УДК 538.9

В. С. Игропуло

МНОГОФАКТОРНЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ГЕТЕРОГЕННЫХ МЕТАСИСТЕМ

Нелинейное математическое моделирование физических процессов в гетерогенных метасистемах с пузырьковым или твердотельным наполнителем позволяет получить соотношения, удобные для численных расчетов и сопоставления теоретических результатов с данными экспериментов. Для создания практически эффективных моделей сформулированы определенные предложения относительно верхней и нижней границ размеров наполнителя, их распределения и концентрации, дипольных моментов, характера и результатов межчастичного взаимодействия.

Nonlinear mathematical modeling of physical processes in heterogeneous metasystems with bubble or a solid-state filler allows to receive the parities convenient for numerical calculations and comparison of theoretical results with the data of experiments. For creation of almost effective models certain offers concerning the top and bottom borders of the sizes of a filler, their distribution and concentration, the dipolar moments, character and results of interpartial interaction are formulated.

Ключевые слова: нелинейные математические модели, многофакторные гетерогенные метасистемы, пузырьковый или твердотельный наполнитель, рост пузырька, конвективная диффузия.

Key words: nonlinear mathematical models, multiple-factor heterogeneous metasystems, пузырьковый or a solid-state filler, vial growth, convective diffusion.

Введение

Гетерогенные объекты достаточно часто используются в современных промышленных технологиях и поэтому привлекают внимание исследователей. Сложности, связанные с гетерогенностью, приводят к серьезным проблемам при проведении как теоретических, так и экспериментальных исследований. Математическое моделирование гетерогенных систем заключается в получении замкнутого комплекса уравнений и начально-краевых условий, отражающих свойства каждой фазы и имеющиеся представления об исходной структуре системы. Без привлечения дополнительных эмпирических, феноменологических соотношений достаточно строгое решение этой проблемы возможно лишь для частных классов гетерогенных систем и процессов. Эти частные случаи можно считать предельными, или эталонными, при создании нелинейных математических моделей реальных объектов и явлений, рассматриваемых как метасистемы.

Математическое моделирование гетерогенных метасистем в сравнении с однофазными требует новых подходов по следующим причинам:

— осложняется моделирование и исследование процессов в системах-компонентах;

— в многофазных метасистемах существенно проявляются эффекты структуры составляющих систем, межсистемного взаимодействия;

— число возможных процессов и необходимых особенностей, которые должны быть учтены в уравнениях, многократно возрастает.

В связи с этим возникает необходимость разработки обобщенных способов учета основных эффектов и факторов, определяющих свойства и поведение гетерогенных метасистем.

1. Структура гетерогенных метасистем, характер их многофакторности. Основные допущения

Гетерогенные, неоднородные системы характеризуются наличием макроскопических (по отношению к молекулярным масштабам) неоднородностей или включений. Из существующих и возможных гетерогенных объектов наиболее подробно изучены (благодаря своей регулярности) двухфазные дисперсные системы, которые состоят из жидкой фазы, заполненной пузырьками газа, пара (пузырьковые среды) или твердыми частицами (суспензии) [1; 2]. Размеры таких пузырьков или частиц лежат обычно в интервале от 1 до 1000 нм.

В работах [3—5] был обоснован и апробирован новый подход к созданию нелинейных математических моделей таких двухфазных объектов, которые предложено рассматривать как *метасистемы*, состоящие из трех систем: наблюдателя H^*, носителя H° (жидкой фазы) и наполнителя $H^\bullet$ (пузырьковой или твердой фазы). Каждая из них — H^*, H°, $H^\bullet$ — является сложной открытой (для других) системой, может участвовать в физических процессах различной природы.

Предположим [4], что метасистема ($H^*H^\circ H^\bullet$) описывается некоторыми параметрами порядка, обобщенными «координатами» Q_i, набор которых отражает многофакторность исследуемого гетерогенного объекта и наблюдателя. Временна́я эволюция Q_i очень сложна ввиду нелинейного поведения компонентов метасистемы и нелинейного характера связей между ними. Поэтому пучок фазовых траекторий весьма чувствителен к малым возмущениям и обладает множеством точек бифуркации. В этих условиях фазовая точка, изображающая состояние метасистемы в многомерном (многофакторном) пространстве состояний, может перебрасываться с одной траектории на другую под действием малых возмущений, малых изменений структуры, порождающих сигналы, которые выделяются в каждой системе в самостоятельные *информационные подсистемы,* или *подсистемы управления* [6; 7]. Математические модели, учитывающие большую часть динамических и информационных факторов, определяющих поведение гетерогенных метасистем различной (не только физической) природы, чрезвычайно сложны, практически неразрешимы и поэтому бесполезны.

Для создания разрешимых (хотя бы приближенно) и практически полезных моделей введем ряд упрощающих допущений.

Д 1. Размеры частиц наполнителя (пузырьков, твердых частиц) и неоднородностей в гетерогенной системе *много больше* молекулярно-кинетических размеров (расстояний между молекулами, параметров кристаллической решетки и пр.).

Д 2. Размеры частиц наполнителя *много меньше* расстояний, на которых макроскопические параметры гетерогенной метасистемы (H*H°H•) или составляющих ее систем меняются существенно. Исключение составляют поверхности соприкосновения систем, которые будут исследоваться отдельно. Это допущение позволяет рассматривать макроскопические процессы в гетерогенных метасистемах (распространение в них волн различной природы, рост и колебания пузырьков, вращение твердых частиц и пр.) с помощью макроскопических параметров и учета факторов, присущих каждой отдельной системе.

Д 3. Частицы наполнителя присутствуют в каждом элементарном макрообъекте метасистемы в небольшой объемной концентрации и представляют собой сферические объекты (пузырьки, частицы), радиус и дипольные моменты которых (для твердых частиц) могут зависеть от температуры и других факторов.

Д 4. Отсутствуют процессы дробления, слипания (коагуляции) и образования новых частиц наполнителя.

Д 5. Можно пренебречь непосредственным взаимодействием и столкновениями между частицами наполнителя.

Эти допущения позволяют описать макроскопические процессы в дисперсной метасистеме с помощью совокупности *трех многофакторных нестационарных взаимодействующих континуумов*. При этом в каждом континууме (H*, H°, H•) выявлены существенные для конкретной проблемы факторы, определены соответствующие параметры, установлены механизмы взаимодействия континуумов. Результаты исследования возможных и реально происходящих процессов отражаются в системе континуальных уравнений и требований согласования.

2. Многофакторная динамика состояний и процессов гетерогенных метасистем

Гетерогенные метасистемы, включающие в себя системы наблюдателя Н*, носителя Н° и наполнителя Н$^\bullet$, относятся к категории *эргатических* метасистем — сложных целеустремленных комплексов. Их характерные особенности — разнообразие и вариативность «определяющих» факторов, реакций на внешние воздействия, разнообразие процессов релаксации и др. Для определения типа оптимального функционала необходимо детально разграничить (на первом этапе) и установить обоснованные связи компонентов метасистемы. Чтобы получить возможность исследования многофакторной динамики состояний и процессов, следует при выборе оптимального функционала учесть возможные типы целей систем, образующих метасистему (Н*Н°Н$^\bullet$), – регулирование, слежение, возбуждение колебаний нужного вида, синхронизацию или модификацию предельных аттракторов [7].

Анализ показал, что этим требованиям отвечает гамильтониан метасистемы: аддитивный функционал гамильтонианов систем и гамильтонианов связей (взаимодействия) между системами. В общем виде такой гамильтониан представляется суммой

$$\mathrm{H} = \mathrm{H}^* + \mathrm{H}^\circ + \mathrm{H}^\bullet + \sum_{i \neq j} \mathrm{H}^{ij} + \mathrm{H}^{(*,\circ,\bullet)}, \tag{1}$$

где $i, j = *, \circ, \bullet$ — (наблюдатель, носитель, наполнитель); 4-е слагаемое соответствует попарному взаимодействию систем; 5-е — «трехсистемному» (гипотетическому) взаимодействию. Каждое слагаемое правой части зависит от времени, координат системы, физических факторов (механических и электромагнитных полей, диффузии, теплопередачи, вязкости, проводимости), управляющих функций и параметров и др.

Если такой гамильтониан известен («сконструирован» из общих соображений), то динамика состояний и процессов гетерогенной метасистемы определяется уравнениями Гамильтона:

$$\dot{z}^{(i,j,k)} - \frac{\partial \mathrm{H}}{\partial p^{(i,j,k)}} = -\mu \frac{\partial L_c}{\partial p^{(i,j,k)}}, \quad \dot{p}^{(i,j,k)} + \frac{\partial \mathrm{H}}{\partial z^{(i,j,k)}} = \mu \left(Q^{(i,j)} + Q^{(i,j,k)} + \frac{\partial L_c}{\partial z^{(i,j,k)}} \right), \tag{2}$$

где $i, j, k = *, \circ, \bullet$; z — обобщенные координаты; p — обобщенные импульсы; точка над буквой означает производную по времени; μ — коэффициенты, характеризующие интенсивность связей между системами; $Q^{(i,j)}$ и $Q^{(i,j,k)}$ — все непотенциальные обобщенные взаимодействия; L_c — лагранжиан системы связей.

Порядок действий при решении конкретной проблемы таков.

1. Устанавливаются границы метасистемы и составляющих ее систем (Н*Н°Н$^\bullet$).

2. Определяется характер и механизмы динамических и информационных связей между системами.

3. Выявляются факторы и соответствующие им величины, определяющие динамику систем и метасистемы.

4. Строится гамильтониан (1).

5. Записываются уравнения (2) с граничными, начальными условиями, соотношениями согласования.

Для иллюстрации применения предложенного подхода рассмотрим два конкретных примера.

3. Влияние изменения радиуса паро-газового пузырька на движение жидкости-носителя

Построим математическую модель сферически-симметричного движения бесконечного объема носителя Н° около сферического паро-газового пузырька наполнителя Н$^\bullet$ с зависящим от времени радиусом $a = a(t)$. Такое движение может возникнуть при фазовых переходах в пузырьке, вызванных изменением температуры T, при изменении давления P всплывающего пузырька, а также при некоторых химических реакциях. Под воздействием изменяющихся внешних факторов пузырек испытывает радиальное сжатие (расширение).

В сферической системе координат с началом в центре пузырька поле радиальных скоростей имеет составляющие $w_r = w(r)\vec{r}/r$, $w_\theta = w_\varphi = 0$, где $\vec{r}$ — радиус-вектор с началом, совпадающим с центром пузырька. Уравнения второго закона динамики и непрерывности, получаемые из общих соотношений (1, 2), в данном случае имеют вид:

$$r^\circ(w_t + ww_r) = -p_r + \mu^\circ\left[\frac{1}{r^2}(r^2 w_r)_r - \frac{2w}{r^2}\right]; \tag{3}$$

$$\frac{1}{r^2}(r^2 w_r)_r = 0,\ \rho^\circ,\ \mu^\circ = \text{const}. \tag{4}$$

Предполагается, что носитель на бесконечности покоится.

На поверхностях $r = \text{const}$, где $\vec{n} = \vec{r}/r$, напряжения, играющие в данном случае роль функций связи f, равны $\sigma^{(rr)} = -p + 2\mu^\bullet w_r$, а граничные условия имеют вид:

$$\begin{cases} \xi_{12} = -\xi_{21} = \rho^\circ(a_t - w_a^\circ) = \rho^\bullet(a_t - w_a^\bullet), \\ \sigma_a^{(rr)\circ} = -p_a^\circ + 2\mu^\circ(w_r)_{r=a},\ \sigma_a^{(rr)\bullet} = -p_a^\bullet. \end{cases} \tag{5}$$

Здесь ξ_{ij} — интенсивность фазовых переходов на поверхности пузырька наполнителя Н$^\bullet$, $\sigma_a^{(rr)\circ}$ и p_a° ($\sigma_a^{(rr)\bullet}$ и $p_a^\bullet$) — радиальное напряжение и давление жидкости носителя Н° (пузырька) и наружной (внутренней) стороны стенки пузырька. Отметим, что ввиду малой вязкости газа (пара) по сравнению с вязкостью жидкости $\sigma_a^{(rr)\bullet} = p_a^\bullet$ слагаемым $\xi_{12}(w_a^\circ - w_a^\bullet)$ можно пренебречь, а слагаемое, определяющее капиллярный эффект, проявляется лишь при очень малых размерах пузырьков.

Из уравнения (4) и первого граничного условия (5) следует

$$w = \frac{w_a^\circ a^2}{r}, \tag{6}$$

причем соответствующее поле скоростей $\vec{w}_r$ — потенциальное:

$$w^i_{(r)} = \nabla^i \varphi_{(r)},\ \varphi_{(r)} = -\frac{A}{r},\ A(t) = \overset{\circ}{w}_a a^2,$$

где $\varphi_{(r)}$ удовлетворяет уравнению Лапласа и граничным условиям

$$\Delta^{(k)}\varphi_{(r)} = 0,\ \left.\frac{\partial \varphi_{(r)}}{\partial n}\right|_{r=a} = \overset{\circ}{w}_a.$$

Подставляя (6) в уравнение (3), находим, что выражение в квадратных скобках равно нулю; и уравнение движения (с учетом потенциальности w) можно проинтегрировать по r и получить интеграл Коши — Лагранжа в таком же виде, как и для идеальной жидкости:

$$\frac{\partial \varphi_{(r)}}{\partial t} + \frac{w^2}{2} + \frac{p}{\overset{\circ}{\rho}} = F(t).$$

Таким образом, вязкость носителя $\overset{\circ}{\mu}$ не входит в уравнение движения, так как импульс вязких сил в рассматриваемом случае всегда равен нулю и влияет на динамический процесс сферически-симметричного движения носителя только через граничные условия (3).

Подставляя в (6) граничные условия при $r = a$ и $r = \infty$:

$$r = a,\ \frac{\partial \varphi_{(r)}}{\partial t} = -\frac{(\overset{\circ}{w}_a)_t\ a^2 + 2a\overset{\circ}{w}_a a_t}{a},\ \ w = \overset{\circ}{w}_a,\ p = \overset{\circ}{p}_a,\ w_r = \frac{-2\overset{\circ}{w}_a}{a},$$
$$r = \infty,\ \varphi_t = 0,\ w = 0,\ p = p_\infty,$$

получим, учитывая (5) и классическое уравнение Рэлея — Лэмба [8; 9] для радиального движения пузырька наполнителя H• в безграничном жидком несжимаемом носителе H° с учетом фазовых переходов, следующие соотношения для радиуса и давления:

$$a(\overset{\circ}{w}_a)_t + \frac{3}{2}(\overset{\circ}{w}_a)^2 = \frac{\overset{\circ}{p}_a - p_\infty}{\overset{\circ}{\rho}},\ a_t = \overset{\circ}{w}_a + \frac{\xi_{12}}{\overset{\circ}{\rho}},\ \overset{\circ}{p}_a = \overset{\bullet}{p}_a - \frac{4\overset{\circ}{\mu}\overset{\circ}{w}_a}{a}.$$

Полученные выражения для $a(t)$ и $\overset{\circ}{p}_a(a)$ позволяют проводить численные расчеты и сопоставлять теоретические результаты с данными экспериментов.

4. Особенности процесса конвективной диффузии в гетерогенной метасистеме

Характер протекания различных физических процессов в гетерогенных метасистемах, как известно, в немалой степени определяется гидродинамическими факторами. К ним относятся процессы, происходящие на границах раздела фаз, связанные с адсорбцией, десорбцией, диффузией вещества между областями гетерогенной системы (суспензии) с различной концентрацией наполнителя H•. Математические модели этих сложных процессов нелинейны [10—12]. Подход к созданию и исследованию таких моделей, предложенный в работе [4], открывает новые возможности и позволяет получить полезные и информативные аналитические и численные результаты.

В качестве физической системы, где происходит процесс конвективной диффузии, рассмотрим погружающуюся в жидкость-носитель Н° каплю суспензии (Н°Н•). При этом через поверхность капли в основную жидкость-носитель происходит диффузия частиц наполнителя. Количество вещества, диффундирующего через поверхность в единицу времени, определено полуэмпирическим законом Нернста [10]

$$Q = D\frac{u-u_ж}{\delta}S,$$

где u — концентрация наполнителя в суспензии; $u_ж$ — концентрация наполнителя в основной жидкости; D — коэффициент диффузии; S — площадь поверхности капли; δ — некоторая постоянная, зависящая от скорости v движения капли, $\delta = 1/v^{\alpha}$, $1/3 < \alpha < 1$ и зависит от характера процесса.

Следуя алгоритму, представленному в разделе 2, формируется гамильтониан метасистемы (Н°Н•), определяется характер связей между Н° и Н• и т. д. Подставив полученный гамильтониан в уравнения (2) и проведя некоторые преобразования, получаем нелинейное уравнение диффузии в сферических координатах (соответственно симметрии процесса).

Конкретная постановка задачи такова: определить распределение концентрации $u(r, t)$ частиц наполнителя в погружающейся капле суспензии как решение нелинейного уравнения диффузии

$$-u_t + (\vec{v}\,\mathrm{grad})u = D\Delta u \tag{7}$$

с начальными и граничными условиями $u\big|_{\substack{t=0\\ r\in[0,a]}} = u_0$, $u\big|_{r\to\infty} \to 0$, $u\big|_{r=a} = u(t)$,

где a — начальный радиус капли.

Скорость жидкости, обтекающей погружающуюся каплю, уменьшается с увеличением расстояния от поверхности капли. Вблизи поверхности возникает диффузионный пограничный слой, через который частицы наполнителя проникают из капли (начальная концентрация равна u_0) в основной объем чистой жидкости ($u = 0$).

Для произвольного момента времени в пограничном слое уравнение (7) можно записать в сферических координатах (r, θ, φ):

$$v_r\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r}\frac{\partial u}{\partial \theta} = D\left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial u}{\partial r}\right). \tag{8}$$

Заметим, что слагаемое $\dfrac{1}{r^2\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial t}\left(\sin\theta\dfrac{\partial u}{\partial\theta}\right) = 0$, так как производная по полярному углу много меньше производной по радиусу капли.

Из физических соображений следует, что заметное изменение концентрации наполнителя Н• происходит в слое, толщина которого мала по сравнению с размерами капли. Поэтому нас будут интересовать решения уравнения (8) при r, близких к $r = a$.

Функция тока вблизи поверхности капли имеет вид [13] $\psi(r,t) \approx \approx -0,75Vr\sin^2\theta$, где V — макроскопическая скорость погружения капли. Тангенциальная составляющая скорости диффузии $v_\theta \approx 1,5V(r/q)\sin\theta$. Учитывая выражения для $\psi(r, t)$ и v_θ, находим, что

$$\left(\frac{\partial u}{\partial \theta}\right)_\psi = Da^2 \sin^2\theta\sqrt{3V}\,\frac{\partial}{\partial \psi}\left(\sqrt{\psi}\,\frac{\partial u}{\partial \psi}\right)$$

с граничными условиями $u\big|_{r=a} = 0, \psi = 0, u\big|_{r\to\infty} = 0, \psi \neq 0, u\big|_{\theta=0} = u_0, \psi = 0$ (последнее условие имеет место для набегающего потока).

Вводя новые переменные и используя метод эталонного моделирования, находим выражение для диффузионного потока $j(r, V, \theta)$ через поверхность капли

$$j(r, V, \theta) = \frac{Du_0}{1,15}\sqrt[3]{\frac{3V}{4Dr^2}}\,\frac{r\sin\theta}{(\theta - 0,5\sin 2\theta)^{1/3}},$$

которое позволяет сделать ряд физически важных заключений.

1. Поток j пропорционален исходной концентрации u_0, зависит от скорости погружения $V^{1/3}$, коэффициента диффузии $D^{2/3}$, радиуса капли $r^{1/3}$ и угла θ.

2. При $\theta = \pi$ имеем $j(\theta = \pi) = 0$, то есть диффузионный поток с этих частей поверхности капли отсутствует.

3. Полный поток диффундирующих частиц задается интегралом

$$\Pi = 2\pi r^2 \int_0^\pi j \sin\theta d\theta = \frac{Du_0 r^{7/3}}{1,15}\sqrt[3]{\frac{3V}{4D}}\,2\pi\int_0^\pi \frac{\sin^2\theta}{(\theta - 0,5\sin 2\theta)^{1/3}}\,d\theta.$$

Вычисление этого интеграла дает следующее выражение для полного потока диффундирующих частиц наполнителя:

$$\Pi = 7,98u_0 D^{2/3} V^{1/3} r^{7/3}.$$

Таким образом, нелинейные математические модели многофакторной динамики некоторых дисперсных метасистем (H*H°H•) могут разрабатываться с использованием методики, предложенной в работах [3; 4; 7; 9], и дают возможность реализации обобщенного теоретического подхода к исследованию гетерогенных сред.

Список литературы

1. *Такетоми С., Тикадзуми С.* Магнитные жидкости. М., 1996.

2. *Кутателадзе С. С., Стырикович М. А.* Гидродинамика газожидкостных систем. М., 1976.

3. *Советов Б., Яковлев С. А.* Моделирование систем. М., 2002.

4. *Игропуло В. С.* Многофункциональная нелинейная модель бинарного гетерогенного коллоида как метасистемы // Вестник Ставропольского государственного университета. 2006. Вып. 47. С. 72—78.

5. *Краснощеков П. С., Петров А. А.* Принципы построения моделей. М., 2006.

6. *Кадомцев Б. Б.* Динамика и информация. М., 1997.

7. *Фрадков А. Л.* Кибернетическая физика. СПб., 2003.

8. *Поддубная Н. А.* Гидродинамическое звукообразование при насыщенном кипении: дис. … канд. физ.-мат. наук. Ставрополь, 1998.

9. *Лойцянский Л. Г.* Механика жидкости и газа. М., 1970.

10. *Дульнев Г. Н., Новиков В. В.* Процессы переноса в неоднородных средах. Л., 1991.

11. *Журавлев В. М.* Точные решения уравнения нелинейной диффузии в двумерном координатном пространстве // Теор. и мат. физика. 2000. Т. 124, №2. С. 265—278.

12. *Маслов В. П., Данилов В. Г., Волосов К. А.* Математическое моделирование процессов тепломассопереноса. М., 1987.

13. *Левич В. Г.* Физико-химическая гидродинамика. М., 1959.

Об авторе

Виталий Стилианович Игропуло — канд. физ.-мат. наук, доц., Ставропольский государственный университет, e-mail: igropulo@mail.ru.

Author

Dr Vitaly Igropulo — assistant prof., Stavropol State University, e-mail: igropulo@mail.ru.