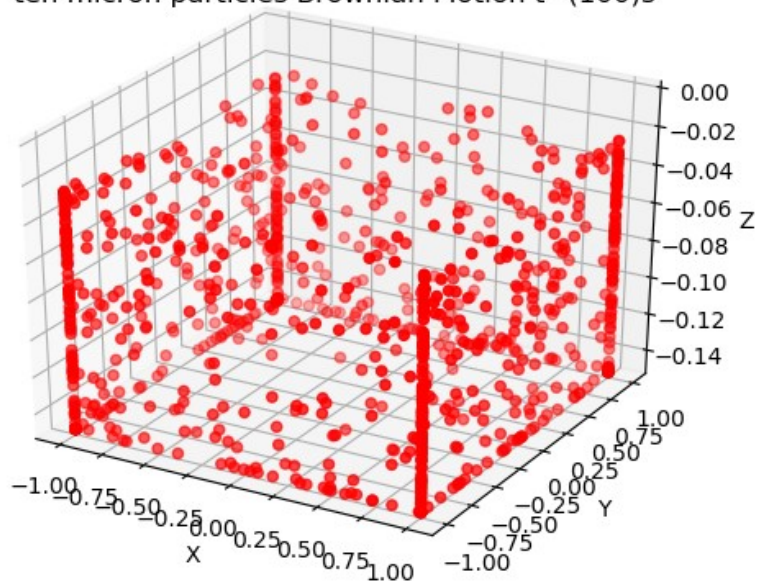
$$\Delta t = 1s$$

$$\eta = 0.0003124 \text{ pa}\cdot s$$

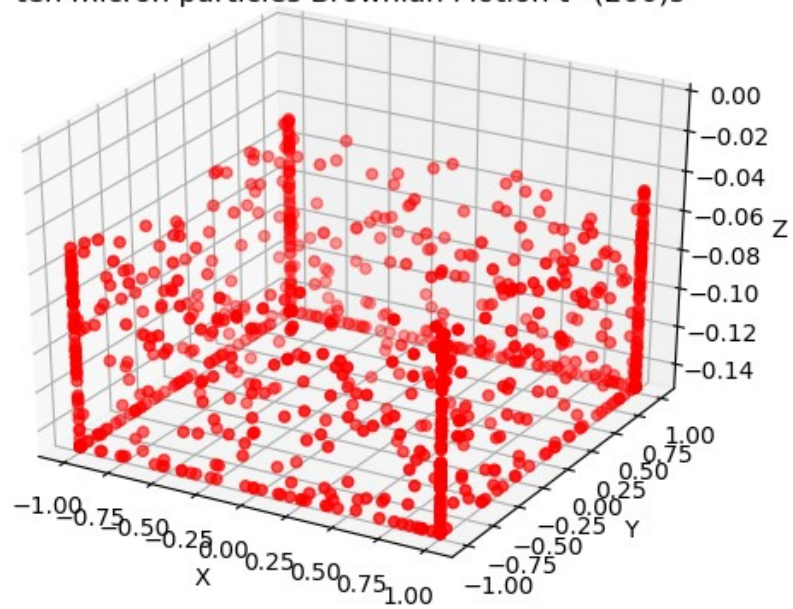
ten micron particles Brownian Motion $t=0$ s



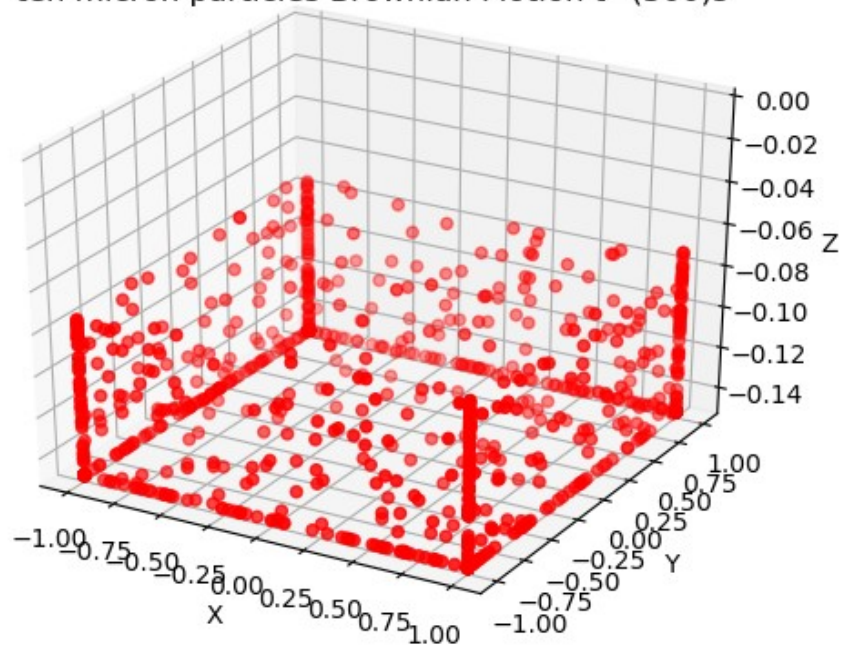
ten micron particles Brownian Motion $t=(100)$ s



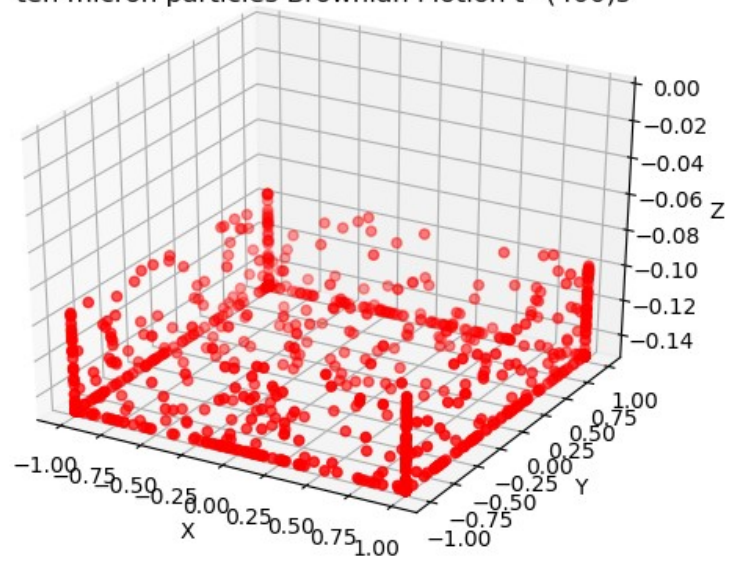
ten micron particles Brownian Motion $t=(200)s$



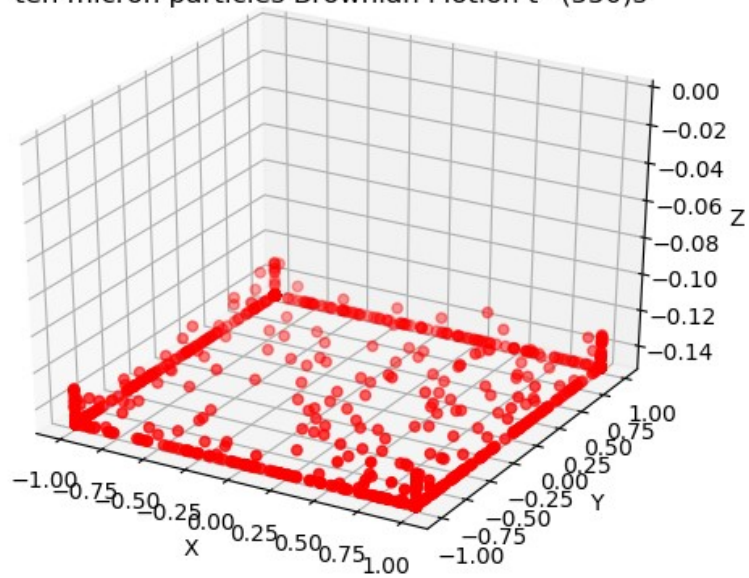
ten micron particles Brownian Motion $t=(300)s$



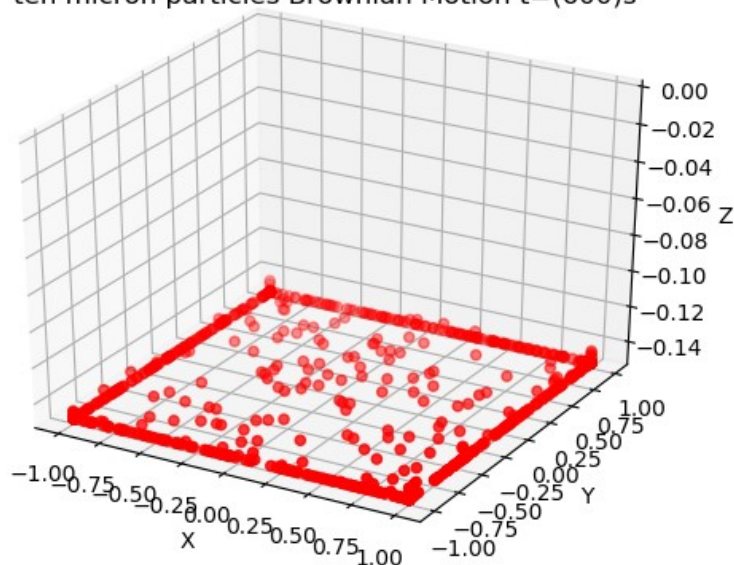
ten micron particles Brownian Motion $t=(400)s$



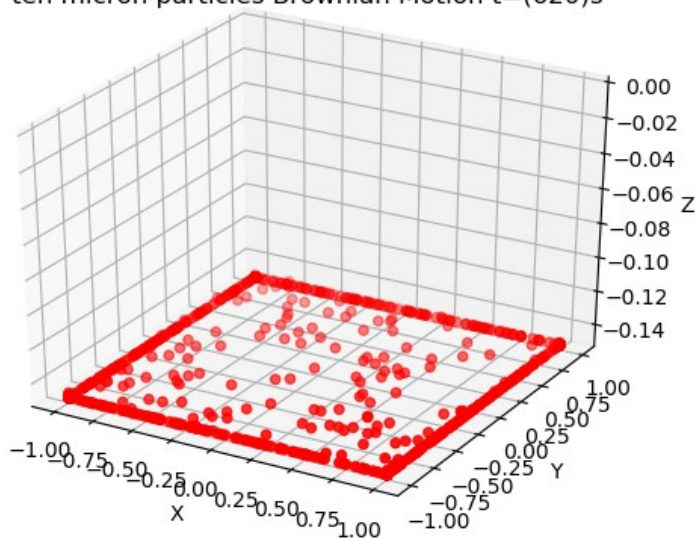
ten micron particles Brownian Motion $t=(550)s$



ten micron particles Brownian Motion $t=(600)s$



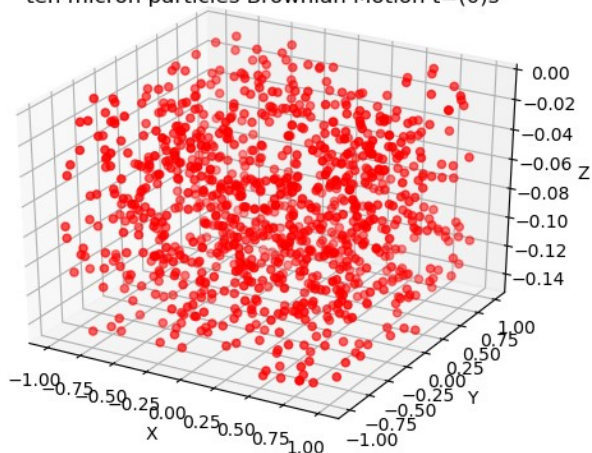
ten micron particles Brownian Motion $t=(620)s$



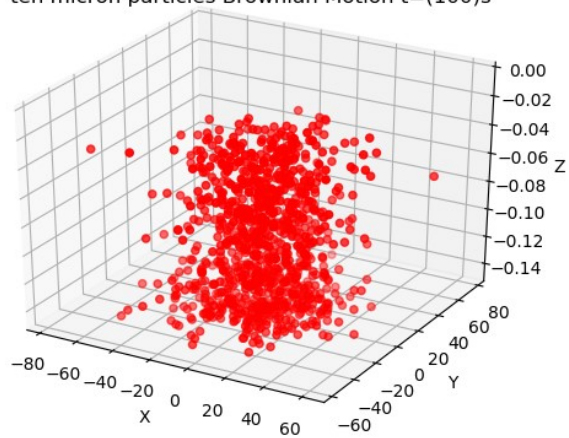
در این حالت مشاهده می کنیم که ذرات بعد از ۶۲۰ ثانیه کاملاً ته نشین میشوند و همچنین در این حالت آثار تصادفی قابل مشاهده اند. نکته جالب در این حالت تشکیل ساختار مربعی در دیواره ظرف است، این اتفاق به دلیل تمایل سیستم به افزایش آنتروپی خود و پخش شدن ذرات است اما چون دیواره ظرف را محدود کردیم و ذرات نمیتوانند از آن خارج شوند به دیواره ظرف چسبیده و باعث میشوند چگالی ذرات در نزدیک دیواره ها بیشتر

از مرکز ظرف است. در ادامه همین سیستم را بدون دیواره شبیه سازی میکنیم تا ببینیم این حرکت به چه صورت است.

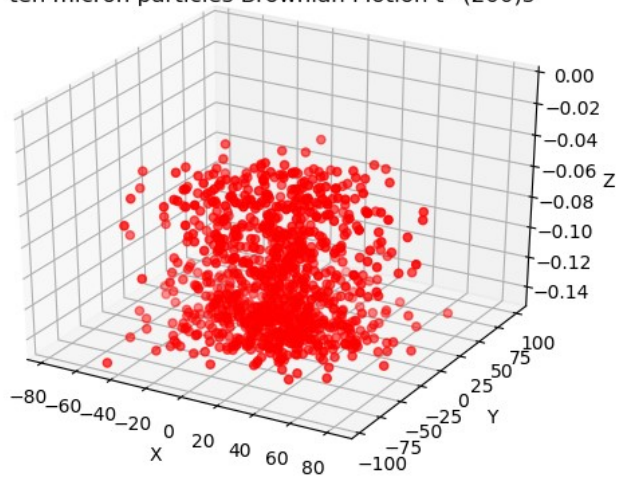
ten micron particles Brownian Motion $t=(0)s$



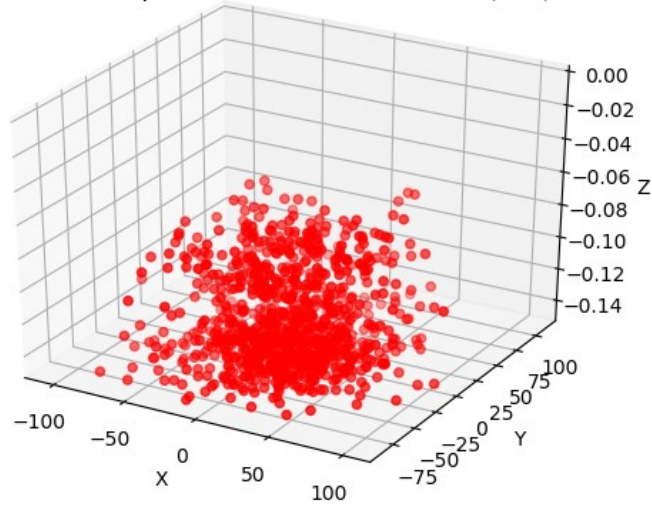
ten micron particles Brownian Motion $t=(100)s$



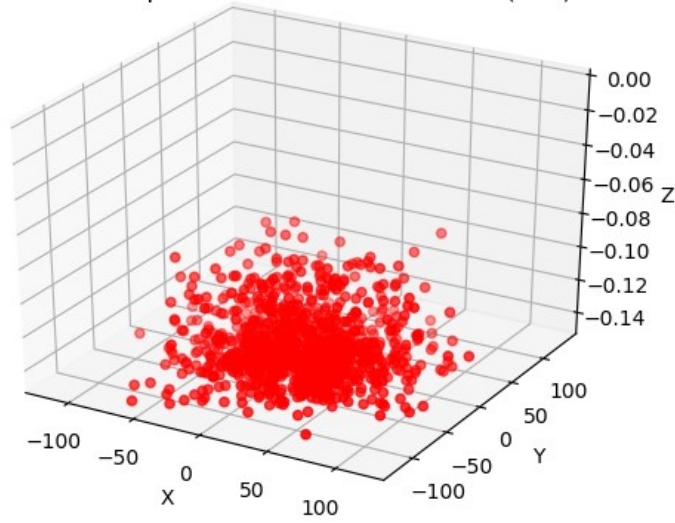
ten micron particles Brownian Motion $t=(200)s$



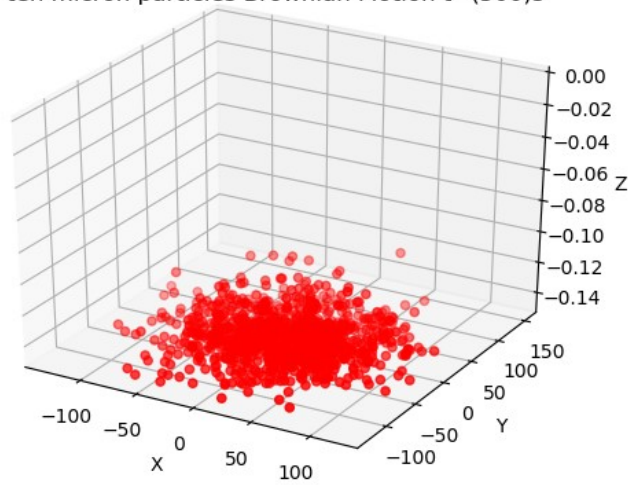
ten micron particles Brownian Motion $t=(300)s$



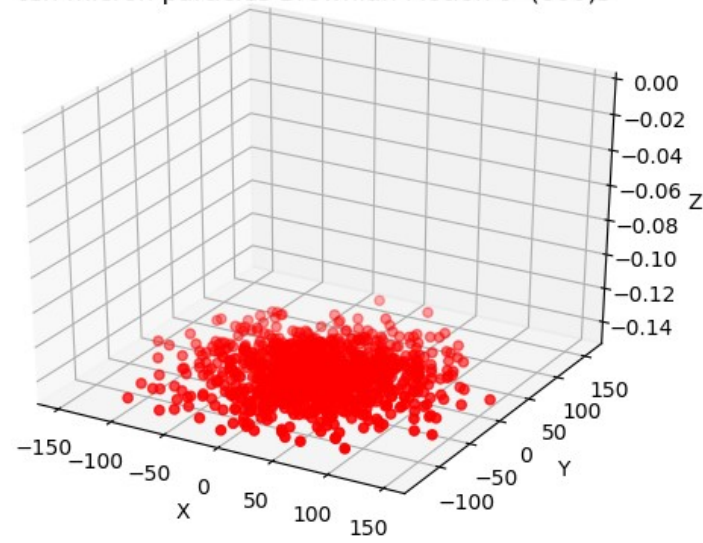
ten micron particles Brownian Motion $t=(400)s$



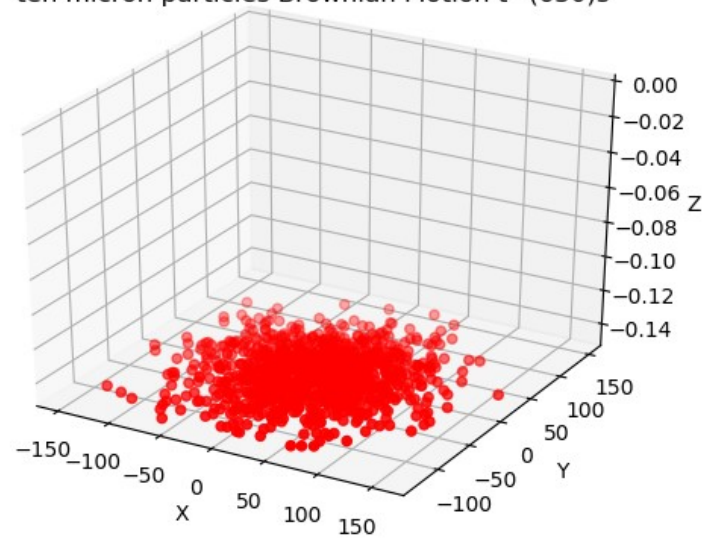
ten micron particles Brownian Motion $t=(500)s$



ten micron particles Brownian Motion $t=(600)s$



ten micron particles Brownian Motion $t=(630)s$



همان طور که در تصاویر پیداست در این حالت هم ذرات بعد از 630 ثانیه ته‌نشین می‌شوند اما با حذف کردن دیواره‌ها ذرات میتوانند قبل از ته‌نشین شدن تا شعاع ۱۵۰ متر جابجا شوند، این اتفاق به دلیل تمایل سیستم به افزایش آنتروپی خود است و دقیقاً همان اتفاقیست که هنگام حرکت لکه جوهر در آب یا منتشر شدن بود عطر در اتاق می‌افتد.

*** نتیجه‌گیری و کاربرد**

با توجه به شبیه‌سازی انجام شده متوجه شدیم که مدل حرکت براونی برای ذراتی با اوردرد اندازه کمتر از ۱۰ میکرون قابل استفاده است مانند ذرات لای و ناخالصی‌های ریز آب. همچنین در می‌یابیم که میتوان با این شبیه‌سازی و تغییر پارامترهای ذره و سیال برای سیستم‌های مختلف، زمان ته‌نشینی را محاسبه کرد و با تغییر دادن دما و شکل ظرف بهترین حالت برای ته‌نشین کردن یا جلوگیری از ته‌نشینی ذرات را یافت. از کاربرد‌ها این شبیه‌سازی می‌توان به یافتن مدل ته‌نشینی ذرات معلق آب شرب در تصفیه‌خانه‌های آب، مدل ته‌نشینی ذرات ریز فاضلاب در تصفیه‌خانه و استخرهای تصفیه نام برد. همچنین می‌توان با حذف یا تغییر دیواره‌ها انتشار ذرات در آب یا هوا را بررسی کرد که خود کاربرد‌های زیادی در صنعت و حتی صنایع نظامی دارد.

*** مراجع**

Book: and introduction to Stochastic processes in physics – Don Lemons

*** کد شبیه‌سازی و نتایج را میتوانید از صفحه گیت‌هاب زیر دریافت کنید**

https://github.com/Behnoodbandi/Brownian_motion_simulation