

Имитационная модель синергетических процессов в динамических дисперсных системах. Ξ -критерий

© А.М. Асланов,¹ М.Б. Беккер,² В.Н. Выровой,³ А.Н. Гергега³

¹ Одесская государственная академия холода,
65026 Одесса, Украина
e-mail: aslanovs@gmail.com

² Университет, штат Миссури,
МО 64110 Канзас-Сити, США
e-mail: bekkerm@umkc.edu

³ Одесская государственная академия строительства и архитектуры,
65029 Одесса, Украина
e-mail: a.herega@gmail.com

(Поступило в Редакцию 1 апреля 2009 г.)

Предложена имитационная компьютерная модель коагуляции частиц твердой фазы циркулирующего газового потока. Описаны типы модельных кластеров, изучены их структура и габитус. Показана возможность априорного определения типа траекторий и образующихся кластеров, а также тенденций развития потока на основе предложенного Ξ -критерия. Описан метод восстановления свойств потока по геометрическим характеристикам отпечатков частиц твердой фазы на стенках конструкции.

Введение

„Одно из наиболее интересных свойств аэрозолей — их непрерывная и самопроизвольная коагуляция. Частицы любого вещества при соприкосновении сливаются или слипаются, аэрозоль становится все более грубым...“ [1]. В дисперсной системе, как известно, коагуляция происходит под действием сил электромагнитной и гравитационной природы [1,2]. На процесс коагуляции влияют концентрация, размеры и форма частиц, полидисперсность состава, а также интенсивность перемешивания частиц в потоке и взаимодействие со стенками конструкции. Это делает экспериментальное изучение кластеров, образующихся в газе, достаточно сложным: исследователи сталкиваются с невозможностью получения необходимого диапазона структурных параметров, а также с отсутствием надежной методики их диагностики [3].

Сведения о фрактальных агрегатах, базирующиеся на теоретических моделях, не всегда согласуются с экспериментом [3–6]. Одна из причин заключается в том, что в аналитических и численных исследованиях заранее фиксируют характер процесса агрегации, тип движения кластеров и частиц, вероятность коагуляции при взаимодействии [3], а также максимально упрощается или игнорируется описание взаимодействия с конструкцией. Аналитически описать столь многофакторный процесс сложно даже в сравнительно простых случаях.

В такой ситуации имитация в качестве моделирующего процесса является полезным методом решения задачи. Имитационное моделирование интуитивно привлекательно, в первую очередь, благодаря сравнительной простоте. Оно не ставит перед собой задачи создания теории изучаемого явления, не отражает реального положения

вещей: оно должно предложить методологию решения проблем по изучению подлинных обстоятельств, которая позволит установить тенденции развития явлений, укажет пути для поиска корректных решений уже вне (в продолжение) модели [7,8]. Во избежание неверных заключений этим нельзя пренебрегать.

Модель

В компьютерной модели, во многом обобщающей работы [9–11], последовательно устранены описанные выше недостатки.

В ее основу положены максимально общие предположения, основанные на анализе физической ситуации, учете особенностей функционирования и конструкции триботехнических устройств. Она позволяет исследовать структуру и свойства модельных кластеров, влияние дисперсной фазы, воздействие конструкции, в которой происходит движение, роль взаимодействия частиц, влияние параметров хаотического потока.

Модель представляет собой алгоритм перемещения твердых частиц и взаимодействия между собой и со стенками конструкции. Она базируется на физических представлениях о движении и взаимодействии, но имеет преимущественно геометрический характер.

Основные положения модели:

- частицы имеют нормальное распределение по размерам;
- частицы циклически движутся в тороидальном канале;
- скорости частиц и образующихся кластеров обладают детерминированной и случайной составляющими;
- взаимодействие — гравитационное;

— все образования в двухфазном газовом потоке объединяются в кластеры, когда расстояние между ними становится меньше некоторого значения;

— при взаимодействии с конструкцией частицы и кластеры ведут себя как абсолютно твердые тела.

В каждом модельном эксперименте в торец канала вводилось по 5000 частиц. Исследовались свойства образующихся кластеров, устойчивость траекторий и тенденции развития потока.

Модельные кластеры

Моделирование показало, что кластеры (рис. 1 и 2) можно визуально разделить на два типа — квазисимметричные, как правило, достаточно компактные и ассиметричные кластеры с пониженной плотностью. Первые возникают, когда отношение средних значений переносной и случайной составляющих скорости газового потока сравнительно мало

$$\Xi = V_{\text{trans}}/V_{\text{chaot}}. \quad (1)$$

Это имеет простое качественное объяснение: относительно малые значения переносной скорости дают возможность частицам максимально глубоко проникать в полость кластера, таким образом преобладание одного из типов кластеров в крайних значениях отношения между составляющими скорости легко предсказуемо. Интерес представляет количественная составляющая результата: при $\Xi < 0.425$ вероятность появления ассиметричных модельных кластеров стремится к нулю, при $\Xi > 0.575$ практически все образующиеся в системе кластеры ассиметричны.

Модельные кластеры являются мультифракталами. Это показано стандартным способом — расчетом спектра размерностей Реньи [12].

В модели рассчитывается клеточная размерность. Для ее определения используется объемный аналог палетки [12], реализованный программно. Расчет старших размерностей спектра Реньи, требующий определения вероятности того, что в ячейке палетки содержится исследуемый объект, осуществлен методом Монте-Карло. В табл. 1 представлены значения размерностей Реньи

Таблица 1. Размерности Реньи одной из реализаций модельных кластеров

Размерность	Квазисимметричные кластеры	Ассиметричные кластеры
D_{max}	$2.98 \pm 0.05 \quad \varepsilon = 1.7\%$	$2.75 \pm 0.06 \quad \varepsilon = 2.2\%$
D_{fract}	$2.90 \pm 0.03 \quad \varepsilon = 1.0\%$	$2.67 \pm 0.08 \quad \varepsilon = 3.0\%$
D_{inf}	$2.73 \pm 0.04 \quad \varepsilon = 1.4\%$	$2.54 \pm 0.04 \quad \varepsilon = 1.6\%$
D_{corr}	$2.67 \pm 0.02 \quad \varepsilon = 0.7\%$	$2.47 \pm 0.09 \quad \varepsilon = 3.6\%$
D_{third}	$2.59 \pm 0.03 \quad \varepsilon = 1.2\%$	$2.34 \pm 0.02 \quad \varepsilon = 0.9\%$
D_{fourth}	$2.50 \pm 0.05 \quad \varepsilon = 2.0\%$	$2.29 \pm 0.04 \quad \varepsilon = 1.7\%$
D_{min}	$2.31 \pm 0.02 \quad \varepsilon = 0.9\%$	$2.11 \pm 0.05 \quad \varepsilon = 2.4\%$

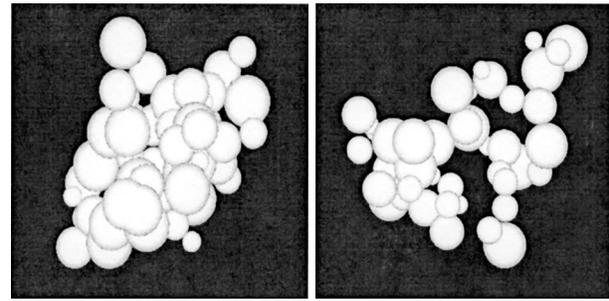


Рис. 1. Ассиметричные модельные кластеры.

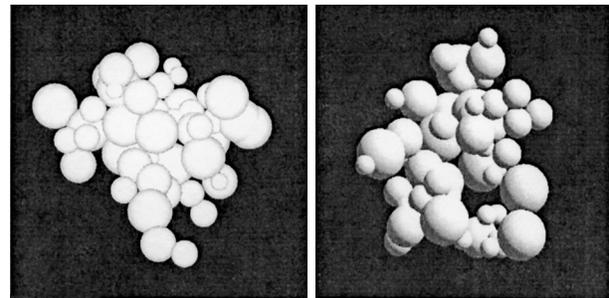


Рис. 2. Квазисимметричные кластеры.

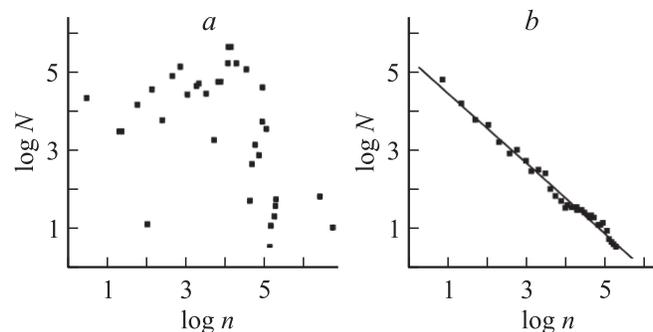


Рис. 3. Вид промежуточной асимптотики для нефрактального (a) и мультифрактального (b) модельных коагулянтов на примере построения графика для получения информации размерности.

модельных кластеров, полученных в конкретном эксперименте и состоящих из не менее чем ста частиц.

Если коагулянт не фрактал (в модели такое возможно по двум причинам: кластер мал и самоподобие еще не проявляется или кластер очень вытянут), это видно по расположению точек в промежуточной асимптотике на графике для определения фрактальной размерности. В случае фрактального кластера экспериментальные точки легко аппроксимируются отрезком прямой, в противном — представляют собой „облако“ (рис. 3).

С использованием этого обстоятельства в работе исследовался вопрос о границах промежуточной асимптотики. Эксперименты показали, что границы мезоскопической области для различных размерностей спектра Реньи неодинаковы: наиболее чувствительными к потере объектами статистического самоподобия оказались информационная D_{inf} и максимальная D_{max} размерности; именно в их границах рассчитывались остальные пять [13].

И наконец, структура и плотность кластеров в модели чувствительна к дисперсии: при прочих равных условиях кластеры максимальной плотности получаются, если частицы имеют гауссово распределение по размерам.

Взаимодействие потока с конструкцией

Взаимодействие двухфазного потока со стенками конструкции — не только существенная часть движения, но и фактор, позволяющий восстановить некоторые характеристики потока. По сути, такой подход реализует попытку воссоздания процесса по его „теням“, при этом технически упрощая задачу: осуществляется переход от динамического потока к стационарному пятну и снижается размерность исследуемого объекта. Это возможно благодаря наличию (при определенных условиях) корреляции между характеристиками пятен и потока, которая выражается в связи между фрактальностью первых и персистентностью второго.

В модели используется метод нормированного размаха Г. Хёрста.

Как известно, для случайного ряда событий $f(t)$ выполняется соотношение

$$R/S \sim (\tau/2)^H,$$

где

$$R(\tau) = \max_{1 \leq t \leq \tau} h(t, \tau) - \min_{1 \leq t \leq \tau} h(t, \tau),$$

$$h(t, \tau) = \sum_{u=1}^t \{f(u) - \langle f \rangle_\tau\},$$

S — стандартное отклонение, τ — длительность рассматриваемого промежутка времени, H — показатель Хёрста. Если показатель H отличается от 0.5, то в процессе присутствуют корреляции между случайными величинами: при $H > 0.5$ — процесс персистентный, при $H < 0.5$ — антиперсистентный [12,14]. Значение H в модели восстанавливается по фрактальной размерности пятна D и размерности пространства d [12,14]

$$H = d - D. \quad (2)$$

Задача восстановления свойств потока требует изучения процесса его взаимодействия с конструкцией. Естественно предположить, что при моделировании пятна следует учитывать размеры кластеров, взаимодействующих со стенками канала. Для этого несложно разработать, например, способ построения сферы,

Таблица 2. Размерности Реньи одной из реализаций мультифрактального следа твердой фазы на стенках конструкции

Размерность	Значение
D_{max}	$1.93 \pm 0.05 \ \varepsilon = 2.6\%$
D_{fract}	$1.90 \pm 0.03 \ \varepsilon = 1.6\%$
D_{inf}	$1.71 \pm 0.06 \ \varepsilon = 3.5\%$
D_{corr}	$1.69 \pm 0.09 \ \varepsilon = 5.3\%$
D_{third}	$1.51 \pm 0.09 \ \varepsilon = 6.0\%$
D_{fourth}	$1.47 \pm 0.02 \ \varepsilon = 1.4\%$
D_{min}	$1.36 \pm 0.06 \ \varepsilon = 4.4\%$

в которую вписан кластер, а также определить, на каком расстоянии от ее центра проводить сечение для определения приемлемой площади отпечатка. Это расстояние могло бы использоваться как подгоночный параметр модели. Однако модельные эксперименты показали, что наиболее информативными, наиболее чувствительными к особенностям потока являются „рисунки“ пятен, которые оставляли точки центра масс кластеров.

Идея восстановления свойств потока по полученным (стабильным) отпечаткам имеет различные приложения (см., например, [15,16]). Особенностью исследуемой модели является то, что поток многократно проходит над ограничивающей поверхностью. При этом пятно эволюционирует, изменяется уровень информативности его характеристик, качество восстановления свойств порождающего потока. Критерием того, что модельное пятно сформировалось для анализа, является его самоподобие, приобретение мультифрактальных свойств. Выше описана методика нахождения масштаба рассмотрения пространственных тел, в котором они обладают этими свойствами; аналогичная применяется для пятен.

Компьютерные эксперименты показали, что площадь заполнения стенки конструкции, при котором „рисунок“ отпечатков уже представляет собой мультифрактал с корректно определяемым спектром размерностей Реньи, составляет 25–45%. При этом показатель Хёрста, рассчитываемый по формуле (2), принимает значения и больше, и меньше 0.5 — в зависимости от свойств потока [13].

Данные, представленные в табл. 2, — пример реализации антиперсистентного случая: когда нет устойчивой тенденции развития потока, когда пятна покрывают достаточно большую площадь, а их рисунок минимально структурирован [12,16].

В компьютерных экспериментах установлено, что управляющим параметром, изменяющим величину показателя Хёрста, может служить критерий подобия модели — введенное формулой (1) число Ξ : при $\Xi < 0.425$ показатель Хёрста $H > 0.5$, а при $\Xi > 0.575$ — меньше.

Заключение

В модели определялась асимптотическая устойчивость траекторий по Ляпунову [17]. Показано, что те же значения числа Ξ , которые обуславливают наличие или отсутствие тенденций в развитии потока, а также тип преобладающих в модельном потоке кластеров [13] определяют и знаки ляпуновских показателей. При $\Xi > 0.575$ показатели Ляпунова в модели определяются сигнатурой $\langle 0, -, - \rangle$, что, как известно, свидетельствует о наличии предельного цикла в поведении расстояния между соседними траекториями, а при $\Xi < 0.425$ — сигнатурой $\langle +, 0, - \rangle$, что предполагает наличие странного аттрактора [17]. В промежутке выраженной тенденции нет.

Таким образом, преобладающий в модельном потоке тип кластеров, существование тенденций в развитии и тип поведения траекторий потока могут быть определены *a priori* на основе предложенного Ξ -критерия.

Список литературы

- [1] Грин Х., Лени В. Аэрозоли — пыли, дымы и туманы. Л.: Химия, 1972. 428 с.
- [2] Зонтаг Г., Штенге К. Коагуляция и устойчивость дисперсных систем. Л.: Химия, 1973. 152 с.
- [3] Михайлов Е.Ф., Власенко С.С. // УФН. 1995. Т. 165. Вып. 3. С. 263–283.
- [4] Жюльен Р. // УФН. 1989. Т. 157. Вып. 2. С. 339–357.
- [5] Смирнов Б.М. // УФН. 1989. Т. 157. Вып. 2. С. 357–360.
- [6] Смирнов Б.М. // УФН. 1986. Т. 149. Вып. 2. С. 177–200.
- [7] Мартин Ф. Моделирование на вычислительных машинах. М.: Сов. радио, 1972. 288 с.
- [8] Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. М.: Мир, 1990.
- [9] Гергега А.Н. // IV Сибирский конгресс по индустриальной и прикладной математике (ИНПРИМ-2000). Новосибирск, 2000.
- [10] Гергега А.Н. // Вестн. ОГАСА. 2003. № 12. С. 88–91.
- [11] Асланов А.М., Гергега А.Н., Лозовский Т.Л. // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 6. С. 134–135.
- [12] Ферд Е. Фракталы. М.: Мир, 1991. 254 с.
- [13] Асланов А.М., Ботнарь К.В., Гергега А.Н. // Сб. тр. IV семинара „Информационные системы и технологии“. Одесса, 2006. С. 105–109.
- [14] Мандельброт Ю. Фрактальная геометрия природы. М.: ИКИ, 2002. 656 с.
- [15] Кузнецов В.Р., Сабельников В.А. Турбулентность и горение. М.: Наука, 1986. 270 с.
- [16] Баряхтар В.Г., Гончар В.Ю., Яновский В.В. // Укр. физич. журн. 1993. Т. 38. № 15. С. 967–975.
- [17] Кузнецов С.П. Динамический хаос. М.: Наука, 1985. 202 с.