Двухмерная модель смеси дисперсных материалов

А. Н. Веригин[1], А. А. Панферов[1], Н. А. Незамаев[2]
Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)
кафедра химической энергетики
e-mail: [1]maxp.lti-gti@yangex.ru, [2]lti-gti@yandex.ru

Аннотация. **Предложена численная модель однородной смеси дисперсных материалов, которая позволяет прогнозировать ее качество – дисперсию распределения ключевого компонента в зависимости от: средней концентрации ключевого компонента; размера его дисперсных частиц; доли смеси, взятой в качестве пробы (размеры пробы).**

Ключевые слова: дисперсный материал; смесь; ключевой компонент; качество смешивания; фрактальная размерность; дисперсия распределения ключевого компонента; объем пробы; размер частиц

Смешивание дисперсных материалов составляет основу производства большинства современных материалов и изделий на их основе. Математический анализ процесса приготовления смеси ведется много десятилетий, тем не менее, до сих пор нет надежной методики оценки качества смеси, а тем более его прогнозирования.

Для прогнозирования качества смеси – расчета равномерности распределения компонентов в отдельных пробах материала или применительно к изделиям малого размера в теоретическом плане целесообразно обратиться к методам имитационного моделирования [1–2]. В последнее время они с большим успехом используются для решения задач в различных областях науки и технологии.

Возникает вопрос, в чем состоит различие смесей, содержащих дисперсные частицы разных размеров, и можно ли это различие измерить. В этом случае одной только дисперсии недостаточно, необходимо использовать еще какую-то характеристику смеси. Такой характеристикой может быть фрактальная размерность множества частиц [10]. В общем случае, если $N^{1/d}$ – положительное целое число, то d – мерный прямоугольный параллелепипед может быть разложен на число N параллелепипедов, каждый из которых получается из исходного параллелепипеда преобразованием подобия с коэффициентом подобия [5–9] $r(N) = 1/N^{1/d}$. Размерность d (от английского capacity dimension – емкостная размерность) характеризуется соотношением

$$d = -\frac{\ln N}{\ln r(N)} = \frac{\ln N}{\ln \dfrac{1}{r(N)}}. \tag{1}$$

Рассмотрим равномерное распределение N_o точек вдоль некоторой линии, или одномерного многообразия в трехмерном пространстве. Множество точек можно покрыть малыми кубами с ребром длиной ε. Необходимо вычислить минимальное число таких кубов $N(\varepsilon)$, покрывающих множество $(N(\varepsilon) < N_o)$. Если число N_o велико, то число кубов, покрывающих линию, будет изменяться в зависимости от ε, как: $N(\varepsilon) \approx 1/\varepsilon$.

Аналогично, если точки распределить равномерно по двумерной поверхности в трехмерном пространстве, то минимальное число кубов, покрывающих множество, будет изменяться в зависимости от ε, как: $N(\varepsilon) \approx 1/\varepsilon^2$. Размерность в общем случае определяется законом подобия

$$N(\varepsilon) \approx 1/\varepsilon^d, \tag{2}$$

из которого следует фрактальная размерность множества точек:

$$d = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\ln N(\varepsilon)}{\ln(1/\varepsilon)}. \tag{3}$$

От многокомпонентной смеси объемом V можно перейти к анализу системы, объединяющей множество координат частиц ее компонентов. В общем случае фрактальная размерность такого множества определяется выражением (3), которое при условии конечности размеров частиц будет иметь следующий вид: $d = \ln N / \ln(1/\varepsilon)$, где N – число элементов множества (число частиц ключевого компонента в смеси); ε – размер единичных кубов, покрывающих точки множества (мера множества).

С практической точки зрения необходимо определить возможное отклонение концентрации заданного (ключевого) компонента в произвольно взятой пробе от его среднего значения в смеси со случайным распределением компонентов. Известны свойства смеси: объем отдельной частицы v_0; их объемная средняя концентрация c_0. Внешними условиями являются, общий объем смеси V, объем пробы $V^* = \alpha V$ $(0 \le \alpha \le 1)$.

Развитие данного подхода, исходя из значения фрактальной размерности смеси d и пробы d^*, позволило получить выражение для расчета дисперсии распределения ключевого компонента по объему смеси

$$\sigma = \frac{c_0}{\sqrt{2\pi e}} \Delta d \, \exp\{\Delta d\},$$

$$\Delta d = d - d^* = d_0 \frac{\ln(\alpha)\,\ln(c_0)}{\ln(V/v_0)\,\ln(\alpha V/v_0)} \qquad (4)$$

С целью проверки данной гипотезы, а так же правильности выражения (4) было выполнено численное моделирование смеси со случайным равномерным распределением дисперсных частиц.

Численная модель смеси может быть получена, если эти частицы случайным образом расположить в пространстве. Для простоты вычислений построим плоскую (двухмерную) модель смеси. Воспользуемся методом Монте-Карло и расположим определенное число частиц в квадрате со стороной, равной единице. В случае плоского приближения выражения для определения координат отдельных частиц будут иметь следующий вид: $x_i = \gamma,\ y_i = \beta$, где γ, β – случайные числа с равномерным распределением от нуля до единицы.

Поскольку в рассматриваемом случае размеры частиц не учитывали, то применять выражение (2) для расчета фрактальной размерности не представляется возможным. Здесь можно воспользоваться уравнением (1) и построить зависимость числа частиц N от размера рассматриваемой области r. Аппроксимация по уравнению (1) дает значение $d = 1{,}981546$. При этом размер области изменялся от самой малой величины 0,000625 до единицы.

Если дисперсные частицы абсолютно равномерно распределены по поверхности единичного квадрата, то величина фрактальной размерности должна быть равна двум. Результаты моделирования показывают, что получить значение d, равное двум, не представляется возможным при проведении вычислений с конечной точностью. Это значение менялось с изменением числа частиц. При числе частиц 10 000 устойчиво получалось значение d равное двум с точностью до третьего знака (расчеты проводились с восемью значащими числами). При меньших числах частиц значение d было меньше двух.

Можно говорить о существовании неоднородности распределения частиц (математических точек) по поверхности единичного квадрата, несмотря на то, что они распределены случайным образом. При определенном соотношении числа частиц и размеров смеси модель проявляет свойства фрактальности. Больше информации из таких представлений получить не удается. Дальнейшее развитие модели предполагает учет конечных размеров дисперсных частиц.

В рамках решаемой нами плоской задачи примем, что ключевой компонент представляет собой диски размером r_o, которые случайным образом распределены по плоскости квадрата со стороной, равной единице. Важно, чтобы диски не перекрывали друг друга, т. е. необходимо выдержать между любой парой дисков расстояние не менее их диаметра. Так как положение диска можно задать двумя его координатами, основное ограничение будет иметь следующий вид:

$$\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} - 2 \cdot r_0 > 0\,. \qquad (5)$$

Для вычисления координат отдельных дисков, входящих в данное выражение, воспользуемся (5). Количество дисков определяет то объемное содержание ключевого компонента, которое необходимо получить в смеси. Для расчета дисперсии распределения частиц [3–4] необходимо: выбрать размер пробы; разбить единичный квадрат на ячейки равные размеру пробы; подсчитать сколько дисков (частиц) попало в каждую ячейку.

Вычислению дисперсии предшествует определение среднего содержания дисперсных частиц в ячейке или вернее доли занятой ими поверхности единичного квадрата, которая будет равна среднему содержанию ключевого компонента в смеси $\langle c \rangle = \pi\, r^2 N_0$.

При расчете дисперсии необходимо учесть размер ячейки, который задавался как часть от единичного размера квадрата путем деления его размера (единицы) на целое число n. Например, если единичный квадрат делился на сто частей, то n принималось, равным десяти. Тогда выражение для расчета дисперсии будет иметь следующий вид:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n^2} \sum_i^n \sum_j^n (\pi\, r^2 n^2 K_{i,j} - \langle c_i \rangle)^2}, \qquad N_0 = \sum_i^n \sum_j^n K_{i,j}. \qquad (6)$$

Выражение (6) написано с учетом особенности решаемой задачи. Оно позволяет рассчитать дисперсию доли поверхности занятой частицами в отдельных ячейках. Поскольку размер анализируемой области (объем смеси) равен единице, то концентрация целевого компонента в пробе равна части поверхности занятой частицами в ячейке. При этом $\pi r^2 n^2 K_{i,j}$ – доля поверхности занятая частицами ячейки с координатами i, j. Второе выражение отражает тот факт, что общее число частиц равно их сумме во всех ячейках.

При изменении количества и размера дисков представляется возможным менять объемное содержание ключевого компонента в смеси, а также исследовать непосредственное влияние размера дисперсных частиц на качество смеси. Предложенная модель позволяет также проводить анализ смеси с использованием проб различного размера. Во всех численных экспериментах рассчитывалась дисперсия (6) и фрактальная размерность (1).

С увеличением количества дисков (дисперсных частиц) и их размера равномерность распределения увеличивается, о чем свидетельствует уменьшение дисперсии по отношению к среднему значению содержания ключевого компонента. Характер зависимости дисперсии от размера пробы хорошо согласуется с результатами экспериментов, т. е. предложенная модель правильно отражает особенности распределения дисперсных частиц по объему смеси.

Впервые на основе численных экспериментов показано, что величина фрактальной размерности непосредственно связана с качеством смешения и наряду с дисперсией может являться его численной характеристикой. Можно утверждать, что смесь дисперсных частиц проявляет свойства фрактальной размерности только в том случае, если частицы имеют конечный размер. Для смеси с меньшей относительной дисперсией лучшего качества фрактальная размерность рассчитывается по выражению:

$$d^* = 2\left(1+\frac{\ln\langle c_0\rangle}{\ln(N)}\right)$$

Полученные результаты расчетов показывают, что не всякая смесь со случайным распределением компонентов является однородной. Предложенная в работе модель смеси дисперсных материалов, построенная с использованием метода Монте-Карло, позволяет прогнозировать характер распределения ключевого компонента по ее объему в зависимости от размера дисперсных частиц и их объемного содержания. Ввиду достаточной простоты и прозрачности модель может быть с успехом использована при разработке композиций с одинаковой равномерностью распределения в смеси исходных дисперсных материалов.

Список литературы

[1] Кафаров В.В., Дорохов Н.Н., Арурюнов С.Ю. Системный анализ процессов химической технологии. Процессы измельчения и смешения сыпучих материалов. М.: Наука, 1985. 440 с.

[2] Макаров Ю.И. Аппараты для смешения сыпучих материалов. М.: Машинстроение, 1973. 216 с.

[3] Шупов Л. П. Математические модели усреднения. М.: Недра, 1978. 544 с.

[4] Бакалов В.Г., Александров М.В., Михалев М.Ф., Болкунов О.А Критерий для оценки качества смеси // Журн. прикл. химии. 1984. № 4. с. 1045-1048.

[5] Берже П., Помо И., Видаль К. Порядок в хаосе. О детерминированном подходе к турбулентности. М.: Мир, 1991. 368 с.

[6] Лихтенберг А., Либерман М. Регулярная и стохастическая динамика. М.: Мир, 1984. 528 с.

[7] Неймарк Ю.И., Ланда П.С. Стохастические и хаотические колебания. М.: Наука, 1987. 424 с.

[8] Веригин А.Н., Данильчук В.С., Незамаев Н.А. Машины и аппараты переработки дисперсных материалов. Учебное пособие. СПб, Москва, Краснодар: Лань, 2018. 534 с.

[9] Веригин А.Н., Ермаков А.С., Шашихин Е. Ю. Методика оценки состояния гетерогенных сред // Журн. прикл. химии. 1994. Т. 67. № 9. с. 1561-1562.

[10] Мун Ф. Хаотические колебания: Водный курс для научных работников и инженеров М.: Мир, 1990. 325с.