

МАШИНЫ И АППАРАТЫ ПЕРЕРАБОТКИ ДИСПЕРСНЫХ МАТЕРИАЛОВ

ОСНОВЫ ПРОЕКТИРОВАНИЯ

А. Н. Веригин, В. С. Данильчук, Н. А. Незамаев



www.e.lanbook.com



**ЭБС
ЛАНЬ® ЛАНЬ**

**А. Н. ВЕРИГИН,
В. С. ДАНИЛЬЧУК,
Н. А. НЕЗАМАЕВ**

МАШИНЫ И АППАРАТЫ ПЕРЕРАБОТКИ ДИСПЕРСНЫХ МАТЕРИАЛОВ ОСНОВЫ ПРОЕКТИРОВАНИЯ

Учебное пособие

Под редакцией профессора А. Н. Веригина



САНКТ-ПЕТЕРБУРГ
МОСКВА
КРАСНОДАР
2018

ББК 35.111я73
В 32

Веригин А. Н., Данильчук В. С., Незамаев Н. А.

В 32 Машины и аппараты переработки дисперсных материалов. Основы проектирования: Учебное пособие / Под ред. А. Н. Веригина. — СПб.: Издательство «Лань», 2018. — 536 с.: ил. — (Учебники для вузов. Специальная литература).

ISBN 978-5-8114-2755-0

Изложены основы создания безопасного, экологически чистого, высокопроизводительного и экономически выгодного оборудования для переработки дисперсных материалов, которое предполагает измельчение (механическую обработку), классификацию, сушку, смешивание, гранулирование и дозирование дисперсных материалов. Разработка таких средств невозможна без всестороннего анализа особенностей и основ проектирования объектов химической техники, что и составляет основное содержание пособия.

Книга предназначена для инженерно-технических работников, занимающихся исследованием, проектированием и эксплуатацией оборудования в химической и других областях промышленности. Может служить пособием для студентов очной и заочной форм обучения, а также обучающихся дистанционно и по ускоренной системе по направлениям: «Технологические машины и оборудование», «Строительство», «Химическая технология». Может быть полезна аспирантам и инженерно-техническим работникам, занимающимся разработкой машин и аппаратов переработки дисперсных материалов.

ББК 35.111я73

Рецензенты:

А. В. АЛЕКСАНДРОВ — доктор технических наук, профессор, зав. кафедрой машин автоматизированных систем Санкт-Петербургского государственного университета промышленных технологий и дизайна;

О. М. ФЛИСЮК — доктор технических наук, профессор Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета).

Обложка
Е. А. ВЛАСОВА

© Издательство «Лань», 2018
© Коллектив авторов, 2018
© Издательство «Лань»,
художественное оформление, 2018

ПРЕДИСЛОВИЕ

Пособие написано так, чтобы каждый читатель в зависимости от его целей – познавательных или практических – мог найти ответы на интересующие его вопросы.

Познавательные цели – стремление читателя понять и всесторонне оценить сложность решаемых задач при проектировании (создании) новых технических средств.

Практические цели сводятся к тому, чтобы вооружить читателя средствами и методами для численной оценки принимаемых технических решений при проектировании химической техники переработки дисперсных материалов.

Первая глава посвящена общим основам создания объектов химической техники. К таким основам отнесены: моделирование, управление качеством объектов техники и анализ ХТА как объекта проектирования. Рассматриваемые в пособии дисперсные материалы в основном имеют кристаллическую природу. *Вторая глава* посвящена описанию как физических, так и технологических свойств кристаллических дисперсных материалов. Эти свойства отдельной частицы и свойства большой их совокупности, которые имеют определяющее значение при проведении расчетов. Совокупность дисперсных частиц может рассматриваться как дисперсная система. Изучению поведения таких систем посвящена *третья глава*. Рассмотрено основное кинетическое уравнение поведения дисперсной системы и подходы к расчету его основных параметров: скорости образования дисперсной фазы, роста (испарения) и коагуляции частиц. Новым является учет фрактальной размерности дисперсных систем. Изложение принципов работы машин и аппаратов для переработки дисперсных материалов невозможно без знаний закономерностей гидродинамики дисперсных систем. Этому вопросу посвящена *четвертая глава*, которая содержит разделы, имеющие наибольшее практическое значение для расчета большинства машин и аппаратов. Это динамика одиночной частицы; особенности движения газовзвеси; гидродинамика аппаратов и явления перемешивания дисперсных частиц.

О том, насколько удачно подобраны вопросы, возникающие при проектировании объектов техники для механической обработки дисперсных материалов, и содержательны ответы на них, пусть судят читатели.

Понимая, что учебное пособие не свободно от недостатков, и учитывая разнообразие и сложность освещаемых вопросов, а в некоторых случаях новизну рассматриваемого материала, критические замечания по содержанию и форме изложения, а также пожелания будут приняты с благодарностью.

Замечания просьба направлять по адресу: Московский пр., 26, Санкт-Петербург, 190013, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), кафедра «Машины и аппараты химических производств».

ВВЕДЕНИЕ

Совершенствование производств, перерабатывающих дисперсные материалы, должно быть направлено на создание высокоавтоматизированных и способных к адаптации в условиях конкретного технологического процесса технических средств (машин и аппаратов). При этом бесспорными являются следующие положения:

- создание новых технических средств, перерабатывающих дисперсные материалы, должно опираться на последние достижения науки;
- эффективное использование последних достижений науки в практике возможно только при обоснованном выборе объекта научных исследований.

В нашем случае объект научных исследований содержит в себе два начала:

- технологию переработки дисперсных материалов как основу получения продуктов необходимого качества с заданными потребительскими свойствами;
- технологию машиностроения как основу создания технических средств, которые позволяют реализовать конкретную технологическую операцию.

Объектом, в полной мере отвечающим этим двум началам, может стать химико-технологический агрегат (ХТА).

Рассмотрим ХТА как систему, основные признаки которой относятся к области техники. Под ХТА как технической системой понимается совокупность процессов, протекающих при проведении отдельной технологической операции (механической обработке дисперсных материалов, их классификации, смешивании и гранулировании), и технических средств для их осуществления.

Техническая система (ХТА) не является изолированной, поскольку взаимодействует с внешней средой (сферой эксплуатации). В этом взаимодействии проявляются функции системы, т. е. степень достижения той цели, для которой данный ХТА был создан. Функциональный аспект определяется характером технологической операции, которую должен выполнять ХТА. Потенциальные возможности функционирования ХТА, присущие ему внутренне, ограничиваются воздействием на него внешней среды. Степень реализации функций ХТА зависит от уровня его совершенства, которое закладывается при проектировании и обеспечивается в сфере машиностроительного производства. ХТА – это реальный материальный объект, который является самостоятельным машиностроительным изделием, включающим в себя отдельные аппараты, машины, вспомогательное оборудование, приборы КИП и АСУТП.

Создание объектов техники связано с проектированием. Для понимания проектирования требуется четкое представление о его сущности. Известны различные его определения, в которых находит отражение убежденность авторов в необходимости целостного подхода к рассмотрению проектирования. Под проектированием будем понимать всестороннее познание еще не существ-

вующего в природе объекта техники и описание полученных знаний с использованием некоторых абстрактных представлений.

Одним из подходов к описанию знаний с использованием абстрактных представлений является моделирование. Известно много достаточно хорошо разработанных методов математического описания процессов и явлений. Дать их перечень, а тем более даже краткий анализ в рамках данного пособия не представляется возможным. Кратко рассмотрим только метод математического описания, который непосредственно позволяет наиболее полно описать особенности функционирования аппарата или химико-технологического агрегата.

В основе большинства процессов переработки дисперсных материалов, а значит, и в основе работы аппаратов лежат явления, вероятностные по своей природе. Стохастические (вероятностные) особенности проявляются прежде всего в неравномерности распределения элементов фаз по времени пребывания, по размерам, по траекториям, в неоднородности удерживающей способности аппарата по зонам, в случайном характере распределения потоков фаз по рабочему объему аппарата. Макронеоднородности гидродинамической обстановки в объеме аппарата, неравномерность и случайный характер распределения материальных и тепловых потоков в нем, неоднородности физико-химических свойств дисперсных материалов особенно характерны для проточных аппаратов с механическим подводом энергии.

Особенности движения обрабатываемых сред в аппарате оказывают существенное влияние на эффективность протекающих в них процессов. Характер течения потоков в реальных аппаратах настолько сложен, что дать их строгое математическое описание в большинстве случаев не представляется возможным. Практический выход состоит в создании некоторой упрощенной модели, которая позволила бы учесть особенности гидродинамики при оценке эффективности работы оборудования в условиях реального производства. Речь идет о создании так называемой модели структуры потоков. Модель структуры потоков имеет мало общего с реальным течением обрабатываемой среды и позволяет обобщить особенности гидродинамики различных по конструкции аппаратов. Получаемые при этом модели просты и при правильном построении достаточно точно отражают реальный физический процесс.

На практике наблюдается отличие действительной картины течения потоков от режима идеального вытеснения или смешения. Причин этому достаточно много, в частности, наличие струйных или отрывных течений, застойных зон, циркуляции потока в аппарате, резких его поворотов при ударе о преграду, когда течение вырождается в интенсивный поток вдоль преграды. Ни классическая ячеечная модель, ни тем более диффузионная модель в этом случае не описывают фактический режим течения обрабатываемой среды в аппарате. В то же время такие гидродинамические условия часто можно встретить в промышленных аппаратах с псевдооживленным слоем зернистых материалов. В этих случаях целесообразно рассматривать реальный аппарат как совокупность взаимосвязанных областей потока, причем модели движения обрабатываемой среды в каждой из них могут быть приняты различными.

Указанные модели носят название смешанные, или комбинированные. Появление таких моделей связано со сложностями получения аналитических решений при использовании, например, сложной ячеечной модели с произвольными потоками между отдельными ячейками. При использовании ПЭВМ эти сложности ушли в прошлое, а изучение данных моделей носит скорее познавательный характер.

Несмотря на простоту и эффективность описания структуры потоков для проточных аппаратов с использованием *математического аппарата цепей Марковского*, существует еще ряд нерешенных до конца проблем. Имеется возможность для вновь создаваемого аппарата прогнозировать достаточное для его описания количество ячеек, их объем, циркуляционные потоки между ними, что имеет особое значение при проведении проектных расчетов. Имеется также возможность по топологической модели представить конструкцию будущего аппарата. Необходимы методы формализованного построения топологических моделей структуры потоков для аппаратов конкретной конструкции. Достигнутые в настоящее время успехи позволяют говорить о наличии достаточно универсального метода имитационного моделирования работы аппаратов неидеального перемешивания. Сама модель остается практически неизменной, а меняется только матрица переходных вероятностей.

Метод Монте-Карло — это численный метод решения математических задач при помощи моделирования случайных величин. Он также нашел широкое применение в инженерной практике. Разработанная на его основе схема расчетов может быть применена и для различных технологических процессов, в которых для отдельных частиц обрабатываемого материала наблюдается неравномерное распределение времени пребывания в зонах с разным режимом. Например, указанным способом расчета можно воспользоваться при определении вероятности попадания дисперсных частиц на выгрузку из каскада аппаратов непрерывного действия. Изменяющиеся в каскаде аппаратов условия, в данном случае температура среды, концентрация, интенсивность перемешивания, различная структура потоков, можно учесть при применении метода Монте-Карло, значительно упростив и автоматизировав процедуру расчета.

Управление качеством объектов техники. Необходимые качественные показатели дисперсных материалов достигаются на стадии их производства. Насколько совершенно это производство, настолько высоки достигаемые качественные показатели. Производство характеризуется наличием малопроизводительных аппаратов и, как следствие, высокой трудоемкостью и не может удовлетворять современным требованиям. Это явилось причиной системных исследований технологии переработки дисперсных материалов, которые декомпозируются на два направления:

- создание стратегии синтеза оптимальных структур для фаз подготовки компонентов и приготовления составов;
- системный анализ существующих технологий, аппаратов и перерабатываемых материалов и разработка требований к вновь создаваемым перспективным технологиям, аппаратам, агрегатам и автоматизированным линиям.

Совершенствование существующих производств направлено на улучшение качества выпускаемой продукции, что напрямую связано с достигнутым научно-техническим уровнем используемых для этого химико-технологических агрегатов. Большое значение имеет технический уровень самих производств, их технологичность – пригодность к выпуску на автоматизированных агрегатах, роторных и роторно-конвейерных линиях. При создании новых ХТА и модернизации существующих необходимо исходить из современных концепций совершенствования объектов техники.

В пособии приведен перечень научных дисциплин, которые составляют теоретическую основу управления качеством объектов техники для обработки дисперсных материалов и позволяют:

- предложить концепцию управления качеством изделий, которая должна учитывать основные закономерности управления как науки и его характеристики, иметь конкретную структуру, быть увязанной с общей стратегией управления и иметь формализуемую модель принятия решения;
- разработать методику системного анализа при управлении качеством сложных технических систем, которая предполагает конкретизацию таких понятий, как система, элемент, системность, применительно к решаемой задаче; определение и уточнение содержания основных этапов системного анализа; обоснование выбора объекта исследования;
- выполнить анализ производства как сложной технической системы; выявить взаимосвязь отдельных ХТА; сформулировать основные требования с позиций управления качеством производства дисперсных материалов.

Идеология управления качеством изделий начала интенсивно развиваться примерно в 1950-е годы. С тех пор она претерпела существенные изменения, которые коснулись следующих аспектов.

Во-первых, объективно обусловленное наличие нескольких параллельных процессов управления. Это касается не только одновременного функционирования различных частей системы управления, но и принципиально порождается самой ее структурой (экспериментирование с моделями, коррекция моделей, выделение и оценка существенных параметров управления).

Во-вторых, объективное априорно заданное существование объекта управления, для которого изначально отсутствует стратегия управления. Созданное для целей управления, оно может не учитывать особенности конкретного изделия. При управлении могут корректироваться не только модели, стратегии, цели и языки, но и различные этапы общей стратегии управления.

Управление как *организация производства* проявляется во всех своих *вещественных – энергетических – информационных* качествах. Как показывает не только практика многих десятилетий, потребность корректировки системы управления при ее функционировании – это не исключение, а реальная закономерность его организации.

В-третьих, массовая (общепринятая) реализация моделей и моделирования лингвистическими средствами на цифровых вычислительных машинах дискретного действия. Это может значительно расходиться с содержанием объек-

та управления. Например, адекватной моделью может являться обычная инструкция для мастера по проведению конкретной технологической операции.

В-четвертых, существенные различия сложности структур управления в отдельных узлах и в системе управления в целом. Более продуктивным будет принцип подобия сложности структур, когда и часть и система управления в целом в равной степени характеризуются основными функциями (рис. 1.2.4).

При управлении качеством переменные блоки моделей могут содержать одноименные элементы: базовые понятия и отношения, целевые структуры, оценочные функции. Наличие многих одноименных элементов обуславливает возможности создания универсальных моделей решения задач управления качеством дисперсных материалов.

Объектом управления является дисперсный материал в совокупности с его качественными показателями, а управляющей системой – производство этих изделий, где формируется их качество. Качество напрямую связано с технологичностью производства. Поэтому модель управления качеством – это обобщенная методика определения технологичности производства по его фазам.

ХТА как объект проектирования. Опыт, накопленный в области машиностроения, показывает, что коренная перестройка химического производства должна быть направлена на создание высокоавтоматизированных и способных к адаптации в условиях конкретного технологического процесса технических средств (машин и аппаратов). Однако он не может быть механически использован в рассматриваемом нами случае.

Анализ условий проектирования, изготовления и эксплуатации объектов химической техники полностью подтверждает правильность выбора в качестве объекта исследования химико-технологического агрегата.

Каждому направлению развития техники свойственны определенные особенности. Было показано, что существуют также особенности, делающие химическую технику отличной от машин, самолетов, кораблей, техники для переработки пищевых продуктов и т. д. Эти особенности в основном и определяют достигнутый в настоящее время технический уровень совершенства машин и аппаратов химических производств.

Перечисленные особенности не являются абсолютно бесспорными и требуют дальнейшего анализа. Опираясь на них, можно сделать вывод о целесообразности пересмотра концепции создания оборудования уже на стадии его проектирования. Значительный прогресс в совершенствовании химической техники может быть достигнут благодаря более широкому использованию средств интенсификации технологических процессов на основе применения последних достижений науки, что отвечает общей тенденции развития техники.

Изучение общих начал, лежащих в основе проектирования, изготовления и эксплуатации типовых ХТА, составляет систему научных знаний о ХТА. Эти знания образуют первичную семантическую информацию.

Представленный перечень научных дисциплин и установленная между ними взаимосвязь в общем виде образуют систему знаний о химико-технологических

агрегатах. Построенную систему знаний необходимо рассматривать как основу для проведения дальнейших исследований по созданию первичной семантической информации.

При автоматизированном проектировании инженер должен использовать для взаимодействия с ЭВМ естественный язык. Наиболее важно выбрать метод представления знаний с целью реализации семантической совместимости человека с ЭВМ при преобразовании первичной семантической информации во вторичную. Пока не существует единой теории перехода от одной формы представления информации к другой. Практическая реализация подобных преобразований остается до сих пор прерогативой инженера.

Переход ко вторичной семантической информации на основе обобщенной модели предполагает выделение базовых категорий. На их основе строятся дальнейшие обобщения: факты и аспекты. Факт отражает свойство объекта, не поддающееся дальнейшему смысловому делению. Аспект объединяет ряд фактов, имеющих общую смысловую нагрузку. Повышение точности и полноты вторичной семантической информации необходимо для создания информационного языка. Словарь языка строится на основе дескрипторов, делящихся на ряд предметных классов. Указатели роли и указатели связи образуют его грамматику. Последующее познание ХТА при его проектировании предполагает раскрытие содержания технической системы, функционально-структурной схемы, конструктивной схемы и комплексного критерия качества.

Объектом механической обработки являются **кристаллические дисперсные материалы**. В таких материалах расположение атомов (или молекул) соответствует периодическому повторению определенного «узора» в трех измерениях, и поэтому они называются кристаллами, а расположение атомов в них – кристаллической структурой. Механические воздействия на твердые тела приводят к нарушению их кристаллической структуры, т. е. к появлению в структуре самих различных дефектов, в том числе и дислокаций.

Изучение дефектов структуры кристаллических тел позволяет понять механизмы их разрушения. Среди возможных дефектов определяющими являются дислокации, которые подвижны и способны размножаться. Поэтому характер деформации и разрушения твердых тел зависит от свойств дислокации в твердых телах. Предел прочности твердых тел зависит от сложных взаимодействий дислокаций друг с другом и с другими дефектами твердого тела. Эти взаимодействия настолько сложны, что на основе простых дислокационных теорий нельзя предсказывать прочность твердых тел. Однако теория дислокаций позволяет понять с качественной стороны механические свойства твердых тел.

Порядок, свойственный расположению атомов твердого тела, часто приводит к симметрии его наружной формы. Для частиц каждого материала характерна своя преобладающая форма (округлая, угловатая, пластинчатая), которая определяется происхождением и свойствами исходного продукта. **Форма частиц** оказывает существенное влияние на величину удельной поверхности материала, гидродинамическое сопротивление, образование пустот в

слое, текучесть материала, угол естественного откоса, прессуемость, лиофильность.

В природе существует достаточно большое число дисперсных материалов правильной формы, однако практического применения в промышленности они не находят. В промышленности приходится сталкиваться с дисперсными частицами, форма которых далека от идеальной формы. Изменение формы частиц при механической обработке в одинаковых динамических условиях происходит по-своему. Это вызвано различиями не только морфологического плана, но и внутренними особенностями структуры этих типов частиц. При «жизни» большинство из них может принимать форму, достаточно близкую к сферической.

Природные и промышленные дисперсные материалы состоят из частиц различного морфологического типа, который определяет макроскопические свойства дисперсной системы в целом. В природе существует достаточно большое число дисперсных материалов правильной формы, однако практического применения в промышленности они не находят. Приходится сталкиваться с дисперсными частицами, форма которых далека от идеальной формы.

Дисперсный материал – это совокупность большого количества твердых частиц. Особый характер такой системы обуславливается тем, что при его обработке частицы дисперсного материала ведут себя иначе по сравнению с твердыми телами или жидкостями. Большинство промышленных дисперсных материалов является продуктом измельчения (дробление, разламывание, истирание) крупных кусков либо ряда других технологических процессов. Независимо от способа получения дисперсный продукт содержит в своем составе частицы самого разнообразного размера, причем размеры одних частиц могут быть в сотни и тысячи раз больше размеров других частиц. Несколько меньше различие в размерах частиц дисперсных материалов природного происхождения, однако их состав тоже является **полидисперсным**. Отмеченное обстоятельство – важнейшая особенность природных и промышленных дисперсных материалов.

Иногда применяются дисперсные материалы, близкие по своему составу к **монодисперсным**. В промышленных условиях такие продукты могут быть получены либо искусственно при тщательно контролируемых условиях, когда однородность гранулометрического состава является целью производства (стеклянные шарики, гранулы некоторых химических продуктов), либо благодаря разделению полидисперсного материала на узкие классы. К монодисперсным материалам приближаются некоторые материалы природного происхождения.

Значительное различие в размерах частиц измельченных продуктов осложняет математическое описание аэродинамики и тепло- и массопереноса в двухфазных потоках и применение полученных результатов для расчета технологических процессов, связанных с движением полидисперсных материалов в двухфазных потоках. Поэтому реальный полидисперсный материал заменяют фиктивным монодисперсным, что значительно упрощает анализ и описание различных явлений. Известно множество методов усреднения размеров частиц полидисперсного материала, каждый из которых имеет серьезные недостатки.

Полидисперсную систему частиц невозможно интерпретировать с помощью некоторых зависимостей для монодисперсного материала даже в тех простейших случаях, когда представляют интерес только его интегральные характеристики, т. е. при усреднении размеров частиц по любому из существующих методов неизбежны серьезные ошибки.

Рассматривая физико-механические свойства дисперсных материалов, можно сделать вывод о том, что какую-либо характеристику материала, например его подвижность, нельзя оценить однозначно: она зависит от влажности, размеров частиц, угла внутреннего и внешнего трения, начального сопротивления сдвигу. В то же время для жидкостей или газа достаточно указать только вязкость (плотность). Поэтому возникают трудности при создании классификаций или таблиц свойств сыпучих материалов. Следует группировать сыпучие материалы с близкими физико-механическими свойствами в отдельные классы.

Распределение частиц по размерам. При выборе типа средней (если такой выбор допустим) важно учесть, какие ее свойства полезны при оценке изучаемого процесса. Например, если важно выбрать такую величину, чтобы сумма квадратов отклонений от нее была минимальна, то целесообразно в качестве средней взять среднюю арифметическую. Если важно, чтобы сумма абсолютных отклонений от средней величины была минимальной, то тогда за среднюю величину следует принять медиану. К моде прибегают, когда хотят использовать наиболее характерный параметр данной совокупности. Следует также руководствоваться удобством и простотой расчета, надежностью исходных данных. Например, случайные ошибки в замерах a_i могут не сказаться на моде, если не искажают частоту величины a , определяющей модальное значение.

При симметричном законе распределения полусумма может являться ориентировочной оценкой для среднего арифметического. Полусумма крайних членов дает наименьшее значение максимума отклонений. Семейство средних величин не ограничено распространенными средними. Имеются специальные средние величины со специфическим характером, например тригонометрические средние.

Необходимо помнить, что средние значения свойств дисперсных материалов являются условными и относительными. Эта условность определяется: условной величиной порции, для которой величина свойства принимается постоянной; неизбежными ошибками при анализе дисперсного материала.

Когда утверждается, что в данном потоке материала среднее содержание целевого компонента составляет $\langle c \rangle$, то эта величина фактически складывается из объективно существующей средней величины плюс колебания, связанные с ошибкой ее определения. Выявление составных частей колебаний не всегда представляется возможным. Значительное различие в размерах частиц дисперсных материалов осложняет математическое описание аэродинамики и тепло-, массопереноса в двухфазных потоках и применение полученных результатов для расчета технологического оборудования. В инженерной практике полидисперсный материал заменяют фиктивным монодисперсным, что зна-

чительно упрощает анализ и описание различных явлений. Известно множество методов усреднения размеров частиц полидисперсного материала, каждый из которых имеет серьезные недостатки. Явления, наблюдаемые в полидисперсных системах частиц, невозможно интерпретировать с помощью некоторых зависимостей для монодисперсного материала даже в тех простейших случаях, когда представляют интерес только его интегральные характеристики, т. е. при усреднении размеров частиц по любому из существующих методов неизбежны серьезные ошибки.

Характеристика материалов как объекта сушки. При анализе свойств материалов, от которых зависит продолжительность сушки и выбор конкретного типа и типоразмера аппарата, надо учитывать свойства, характеризующие как диффузионное, так и термическое сопротивление материалов. Необходимо иметь представление о механизме переноса влаги, структуре пор материала, гидродинамических условиях процесса сушки.

На основе производственного опыта были даны рекомендации по аппаратному оформлению сушки для каждой группы квалификационной таблицы, рекомендуемые типовые аппараты обеспечивают необходимое время сушки. Позволяют подвести при сушке тепло, достаточное для разрушения соответствующих форм связи и сообщения молекулам удаляемой жидкости энергии на преодоление сил отталкивания.

Методы усреднения свойств дисперсных материалов. Усреднение – это приведение дисперсного материала к единому (общему) значению признака, близкому к так называемой средней его величине. Но при этом возникает вопрос: что понимать под средним значением признака в дисперсном материале? Вопрос на первый взгляд тривиален. Однако имеются различные типы и различные значения средней величины.

Методы контроля качества дисперсных материалов. Важнейшим аспектом производства дисперсных материалов и изделий на их основе является организация оперативного контроля качества в условиях серийного производства.

Используемые в настоящее время методы контроля химического состава не в полной мере удовлетворяют требованиям быстро развивающейся технологии. Применяющиеся в производстве методы контроля массовой доли компонентов требуют перевода пробы в раствор и последовательного разделения компонентов. Длительность процедуры анализа составляет от 2–4 часов для физико-химических методов (спектрофотометрия; атомная абсорбция) до 4–8 часов для классических химических методов (титриметрия, гравиметрия). Тем не менее эти методы продолжают развиваться.

Метод неразрушающего рентгеновского флуоресцентного экспресс-анализа пригоден для определения массовых долей компонентов в смесях с погрешностью 0,2–1% и временем определения одного компонента 1–2 мин. Метод применен для контроля однородности смесей.

Свойства дисперсных материалов в значительной степени определяются влажностью компонентов и составов в целом. Существующие стандартные методы определения влажности сложны, малопроизводительны и не подда-

ются автоматизации. Поэтому был испытан инфракрасный (ИК) влагомер ВК-204.

После соответствующей доработки конструкции оптического преобразователя, связанной с обеспечением безопасности, прибор может быть использован для непрерывного бесконтактного измерения влажности продуктов непосредственно в технологическом процессе с выдачей управляющего сигнала о текущем значении влажности в АСУ.

Для определения размеров частиц порошков применяются различные способы, объединенные общим названием *методы дисперсионного анализа*. Эти методы делятся на прямые и косвенные методы. К прямым относится непосредственное измерение размеров частиц с помощью некоторого масштаба, будь то шкала микроскопа или ячейки сит. К косвенным методам – определение размеров по какому-либо признаку, непосредственно от них зависящему, например по скорости оседания в вязкой среде, скорости растворения, отражению света суспензией, адсорбционной способности и др. Разнообразие применяемых в настоящее время методов дисперсионного анализа весьма велико. Объясняется это не только большим ассортиментом порошков, отличающихся своей природой и дисперсностью, но и специфичностью их применения. Часто оказывается, что характеристика дисперсности, удовлетворительная в одном случае, неприемлема в другом. Опыт эксплуатации прибора ЭИП-11т подтвердил его достаточную надежность, высокое быстродействие и простоту обслуживания. Прибор ЭИП-11т может быть положен в основу создания автоматизированного быстродействующего устройства для контроля дисперсности компонентов, пригодного для встраивания в технологические линии.

Дисперсные системы. Туманы, взаимодействуя с промышленными выбросами, образуют аэрозоли, которые токсичны для некоторых видов растений, а в отдельных случаях опасны для человека. Многие промышленные выбросы, находящиеся в виде аэрозолей, образуются при конденсации жидкостей.

В атмосфере спектры капель сильно меняются от одного физически бесконечно малого объема к другому (см. рис. 3.1.4). Наблюдаются явно выраженные колебания спектра частиц. Можно предположить, что имеется несколько независимых распределений, в результате сложения которых образуется конечное распределение. Связано это с изменением механизма коагуляции частиц с увеличением их размера, поскольку в области больших размеров проявляется преимущество дискретного характера роста частиц в результате коагуляции над их регулярным ростом за счет конденсации. Так, основным свойством распределения дисперсных частиц (капель) является его дискретность. В этой связи можно говорить о том, что имеется несколько связанных между собой иерархических уровней дисперсной системы.

Дисперсная система на каждом иерархическом уровне является открытой макроскопической системой. Открытость обусловлена наличием обмена веществом и энергией с другими системами или между соседними уровнями. Макроскопичность обусловлена тем, что на каждом уровне дисперсная система мо-

жет состоять из большого числа принимаемых за элементарные частиц. В силу макроскопичности каждого уровня дисперсной системы, а также ввиду сложности полного контроля внешних условий достаточно полное и адекватное их описание может быть проведено на основе статистической теории. При этом могут быть получены выражения, описывающие процессы, происходящие в различных пространственно-временных масштабах.

Однако процессы, которые могут иметь место в открытых макроскопических системах, настолько сложны, что в настоящее время лишь немного можно изложить с достаточной полнотой и последовательностью. Во многих случаях при выборе математических моделей приходится в большей мере полагаться на интуицию и эмпирические данные. Удачным дополнением, а в некоторых случаях и заменой статистических методов могли бы быть динамические уравнения, описывающие поведение сложных нелинейных систем. Интенсивное развитие нелинейной динамики во многом вызвано введением новых понятий, одним из которых является понятие фрактальной размерности, давшее возможность использовать ее достижения в решении практических задач. Принципы и понятия теории фрактальной размерности нашли широкое применение в математике и теоретической физике. Однако химическая технология не являлась до сих пор объектом приложения данной теории. По-видимому, сложность заключается в неоднозначности самого понятия «фрактальность».

Весьма жесткое требование масштабной инвариантности множества (объекта) существенно сужает область применения теории, ограничивая ее экзотическими объектами типа снежинок или математических абстракций, имеющих скорее эстетическую ценность. Применимость этой теории можно расширить, определив фрактальную размерность как дробную размерность точечного множества. В частности, понятие информационной размерности (или информационной энтропии), используемое при описании поведения дисперсных систем, не имеет столь адекватной физической интерпретации.

Мы будем использовать гипотезу о том, что фрактальная размерность множества определима в том случае, если само множество либо мера, определенная соответствующим образом на данном множестве, обладают свойством масштабной инвариантности. Такое допущение позволяет применить весьма продуктивные методы теории фрактальности к традиционным объектам химической технологии.

Описание смысловой стороны модели дисперсной системы является весьма сложной задачей, не имеющей универсального решения. Не всегда вопросы моделирования в настоящее время могут быть решены с использованием только теоретических методов. Остается еще много задач, требующих лабораторных экспериментальных исследований с последующей их проверкой в условиях производства. В связи с этим широкое распространение в инженерной практике еще находят эмпирические или полуэмпирические расчетные зависимости. Можно сформулировать некоторые общие принципы построения адекватного математического описания иерархической структуры модели:

– математические модели различных уровней дисперсной системы не должны использовать взаимоисключающие теоретические или полуэмпирические допущения и методы решения, то есть описание в рамках одной модели должно быть по возможности единообразным;

– число параметров, связывающих различные уровни модели, должно быть минимальным;

– необходимо стремиться к достижению максимальной полноты физической интерпретации математического описания.

С позиций статистической механики неоднородных сред смесь газа и частиц дисперсного материала может рассматриваться как *дисперсная система*. Под дисперсной системой при анализе химико-технологических процессов подразумевается механическая смесь газа (жидкой среды) с частицами дисперсной фазы (твердой или жидкой). Частица дисперсной фазы характеризуется, с одной стороны, положением ее центра тяжести \vec{x} , поступательной \vec{w} и угловой $\vec{\omega}$ скоростями и, с другой стороны, ее размером l , объемом V , формой ϕ , плотностью ρ_d , концентрацией целевого компонента C . Для сокращения записи параметры \vec{x} , \vec{w} , $\vec{\omega}$, l , V и другие можно считать компонентами некоторого обобщенного вектора \vec{a} . Корректное описание поведения дисперсных систем возможно только на основании кинетических уравнений, отражающих эволюцию функций распределения во времени и пространстве параметров \vec{a} . Выбор параметров функции распределения зависит от стоящей перед исследователем задачи.

Требуется разработать новый подход к прогнозированию возможных отклонений от средних значений содержания дисперсных частиц в некотором заданном объеме (объеме пробы) в зависимости от свойств дисперсной системы. Важно, чтобы при этом учитывался и объем самой системы.

Получено распределение, которое отражает самые общие свойства дисперсных систем – отклонение числа частиц в отдельно взятой пробе (объеме) от его среднего значения, т. е. оно может найти применение при решении самых различных задач. В нашем случае это может быть расчет скорости зародышеобразования при конденсации или учет влияния концентрации аэрозольных частиц на скорость коагуляции.

Стохастические свойства дисперсных систем (например, конденсационного пылеулавливания, см. раздел 10.3) наиболее полно проявляются при анализе поведения ансамбля дисперсных частиц, когда одновременно происходит их образование, дальнейший рост, агломерация и дробление. Для описания этих свойств и используется кинетическое уравнение баланса числа частиц по размерам. Хотя данное уравнение используется давно, вопросам его обоснования и пределам применимости стали уделять внимание только в последние годы.

Поскольку в рассматриваемом процессе непрерывно образуются новые частицы, их среднее время пребывания не равно среднему времени пребывания потока; для частиц различных размеров оно тоже разное. Вследствие большой дисперсности капель на выходе из аппарата может сказываться гидродинамиче-

ское отставание крупных частиц и проскок мелких. Реальное время пребывания капель в аппарате и эффективность улавливания зависят от их функции распределения по размерам.

К дисперсной системе помимо материальных потоков извне подводится также механическая энергия, которая необходима для создания определенной гидродинамической обстановки в аппарате. Часть вводимой энергии расходуется на придание скорости движения каплям относительно газа. В результате наблюдается интенсивное взаимодействие как между отдельными каплями, так и между каплями и конструктивными элементами аппарата, что приводит к дроблению дисперсных частиц. Дробление по своей природе является вероятностным процессом, и его аналитическое описание возможно при определенных физических ограничениях.

Рецептурных методов решения интегродифференциальных уравнений нет. Задача нахождения даже стационарного решения уравнения вида (3.1.43) оказывается довольно сложной, а в большинстве случаев и вообще неразрешимой. Этим объясняется стремление различных исследователей к построению более частных моделей, которые затем используются при практических расчетах.

В связи с этим встают две основные задачи. Необходимо строгое статистическое обоснование уравнения (3.1.43), что позволит уточнить пределы его применимости и выявить возможные неточности его написания. Такое обоснование можно получить в результате распространения статистических методов неравновесной механики и термодинамики на конденсационную систему на основании анализа уравнения Лиувилля (3.1.19).

Рассмотрим конденсационное пылеулавливание как процесс эволюции во времени большой системы капель. Возможно, рассмотреть поставленную задачу, решив уравнение Лиувилля при надлежащем выборе начальных и граничных условий. Детальный анализ такого решения должен выявить особенности, наблюдаемые при конденсации в дисперсных системах. Сказанное основано на следующей фундаментальной идее: если задана некоторая система уравнений и начальное ее состояние при $\tau = 0$, то ее эволюцию в последующие моменты времени можно объяснить посредством задания точных законов микрокинетики изучаемого явления. Информация о законах микрокинетики и, следовательно, о свойствах системы содержится в векторах $d\vec{a}_i/d\tau$ – см. уравнение (3.1.19). Однако подход, основанный на решении уравнения Лиувилля, требует глубоких знаний методов статистической физики и законов микрокинетики конденсации в дисперсных системах. В связи с этим воспользуемся более традиционным подходом и уже на самом первом этапе рассуждений откажемся от точных законов микрокинетики, умышленно заменим их вероятностным законом. Такая операция обладает по меньшей мере одним достоинством – ясностью.

В статистической кинетике основную роль играет понятие цепи Маркова. Под цепью Маркова (дискретной) в теории вероятности понимают следующее. Предположим, что капля может находиться в одном из состояний, которые

характеризуются объемом V_1, V_2, \dots, V_n и обозначены номерами 1, 2, 3, ... и т. д. Предположим также, что состояние его можно наблюдать через определенные промежутки времени. Например, каждую минуту, в моменты $\tau = 0, 1, 2, \dots$ и так далее. С течением времени могут происходить переходы из одного состояния в другое. Ряд состояний, принимаемых системой с течением времени, представляет собой цепь Маркова, если вероятность того, что при τ -м наблюдении система находится в k -м состоянии (V_k), полностью определена заданием состояния (например, V_l) системы для одного из предшествующих наблюдений в момент $\tau_0 < \tau$. При решении многих прикладных задач нет необходимости рассматривать непрерывный процесс как таковой, поскольку при некотором приближении можно интересоваться не точным объемом частицы, а, скажем, вероятностью того, что частица принадлежит заданному интервалу объемов. Вероятностное, как скорость роста, так и коэффициент диффузии частиц в пространстве размеров зависят от размера (объема) аэрозольной частицы и изменяются в течение времени, то есть изучаемое явление — это неоднородный марковский процесс. Основное рекуррентное соотношение (3.1.66) должно учитывать как коагуляцию, так и дробление дисперсных частиц. Такой подход оправдан тем, что решение задачи проводится с помощью ЭВМ.

Первая ступень иерархии характеризуется физико-химическим взаимодействием атомов, молекул, ионов и относится к моделированию на атомно-молекулярном уровне. Именно эти взаимодействия и определяют **образование дисперсной фазы** при конденсации как фазовый переход из газообразного состояния (пара) в жидкое состояние.

Образование дисперсных систем. В термодинамической теории фазовых превращений рассматривается лишь равновесие между исходной и новой фазой в предположении, что последняя достигла полного развития и поверхность раздела между обеими фазами является плоской. Под температурой перехода при заданном давлении подразумевается не та температура, при которой переход фактически начинается, а та, при которой он останавливается. Речь идет о температуре, при которой обе фазы могут оставаться в равновесии друг с другом неограниченно долгое время. Качественный анализ зарождения дисперсной фазы в условиях отклонения сплошной фазы от термодинамического равновесия показывает большое многообразие наблюдаемых при этом явлений, учесть которые в рамках единой теории пока не представляется возможным. Достигнутые в настоящее время результаты позволяют говорить о возможности предсказания скорости гомогенного и гетерогенного зародышеобразования в условиях конденсации пересыщенного пара.

Скорость образования зародышей. Изучение структуры зародышей и их взаимодействий приводит к становлению теории кластеров. Широким фронтом ведутся работы по нестационарной и неизотермической теории зародышеобразования. Развиваются статистические подходы на основе математической теории случайных процессов — пуассоновских, марковских, приводящих к описанию зародышеобразования уравнениями типа Фоккера–Планка, А. Н. Колмогорова и других стохастических уравнений. Несмотря на полученные результаты

в области теории зарождения новой фазы в пересыщенных системах, определение скорости зародышеобразования при конденсации остается больше предсказанием, чем инженерным расчетом (см., например, выражение (3.2.26)).

Для расчета **вероятности образования зародышей** воспользуемся распределением, полученным в предыдущем разделе некоторой дисперсной системы. В данном случае под дисперсной системой понимается совокупность атомов или молекул, участвующих в конденсации и занимающих определенный объем. Определим вероятность того, что в некотором контрольном объеме число частиц стало достаточным для образования зародыша, размер которого превышает критический. Согласно (3.2.32), нам необходимо знать: величину объема, занимаемого дисперсной системой, число молекул газа в объеме дисперсной системы, величину контрольного объема, объем одиночного атома или молекулы.

Из результатов расчета следует, что для каждого конкретного значения пересыщения имеется только одно значение вероятности образования зародышей. Незначительное изменение пересыщения приводит к переходу с одного уровня на другой, то есть приводит к хаотическим колебаниям вероятности образования зародышей. Чем точнее мы задаем пересыщение, тем явственнее проявляется структура странного аттрактора (см. рис. 3.2.9). Наблюдается общая тенденция устойчивого роста вероятности образования зародышей с увеличением пересыщения, несмотря на возможность локального ее уменьшения за счет хаотических колебаний.

Стохастическая теория кинетики зародышеобразования. Как правило, скорость зарождения дисперсной фазы рассчитывают по термодинамической формуле. Это вполне корректно, если конденсация идет вблизи равновесия при небольших пересыщениях. Но при конденсации в расширяющихся соплах пересыщения очень велики, поскольку расширение происходит при сильном отклонении от равновесия, когда существенную роль играют нестационарные процессы (например, поглощение атомов растущими зародышами). В этом случае нужно пользоваться кинетическими уравнениями.

Г. Дж. Цинмайстер, Л. Н. Александров, Б. И. Кидяров развили теорию гомогенного и гетерогенного стохастического зародышеобразования для описания скорости образования кристаллов из жидкой фазы, эпитаксного осаждения тонких пленок и других процессов с фазовыми превращениями на основе представления о рождении и гибели кластеров.

Испарение и рост капель. Помимо знания условий образования капли важно уметь оценивать скорость ее роста и испарения. Например, растворимые частицы, вдыхаемые в респираторный тракт, будут быстро увлажняться и могут так вырасти, что их аэродинамические свойства в легких будут сильно отличаться от свойств первоначальных частиц. Капли инсектицида, распыляемые в воздухе, могут испариться и никогда не достигнуть растений, не выполнив тем самым своей главной задачи.

Уравнение, описывающее испарение капли в зависимости от времени, впервые было сформулировано Максвеллом в 1877 г. Примеры расчетов показывают порядок скорости роста капель в зависимости от их размера и скорости из-

менения ее поверхности в зависимости от температуры, при которой происходит конденсация. Сложность непосредственного определения скорости роста капель в области размеров, соизмеримых с размерами зародыша, не позволяет подтвердить экспериментально результаты расчетов. Возможно только косвенное обоснование теоретических выкладок, например по времени испарения (роста) капель до заданного размера. В связи с этим проводятся расчеты времени жизни испаряющейся капли на основании так называемого уравнения Ленгмюра. При росте капли ее диаметр увеличивается (при испарении уменьшается). Чтобы размер капли значительно изменился, требуется большое число молекул. Для грубой оценки времени роста, или *времени жизни*, капли можно принять квазистационарное условие. При этом поправка Фукса позволяет учесть снижение скорости роста капель в области малых размеров при $R < 10$ мкм, хотя никакого прямого экспериментального подтверждения этому в настоящее время не имеется. Для оценки температуры капли в стационарном состоянии можно использовать психрометрическую диаграмму, определяя температуру по влажному термометру, соответствующую относительной влажности и окружающей температуре. Температура по влажному термометру – это температура испаряющейся капли.

Рост капель из чистых паров. Предположим, что термодинамическое состояние окружающей среды не меняется во время роста капель. Вывод проводится для единичной капли. В действительности полученные результаты верны только в среднем для большого числа частиц, так как при выводе применяются статистические законы молекулярного движения.

Уравнение (3.3.30) получено для значения критерия Нуссельта $Nu = 2$. Для двухфазных сред «пар–жидкость» с достаточно большими каплями могут иметь место самые разнообразные ситуации, когда тепло- и массообмен между каплями и паром (газом) определяются многими другими параметрами и $Nu \neq 2$. С увеличением размера капель существенным становится учет межфазового теплообмена и изменение температуры капли при ее движении.

При движении капли в среде скорость ее испарения может изменяться, поскольку молекулы пара, находящиеся около поверхности капли, уносятся средой. Создание строгой теории роста капель может базироваться на нестационарных кинетических уравнениях. При достаточно больших размерах капель по сравнению с размерами атомов, молекул и кластеров они будут иметь развитую поверхность, поэтому решение этих задач усложняется наличием поверхностей раздела. Возникают сложные проблемы формирования граничных условий и решений граничных задач для кинетического уравнения. В этом случае возможен переход к системе уравнений, аналогичной (3.2.60) для скорости зародышеобразования, когда основными параметрами модели являются вероятности присоединения и отрыва одиночного атома кластера от поверхности капли.

Броуновское столкновение и диффузия частиц. Тепловое движение молекул среды вызывает хаотическое движение частиц дисперсной фазы – так называемое броуновское блуждание. Мельчайшие частицы могут выводиться из аэрозольной системы двумя путями. Во-первых, они способны объединяться с

другими частицами и вырастать до таких размеров, что будут оседать под воздействием гравитации или аэродинамических сил, во-вторых, могут мигрировать к поверхностям, ударяться о них и оставаться связанными с ними. Процессы, вследствие которых частицы перемещаются к поверхности либо друг к другу, называются диффузионными, а движение частиц – броуновским. При изучении аэрозолей закономерности диффузии очень важны, поскольку во многом определяют взаимодействие мельчайших частиц ($2R < 0,1$ мкм).

Маленькие частички, взвешенные в газе, беспорядочно перемещаются из-за соударений с быстро движущимися молекулами газа. Их движение отчасти можно представить как вибрацию всего ансамбля частиц, хотя имеются и перемещения любой частицы относительно других. Это явление в 1828 г. впервые наблюдал в жидкости английский натуралист Броун, в честь которого оно получило свое наименование. В 1881 г. Бодашевский изучил броуновское движение частиц дыма и других воздушных суспензий и нашел, что оно подобно движению газовых молекул, постулированному кинетической теорией. Независимо от того, находятся ли частицы в газе или жидкости, принципы броуновского движения остаются неизменными.

Физико-математическая модель броуновского блуждания частиц подробно разработана и позволяет достаточно обоснованно рассчитать коэффициент броуновской диффузии частиц аэрозоля, который при постоянной температуре зависит только от диаметра частицы и вязкости газа, а также поправки Каннингема. Для расчета поправки Каннингема имеются надежные аналитические зависимости. Анализ особенностей броуновского блуждания в жидких средах показал, что скорость частицы равномерная. Мелкие частицы перемещаются быстрее, чем крупные, в средах с меньшей вязкостью скорость частиц выше и при постоянной вязкости амплитуда смещения прямо пропорциональна абсолютной температуре. Эти наблюдения согласуются с теорией броуновского движения, развитой Эйнштейном в 1905–1906-х гг.

Вращение частицы сильно усложняет анализ ее броуновского блуждания в том случае, если форма частицы несферическая либо она находится в окрестности границы. В этих ситуациях происходит взаимное влияние поступательного и вращательного броуновских блужданий.

Выполненные в данном разделе исследования показывают, что в рамках гидродинамического приближения задача броуновского блуждания частиц аэрозоля сводится к решению уравнения диффузии при соответствующих граничных условиях. В этом случае пропадают индивидуальные свойства отдельных частиц. Такое приближение может быть использовано для дисперсных систем, в которых не происходит изменения размера частиц.

Коагуляция частиц. В предыдущих главах в основном обсуждались свойства отдельных аэрозольных частиц. При этом большей частью взаимодействие между частицами не учитывалось. Теперь рассмотрим коагуляцию (слипание или слияние) частиц, когда взаимодействием между частицами пренебречь нельзя. Во многих случаях с помощью упрощенных моделей можно с достаточной точностью рассчитать скорость коагуляции аэрозоля и изменение его кон-

центрации, хотя при этом мало что можно сказать о результирующей кривой распределения частиц по размерам.

Наиболее простой вид коагуляции – это тепловая коагуляция монодисперсных сферических частиц. Предложена поправка к приближению Смолуховского, которая учитывает наличие флуктуаций числа частиц в дисперсной системе и впервые позволяет теоретически обосновать влияние на скорость коагуляции размера и средней концентрации аэрозольных частиц. Применимость полученных результатов к коагуляции коллоидных частиц требует специального обоснования. Дальнейшие исследования должны быть направлены на обоснование выбора линейного масштаба. Выполненный анализ большого числа теоретических и экспериментальных исследований показывает, что наше незнание коагуляции мы стремимся свести к определению коэффициента захвата, и совсем не принимается во внимание правильность определения разности скоростей двух коагулирующих частиц, т. е. не учитывается возможность случайной пульсации этих скоростей, что может иметь большое значение для аэрозолей.

Предположим, что аэрозоль вначале состоит из частиц с размерами $1, 2, \dots, m$. Изменение концентрации частиц размера i происходит не только из-за уменьшения количества частиц этой группы при соединении их с другими частицами, но и вследствие увеличения количества частиц этой группы в результате соединения более мелких. Этот процесс можно описать, используя **дифференциальное уравнение коагуляции**, само по себе оно ничем не отличается от основного кинетического уравнения для описания эволюции дисперсной системы при наличии внешних воздействий. Его запись в виде цепи Маркова при известных значениях констант коагуляции имеет простое численное разрешение.

Гидродинамика дисперсных систем.

Движение одиночной частицы. Если считать среду (газ или жидкость) несжимаемой и пренебречь силой тяжести, то основными силами, действующими в системе, будут инерционные силы, связанные с ускорением или замедлением небольших масс текущей среды вблизи тела, а также силы трения, возникающие благодаря вязкости среды. Эти силы подобны, если в любой момент находятся в одном и том же отношении, которое дает число Рейнольдса (Re) – безразмерную величину, характеризующую течения среды вокруг тела. В настоящее время имеются достаточно универсальные зависимости, позволяющие рассчитать коэффициент сопротивления движению частицы в широком диапазоне чисел Рейнольдса. При непосредственном расчете скорости осаждения дисперсной частицы могут возникнуть определенные трудности, поскольку в общем случае явной зависимости для ее расчета не существует. Для маленьких частиц, оседающих в области Стокса, такие трудности не возникают.

При рассмотрении потока с **малым числом Рейнольдса** (вязкий поток) можно получить выражение для силы сопротивления движению сферы в текущей среде, используя чисто математические аргументы. На практике расчеты проводят с использованием коэффициента формы по выражению (4.1.4). Относительно этого выражения следует сделать следующее замечание. Коэффициенты формы частиц, которые, например, используются в технологии порошковых

материалов, могут относиться ко многим свойствам дисперсных систем. Нас интересуют лишь коэффициенты, которые определяют зависимости сопротивления жидкости от относительной скорости частиц различной формы. Даже в этом весьма частном случае наиболее подходящее определение коэффициента формы остается предметом дискуссии.

Рассмотрены силы, действующие на частицу в потоке газа. Оценка влияния *турбулентности* на характер движения частиц и их влияние на спектр и масштаб турбулентности представляют большой интерес. Достаточно крупные частицы при значительном скольжении являются дополнительными источниками турбулентности: вихревые следы за частицами генерируют повышенную турбулентность. Кроме того, при вращении частиц возникают присоединенные вихри, происхождение которых связано с циркуляционным (несимметричным) обтеканием частицы. Сила гидромеханического сопротивления увеличивается с ростом угловой скорости вращения частицы и, следовательно, интенсивности присоединенного вихря. Под влиянием сил Магнуса частицы совершают поперечные перемещения, влияющие на интенсивность турбулентности. По-видимому, это влияние особенно велико в пограничном слое (пристенная турбулентность).

Турбулентность, ее свойства и характеристики. Турбулентным течением или просто турбулентностью в гидромеханике именуется особая форма движения газов и жидкостей, которая устанавливается в результате потери ими гидродинамической устойчивости движения, наступающей при высоких, сверхкритических значениях безразмерного комплекса – числа Рейнольдса.

Экспериментальные измерения, получаемые с помощью термоанемометра, дают представление об эйлеровых частотах, регистрируемых в неподвижной точке пространства. При переходе к системе координат, движущейся со средней скоростью потока, получается лагранжев спектр частот, необходимый при расчетах степени увлечения аэрозольных частиц турбулентными пульсациями.

Частота пульсаций Лагранжа f_f ниже частоты Эйлера f_E , приближенно в пропорции $f_L/f_E = 0,7V'/\langle v \rangle$, где V' – амплитуда скорости рассматриваемых пульсаций, а $\langle v \rangle$ – осредненная скорость течения. К этому соотношению нетрудно прийти, представляя турбулентный поток равномерно заполненным вихрями со средним расстоянием $\Delta x = \lambda$ между ними. Подвижная точка, движущаяся со скоростью, равной осредненной скорости течения, обтекается вихрями со средней скоростью $V'/\sqrt{2}$ и «касается» их, поэтому $V'/\lambda\sqrt{2}$ раз в секунду; неподвижная точка обтекается вихрями со средней скоростью и $\langle v \rangle$ «касается» их $\langle v \rangle/\lambda$ раз в секунду. Отношение частот «касания» вихрями подвижной и неподвижной точек или, что то же самое отношение частот пульсаций Лагранжа и Эйлера и дает указанное равенство.

Турбулентный поток в трубах и каналах. Характерной особенностью течения газов в трубах и каналах является наличие твердых замкнутых границ – стенок, приводящих к сдвигу осредненной и пульсационных составляющих скорости течения. Аналитическое решение этой гидродинамической задачи в

случае турбулентного режима течения невозможно, поэтому она решается полумпирическими или чисто эмпирическими методами с использованием закономерностей, установленных экспериментально в естественных условиях или на моделях. Частотный спектр турбулентных пульсаций в трубах и каналах весьма широк и простирается на три-четыре порядка и более. Подробную информацию о частотном спектре в реальных турбулентных потоках дают экспериментальные исследования. Анализ измерений спектральной плотности энергии и продольных Φ_{11} и поперечных Φ_{22} пульсаций позволяет сделать следующие выводы.

Во-первых, наиболее энергоемкими являются низкочастотные пульсации, принадлежащие крупномасштабным вихрям; их частота определяется отношением: $\omega_E = u^*/l_E \cong u^*/0,1R$, где l_E – масштаб энергоемких пульсаций, принимаемый, по Таунсенду, равным $0,1R$. С нижним пределом частоты пульсаций ω_0 значение ω_E связано простым соотношением $\omega_E = 4\omega_0 \text{Re}_D^{-1/8}$ и в силу близости часто подменяется выражением (4.2.1). Для широких труб и каналов ω_E исчисляется обычно десятками и сотнями рад/с, а для узких – сотнями и тысячами рад/с.

Во-вторых, инерционный интервал частот, свойственный наиболее мелким пульсациям (с масштабом λ), выражен только для продольных пульсаций в буферном слое, т. е. в узком диапазоне частот. Интервал вязкой диссипации, в котором происходит непосредственный переход кинетической энергии в тепло, ни в одном спектре не выражен четко.

В-третьих, приближением к стенке частотный спектр несколько изменяется, а именно расширяется за счет более высокочастотных пульсаций, что обусловлено уменьшением масштаба турбулентных вихрей вблизи стенки. При этом основная часть энергии приходится примерно на те же низкочастотные пульсации.

В-четвертых, частотный спектр поперечных пульсаций отличается от спектра продольных пульсаций относительно меньшим содержанием низкочастотных составляющих и большим содержанием высокочастотных составляющих. Это имеет место и в центральной части потока, где наблюдается изотропия пульсаций по амплитуде скорости.

В-пятых, с увеличением числа Рейнольдса кривая спектра, сохраняя сходство, поднимается вверх и таким образом захватывает дополнительную область высокочастотных пульсаций.

В-шестых, частотный спектр для круглых труб и прямоугольных каналов в принципе идентичен, однако каналах содержание низкочастотных пульсаций ядра потока несколько выше.

Средняя частота пульсаций, определяемая подсчетом отклонений мгновенной скорости потока от осредненной скорости в единицу времени, не зависит от расстояния до стенки.

Движение мелких частиц в турбулентном потоке. Рассматриваются силы, действующие на твердые частицы в турбулентном восходящем потоке газа в цилиндрическом канале. Оценивается вклад пульсационных составляющих

движения частиц в осредненные значения этих сил. Получены уравнения движения частиц и проведено обсуждение способов задания граничных условий и характеристик движения газов.

Турбулентные потоки газа, несущего твердые частицы, используются в самых различных энергетических и технологических установках. Разнообразные процессы переноса во многом определяются условиями продольного и радиального движения частиц. Проведенный анализ, а также полученное математическое описание движения дисперсных частиц позволяют в дальнейшем перейти к качественному и количественному анализу их полей продольной и поперечной скоростей. При этом возникает возможность совместного анализа влияния основных эффектов, проявляющихся в рассматриваемых турбулентных потоках газозвеси.

Гидродинамические режимы работы аппаратов. Термин «режимы псевдооживления» можно рассматривать в узком и широком аспектах. Оба они тесно связаны, поэтому их различие для серьезного исследователя весьма проблематично. Инженер подразумевает под этим термином плотности и скорости движения смесей оживающего агента и твердых частиц в аппарате в целом. Для химиков, рассчитывающих химические реакторы, рассматриваемый термин имеет более глубокий и широкий смысл: механизм движения газа и твердых частиц внутри псевдооживленного слоя, т. е. в пределах отдельных его зон. Оба аспекта получили подробную теоретическую и экспериментальную трактовку. Нами проблема трактуется в широком аспекте; при этом демонстрируется, что макроскопически рассматриваемое физическое явление может быть описано на основе известных принципов гидромеханики.

Для большей наглядности и качественного отображения разнообразия и сложности состояний системы «газ — дисперсные частицы» было разработано общее графическое представление в виде так называемой фазовой диаграммы. Последняя не является оригинальной с математической точки зрения, но позволяет весьма просто очертить различные области системы, что особенно полезно для практики. Для некоторых процессов диаграмма может быть использована при определении давлений и составлении материальных балансов, аналогично энтальпийным диаграммам в тепловых расчетах.

В случае значительного изменения полного давления в системе необходимо иметь несколько подобных диаграмм, расположенных в порядке изменения давления (трехмерные диаграммы). Фазовая диаграмма, представленная на рис. 4.3.3, построена применительно к постоянному значению размера и плотности частиц, вязкости и плотности газа.

Псевдооживленный слой. Слой дисперсных частиц при малых скоростях восходящего газового потока остается неподвижным. При достаточно больших скоростях потока дисперсные частицы, свободно взвешенные в нем, образуют псевдооживленный слой. При очень высоких скоростях газового потока дисперсные частицы уносятся им из системы.

В системах «газ — дисперсные частицы» однородные системы существуют только в сравнительно узком интервале скоростей сжижающего агента. Зависимость между порозностью слоя и скоростью во всех случаях однородного

псевдоожигения имеет простую степенную форму. При использовании газов для создания однородного псевдоожигения очень легких и мелких частиц часто необходимо механическое перемешивание.

Поскольку в слое могут одновременно существовать ожигенные и неожигенные участки, скорость начала псевдоожигения четко зафиксировать не представляется возможным. Эта величина с достаточной точностью может быть определена по экспериментальным данным. Скорость начала псевдоожигения может быть приближенно рассчитана по уравнениям для потока сжижающего агента через неподвижный слой, если перепад давления в нем при стабильной порозности приравнять весу частиц (с учетом архимедовой силы) на единицу площади поперечного сечения слоя. Значения перепада давления, вычисленные по уравнениям для потока через неподвижный слой, для псевдоожигенного слоя оказываются завышенными. Удобнее выражать скорость начала псевдоожигения исходя из скорости свободного падения частиц, так как отношение этих скоростей непосредственно связано с критерием Архимеда.

Фонтанирующий слой. Фонтанирование является одной из разновидностей псевдоожигения, позволяющей перемешивать плохо псевдоожигаемые зернистые материалы: слишком крупные частицы или одинаковые по размеру. Фонтанирование достигается подачей газа через небольшое отверстие в центре основания расширяющегося конического аппарата вместо равномерного его распределения по всему сечению слоя. В рассматриваемом случае гидродинамическая обстановка существенно отличается от существующей в обычном псевдоожигенном слое. Твердому материалу сообщается направленное циркуляционное движение, он в виде разбавленной фазы поднимается в ядре слоя и в виде плотной фазы опускается в кольцевой периферийной зоне.

Общее допущение о постоянстве диаметра фонтана по его высоте весьма удобно для количественной интерпретации, но не является достаточно строгим. Поскольку форма фонтана определяется равновесием сил в потоках твердого материала и газа, то изменение диаметра фонтана по высоте слоя должно быть функцией переменных, влияющих на движение газа и твердых частиц. При определенных условиях наблюдалось непрерывное увеличение диаметра фонтана по высоте слоя, в то время как при других условиях отмечалось сужение фонтана на небольшом расстоянии от отверстия для ввода газа. В некоторых случаях было обнаружено незначительное сужение фонтана в верхних областях слоя. Были предприняты попытки теоретически объяснить это явление.

Виброкипящий слой может быть создан в аппаратах самых разнообразных конструкций путем воздействия на сыпучий материал вибрирующих дна, дополнительных перегородок или наклонных лотков, а также с помощью побудителей вибрации, введенных непосредственно в рабочую камеру. Указанные элементы могут совершать гармонические или субгармонические колебания. Траектория их колебательного движения может представлять собой прямую, направленную по вертикали или под углом к горизонту, окружность, эллипс или другую плоскую или объемную фигуру.

Виброкипящий слой является таким оптимальным состоянием дисперсной системы, в которой создаются благоприятные условия осуществления различных гетерогенных процессов. Несмотря на значительные преимущества кипящего слоя перед другими способами организации процесса, он, как и любой другой, не является универсальным и имеет ряд существенных недостатков. Один из них заключается в том, что кипящий слой создается только при определенных скоростях газа и жидкости, которые в ряде случаев являются далеко не оптимальными для физико-химического процесса и не дают возможности работать с материалом широкого гранулометрического состава. Кроме того, перевести слой некоторых материалов в состояние кипения вообще не удастся, что особенно характерно для частиц, склонных к агрегированию. Применение аппаратов, создающих виброкипящий слой, позволяет организовать хорошее перемешивание дисперсных материалов и значительно приблизиться к предельному случаю создания аппарата с идеальным смешением или гомогенной реакционной зоной. В условиях виброкипящего слоя снижается тормозящее действие внешних диффузионных микро- и макрофакторов, что благоприятствует повышению коэффициентов тепло- и массопереноса.

Транспорт. Визуальные наблюдения за поведением потока твердых частиц в стеклянной трубе показали, что его характер весьма сложен и зависит от отношения расходов твердого материала и газа μ . Приведенный метод расчета вертикального транспорта твердых материалов требует знания лишь доступных характеристик системы. Этот метод весьма чувствителен к изменениям порозности.

Явление перемешивания дисперсных частиц. Для большинства рассмотренных нами смесителей непосредственно смешивание имеет место тогда, когда дисперсный материал находится во взвешенном состоянии, т.е. вес частиц компенсируется некоторым внешним воздействием. Перевести дисперсный материал во взвешенное состояние возможно: за счет подачи воздуха (газа) – взвешенный слой, используя механические перемешивающие устройства самой разной конструкции – механическое взвешивание; при наложении вибрации – вибровзвешивание.

Несмотря на принципиальное различие трех этих способов, общим для них является то, что во взвешенном состоянии частицы дисперсного материала приобретают значительную подвижность – способность интенсивно перемещаться относительно друг друга.

Полученные результаты подтверждают правильность выдвинутых физических представлений о характере процессов переноса во взвешенных слоях и могут явиться основой расчета смесителей самых различных конструкций.

В зависимости от среднего времени пребывания частиц в аппарате и среднего времени их диффузионного перемешивания возможны самые различные режимы работы смесителя. Если среднего времени пребывания частиц в аппарате значительно больше, чем среднего времени их диффузионного перемешивания, то имеет место режим идеального вытеснения. В противном случае характер движения дисперсных частиц приближается к режиму идеального вытеснения.

Однако на практике имеют место и промежуточные режимы, которые больше соответствуют перемешиванию и движению твердой фазы в секционированных аппаратах с перетоками. В этом случае с увеличением числа секций уменьшается разброс времени пребывания отдельных дисперсных частиц в аппарате и наблюдается переход от режима идеального смешения к режиму идеального вытеснения.

Данное пособие является основой для решения основной задачи создания высокоэффективных машин и аппаратов переработки дисперсных материалов.

ГЛАВА 1. ОСНОВЫ СОЗДАНИЯ ОБЪЕКТОВ ТЕХНИКИ

Создание объектов техники связано с проектированием. Для понимания проектирования требуется четкое представление о его сущности. Известны различные его определения, в которых находит отражение убежденность авторов в необходимости целостного подхода к рассмотрению проектирования. Следуя этим определениям, проектирование – это:

- отыскание характеристик физических составляющих материальных структур;
- деятельность для целенаправленного решения проблем;
- принятие решений в условиях неопределенности и высокой ответственности за ошибку;
- моделирование того, что мы хотим выполнить, осуществляемое неоднократно до тех пор, пока мы не убедимся в положительности конечного результата;
- использование научных основ, технической информации и воображения для синтеза технической системы, которая с минимальными затратами и максимальной эффективностью выполняла бы предписанные ей функции;
- скачок воображения от факторов сегодняшнего дня к будущим возможностям;
- последовательность действий от постановки проблемы до разработки решения, удовлетворяющего исполнителя с функциональной и экономической точки зрения;
- создание системы, предназначенной для удовлетворения той или иной потребности либо выполнения той или иной функции;
- итерационное принятие решений с целью разработки плана, согласно которому ресурсы могут быть преобразованы в системы или устройства, удовлетворяющие определенные человеческие потребности.

Возможны и более сложные определения, которые частично объединяют перечисленные.

Проектирование связано с инженерной деятельностью, направленной на создание новых объектов, методов, теорий, которые совершенствуют среду, окружающую человека. Проектировать – значит творить, создавать нечто новое с учетом последствий, к которым приведет его создание и дальнейшее использование в условиях производства.

Проектирование можно рассматривать и как целенаправленную последовательность актов принятия решений, приводящую к достижению поставленной цели с заданной степенью вероятности. В этой связи проектирование во многом сродни управлению.

Можно говорить о последовательном преобразовании исходного описания объекта проектирования в конечное описание (перечень управляющих воздействий) с использованием семантической информации. Результатом действия системы проектирования является упорядоченная совокупность сведений, служащих знаковой моделью описания объекта техники, реально еще не существующей во внешнем мире.

Нет необходимости давать какие-либо комментарии к отдельным определениям. Каждое из них имеет определенные недостатки или преимущества. Некоторые из них имеют во многом декларативный характер. Приведенные примеры развернутого определения также требуют дальнейшего уточнения и разъяснения, что подтверждает необходимость сделать его более емким и содержательным. Насколько нам это удалось – судить читателям.

Под проектированием будем понимать всестороннее познание еще не существующего в природе объекта техники и описание полученных знаний с использованием некоторых абстрактных представлений.

Одним из подходов к описанию знаний с использованием абстрактных представлений является моделирование.

1.1. МОДЕЛИРОВАНИЕ

Проектирование и совершенствование существующих аппаратов становится все более трудным делом, поскольку структура производств переработки дисперсных материалов непрерывно усложняется. С появлением ЭВМ одним из наиболее важных и полезных орудий анализа закономерностей функционирования химико-технологических агрегатов (ХТА) в условиях производства может быть имитационное моделирование. Имитировать – значит вообразить, постичь суть явлений, не прибегая к экспериментам на реальном объекте.

По существу, каждая модель есть форма имитации. Имитационное моделирование является весьма широким и недостаточно четко определенным понятием, имеющим большое значение, в частности, при проектировании сложных технических объектов. Постараемся дать его определение применительно к задачам проектирования. Имитационное моделирование – конструирование модели, описывающей работу реального аппарата, и постановка экспериментов на этой модели с целью либо понять закономерности его функционирования, либо определить оптимальные геометрические размеры и технологические параметры его работы. Имитационное моделирование мы должны понимать как конструирование модели и ее применение для решения задач проектирования. Какое же место имитационное моделирование занимает среди проектных процедур при эскизном проектировании?

Инженер-конструктор в своей практической деятельности стремится иметь в своем распоряжении набор стандартных конструктивных решений, приспособляемых им к конкретным условиям производства. Трудности состоят в том, что нет двух заданий на проектирование, которые были бы одинаковыми. Новое задание на проектирование приводит к новому набору технологических параметров работы ХТА, отличающихся от тех, которые имели место в подобных агрегатах, спроектированных ранее. Зачастую большинство геометрических размеров, определяющих работу агрегата, также изменяются. Оказывается возможным незначительно изменить некоторые технологические параметры и геометрические размеры стандартного аппарата, чтобы получить экономически оптимальное техническое течение, согласно заданию на проектирование.

Имитационное моделирование поможет инженеру в этом случае предсказать и приближенно оптимизировать характеристики стандартного аппарата применительно к заданию на проектирование, значительно сократить время на проектирование и его стоимость, исключить дорогостоящие экспериментальные исследования в лабораторных условиях.

На первое место выходят знания методов создания моделей, имитирующих работу ХТА переработки дисперсных материалов. Математически аспектов создания моделей и их связи с физическими особенностями конкретного технологического процесса. Такие модели должны быть просты по своей структуре и обладать достаточной универсальностью.

1.1.1. Проблематика моделирования

Одной из самых важных проблем при реализации проектирования является проблема прогнозирования на основе математического моделирования.

В математическом смысле ХТА представляет собой квазистойчивую совокупность элементов и связей между ними или, иначе, некоторое число взаимосвязанных элементов, обладающих свойствами, не сводящимися к сумме свойств отдельных элементов.

Понятие модели. Существует несколько десятков определений понятия «модель объекта». Отличаясь друг от друга терминологией и глубиной охвата данного понятия, большинство из них отражает мысль, что под моделью понимается выраженная в той или иной форме информация о наиболее существенных и устойчивых причинно-следственных связях между переменными объекта. Различают качественную информацию о характере поведения объекта и количественную информацию, которая извлекается из экспериментальных данных, полученных в результате наблюдения за функционированием объекта.

Модель – представление объекта, системы или понятия (идеи) в некоторой форме, отличной от формы их реального существования, и служит средством, помогающим нам в объяснении, понимании или совершенствовании окружающей нас природы.

В широком смысле *модель* – это уменьшенное (или в натуральную величину) воспроизведение чего-либо. При проектировании по ее существу всегда приходится иметь дело с моделями. Вне их конкретных классов бессмысленно говорить об основных понятиях теории и закономерностях построения объектов техники. Построение модели предполагает некоторое воспроизведение объекта с вполне конкретной целью. Рассматриваются только те его стороны, которые с достаточной для целей проектирования точностью описывают изучаемый объект. Задача нахождения адекватных каждому уровню познания моделей и пределов их справедливости составляет основное содержание физических исследований и теоретического разрешения технических проблем.

Моделирование. По существу анализ объекта при проектировании – это анализ специальным образом построенных моделей. От того, насколько правильно

построены отдельные модели, как они увязаны друг с другом, зависят результаты проектирования.

В основе математического моделирования лежит явление изоморфизма, который означает сходство форм при качественном различии явлений. В математике изучение одной из изоморфных систем сводится в значительной степени к изучению другой изоморфной системы. Изоморфизм указывает на единство, связь, взаимодействие и взаимозаменяемость в определенных пределах различных явлений материального мира, на сходство их формы и отдельных закономерностей. В строго определенных границах и условиях можно заменить изучение одного явления изучением другого, подобного ему по форме и структуре. Появляется возможность моделировать одну систему с помощью другой.

Относительность понятия модели связана с влиянием на ее создание субъективного фактора. Построение модели – процесс творческий. Многое зависит от лица, которое строит модель с учетом условий конкретной задачи. Исследователь определяет те стороны модели, которые должны отражаться в ней, и те, которые опускаются из рассмотрения, осуществляет принятие тех или иных допущений, выбор средств моделирования, применение разнообразных методов в рамках выбранных средств.

Функции модели. Идея исследования некоторого объекта, системы или понятия при помощи модели носит столь общий характер, что дать полностью классификацию функций модели затруднительно. Различают пять ставших привычными случаев применения моделей в качестве: средства понимания действительности, средства общения, средства обучения и тренажа, инструмента прогнозирования, средства постановки эксперимента.

При моделировании вместо изучения и исследования оригинала исследуются математические зависимости, описывающие оригинал. При построении математической модели необходимо учитывать основные стороны и взаимосвязи рассматриваемого явления и отказаться от изучения второстепенных сторон и связей. Модель представляет собой некоторую абстракцию от действительности, учитывающую только характеристики, представляющие интерес для практики. Рассмотрение в модели второстепенных сторон и связей, призванное уточнить получаемый результат, приводит лишь к усложнению модели.

Модель должна строиться для решения конкретной задачи исследования. В зависимости от цели исследования те или иные связи и стороны явления могут оказаться основными или второстепенными. Попытка создать универсальную модель, предназначенную для решения большого числа разнообразных задач, приводит к такому усложнению ее, что она оказывается практически непригодной. Для каждой конкретной задачи лучше строить свою модель, отражающую те стороны и связи изучаемого явления, которые являются наиболее важными именно для данного исследования.

Принято различать натуральный объект или процесс – «натуру» – и модельное отображение этого объекта или процесса – «модель». Натура и модель находятся в определенном соответствии. Модель отображает натуру в плане конкретно поставленной задачи. Модель неразрывно связана с целью исследований

натуры. Например, пусть натурой будет химико-технологический агрегат, установленный в некотором производстве, который связан со средствами управления. Натура состоит из ряда элементов конструкций (аппаратов, машин и вспомогательного оборудования). Аппарат, в свою очередь, состоит из узлов, узлы – из деталей, детали – из частей, части – из молекул, молекулы – из атомов. Натура находится в условиях постоянного воздействия гравитационного, электромагнитного, температурного, радиационного и других полей. Отдельные компоненты (элементы) находятся в непрерывно изменяющемся взаимодействии друг с другом. Натура крайне сложна, и полностью воспроизвести ее практически невозможно. Требуется конкретизация задачи и пренебрежение в ее рамках некоторыми факторами.

Пусть ставится задача определения геометрического облика ХТА. В данном случае моделью природы может быть конструктивная схема ХТА, если для решения поставленной задачи действительно достаточно данных, воспроизводимых в рамках конструктивной схемы. При этом не учитываются свойства обрабатываемых продуктов, режимы работы ХТА, конструктивные особенности отдельных деталей. Конструктивная схема – это модель ХТА, достаточная для решения конкретно поставленной задачи.

Пусть в качестве задачи поставлено количественное определение параметров работы ХТА в условиях конкретного производства. Для ответа на этот вопрос требуется учитывать свойства обрабатываемых компонентов, структуру ХТА, требования к получаемому продукту, взаимосвязь с соседними агрегатами производства. Модель, отражающая природу, будет значительно сложнее, чем в предыдущем случае. Однако нет необходимости учитывать атомно-молекулярные взаимодействия в материале, из которого изготовлен ХТА.

Модель предполагает некоторое воспроизведение объекта с вполне определенной целью. Рассматриваются только те ее троны, которые с определенной, достаточной для целей проектирования точностью описывают объект (ХТА). Задача нахождения адекватных каждому уровню познания моделей и пределов их справедливости составляет основное содержание физических исследований и теоретического разрешения технических проблем.

Для ХТА в качестве его моделей могут рассматриваться:

- модель физико-химических процессов, предназначенная для выполнения его комплексного технологического расчета или оценки эффективности работы в условиях конкретного производства;
- правила эксплуатации ХТА как модель, обеспечивающая его рациональное, безопасное и надежное использование;
- комплекс рабочих чертежей как модель, предназначенная для его изготовления;
- опытный образец как модель, позволяющая выполнить увязку отдельных аппаратов и их узлов;
- непосредственно полномасштабный ХТА может рассматриваться как модель для натурной отработки его функционирования.

В последнем случае модель и натура поменялись местами.

Классификация моделей. Модели можно классифицировать по различным признакам. В зависимости от вида прогнозируемого объекта модели могут быть: физических процессов; развития производства; развития науки и техники; экономические; демографические; социальные; политических ситуаций. Модели каждого вида различаются в зависимости от описываемого процесса.

К классификации моделей более рационально подойти с позиций классификации огромного многообразия возможных задач, решаемых при проектировании. Можно выделить два случая воспроизведения натуры: материальное (предметное) и идеальное (абстрактное). Материальное воспроизведение натуры предполагает исследование объекта на физических моделях, при котором изучаемый объект воспроизводится с сохранением его физической природы или используются другие аналогичные физические явления. Натуральное моделирование – частный случай материального моделирования. Основное требование – соблюдение подобия оригинала и модели.

Абстрактное воспроизведение – это описание объекта определенными символами. Особое место в абстрактном воспроизведении играют математические модели, исследования в которых осуществляются на основе идентичности формы уравнений и однозначности соотношений между переменными, фиксируемыми в натуре и модели. Для решения трудно формализуемых задач большое значение приобретают методы эвристического моделирования. Возможная упрощенная структура видов моделирования представлена на рис. 1.1.1.

В зависимости от характера протекания прогнозируемого явления существуют следующие группы *интуитивных* моделей: эволюционного развития; революционного развития; включающие элементы и эволюционного и революционного развития. В зависимости от вида математического описания *аналитические* модели можно разделить на следующие группы:

- дифференциально-разностные, представляющие собой совокупность дифференциальных или разностных уравнений;
- алгебраические, использующие понятия и результаты общей алгебры;
- основанные на теории автоматов;
- топологические, основанные на использовании понятий общей топологии и геометрии;
- теоретико-графические, когда соотношения между элементами моделируемого объекта представлены в виде графа;
- игровые, использующие аппарат теории игр;
- модели математического программирования, отличающиеся наличием критерия оптимальности.

В зависимости от наличия неопределенностей, сопровождающих прогнозируемый процесс, среди *имитационных* моделей можно выделить детерминированные и стохастические. Стохастические модели разделяют на модели:

- для расчета математических ожиданий процессов (модели динамики средних для массовых явлений в экономике, биологии, военном деле) в непрерывной или дискретной форме;
- вероятностные в непрерывной форме (теория массового обслуживания, стохастические дуэли и т. д.) или дискретной форме (цепи Маркова);
- статистических испытаний (метод Монте-Карло).



Рис. 1.1.1. Возможные виды моделирования

В зависимости от вида функций, описывающих детерминированную основу процесса, *аналитические* модели могут быть: полиномиальные (в частности, линейные и квадратичные), тригонометрические, экспоненциальные, комбинированные, включающие различные комбинации перечисленных моделей.

Большинство из приведенных моделей находит применение в задачах проектирования при оценивании и измерении.

Известно много достаточно хорошо разработанных методов математического описания процессов и явлений. Дать их перечень, а тем более даже краткий анализ в рамках данного пособия не представляется возможным. Кратко рассмотрим только метод математического описания, который непосредственно позволяет наиболее полно описать особенности функционирования аппарата или химико-технологического агрегата.

В основе большинства процессов переработки дисперсных материалов, а значит, и в основе работы аппаратов, лежат явления, вероятностные по своей природе. Стохастические (вероятностные) особенности проявляются, прежде всего, в неравномерности распределения элементов фаз по времени пребывания, по размерам, по траекториям, в неоднородности удерживающей способности аппарата по зонам, в случайном характере распределения потоков фаз по рабочему объему аппарата. Макронеоднородности гидродинамической обстановки в объеме аппарата, неравномерность и случайный характер распределения материальных и тепловых потоков в нем, неоднородности физико-химических свойств дисперсных материалов особенно характерны для проточных аппаратов с механическим подводом энергии.

1.1.2. Модели структуры потоков

Понятие и методы исследования структуры потоков. Особенности движения обрабатываемых сред в аппарате оказывают существенное влияние на эффективность протекающих в них процессов. Характер течения потоков в реальных аппаратах настолько сложен, что дать их строгое математическое описание в большинстве случаев не представляется возможным. Практический выход состоит в создании некоторой упрощенной модели, которая позволила бы учесть особенности гидродинамики при оценке эффективности работы оборудования в условиях реального производства. Речь идет о создании так называемой модели структуры потоков. Модель структуры потоков имеет мало общего с реальным течением обрабатываемой среды и позволяет обобщить особенности гидродинамики различных по конструкции аппаратов. Получаемые при этом модели структуры потоков достаточно просты и при правильном построении достаточно точно отражают реальный физический процесс.

При переработке дисперсных материалов важно знать степень ее завершенности. Для сушильного агрегата это степень удаления влаги из высушиваемого материала, для мельницы – степень измельчения исходных продуктов в конечные (целевые). Завершенность переработки зависит от многих факторов, и в том числе от того, как организовано движение взаимодействующих сред. Некоторые элементы потока могут задержаться в аппарате, а другие, наоборот, проскочить, не вступив во взаимодействие. Распределение времени пребывания элементов потока в аппарате имеет стохастическую природу и оценивается статистическим распределением.

Наиболее существенными причинами неравномерности распределения элементов потока по времени пребывания в промышленных аппаратах являются:

- неравномерность профиля скоростей потока;
- турбулизация потока;
- наличие застойных областей;
- образование каналов, байпасные и перекрестные токи;
- высокие температурные градиенты и связанные с ними течения;
- непосредственно тепло- и массообмен между фазами.

Например, неравномерный профиль скорости газа или жидкости при их течении через слой неподвижного дисперсного материала. Интенсивная турбулизация потока в аппарате с быстроходным перемешивающим устройством. Образование каналов в аппаратах с псевдоожиженным слоем.

Может оказаться, что истинное время пребывания в аппарате элементов потока недостаточно для осуществления массообмена, а от этого зависит эффективность технологической операции в целом. Наиболее наглядно рассматривать модели структуры потоков на примере массопередачи, так как она протекает достаточно медленно, и представляется возможным установить перемещение и распределение вещества в этих потоках.

Построению модели могут предшествовать экспериментальные исследования структуры потоков. Их сущность заключается в том, что в поток на входе в аппарат каким-либо способом вводят индикатор. На выходе из аппарата измеряют концентрацию индикатора как функцию времени. Эта выходная кривая называется *функцией отклика системы на типовое возмущение* по составу потока. В качестве индикатора используют пассивную примесь (краситель, раствор соли или кислоты, изотопы), которая не оказывает влияния на гидродинамическую обстановку в аппарате. Должно быть обеспечено подобие поведения частиц индикатора в аппарате и частиц основного потока. С этой точки зрения лучшими индикаторами являются изотопы. Они мало различаются с основным потоком по свойствам. На практике обычно применяют доступные индикаторы, концентрация которых может быть легко замерена. К таким индикаторам относятся растворы солей (электролиты).

Закон изменения концентрации индикатора во времени на входе потока в аппарат может быть абсолютно произвольным, что усложняет анализ результатов замера. На практике используют так называемые стандартные сигналы: импульсный, ступенчатый и циклический. Последний сигнал обычно имеет форму синусоиды. В зависимости от вида возмущающего сигнала различают следующие методы исследования структуры потоков: *импульсный, ступенчатый и циклический*. Остановимся более подробно на первых двух.

Импульсный метод. Допустим, что на входе в аппарат в поток ввели практически мгновенно индикатор и определили функцию отклика на это возмущение. Вид функции представлен на рис. 1.1.2. Для выявления физического смысла зависимости концентрации от времени $C(\tau)$ произведем преобразование переменных. Поясним необходимость этих преобразований. Величина концентрации зависит от введенного количества индикатора m . Но сам по себе индикатор никакого отношения к работе аппарата не имеет. Количество m для анализа процесса совершенно несущественно. Поэтому лучше характеризовать работу аппарата величиной, не зависящей от m .

Целесообразно преобразовать и величину времени. Это объясняется тем, что масштабы времени оригинала и модели могут быть различны из-за различия их размеров. Указанная задача решается введением приведенных переменных, которые получают при измерении величин не общими эталонами, а внутренними, свойственными конкретной задаче, а не данному классу величин вообще. Полу-

ченные приведенные величины обладают следующим свойством: их значения одинаковы для подобных друг другу аппаратов.

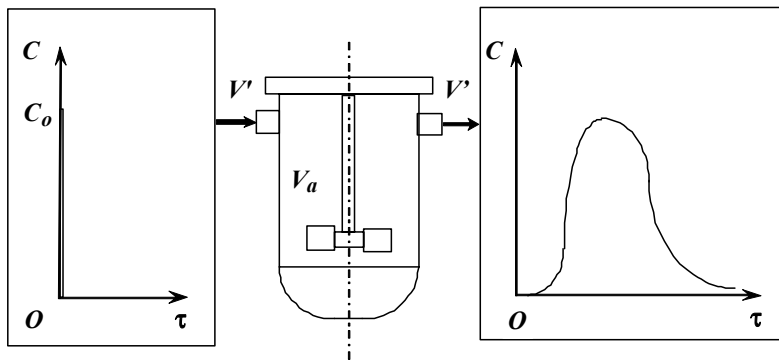


Рис. 1.1.2. Типичная функция отклика системы на импульсное возмущение

В данном случае за единицу масштаба времени удобно принять среднее время пребывания частиц жидкости в аппарате

$$\langle \tau \rangle = \frac{V_a}{V'}.$$

Среднее время пребывания частиц потока в аппарате тем больше, чем больше объем, и тем меньше, чем больше расход через аппарат.

Введем безразмерную концентрацию $C(\theta)$ как функцию безразмерного времени θ :

$$C(\theta) = \frac{V_a C(\tau)}{M}, \quad \theta = \frac{\tau V'}{V_a} = \frac{\tau}{\langle \tau \rangle}. \quad (1.1.1)$$

Количество индикатора, время пребывания которого в аппарате изменяется от τ до $\tau + d\tau$, составляет

$$dM = V' C(\tau) d\tau. \quad (1.1.2)$$

Отношение dM ко всему количеству индикатора M выражает долю индикатора, вышедшего из аппарата за время от τ до $\tau + d\tau$, т. е. вероятность индикатора покинуть аппарат:

$$\frac{dM}{M} = \frac{V' C(\tau) d\tau}{M}. \quad (1.1.3)$$

Так как поведение индикатора в аппарате идентично поведению основного потока, то выражение (1.1.3) представляет собой долю потока, время пребывания которого изменяется от τ до $\tau + d\tau$. Уравнение (1.1.3) можно привести к виду

$$\frac{V' C(\tau) d\tau}{M} = \frac{V' M C(\theta) V_a d\theta}{M V_a V'} = C(\theta) d\theta. \quad (1.1.4)$$

Соотношение (1.1.4) определяет физический смысл безразмерной концентрации $C(\theta)$. Для того чтобы он стал понятным, подойдем к нашим результатам с несколько иных позиций.

Индикатор как таковой нас совершенно не интересует. Он нужен только для того, чтобы выделить частицы жидкости, вошедшие в аппарат в определенный момент времени. Рассмотрим частицу, вошедшую в аппарат. Сколько времени она пробудет в нем? Определенного ответа на этот вопрос нет. Точно предсказать время пребывания данной частицы жидкости в аппарате нельзя. Время пребывания частицы в аппарате есть случайная величина.

Из этого нельзя заключить, что ничего о ее значении нельзя сказать заранее. Вероятность случайной непрерывной величины задается как: вероятность того, что случайная непрерывная величина U примет какое-нибудь значение в интервале от u до $u + du$, равна $p(u \leq U \leq u + du) = f(u)du$.

Функция $f(u)$ называется плотностью вероятности, или дифференциальной функцией распределения величины U . Из сопоставления данного выражения и (1.1.4) ясно, что $C(\theta)$ есть дифференциальная функция распределения (плотность вероятности) времени пребывания частиц жидкости в аппарате.

Проведем дальнейшие преобразования соотношения (1.1.4). Общее количество введенного индикатора определяется выражением

$$M = V' \int_0^{\infty} C(\tau) d\tau.$$

Тогда из уравнений (1.1.2) и (1.1.4) следует

$$C(\theta) = V' C(\tau) d\tau / M d\theta = C(\tau) / \int_0^{\infty} C(\tau) d\tau \langle \tau \rangle = C^*(\tau) \langle \tau \rangle,$$

где выражение $C^*(\tau) = C(\tau) / \int_0^{\infty} C(\tau) d\tau$ задает нормированную C -кривую.

Построим экспериментальную кривую в координатах $C(\theta)$, θ (рис. 1.1.3). Такая кривая называется C -кривой. Заштрихованная площадь под ней равна $\int_0^{\theta} C(\theta) d\theta$ и означает долю потока, время пребывания которого в аппарате изме-

няется от 0 до θ . Естественно, что $\int_0^{\infty} C(\theta) d\theta = 1$.

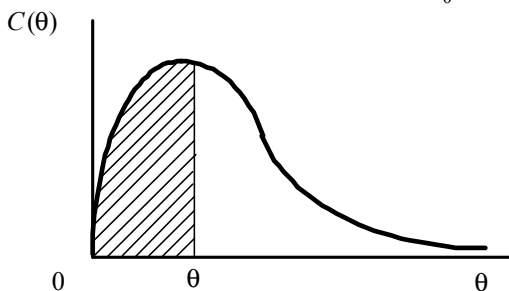


Рис. 1.1.3. Изображение C -кривой в безразмерных координатах

C -кривая является характеристикой распределения элементов потока по времени их пребывания в аппарате.

Для проверки правильности проведения экспериментальных исследований по C -кривой может быть определено среднее время потока в аппарате:

$$\langle \tau \rangle = \int_0^{\infty} \tau d\tau = \int_0^{\infty} \tau C(\theta) d\theta. \quad (1.1.5)$$

Полученное значение необходимо сравнить с расчетом по (1.1.1).

Метод ступенчатого возмущения. В поступающий в аппарат поток жидкости в некоторый момент времени вводят индикатор. Концентрация индикатора в потоке изменяется скачком до некоторого значения C_0 и в дальнейшем поддерживается на этом уровне. Кривая отклика, соответствующая сигналу ступенчатой формы, имеет вид, изображенный на рис. 1.1.4.

Если время выражено в безразмерных единицах, то зависимость изменения концентрации индикатора во времени в потоке, выходящем из аппарата, называется F -кривой. Величина, равная отношению текущей концентрации к концентрации во входном потоке, изменяется от нуля до единицы.

Доля элементов потока, время пребывания которых в аппарате находится в пределах от θ до $\theta + d\theta$, есть $dF(\theta) = C(\theta)d\theta$.

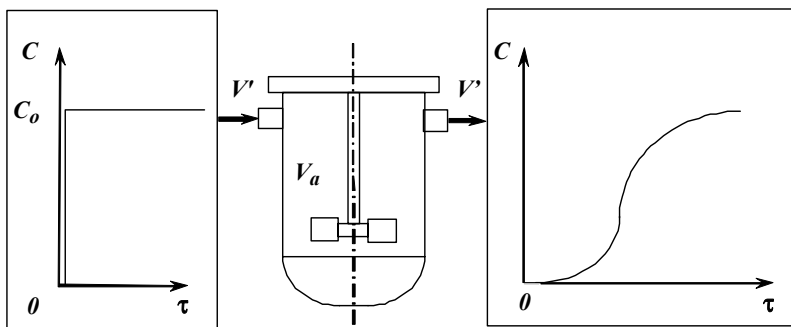


Рис. 1.1.4. Функция отклика системы на ступенчатое возмущение

Доля элементов потока, время пребывания которых в аппарате меньше θ , равна

$$F(\theta) = \int_0^{\theta} C(\theta) d\theta. \quad (1.1.6)$$

Согласно (1.1.6) функция $F(\theta)$ определяет вероятность того, что время пребывания некоторой частицы окажется меньше τ . Ее называют интегральной функцией распределения времени пребывания. Так как сумма всех долей жидкости в аппарате равна 1, то площадь под F -кривой равна 1 и $F(\theta) \rightarrow 1$ при

$\theta \rightarrow \infty$. Согласно выражению (1.1.5) среднее время пребывания потока в аппарате равно: $\langle \tau \rangle = \int_0^{\infty} \tau C(\theta) d\theta = \int_0^{\infty} \tau dF = - \int_0^{\infty} \tau d(1-F)$.

Для нахождения интеграла воспользуемся интегрированием по частям:

$$\int_0^{\infty} \tau d(1-F) = \tau(1-F) \Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} (1-F) d\tau.$$

Первое слагаемое в данном уравнении равно нулю. Тогда среднее время пребывания потока в аппарате независимо от его конструкции выразится через значения функции распределения элементов потока на выходе так:

$$\langle \tau \rangle = \int_0^{\infty} (1-F) d\tau.$$

Геометрически среднее время пребывания соответствует площади над кривой $F(\theta)$ (рис. 1.1.5).

Приведенные методы позволяют получить больше информации о структуре потоков в аппарате, чем только среднее время пребывания. Перечислим основные свойства функций $C(\theta)$ и $F(\tau)$. $C(\theta) \geq 0$; $F(\theta) \geq 0$ (вероятность не может быть отрицательной).

Из того, что $C(\theta) \geq 0$, и соотношения (1.1.6) следует, что $F(\tau)$ -функция неубывающая; она либо возрастает со временем, либо (на тех участках, где $C(\theta) = 0$) параллельна оси абсцисс.

$F(\theta) = C(\theta) = 0$ при $\tau \leq 0$ (время пребывания не может быть отрицательным). Вероятность того, что частица жидкости, вошедшая в аппарат в момент $\tau = 0$, выйдет из аппарата хоть когда-нибудь (в промежутке времени от $\tau = 0$ до $\tau = \infty$), равна единице. Иными словами, это событие наверняка произойдет – частица когда-нибудь да выйдет.

Функции распределения, описывающие работу определенной группы аппаратов, могут обладать и другими свойствами. Указанные четыре свойства являются наиболее общими.

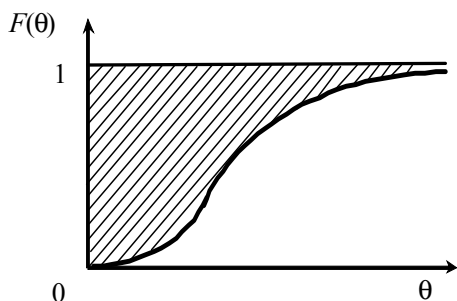


Рис. 1.1.5. Изображение F -кривой в безразмерных координатах

Основные характеристики распределения элементов потока по времени пребывания в аппарате. В силу стохастической природы движения элементов

потока в аппарате время их пребывания является случайной величиной. Дальнейший анализ экспериментальных кривых отклика возможен, если принять, что C -кривая характеризует плотность вероятности, а F -кривая – интегральное распределение частиц потока по их времени пребывания. Основные свойства распределения случайной величины можно описать несколькими числовыми характеристиками, которые определяют наиболее существенные особенности распределения. Такими характеристиками являются моменты распределения случайной величины, которые систематизируются по трем признакам: по порядку момента r ; по началу отсчета случайной величины; по виду случайной величины. Порядок r момента может быть любым целым числом. Практически же рассматривают моменты нулевого, первого, второго, третьего и четвертого порядков, т. е. $r = 0, 1, 2, 3, 4$. В зависимости от начала отсчета случайной величины различают начальные и центральные моменты. Общий вид *начальных моментов* функции распределения:

$$M_r = \int_0^{\infty} \tau^r C(\tau) d\tau.$$

Каждый из моментов имеет определенный физический смысл. Нулевой момент – это площадь под кривой изменения концентрации во времени и характеризует массу введенного индикатора. Первый момент позволяет рассчитать среднее значение (в рассматриваемом случае среднее время пребывания), или математическое ожидание случайной величины.

Случайные величины, отсчитываемые от математического ожидания, называются *центрированными*. Моменты центрированной случайной величины называются *центральными*. Общий вид центральных моментов таков:

$$\mu_r = \int_0^{\infty} (\tau - \langle \tau \rangle)^r C(\tau) d\tau.$$

Второй случайный момент характеризует рассеяние случайной величины относительно среднего времени пребывания, он называется дисперсией:

$$\sigma^2 = \mu_2 = \int_0^{\infty} (\tau - \langle \tau \rangle)^2 C(\tau) d\tau. \quad (1.1.7)$$

Чем меньше дисперсия, тем меньше разброс по времени пребывания различных элементов потока в аппарате.

Третий центральный момент характеризует *асимметрию* распределения:

$$\mu_3 = \int_0^{\infty} (\tau - \langle \tau \rangle)^3 C(\tau) d\tau.$$

Знание асимметрии распределения различных элементов потока по времени их пребывания позволяет судить о движении жидкости в аппарате. Если μ_3 положителен и значительно больше единицы, то в аппарате существуют зоны, обмен которых с основным потоком незначителен (застойные зоны). Четвертый центральный момент определяет острровершинность распределения:

$$\mu_4 = \int_0^{\infty} (\tau - \langle \tau \rangle)^4 C(\tau) d\tau.$$

Оценкой плотности распределения элементов потока по времени пребывания в аппарате может служить C -кривая, снимаемая на выходе из аппарата при импульсном возмущении. Тогда моменты C -кривой являются основными характеристиками распределения элементов потока по времени пребывания, определяя тем самым структуру потока.

Учитывая выражения (1.1.3) для безразмерной концентрации $C(\theta)$ и времени θ , получим

$$M_r = \int_0^{\infty} (\theta \langle \tau \rangle)^r \frac{C(\theta)}{\langle \tau \rangle} d\theta = \langle \tau \rangle^r \int_0^{\infty} (\theta)^r C(\theta) d\theta. \quad (1.1.8)$$

По определению, интеграл в правой части является начальным моментом порядка r безразмерного времени пребывания M_r^* . Отсюда получается следующее соотношение, связывающее размерный и безразмерный начальные моменты порядка r :

$$M_r = \langle \tau \rangle^r M_r^*.$$

Аналогично получаем соотношение между размерным и безразмерным центральными моментами:

$$\mu_r = \langle \tau \rangle^r \mu_r^*.$$

Анализ экспериментальных данных по изменению концентрации трассера во времени предполагает два этапа. Первоначально необходимо рассчитать основные центральные моменты функции распределения. Затем представляется возможным определить значения плотности вероятности или интегрального распределения частиц потока по их времени пребывания в аппарате.

Влияние структуры потоков на степень завершенности физико-химических процессов. Наиболее важным для практики является учет влияния данных по распределению времени пребывания на ход процессов в непрерывно действующих аппаратах. Будем рассматривать этот процесс на простейшем примере протекания необратимой реакции 1-го порядка. Для реакций не 1-го порядка дело обстоит сложнее. Прямо применять к ним дальнейшие рассуждения опасно, поскольку в данном случае необходимо учитывать не только распределение времени пребывания, но и некоторые другие особенности движения потока.

Рассмотрим необратимую реакцию 1-го порядка. Скорость реакции

$$r_p = \kappa(C_A - C_A^*).$$

Допустим, что реакция протекает при постоянных значениях температуры и объема. Тогда кинетическое уравнение будет иметь вид

$$\frac{dC_A}{d\tau} = -\kappa C_A.$$

Интеграл этого уравнения получается просто:

$$C_A = C_A^0 \exp(-\kappa \tau). \quad (1.1.9)$$

Казалось бы, задача решена. Но возникает вопрос: что такое τ для реакции в открытой системе? Очевидно, что τ – время протекания реакции. В непрерывно действующем аппарате разные частицы имеют разное время пребывания (а стало быть, и разную степень завершенности реакции). На выходе частицы перемешиваются. Каков же результат этого смешения? Часто задачу решают так: подставляют в формулу (1.1.9) среднее время пребывания, полагая, что тем самым усреднили и степень превращения. В общем случае такой способ неверен.

Для получения верного ответа проанализируем единичный объем вещества. «Рассортируем» частицы по времени пребывания и рассчитаем количество не принявшего участия в реакции вещества A в какой-либо частице жидкости. Расчет будем вести в приведенном времени. Константа скорости также примет приведенное значение. Вследствие того, что размерности k и τ взаимно обратимы, получим: $k^* = k(\tau)$.

Рассмотрим элемент объема V жидкости, прошедший через аппарат. Для всех молекул, находящихся в нем, время пребывания лежит в интервале от θ до $\theta + d\theta$. Доля таких молекул от их общего числа равна вероятности того, что время пребывания попадет в указанные пределы. Поскольку отобранный объем равен единице, то $dV = C(\theta)d\theta$.

Концентрацию вещества A в объеме dV можно выразить формулой (1.1.9), поскольку время пребывания частиц в этом объеме одинаково с точностью до $d\theta$: $C_A = C_A^0 \exp(-k^*\theta)$.

Количество вещества в объеме равно произведению концентрации на элементарный объем:

$$dm_A = C_A dV = C_A^0 \exp(-k^*\theta) C(\theta) d\theta.$$

Общее количество вещества в прошедшем через аппарат объеме можно получить, проинтегрировав данное уравнение, причем при интегрировании правой части время следует брать от 0 до ∞ , поскольку необходимо учитывать частицы с любым временем пребывания:

$$m_A = C_A^0 \int_0^{\infty} \exp(-k^*\theta) C(\theta) d\theta.$$

При смешении частиц средняя концентрация в вытекающем объеме равна m_A (так как было принято, что анализируемый объем равен единице). Перейдем к степени превращения:

$$x = \frac{C_A^0 - C_A}{C_A^0} = 1 - \int_0^{\infty} \exp(-k^*\theta) C(\theta) d\theta. \quad (1.1.10)$$

Выражение (1.1.10) не обладает достаточной наглядностью, чтобы можно было решить, как влияет на степень превращения вид функции $C(\theta)$. Степень превращения тем выше, чем меньше дисперсия функции $C(\theta)$ или ее второй центральный момент.

Не проводя химических превращений, можно оценить эффективность работы реактора, зная распределение частиц по времени пребывания.

Рассуждения, с помощью которых получена формула (1.1.10), будут справедливы не только для расчета степени химического превращения.

Аналогичные рассуждения можно распространить и на другие процессы. Можно учесть структуру потоков в грануляторе с псевдоожиженным слоем материала и рассчитать распределение частиц по степени их покрытия. Для расчета аппаратов, работающих в непрерывном режиме, необходимо знать вид функции плотности распределения частиц потока по их времени пребывания. Как быть, если требуется принять решение на стадии проектирования и нет возможности получить данную функцию экспериментально? Оказывается, в ряде случаев можно воспользоваться аналитической зависимостью и обойтись без постановки эксперимента. С этой целью рассмотрим некоторые часто встречающиеся на практике модели структуры потоков.

Модели идеального смешения и идеального вытеснения. По структуре потока аппараты можно разделить на несколько типов. В аппаратах, относящихся к одному и тому же типу, потоки обладают общими чертами. Выделение основных, наиболее характерных черт привело к введению понятия об *идеальных аппаратах*. Идеальные аппараты, как и любая идеализация, – это абстракция, которую нельзя точно осуществить на практике. Ясность физической картины и простота математического описания идеальных аппаратов чрезвычайно удобны для анализа процессов, протекающих в ХТА.

Различают два типа идеальных аппаратов. Первый тип можно представить себе таким образом. Это аппарат с мешалкой, через который проходит поток. Интенсивность циркуляции обрабатываемой среды такова, что поступающий поток мгновенно равномерно перемешивается со всей массой, уже находящейся в аппарате. Это аппарат *идеального смешения*. Второй тип характеризуется тем, что поток в нем движется очень равномерно. Частицы имеют одинаковую скорость и одинаковое время пребывания. Фронт потока движется как твердый поршень. Это аппарат идеального вытеснения.

Модель идеального смешения. Согласно определению, концентрация вещества в любой точке аппарата равна концентрации на выходе из него. Уравнение материального баланса модели идеального смешения запишется в виде

$$V_a \frac{dC}{d\tau} = V(C_n - C).$$

Отклик модели идеального смешения на входное возмущение для метода вымывания соответствует убывающей экспоненциальной зависимости с начальной концентрацией C_n (кривая *I* на рис. 1.1.6):

$$C(\tau) = C_n \exp(-\tau/\langle\tau\rangle). \quad (1.1.11)$$

При импульсном возмущении уравнение имеет аналогичный вид, так как введенный индикатор в количестве m мгновенно распределяется по всему объему и начинается его вымывание. Начальная концентрация при этом равна $C_n = m/V_a$. Соответственно изменение концентрации на выходе потока из аппарата описывается уравнением (1.1.11) (кривая *I* на рис. 1.1.6).

При ступенчатом введении индикатора со скачкообразным изменением концентрации в момент времени $\tau = 0$ от $C = 0$ до $C = C^o$ функция отклика

$$C(\tau) = C^o(1 - \exp(-\tau/\langle\tau\rangle)) \quad (1.1.12)$$

(кривая 2 на рис. 1.1.6).

В аппарате идеального смешения дифференциальная функция распределения времени пребывания имеет максимум при $\tau = 0$, а затем согласно (1.1.11) убывает по следующему закону: $C(\theta) = \exp(-\tau/\langle\tau\rangle)$.

Интегральная функция распределения, в свою очередь, согласно (1.1.12) будет иметь вид $F(\theta) = 1 - \exp(-\tau/\langle\tau\rangle)$.

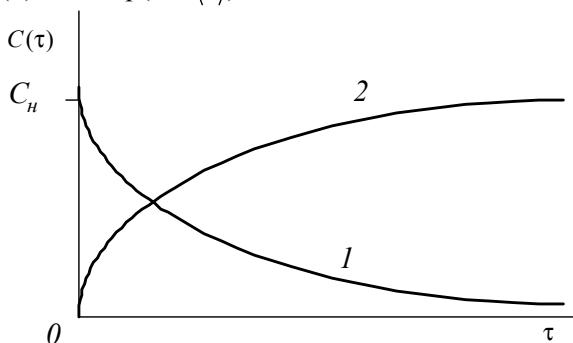


Рис. 1.1.6. Функции отклика для модели идеального смешения:
1 – метод вымывания (метод импульсного введения индикатора);
2 – метод ступенчатого введения индикатора.

Модель идеального смешения отличается значительной простотой. Вместе с тем в ряде случаев ее применение вполне обосновано. Это относится в первую очередь к аппаратам с механическими перемешивающими устройствами. Не для всех аппаратов с мешалками может быть применена модель идеального смешения. Основное условие применения – это интенсивность перемешивания.

Модель идеального вытеснения. В основе модели идеального вытеснения лежит допущение о поршневом характере течения обрабатываемой среды. Перемешивание вдоль потока отсутствует и имеет место равномерное распределение вещества в направлении, перпендикулярном движению. Время пребывания всех частиц в системе одинаково и равно отношению объема аппарата к объемному расходу жидкости. Например, такой поток имеет место в трубчатом аппарате при турбулентном течении жидкости через него, когда профиль скорости можно считать равномерным, т. е. принять одинаковым время пребывания отдельных элементов потока.

Уравнение модели идеального вытеснения запишется в виде

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} + w \frac{\partial C}{\partial x} = 0.$$

Решение уравнения (1.1.42), удовлетворяющее начальному условию

$$C(0, x) = C^o(x) \text{ при } \tau = 0, \quad 0 \leq x \leq l, \quad (1.1.13)$$

и граничному условию $C(\tau, 0) = C(\tau)$ при $x = 0, \quad \tau \geq 0$, есть

$$C(\tau, l) = \begin{cases} C^0(l - w\tau), & \tau \leq l/w; \\ C(\tau - l/w), & \tau \geq l/w. \end{cases} \quad (1.1.14)$$

Из решения (1.1.14) следует, что любое изменение концентрации на входе в аппарат идеального вытеснения появляется на его выходе через время, равное среднему времени пребывания $\langle \tau \rangle = l/w$.

В соответствии с решением (1.1.14) отклики на импульсное и ступенчатое возмущения для идеального вытеснения изображены соответственно на рис. 1.1.7 *а* и *б*. Первый из них является дифференциальной, а второй интегральной функциями распределения времени пребывания. Так как время пребывания для всех частиц одинаково, то при $\tau < \langle \tau \rangle$ выхода не достигает ни одна частица: $C = 0$ (рис. 1.1.7, *а*). При $\tau > \langle \tau \rangle$ на выходе также не будет меченых частиц: $C = 0$; все они уже прошли. Функция $C(\theta)$ отлична от нуля только при $\tau = \langle \tau \rangle$.

Если функция отлична от нуля только в одной точке, а площадь под ее кривой не равна нулю, то ей в этой точке приходится придать бесконечное значение – функция оказывается весьма необычной. Введенная в науку Дираком, она называется *дельта-функцией* Дирака. Для данного случая (бесконечное значение при $\tau = \langle \tau \rangle$) ее запись такова:

$$C(\theta) = \delta(\tau - \langle \tau \rangle).$$

График δ -функции, изображенный на рис. 1.1.7, *а*, является условным. Это возможно только в том случае, если изменение концентрации индикатора во времени на входе в аппарат представляет собой δ -функцию.

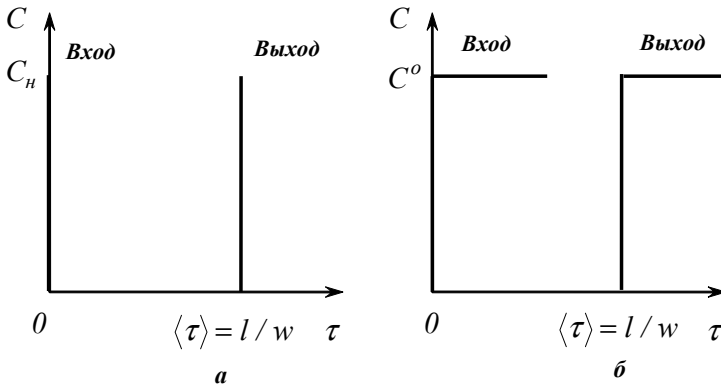


Рис. 1.1.7. Модель идеального вытеснения, отклик на:
***а* – импульсное возмущение; *б* – ступенчатое возмущение.**

Интегральная функция распределения для данного случая приведена на рис. 1.1.7, *б*. При $\tau < \langle \tau \rangle$ значение $F(\theta)$ равно нулю. При $\tau > \langle \tau \rangle$ оно равно единице, т. е. при любом $\tau > \langle \tau \rangle$ из аппарата уже вышла вся жидкость, поступившая

туда в начальный момент и содержащая индикатор. При $\tau = \langle \tau \rangle$ функция совершает скачок от нуля до единицы.

Химические реакции в идеальных аппаратах. Интересным для практики является вопрос о полноте прохождения химических реакций в идеальных аппаратах. По-прежнему возьмем необратимую реакцию первого порядка. Выясним, почему и как различается степень превращения в аппаратах обоих типов. Затем выведем количественные соотношения и сравним их с качественными выводами. Сделать вывод о том, в каком варианте получается более высокая степень превращения, можно, сравнив дисперсии функций распределения. Для аппарата идеального вытеснения дисперсия равна нулю. Время пребывания всех частиц одинаково, разброс относительно среднего отсутствует. Следовательно, и время реакции для всех частиц потока одинаково.

В аппарате идеального смешения дисперсия явно отлична от нуля. Имеется много частиц, время пребывания которых мало, но есть и частицы, время пребывания которых весьма велико. Первые частицы выносят из аппарата много вещества, не успевшего вступить в реакцию, что снижает степень превращения. Те же частицы, которые задерживаются в аппарате дольше среднего времени пребывания, уже в основном прореагировали. Вещества в них почти не осталось, реакция идет медленно, и от того, насколько дольше они пробудут в аппарате, степень превращения зависит слабо. Степень превращения в аппарате идеального вытеснения должна быть выше, если среднее время пребывания и константа скорости реакции в том и другом аппаратах одинаковы.

В аппарате идеального вытеснения смесь реагирующих веществ равномерно движется от входа к выходу. При этом концентрация вещества A падает за счет реакции. Время реакции пропорционально пути, пройденному потоком. Согласно (1.1.10), степень превращения вещества A имеет следующий вид:

$$x = \frac{C_A^0 - C_A}{C_A^0} = 1 - \int_0^\infty \exp(-\kappa^* \theta) C(\theta) d\theta = 1 - \exp(-\kappa^* \theta). \quad (1.1.15)$$

В аппарате идеального вытеснения реакция во времени протекает так же, как в аппарате периодического действия, причем каждому моменту времени соответствует определенное поперечное сечение аппарата.

В аппарате идеального смешения этот закон будет совсем иным. В соответствии с определением идеального смешения концентрация вещества A постоянна по всему объему аппарата. Причем на входе концентрация претерпевает резкий скачок. Входящая жидкость мгновенно смешивается с жидкостью в аппарате, а концентрация вещества A в этой жидкости уже уменьшилась в результате реакции. На выходе же скачка нет, и в объеме аппарата и на выходе концентрация одинакова.

Для аппарата идеального смешения расчет степени превращения можно провести по уравнению (1.1.33):

$$x = \frac{C_A^0 - C_A}{C_A^0} = 1 - \int_0^\infty \exp(-\kappa^* \theta) \exp(-\theta) d\theta = 1 - \frac{1}{\kappa^* + 1} = \frac{\kappa^*}{\kappa^* + 1}. \quad (1.1.16)$$

Этот же вывод можно получить совсем иным путем. С этой целью запишем уравнение материального баланса по реагирующему компоненту для аппарата идеального смешения:

$$V' C_A^0 = V_a \kappa C_A + V' C_A.$$

В левой части находится количество вещества A , вносимое в аппарат потоком. Первый член правой части – расход вещества в реакции, второй – вынос его потоком из аппарата (с учетом того, что концентрация этого вещества во всех точках аппарата и на выходе равна C_A). Отсюда

$$C_A = \frac{V' C_A^0}{V_a \kappa + V'} = \frac{C_A^0}{\kappa \langle \tau \rangle + 1} = \frac{C_A^0}{\kappa^* + 1},$$

или

$$\frac{C_A}{C_A^0} = 1 - x = \frac{1}{\kappa^* + 1}.$$

Окончательно

$$x = \frac{\kappa^*}{\kappa^* + 1}.$$

Таблица 1.1.1

Степень превращения реакции первого порядка в идеальных аппаратах

Приведенное время реакции

$\kappa^* = \kappa \langle \tau \rangle$	0,5	1	2	4	6	10
Идеальное вытеснение	0,394	0,632	0,865	0,982	0,997	0,999
Идеальное смешение	0,333	0,500	0,667	0,800	0,856	0,909

Сравнивая выражения (1.1.15) и (1.1.16) при одинаковых значениях константы скорости реакции, получим значения степени превращения для одной и той же реакции в аппаратах того и другого типа (см. табл. 1.1.1).

При больших значениях κ^* разница весьма велика. Реактор идеального вытеснения дает намного больший выход по сравнению с реактором идеального смешения. Еще нагляднее эта разница выявляется из сравнения объемов аппаратов обоих типов, необходимых для достижения одной и той же степени превращения (см. табл. 1.1.2).

Таблица 1.1.2

Соотношение объемов аппаратов идеального смешения и вытеснения при одинаковой степени превращения

Степень превращения	0,5	0,7	0,9	0,95	0,99	0,999
Отношение объемов $V_{см}/V_{выт}$	1,5	2	4	6,3	22	140

Здесь дано соотношение необходимых объемов аппаратов идеального смешения и идеального вытеснения.

Если необходимо получить высокую степень превращения, то объем аппарата идеального смешения может отличаться от объема аппарата идеального вытеснения в сто и более раз. Это положение имеет общий характер. Чем выше требуемая степень превращения, тем сильнее влияние характера распределения

времени пребывания. Проблема распределения потоков приобретает особую остроту в связи с непрерывным возрастанием требований к глубине протекания реакций, глубине очистки и т. д.

Если требуется не очень высокая степень превращения, то аппарат, близкий к идеальному смешению, может оказаться достаточно выгодным. Дело в том, что сравнивать аппараты только по объему нельзя. Стоимость аппарата в большей степени зависит от сложности его конструкции. Конструкция аппаратов, близких к идеальному вытеснению, часто достаточно сложна. Особенно трудно в таких аппаратах отводить тепло. В аппаратах же, близких к идеальному смешению, отвод тепла сильно упрощен, поскольку интенсивное перемешивание улучшает условия теплопередачи.

Диффузионная модель. В основе диффузионной модели лежит допущение, что структура потока описывается уравнением, аналогичным уравнению молекулярной диффузии. Параметром модели является коэффициент продольного перемешивания, называемый также коэффициентом турбулентной диффузии или коэффициентом обратного перемешивания.

Для вывода уравнения модели составим уравнение математического баланса для элемента аппарата Δx , как показано на рис. 1.1.8. В рассматриваемый элемент поступают:

- конвективный поток wSC ;
- диффузионный поток $D_l S \frac{\partial C}{\partial x} (C + \frac{\partial C}{\partial x} \Delta x)$.

В свою очередь, его покидают:

- конвективный поток $wS(C + \frac{\partial C}{\partial x} \Delta x)$;
- диффузионный поток $D_l S \frac{\partial C}{\partial x}$.

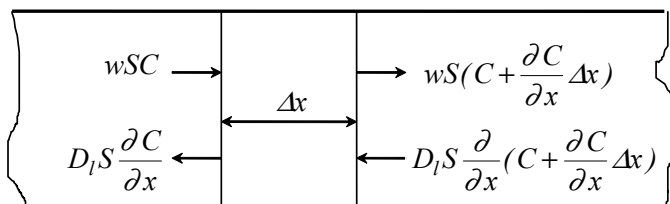


Рис. 1.1.8. К выводу основного уравнения диффузионной модели

В соответствии с законом сохранения массы разность между входящими и выходящими потоками должна составлять накопление вещества (индикатора) в рассматриваемом элементе. Она равна $S \Delta x \frac{\partial C}{\partial \tau}$. Запишем теперь уравнение сохранения массы согласно рис. 1.1.8:

$$S \Delta x \frac{\partial C}{\partial \tau} = wSC + D_l S \frac{\partial}{\partial x} (C + \frac{\partial C}{\partial x} \Delta x) - wS(C + \frac{\partial C}{\partial x} \Delta x) - D_l S \frac{\partial C}{\partial x}.$$

Переходя к пределу при $\Delta x \rightarrow 0$, получаем

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = D_l \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - w \frac{\partial C}{\partial x}. \quad (1.1.17)$$

Данное уравнение является основным для диффузионной модели. Остановимся на начальных и граничных условиях для (1.1.17). Очевидно, что должны быть заданы одно начальное и два граничных условия. В качестве начального условия обычно задается профиль концентрации по аппарату в начальный момент времени:

$$C(0, x) = C(x) \text{ при } \tau = 0. \quad (1.1.18)$$

Граничные условия могут быть заданы из условия материального баланса на концах аппарата (условия по Данквертсу). Рассмотрим левый конец аппарата, в который поступает поток с некоторой средней скоростью w (рис. 1.1.9а).

Сумма потоков вещества, подходящих к границе $x = 0$, должна быть равна потоку вещества, отходящего от границы. Тогда получим

$$w(C^0 - C) + D_l \frac{dC}{dx} = 0. \quad (1.1.19)$$

Для правого конца аппарата (рис. 1.1.9б) имеем

$$wC = wC^k + D_l \frac{dC}{dx}. \quad (1.1.20)$$

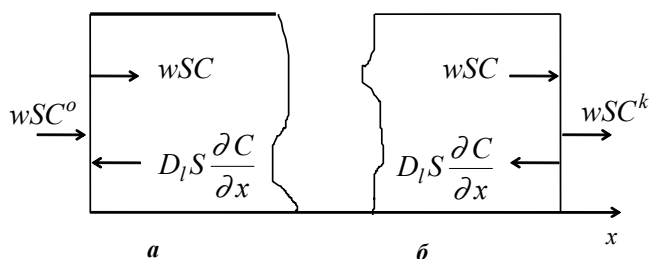


Рис. 1.1.9. Схема потоков:

а – у левого конца аппарата; б – у правого конца аппарата.

Предполагается, что на выходе из аппарата не происходит изменение концентрации вещества в потоке, т. е. $C \approx C^k$. С учетом этого граничное условие (1.1.18) примет вид

$$\frac{dC}{dx} = 0. \quad (1.1.21)$$

Условия (1.1.18) и (1.1.20) называются *граничными условиями по Данквертсу*.

На практике обычно используют безразмерную форму записи основного уравнения. В качестве безразмерных переменных можно использовать безразмерные переменные $z = x/l$, $\theta = \tau/\langle \tau \rangle$. С учетом принятых обозначений представим уравнение (1.1.17) в виде

$$\frac{wl}{D_l} \frac{\partial C}{\partial \theta} + \frac{wl}{D_l} \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}.$$

Множитель wl/D_l в левой части данного уравнения представляет собой безразмерное число Пекле (Pe), и последнее уравнение можно переписать в виде

$$\text{Pe} \frac{\partial C}{\partial \theta} + \text{Pe} \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}. \quad (1.1.22)$$

Приведем к безразмерной форме граничные условия (1.1.19) и (1.1.21):

$$(C^0 - C) + \frac{1}{\text{Pe}} \frac{dC}{dz} = 0 \text{ при } z = 0, \quad \frac{dC}{dz} = 0 \text{ при } z = 1.$$

Функция отклика на импульсное возмущение. В зависимости от используемых граничных условий были получены решения для аппарата бесконечной, полубесконечной и конечной длины. В последнем случае решение представляется в виде бесконечного медленно сходящегося ряда. В связи с этим при расчетах выбирается такое число членов ряда, при котором обеспечивается необходимая точность:

$$C(\theta) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{2\lambda_i^2 \exp\left(\frac{\text{Pe}}{2} - \frac{\text{Pe}}{4}\theta - \lambda_i^2 \frac{4\theta}{\text{Pe}}\right)}{\left(1 + \frac{\text{Pe}}{2}\right)\lambda_i \sin 2\lambda_i - \left[\frac{\text{Pe}}{4} + \left(\frac{\text{Pe}}{4}\right)^2 - \lambda_i^2\right] \cos 2\lambda_i}, \quad (1.1.23)$$

где λ_i – корни трансцендентных уравнений:

$$\frac{\lambda_i}{2} \operatorname{tg} \frac{\lambda_i}{2} = \frac{\text{Pe}}{4} \quad (i = 1, 3, 5, \dots); \quad \frac{\lambda_i}{2} \operatorname{ctg} \frac{\lambda_i}{2} = -\frac{\text{Pe}}{4} \quad (i = 2, 4, 6, \dots). \quad (1.1.24)$$

Решение (1.1.61) дает удовлетворительные результаты в области $\theta \geq 0,01$ и $\text{Pe} \leq 10$. Вне указанных пределов необходимо пользоваться приближенными решениями. При больших числах Pe влияние диффузии мало и C -кривые для любых условий на входе и выходе близки между собой. Потoki, незначительно отличающиеся от идеального вытеснения, часто встречаются на практике. C -кривые могут быть достаточно точно аппроксимированы кривой нормального распределения:

$$C(\theta) = \frac{1}{2\sqrt{\pi/\text{Pe}}} \exp\left\{-(1-\theta)^2 \frac{\text{Pe}}{4}\right\}. \quad (1.1.25)$$

Функция отклика на ступенчатое возмущение. Рассмотрим теперь функцию отклика на ступенчатое возмущение. Для аппарата конечных размеров с граничными условиями по Данквертсу функция отклика имеет следующий вид:

$$F(\theta) = 1 - 2\text{Pe} \exp\left(\frac{\text{Pe}}{2}\right) \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(-1)^{i-1} \lambda_i^2 \exp\left(-\frac{\lambda_i^2 + \text{Pe}^2/4}{\text{Pe}}\theta\right)}{(\lambda_i^2 + \text{Pe}^2/4)(\lambda_i^2 + \text{Pe}^2/4 + \text{Pe})}. \quad (1.1.26)$$

Решение (1.1.26) представляет собой медленно сходящийся ряд. Удовлетворительное решение может быть достигнуто в области $\theta \geq 0,01$ и $\text{Pe} \leq 10$. Величины λ_i являются корнями уравнений (1.1.24).

Представляет интерес раскрыть физическую природу коэффициента D_l , который является основным параметром модели. Необходимо иметь в виду, что при стремлении к нулю D_l диффузионная модель переходит в модель идеального вытеснения.

Предположим, что в потоке жидкости, подчиняющемся схеме идеального вытеснения, учтена молекулярная диффузия индикатора. При этом происходит не только сдвиг картины распределения концентрации, но и ее деформация. По

мере продвижения кривая концентрации все больше «размывается» за счет диффузии.

Теперь рассмотрим случай, когда поток в аппарате имеет турбулентный характер. Для простоты допустим, что молекулярная диффузия индикатора отсутствует. Однако идеального вытеснения здесь не будет. За счет турбулентных пульсаций скорости одни частицы будут обгонять основную массу потока, другие отставать от нее. В результате распределение концентраций будет также *размываться*. Вследствие турбулентных пульсаций деформация распределения концентрации индикатора аналогична его деформации под влиянием теплового движения молекул (т. е. молекулярной диффузии) с той лишь разницей, что диффузия происходит на уровне некоторых турбулентных образований.

В ламинарном потоке турбулентная диффузия отсутствует (рис. 1.1.10). Тем не менее и в этом случае наблюдается отклонение потока от идеального течения. При отсутствии молекулярной диффузии в самых общих чертах ситуация сводится к тому же: одни частицы уходят вперед, другие отстают.

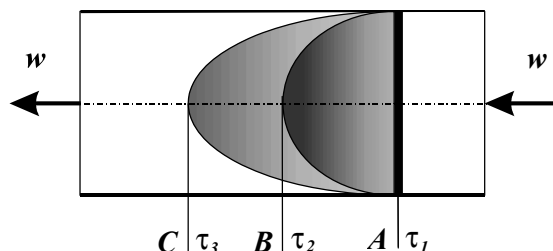


Рис. 1.1.10. Положение меченых частиц в различные моменты времени

При течении жидкости в трубе профиль скорости имеет вид параболы. Если в момент τ_1 пометить частицы, находящиеся в каком-либо сечении, то в более поздние моменты τ_2, τ_3 помеченные частицы окажутся на поверхности параболоида. Те частицы, которые движутся по оси трубы, уйдут дальше всех, те же, которые попали на самую периферию потока, не движутся, их скорость равна нулю. Картина, как видим, совсем не похожа на обычную диффузию. Убегание частиц вперед и отставание происходят не хаотично, а регулярно. Заранее можно сказать, какие частицы уйдут вперед, какие отстанут.

Нас не интересует судьба отдельных конкретных частиц. Нам важно знать поведение потока в среднем. В первый момент времени индикатор сосредоточен в начальном сечении *A*. В следующий момент времени помеченная жидкость в среднем сместится вправо. Зона, в которой концентрация отлична от нуля, распространится от *A* до сечения *B*. В последующий момент произойдет дальнейшее смещение помеченной жидкости в среднем и дальнейшее «размывание» зоны до сечения *C*.

Нетрудно заметить, что при таком описании «в среднем» теряется принципиальное различие между ламинарным и турбулентными потоками. Однако ут-

рата информации компенсируется простотой и универсальностью модели. Для ряда приложений упрощенное описание является единственно возможным.

Оценка параметра Pe диффузионной модели. Определение числа Pe по экспериментальным данным основано на использовании функции отклика системы на типовое возмущение. Методы определения делят на две группы:

- методы, использующие решение уравнения (1.1.22);
- методы, в основе которых лежат уравнения связи между статистическими параметрами функции отклика и параметрами модели.

Для определения Pe с помощью методов первой группы необходимо знать решение уравнения (1.1.22). Такие решения (см. (1.1.23)–(1.1.26)) имеют вид ряда, причем медленно сходящегося, чем обусловлены трудности практического использования этих решений.

Наибольшее распространение получили методы второй группы. Пусть через закрытый аппарат протекает поток, в котором имеет место продольное перемешивание. Импульсное возмущение подается на вход аппарата, а отклик определяется на выходе из аппарата. Уравнение связи между параметрами диффузионной модели и моментами экспериментальных кривых распределения времени пребывания элементов потока в аппарате имеет следующий вид:

$$\sigma_{\theta}^2 = \frac{2}{Pe^2} (Pe - 1 + \exp(-Pe)).$$

Данное уравнение используется для расчета числа Pe по экспериментальным данным.

При значениях числа Pe больше 10

$$\sigma_{\theta}^2 = \frac{2}{Pe}.$$

Применение диффузионной модели оправдано, когда один из геометрических размеров аппарата значительно превышает два других и наблюдается разброс по времени пребывания отдельных частиц потока.

Ячеечная модель. Рассматриваемая модель, впервые предложенная для каскада реакторов с мешалками, является одной из наиболее простых. Согласно данной модели аппарат представляется состоящим из ряда последовательно соединенных ячеек, через которые проходит поток вещества (рис. 1.1.11).

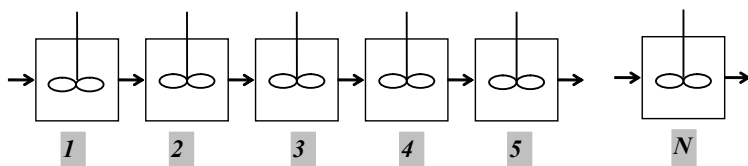


Рис. 1.1.11. Схема ячейчной модели: 1, 2, 3, ..., N – номера ячеек

Сделаем следующие допущения:

- в каждой ячейке осуществляется идеальное перемешивание;
- между ячейками отсутствует обратное перемешивание.

Параметром ячеечной модели служит число ячеек полного перемешивания N , каждая из которых имеет одинаковый объем V_j . С увеличением N структура потока приближается к модели полного вытеснения, а с уменьшением N – к модели идеального смешения.

Запишем уравнения сохранения массы для каждой из ячеек:

$$V'C - V'C_1 = V_j \frac{dC_1}{d\tau}, \quad V'C_1 - V'C_2 = V_j \frac{dC_2}{d\tau}, \dots, \\ V'C_{j-1} - V'C_j = V_j \frac{dC_j}{d\tau}, \dots, V'C_{N-1} - V'C_N = V_j \frac{dC_N}{d\tau}.$$

Разделим левую и правую части уравнения на расход V , получим:

$$C_N - C_1 = \langle \tau \rangle \frac{dC_1}{d\tau}, \quad C_1 - C_2 = \langle \tau \rangle \frac{dC_2}{d\tau}, \dots, \\ C_{j-1} - C_j = \langle \tau \rangle \frac{dC_j}{d\tau}, \dots, C_{N-1} - C_N = \langle \tau \rangle \frac{dC_N}{d\tau}. \quad (1.1.27)$$

Соответствующие начальные условия для системы уравнений (1.1.27) имеют вид

$$C_1 = C_1^o, \quad C_2 = C_2^o, \quad \dots, \quad C_N = C_N^o \quad \text{при } \tau = 0. \quad (1.1.28)$$

Система уравнений (1.1.27) вместе с начальными условиями (1.1.28) образуют ячеечную модель структуры потоков. С целью изучения свойств модели рассмотрим отклики ячеечной модели на стандартные возмущения.

Отклик модели на ступенчатое возмущение со скачкообразным уменьшением концентрации до нуля (метод вымывания). Будем искать отклик модели, последовательно решая уравнения системы (1.1.27) начиная с первой ячейки.

Первая ячейка. В методе вымывания концентрация на входе равна нулю. Следовательно, $C_N = 0$ и исходное уравнение для первой ячейки с учетом разделения переменных сводится к следующему:

$$\frac{dC_1}{C_1} = \frac{d\tau}{\langle \tau \rangle}.$$

Интегрирование уравнения (1.1.27) дает

$$C_1 = K \exp(-\tau/\langle \tau \rangle). \quad (1.1.29)$$

Неизвестную константу K найдем из начального условия $C_1 = C_1^o = C^o$ при $\tau = 0$. Отсюда $K = C^o$ и отклик на выходе из первой ячейки имеет вид

$$C_1 = C^o \exp(-\tau/\langle \tau \rangle).$$

Вторая ячейка. Входом для второй ячейки является выход первой. Тогда уравнение сохранения вещества для второй ячейки примет вид

$$C^o \exp(-\tau/\langle \tau \rangle) - C_2 = \langle \tau \rangle \frac{dC_2}{d\tau}. \quad (1.1.30)$$

Уравнение (1.1.30) – неоднородное дифференциальное уравнение первого порядка. Будем решать его методом неопределенных множителей. Соответствующее однородное уравнение имеет вид

$$\langle \tau \rangle \frac{dC_2}{d\tau} + C_2 = 0.$$

Его решение есть

$$C_2 = A(\tau) \exp(-\tau/\langle\tau\rangle), \quad (1.1.31)$$

где $A(\tau)$ – неопределенный множитель.

Подставив решение однородного уравнения (1.1.31) в (1.1.30), получим:

$$\begin{aligned} \frac{dC_2}{d\tau} &= \frac{dA}{d\tau} \exp(-\tau/\langle\tau\rangle) - \frac{A(\tau)}{\langle\tau\rangle} \exp(-\tau/\langle\tau\rangle), \\ \langle\tau\rangle \left[\frac{dA}{d\tau} \exp(-\tau/\langle\tau\rangle) - \frac{A(\tau)}{\langle\tau\rangle} \exp(-\tau/\langle\tau\rangle) \right] + A(\tau) \exp(-\tau/\langle\tau\rangle) &= C^o \exp(-\tau/\langle\tau\rangle). \end{aligned}$$

Приводя подобные члены, имеем

$$\frac{dA}{d\tau} = \frac{C^o}{\langle\tau\rangle}.$$

Решим полученное дифференциальное уравнение относительно A :

$$A(\tau) = \frac{C^o}{\langle\tau\rangle} \tau + K. \quad (1.1.32)$$

Неизвестную константу K можно найти из начального условия

$$C_2 = C_2^o = C^o \text{ при } \tau = 0.$$

Отсюда

$$K = C^o.$$

Отклик на выходе второй ячейки имеет вид

$$C_2 = C^o [1 + (\tau/\langle\tau\rangle)] \exp(-\tau/\langle\tau\rangle).$$

Продолжая аналогичные рассуждения для третьей, четвертой, ..., N -й ячейки, получаем следующее выражение для отклика ячеечной модели на скачкообразное уменьшение концентрации до нуля:

$$\frac{C_N}{C^o} = \left[1 + \left(\frac{\tau}{\langle\tau\rangle} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\tau}{\langle\tau\rangle} \right)^2 + \dots + \frac{1}{(N-1)!} \left(\frac{\tau}{\langle\tau\rangle} \right)^{N-1} \right] \exp\left(-\frac{\tau}{\langle\tau\rangle}\right).$$

Уравнение удобнее записать в безразмерном виде:

$$C(\theta) = \left[1 + N\theta + \frac{1}{2}(N\theta)^2 + \frac{(N\theta)^{N-1}}{(N-1)!} \right] \exp(-N\theta).$$

Чем больше число ячеек, тем ближе мы приходим к аппарату идеального вытеснения.

Отклик модели на ступенчатое повышение концентрации. Для получения отклика ячеечной модели на импульсное возмущение продelaем вычисления, аналогичные предыдущему случаю.

Первая ячейка. Так как для данного вида возмущения концентрация на входе C_n отлична от нуля, то уравнение сохранения вещества для первой ячейки запишется следующим образом:

$$C_n - C_1 = \langle\tau\rangle \frac{dC_1}{d\tau}, \quad C_1 = 0 \text{ при } \tau = 0.$$

Уравнение (1.1.32) можно преобразовать следующим образом:

$$\frac{d(C_n - C_1)}{(C_n - C_1)} = -\frac{d\tau}{\langle\tau\rangle}. \quad (1.1.33)$$

Интегрирование последнего уравнения дает

$$(C_n - C_1) = K \exp(-\tau/\langle\tau\rangle). \quad (1.1.34)$$

Неизвестную константу K найдем из начального условия $K = C_n$ при $\tau = 0$.

Тогда на выходе первой ячейки получим следующую функцию отклика:

$$C_1 = C_n \cdot (1 - \exp(-\tau/\langle\tau\rangle)).$$

Вторая ячейка. Входом для второй ячейки является отклик первой ячейки (1.1.33). В этом случае уравнение сохранения вещества для второй ячейки запишется так:

$$C_n (1 - \exp(-\tau/\langle\tau\rangle)) - C_2 = \langle\tau\rangle \frac{dC_2}{d\tau}. \quad (1.1.35)$$

Решение соответствующего однородного уравнения имеет вид

$$C_2 = A(\tau) \exp(-\tau/\langle\tau\rangle). \quad (1.1.36)$$

Для отыскания неопределенного множителя подставим решение (1.1.36) в неоднородное исходное уравнение (1.1.35). Приводя подобные члены, получаем следующее уравнение относительно искомого множителя $A(\tau)$:

$$\frac{dA(\tau)}{d\tau} = \frac{C_n}{\langle\tau\rangle} [\exp(-\tau/\langle\tau\rangle) - 1].$$

Его решение есть

$$A(\tau) = \frac{C_n}{\langle\tau\rangle} [\langle\tau\rangle \exp(-\tau/\langle\tau\rangle) - \tau] + K.$$

Подставив полученное выражение в (1.1.36), получим решение неоднородного дифференциального уравнения (1.1.34):

$$C_2 = \left[\frac{C_n}{\langle\tau\rangle} \{ \langle\tau\rangle \exp(\tau/\langle\tau\rangle) + K \} \exp(-\tau/\langle\tau\rangle) \right].$$

Неизвестную константу K можно найти из начального условия

$$C_2 = 0, K = -C_n \text{ при } \tau = 0.$$

Отклик на выходе второй ячейки имеет вид

$$C_2 = C_n \{ 1 - [1 + (\tau/\langle\tau\rangle)] \exp(-\tau/\langle\tau\rangle) \}.$$

Аналогичные решения для третьей, четвертой, ..., N -й ячейки дают следующую общую функцию отклика на выходе из последней N -й ячейки:

$$\frac{C_N}{C_n} = 1 - \left[1 + \left(\frac{\tau}{\langle\tau\rangle} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\tau}{\langle\tau\rangle} \right)^2 + \dots + \frac{1}{(N-1)!} \left(\frac{\tau}{\langle\tau\rangle} \right)^{N-1} \right] \exp \left(-\frac{\tau}{\langle\tau\rangle} \right).$$

Вводя безразмерную концентрацию $F(\theta) = C_N / C_n$ и время $\theta = \tau/\langle\tau\rangle$, находим

$$F(\theta) = 1 - \left[1 + N\theta + \frac{1}{2} (N\theta)^2 + \dots + \frac{1}{(N-1)!} (N\theta)^{N-1} \right] \exp(-N\theta).$$

Согласно определению функция отклика $F(\theta)$ называется F -кривой и характеризует распределение элементов потока по времени пребывания.

Оценка параметра N ячеечной модели. Для оценки параметра N ячеечной модели определим функцию отклика на импульсное возмущение. Для полу-

чения функции отклика будем аналогично предыдущим случаям находить отклик на выходе первой, второй и т. д. ячеек.

Первая ячейка. Для первой ячейки получим уравнение, полностью аналогичное (1.1.29):

$$C_1 = C^o \exp(-\tau/\langle\tau\rangle).$$

Вторая ячейка. Входом для второй ячейки является выход первой. Отличие в выводе наблюдается после выражения (1.1.31):

$$A(\tau) = \frac{C^o}{\langle\tau\rangle} \tau + K.$$

При нахождении неизвестной константы K необходимо учесть изменение начального условия по сравнению с первым случаем, а именно $C_2 = 0$ при $\tau = 0$. Отсюда получаем, что $K = 0$ и выражение для функции отклика на выходе второй ячейки имеет вид

$$C_2 = C^o \frac{\tau}{\langle\tau\rangle} \exp(-\tau/\langle\tau\rangle).$$

Продолжая аналогичные рассуждения для третьей, четвертой, ..., N -й ячейки, получаем следующее выражение для отклика ячеечной модели на импульсное возмущение:

$$\frac{C_N}{C^o} = \frac{1}{(N-1)!} \left(\frac{\tau}{\langle\tau\rangle} \right)^{N-1} \exp\left(-\frac{\tau}{\langle\tau\rangle}\right),$$

или в безразмерном виде:

$$C(\theta) = \frac{N^N \theta^{N-1}}{(N-1)!} \exp(-N\theta). \quad (1.1.37)$$

По мере роста числа ячеек кривые распределения становятся все более похожими на график δ -функции. Анализ показывает, что при $N=1$ уравнение (1.37) переходит к (1.1.11), а при $N \rightarrow \infty$ – в (1.1.13). Так, аппараты идеального смещения и идеального вытеснения являются крайними случаями ячеечной модели соответственно при $N=1$ и при $N \rightarrow \infty$.

Увеличение кривизны кривых связано с уменьшением дисперсии. Между дисперсией функции распределения и параметром ячеечной модели существует простая связь. С целью ее установления определим второй момент функции отклика на импульсное возмущение согласно (1.1.8):

$$M_2 = \langle\tau\rangle^2 \int_0^\infty \theta^2 C(\theta) d\theta = \langle\tau\rangle^2 \int_0^\infty \theta^2 \frac{N^N \theta^{N-1}}{(N-1)!} \exp(-N\theta) d\theta = N(N+1)\langle\tau\rangle^2 = \langle\tau_a\rangle^2 \left(1 + \frac{1}{N}\right).$$

Соответственно центральный размерный момент второго порядка определяется выражением

$$\mu_2 = M_2 - \langle\tau_a\rangle^2 = \frac{\langle\tau_a\rangle^2}{N}.$$

Разделив данное выражение на квадрат среднего времени пребывания в системе $\langle\tau_a\rangle^2$, получим уравнение связи параметра ячеечной модели N с безразмерной дисперсией σ_θ^2 функции отклика ячеечной модели на импульсное возму-

щение $N = 1/\sigma_0^2$. Данное выражение – основное для оценки параметра ячеечной модели N по экспериментальным кривым отклика на импульсное возмущение.

Степень превращения для ячеечной модели. Первоначально рассмотрим вопрос качественно. Поскольку с ростом N уменьшается дисперсия функции распределения элементов потока по времени пребывания в аппарате, то одновременно должна увеличиваться степень превращения. К этому же выводу можно прийти, рассматривая изменение концентрации по длине аппарата. На рис. 1.1.12 изображено изменение концентрации по длине аппарата, состоящего из трех ячеек. Для последней ячейки концентрации в ячеечной модели и в аппарате идеального смешения совпадают. Совпадает и скорость реакции. Но первые ячейки работают при больших концентрациях C_A и соответственно при больших скоростях реакции. И здесь ячеечная модель при $1 \leq N \leq \infty$ занимает промежуточное положение между идеальными моделями.

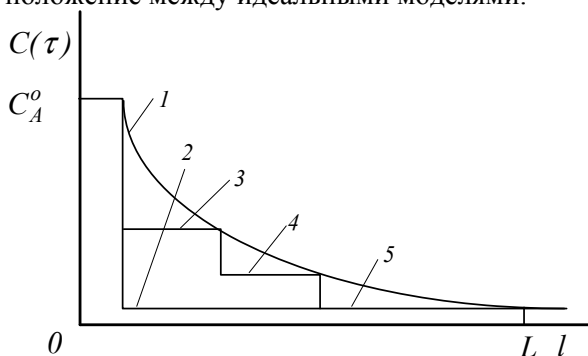


Рис. 1.1.12. Функции отклика для ячеечной модели на скачкообразное уменьшение концентрации для различного числа ячеек:

1 – при идеальном вытеснении; 2 – при идеальном смешении ($N = 1$); 3, 4, 5 – соответственно для числа ячеек $N = 2, 3, 4$.

Количественное решение для степени превращения проще всего получить следующим образом. Вначале рассмотрим аппарат из двух ячеек. Составим уравнения материального баланса по веществу A .

Первая ячейка. Уравнение для первой ячейки

$$C_{A1} = C_A^0 \frac{V}{V + V_A k / 2}. \quad (1.1.38)$$

Вторая ячейка. Уравнение для второй ячейки получается так же, но концентрация вещества A на входе в нее равна ее значению на выходе из первой ячейки:

$$C_{A2} = C_{A1} \frac{V}{V + V_A k / 2}.$$

Подставив в это выражение значение C_{A1} из уравнения (1.1.38), получим

$$C_{A2} = C_A^0 \left(\frac{V}{V + V_A k / 2} \right)^2,$$

или, поделив левую и правую части на C_A^0 , а в скобках числитель и знаменатель на объемный расход, получим

$$x = 1 - \frac{1}{(1 + k\langle\tau_a\rangle/2)^2}.$$

Так же проводится вывод для любого числа ячеек. Число уравнений материального баланса при этом равно N . В результате получим

$$x = 1 - \frac{1}{(1 + k\langle\tau_a\rangle/N)^N}. \quad (1.1.39)$$

При $N=1$ получаем выражение (1.1.16), при $N \rightarrow \infty$ уравнение (1.1.39) в пределе переходит в (1.1.15).

Исследуем зависимость степени превращения от числа ячеек. Для сравнения рассчитаем степень превращения в аппарате идеального смешения $N=1$ при том же значении $k\langle\tau_a\rangle = 6$:

$N = 1,$	$x = \frac{6}{1+6} = 0,857;$
$N = 2,$	$x = 1 - \frac{1}{(1+3)^2} = 0,938;$
$N = 3,$	$x = 1 - \frac{1}{(1+2)^3} = 0,963;$
$N = 6,$	$x = 1 - \frac{1}{(1+1)^6} = 0,984;$
$N \rightarrow \infty,$	$x = 1 - \exp(-6) = 0,996.$

Если параметр модели найден из опытных данных и содержит дробную часть, расчет степени превращения также можно вести по формуле (1.1.39).

Приведенные рассуждения будут справедливы не только для расчета степени химического превращения, но могут быть использованы и для других процессов, в которых распределение времени пребывания обрабатываемой среды будет влиять на степень их завершенности.

В рамках ячеечной модели аппарат идеального вытеснения является наилучшим вариантом для протекания необратимой реакции первого порядка, а аппарат идеального смешения – наихудшим. Это не противоречит полученным ранее результатам и полностью может быть отнесено к массообменным процессам. Аппараты могут работать и хуже, чем при идеальном смешении, но их нельзя описывать с помощью классической ячеечной модели. В противном случае пришлось бы принять, что $N < 1$.

Подведем итоги. На практике наблюдается отличие действительной картины течения потоков от режима идеального вытеснения или смешения. Причин этому достаточно много, в частности наличие струйных или отрывных течений, застойных зон, циркуляции потока в аппарате, резких его поворотов при ударе о преграду, когда течение вырождается в интенсивный поток вдоль преграды. Ни классическая ячеечная модель, ни тем более диффузионная модель в этом случае не описывают фактический режим течения обрабатываемой среды в аппарате. В то же время такие гидродинамические условия часто можно встретить в промышленных аппаратах с мешалками и в аппаратах с псевдоожиженным

слоем зернистых материалов. В этих случаях целесообразно рассматривать реальный аппарат как совокупность взаимосвязанных областей потока, причем модели движения жидкости в каждой из них могут быть приняты различными. Указанные модели носят название смешанных или комбинированных. Появление таких моделей было связано со сложностями получения аналитических решений при использовании, например, сложной ячеечной модели с произвольными потоками между отдельными ячейками. При использовании ПЭВМ эти сложности ушли в прошлое, а изучение данных моделей носит скорее познавательный характер.

При построении комбинированной модели для различных областей реактора могут быть использованы следующие простые режимы течения:

- идеального смешения;
- идеального вытеснения;
- вытеснения с диффузией.

Перечисленные режимы течения могут быть усложнены за счет учета:

- проскока, т. е. части потока, который не смешивается с основным объемом вещества в аппарате и сразу попадает на выгрузку;
- обратного или циркуляционного потока, который выходит за пределы аппарата или определенной его части и вновь возвращается, перемешиваясь с веществом в месте входа;
- струйного потока, мгновенно переносящего вещество из одной зоны в другую.

При построении модели, включающей перечисленные компоненты, одна из важных задач заключается в определении объемов зон аппарата с различными типами течения жидкости. Указанную задачу необходимо решать так, чтобы форма кривой, которая характеризует отклик системы на возмущение, предсказанная на основании модели, по возможности близко совпадала с экспериментальной кривой, полученной для реального объекта. Число параметров, входящих в предполагаемую модель, определяется:

- с одной стороны, точностью, с которой она должна отражать изучаемый поток в пределах данного класса режимов;
- с другой стороны, степенью сложности математических представлений, необходимых для анализа модели.

По мере увеличения числа параметров модель охватывает все более широкий круг явлений. При изучении реальной ситуации необходимо сначала стремиться к простейшей модели, согласующейся с опытными данными. Модель должна вытекать из действительных условий движения обрабатываемой среды в аппарате. Только в этом случае параметры модели будут иметь конкретный физический смысл и могут быть определены независимыми методами.

При включении в комбинированную модель застойной зоны предполагают, что ее содержимое полностью неподвижно или очень медленно обменивается с основным потоком, проходящим через аппарат. В первом случае понятие застойной зоны сильно упрощается. Второй случай в большей мере отражает реальный процесс, но требует значительно более сложного анализа.

1.1.3. Стохастические модели

Стохастические модели. В основе большинства процессов переработки дисперсных материалов, а значит, и в основе работы аппаратов, лежат явления, вероятностные по своей природе. Стохастические (вероятностные) особенности процессов химической технологии проявляются прежде всего в неравномерности распределения элементов фаз по времени пребывания, по размерам, по траекториям, в неоднородности удерживающей способности аппарата по зонам, в случайном характере распределения потоков фаз по рабочему объему аппарата. Неоднородности гидродинамической обстановки в объеме аппарата, неравномерность и случайный характер распределения материальных и тепловых потоков в нем, различия физико-химических свойств реакционной среды особенно характерны для проточных аппаратов с механическим подводом энергии.

В связи с этим большое распространение получили модели, рассмотренные нами в предыдущем разделе. Эти модели не учитывают возможность возникновения колебаний параметров работы аппарата, отражающих их случайные изменения. Эти ограничения снимаются, если переходить к вероятностным моделям. Использование теории вероятностей в ее классической форме приводит к описанию независимых в данный момент или период времени явлений. Для описания процессов как последовательности явлений во времени были разработаны соответствующие разделы теории вероятности. Последовательности взаимозависимых случайных явлений во времени называются стохастическими процессами. Модели, при построении которых описываются и анализируются явления реального мира в предположении, что они представляют собой стохастические процессы, называются стохастическими моделями.

К стохастическим моделям можно отнести модели, построенные с использованием математического аппарата цепей Маркова. Чтобы дать общее представление о марковских процессах, запишем уравнение, построенное на основе баланса физических явлений, приводящих протекание процесса в аппарате к определенному состоянию Q , и явлений, уводящих процесс из этого состояния. Очевидно, что

$$\frac{d}{d\tau}P(Q, \tau) = R_+(Q) - R_-(Q),$$

где $R_+(Q)$ – член, соответствующий переходам в состояние Q в единицу времени; $R_-(Q)$ – член, соответствующий уходам из состояния Q в единицу времени.

При эксплуатации аппарата или машины имеют место флуктуации параметров его работы (гидродинамических, кинетических, структурных), представляющих собой локальные события, имеющие определенные пространственные и временные масштабы. Если предположить, что переходы осуществляются благодаря флуктуациям, то можно ожидать, что скорости перехода будут зависеть только от некоторого состояния Q и смежных с ним состояний. Считается, что процесс последовательных переходов, обусловленных флуктуациями, сохраняет память лишь о последнем переходе. В рамках этого условия определяется

чрезвычайно важный класс процессов, известных под названием марковских. Эти процессы обладают важным свойством – они необратимы во времени.

Приведем примеры некоторых стохастических процессов химической технологии. Для начала рассмотрим простейший пример, имеющий в основном методологический характер.

Нас интересует, будет ли в определенное время (день, смену, час, минуту) работать некоторый аппарат или же он будет простаивать, например вследствие ремонта. Изменение возможно всегда в конце рассматриваемой единицы времени. Например, утром аппарат проверяется с точки зрения его исправности. Проверка повторяется на следующий день. Выявляются два возможных состояния аппарата – эксплуатация и ремонт, – которые исключают друг друга. Они всегда возникают в определенный момент (утром) и изменяются во времени дискретно. Эволюция рассматриваемой эксплуатации аппарата определяется только его состоянием в предшествующий момент и переход из состояния в состояние осуществляется в дискретные моменты времени. Такой процесс называется цепью Маркова. Следовательно, перед нами следующая последовательность состояний – *эксплуатация* (Э) и *ремонт* (Р): ЭЭРЭЭЭЭЭР РРЭЭРЭРЭЭР.

Как указывается в учебниках по теории вероятности, такую последовательность можно получить при бросании монеты. Если при бросании монеты можно предположить, что следующие друг за другом испытания независимы, то в нашем примере следует скорее считать, что между последовательными состояниями существует определенная связь. Эта связь может распространяться как на одно, так и на несколько предшествующих состояний. Чтобы проследить ее, нужно изучить условные относительные частоты. Их условность определяется предшествующим состоянием. Эти частоты представляют собой средство для изучения условных вероятностей. С этой целью рассмотрим таблицу частот (табл. 1.1.3). Таблица получена следующим образом: за 100% было принято число случаев, которым на n -м шаге соответствует состояние Э в предположении, что на $(n+1)$ -м шаге в 57% случаев опять произошло событие Э и в 43% случаев – событие Р. Подобным же образом составлена вторая строка таблицы: если на n -м шаге имело место событие Р, то в 71% случаев на $(n+1)$ -м шаге произошло Э, и в 29% случаев произошло Р.

Таблица 1.1.3

Частота возможных событий

Ситуация (состояние) в «период» (на шаге) n	Ситуация (состояние) в «период» (на шаге) $n+1$	
	Э (1)	Р (2)
Э (1)	57	43
Р (2)	71	29

Анализ процесса с помощью условных частот позволяет более глубоко изучить явления по сравнению с констатацией частот состояний *ремонт* и *эксплуатация*.

Приведенный пример показывает, что для изучения явлений, которые имеют вероятностный характер и изменяются во времени, можно применить модели с условными вероятностями. В этих моделях предполагается, что для описания процесса помимо всего прочего необходимо знать систему условных вероятностей. В нашем примере это система (или матрица) вида

$$\|P\| = \begin{vmatrix} p_{11} & p_{12} \\ p_{21} & p_{22} \end{vmatrix},$$

где p_{11} означает вероятность события Э на $(n+1)$ -м шаге в предположении, что на n -м шаге также имело место событие Э, и т. д., временно будем предполагать, что условные вероятности, называемые также вероятностями перехода, постоянны, т.е. не меняются от шага к шагу.

Вероятности перехода не могут быть произвольными: должны выполняться условия $p_{11} + p_{12} = 1$, $p_{21} + p_{22} = 1$, так как если на шаге n произошло событие Э, то обе возможности – сохранение того же состояния или переход к состоянию Р – исчерпывают список событий и сумма их вероятностей равна единице.

Следовательно, систему вероятностей перехода достаточно описать двумя величинами, которые можно выбирать. Поэтому иногда матрица вероятностей перехода для подобных задач записывается в виде

$$\|P\| = \begin{vmatrix} 1-\lambda & \lambda \\ \mu & 1-\mu \end{vmatrix},$$

где $0 \leq \lambda \leq 1$ и $0 \leq \mu \leq 1$.

Если известно, с какого состояния начался процесс (т.е. начался ли он с состояния Р и, следовательно, вероятность этого состояния в начальный момент равна 1, так что вероятность другого состояния 0, либо заданы вероятности состояний в начальный момент времени), тогда можно с помощью исходных и условных вероятностей определить вероятности появления события на каждом последующем шаге. Это означает, что если мы находимся на 0-м шаге (в момент 0) в состоянии Р, то вероятность этого события записывается как $p_2(0)$; если этим состоянием будет Э, то пишем $p_1(0)$. На 1-м шаге (в момент 1) можно оказаться в состоянии Э или в результате того, что мы оставались в нем, или путем перехода от состояния Р к состоянию Э. Формально это записывается так: $p_1(1) = p_1(0)p_{11} + p_2(0)p_{21}$. Вероятность $p_1(1)$ называется также абсолютной вероятностью события Э после одного шага. Аналогичным образом можно выписать вероятность события Р после $(n+1)$ -го шага. Эту операцию можно записать не только для перехода от момента 0 к моменту 1, но и для общего случая перехода от момента n к моменту $n+1$ в виде $p_1(n+1) = p_1(n)p_{11} + p_2(n)p_{21}$.

С помощью стохастической модели можно изучать свойства моделируемого процесса. В модели не были учтены некоторые факторы. Мы не могли их тщательно изучить или они вообще нам неизвестны, и было решено считать их не-

существенными при описании аналогичного явления. В нашем случае мы временно согласились с тем, что наши знания определяются системой условных вероятностей, которые зависят только от предшествующего состояния.

Предполагалось, что условные вероятности не меняются от шага к шагу (во времени). Если представить себе работу некоторого аппарата, который изнашивается, то по мере его старения условные вероятности будут, разумеется, изменяться в зависимости от срока службы. В этом случае можно говорить о неоднородном процессе. Подробное определение неоднородных процессов будет дано ниже. Сейчас же достаточно указать на возможность изменения системы по мере ее старения.

Остановимся также на возможной классификации состояний изучаемой модели. Если переходные вероятности p_{ij} ($i, j = 1, 2$) ненулевые, то появление каждого состояния в любой момент времени имеет ненулевую вероятность. Следовательно, состояния будут чередоваться во времени. Такие состояния называются рекуррентными (возвратными).

Рассмотренные модели могут применяться для описания систем, в которых изменения происходят в следующие друг за другом дискретные моменты времени. В действительности реальный технологический процесс не всегда идет в соответствии с такой моделью. При этом он протекает в течение достаточно больших интервалов времени в относительно постоянных условиях, что и позволяет применять модель.

Предположим, что одно состояние не позволяет вернуться к предыдущему. Понятно, что вероятность остаться в нем равна 1. Если переходы повторяются в течение некоторого периода, то опять можно интуитивно предположить, что вероятность состояния, к которому нет переходов, будет все меньшей. Можно говорить о транзитивном (переходном) и абсорбционном (поглощающем) состоянии. Модель будет иметь следующий вид:

$$\begin{vmatrix} p_{11} & p_{12} \\ 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

Состояние 1 будет транзитивным, 2 – абсорбционным. Эту модель можно интерпретировать так: имеем некоторые совокупности элементов, часть которых может функционировать, а другие – бездействуют (поломка оборудования). Неисправные элементы не могут вернуться к исходному состоянию, так что система постепенно прекращает функционирование.

Процессы с числом состояний больше двух. Естественно желание учитывать большее количество возможностей расширять число изучаемых состояний. Приведем пример системы условных вероятностей, которая была получена при анализе работы аппарата в периодическом режиме. Наблюдение осуществлялось сначала в один, затем в другой момент времени. Для состояний *работа*, *разгрузка*, *промывка* и *загрузка* была получена следующая система (округленных) относительных частот, аппроксимирующих переходные вероятности (табл. 1.1.4).

Таблица 1.1.4

Возможные частоты процесса с четырьмя состояниями

Содержание состояния	Номер состояния	Состояние в момент времени $n+1$			
		1	2	3	4
Работа	1	0,7	0,05	0,2	0,05
Разгрузка	2	0,3	0,05	0,55	0,1
Промывка	3	0,15	0	0,05	0,8
Загрузка	4	0,2	0	0	0,8

За исключением некоторых случаев, обусловленных округлением до нуля, возможны все переходы, причем всегда с разными вероятностями. Например, из состояния *работа* аппарат переходит к другим состояниям, как правило, через состояние *загрузка*.

Большие системы с ограниченными возможностями перехода. Разработка больших систем связана с трудностями определения вероятностей перехода. Можно точно разбить на ячейки аппарат, состоящий из отдельных секций (колонный аппарат), но трудно их выделить, если обрабатываемая среда представляет собой единое целое (смеситель). Встречаются трудности и вычислительного характера. Например, нужно рассчитать абсолютную вероятность некоторых состояний. Здесь необходимо решать большие системы уравнений. Уже сам анализ условий существования решения может представить сложную задачу. Поэтому целесообразно строить простые модели. В ряде случаев оказывается, что приблизиться к описанию действительности можно в результате изучения переходов лишь между соседними состояниями. В таком случае появляется возможность более подробно исследовать эти состояния.

Например, при описании работы тарельчатой сушилки можно предположить, что переход дисперсного материала возможен только между соседними тарелками. Такая модель хорошо описывает действительность. Переход дисперсного материала, минуя соседнюю (верхнюю или нижнюю) тарелку, маловероятен. Для большинства типов тарелок им можно пренебречь.

Пусть переходы осуществляются лишь между соседними состояниями системы в дискретные моменты времени. Для создания простой модели движения дисперсного материала в тарельчатой сушилке, например с пятью тарелками, можно записать матрицу вероятностей перехода, имеющую элементы по трем диагоналям. Пусть α обозначает вероятность перехода дисперсного материала с нижележащей тарелки на вышележащую тарелку. Вероятность перехода жидкости с вышележащей тарелки на нижележащую обозначим β . Вероятности остаться на соответствующей тарелке обозначим $1-\alpha$, $1-\beta$, $1-\alpha-\beta$. С учетом принятых обозначений матрица переходных вероятностей будет иметь следующий вид:

$$|P| = \begin{matrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \end{matrix} \begin{bmatrix} 1-\alpha & \alpha & 0 & 0 & 0 \\ \beta & 1-\alpha-\beta & \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 1-\alpha-\beta & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \beta & 1-\alpha-\beta & \alpha \\ 0 & 0 & 0 & \beta & 1-\beta \end{bmatrix}.$$

Понятно, что колонна может иметь гораздо большее число состояний (тарелок). Дисперсный материал с нижней тарелки должен уходить из аппарата. Должно быть добавлено абсорбционное состояние, которое отражает выход дисперсного материала из аппарата. Жидкость также должна поступать на первую тарелку, и в модели необходимо добавить состояние, из которого осуществляется данный переход. Перечисленные добавления не меняют общую структуру матрицы переходных вероятностей. Вероятности перехода не обязательно должны быть постоянными. Они могут меняться во времени и в зависимости от состояния, в котором находится система.

Следующий класс моделей, в которых наряду с переходом между соседними состояниями возможно ограниченное число других переходов, описывает рециркуляцию дисперсного материала в аппарате. Приведем пример такой простой модели. Обозначим вероятность перехода между отдельными близлежащими ячейками аппарата через α , а вероятность возврата дисперсного материала с последней ячейки в первую через β . Вероятности перехода можно записать в виде

$$|P| = \begin{matrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ S_4 \\ S_5 \end{matrix} \begin{bmatrix} 1-\alpha & \alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-\alpha & \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 1-\alpha-\beta & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \beta & 1-\alpha-\beta & \alpha \\ \beta & 0 & 0 & 0 & 1-\beta \end{bmatrix}.$$

Рециркуляция обрабатываемого материала в аппарате является важным технологическим приемом, позволяющим повысить эффективность его работы. Рециркуляция снижает вероятность выхода дисперсного материала из аппарата без необходимой его обработки.

Системы с поглощающими состояниями. Элементарную матрицу с одним поглощающим состоянием мы уже приводили. Расширим систему, включив еще одно состояние. Теперь имеем следующие состояния: работающие аппараты, ремонтируемые аппараты и аппараты, вышедшие из строя. Матрица строится так:

$$|P| = \begin{matrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{matrix} \begin{bmatrix} p_{aa} & p_{ai} & p_{az} \\ p_{ia} & p_{ii} & p_{iz} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Приведенные вероятности перехода будут изменяться во времени. Вероятности выхода из строя будут расти по мере увеличения срока службы аппарата. Переходные вероятности будут зависеть и от того, с какого момента мы начинаем изучать поведение совокупности аппаратов, образующих производство. Независимость от срока службы может проявляться для некоторого небольшого интервала времени. Например, интенсивный износ оборудования начинается после определенного периода эксплуатации. Если изучается помес-
 сячное изменение состояния аппарата (эксплуатация, ремонт, авария), то для аппаратов одного возраста зависимость от времени можно не учитывать.

Дальнейшее упрощение модели произойдет в том случае, если система не допускает обратных переходов. Например, изготовление детали из заготовки происходит в результате выполнения отдельных технологических операций. Изготовление на отдельных операциях может заканчиваться, повторяться, но никогда не возвращается на предыдущую операцию. Нужно отобразить структуру изготовления. Переходы возможны лишь в результате прекращения изготовления (с вероятностью p) или перехода к следующей операции (с вероятностью r), обратного пути нет. Отдельные операции повторяются с вероятностью q . Для простоты предположим, что условные вероятности не меняются в зависимости от типа технологической операции.

Примем обозначения: S_1 – первая технологическая операция, S_2 – вторая, S_5 – окончание изготовления в результате разбраковки детали, S_6 – успешное завершение изготовления и отправка детали на склад готовой продукции.

Матрица вероятностей перехода выглядит следующим образом:

$$|P| = \begin{matrix} & \begin{matrix} S_1 & S_2 & S_3 & S_4 & S_5 & S_6 \end{matrix} \\ \begin{matrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ S_4 \\ S_5 \\ S_6 \end{matrix} & \begin{bmatrix} q & r & 0 & 0 & p & 0 \\ 0 & q & r & 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & q & r & p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & q & p & r \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{matrix}.$$

Прекращение изготовления детали может быть либо в результате его завершения, либо в результате брака на некоторой технологической операции. После попадания детали в пятое состояние деталь из процесса изготовления выбывает. В шестое состояние деталь может попасть, только пройдя все технологические операции. Состояния S_5 и S_6 будут поглощающими. Нумерацию состояний можно как угодно изменить. Часто по формальным соображениям выбирается такой подход, при котором единичная подматрица находится в левом верхнем углу. В нашем случае состояния нумеровались бы так, что S_1 – окончание, S_2 – склад, S_3 – четвертая технологическая операция, S_4 – третья, S_5 – вторая, S_6 – первая. Матрица переходных вероятностей имеет вид

$$|P| = \begin{matrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ S_4 \\ S_5 \\ S_6 \end{matrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ p & r & q & 0 & 0 & 0 \\ p & 0 & r & q & 0 & 0 \\ p & 0 & 0 & r & q & 0 \\ p & 0 & 0 & 0 & r & q \end{bmatrix}.$$

Настоящая модель позволяет рассчитать количество бракованных и хороших деталей в зависимости от особенностей работы отдельных технологических операций (численных значений вероятностей перехода).

Процесс с непрерывным временем. В некоторых рассмотренных примерах, иллюстрировавших движение дисперсного материала между тарелками сушилки, предположение о дискретном во времени изменении не является до конца оправданным. Иногда целесообразно предположить, что моменты, в которых осуществляются переходы, приближаются к нулю. Вероятности перехода при этом также становятся близкими к нулю. Предположим, однако, что существуют пределы выражений $p_{ij}(\tau, \tau + \Delta\tau)/\Delta\tau = a_{ij}$, которые называются интенсивностями перехода. Если $i = j$, то есть смысл требовать существования предела выражения $(1 - p_{ii}(\tau, \tau + \Delta\tau))/\Delta\tau = a_{ii}$, при незначительном изменении времени почти достоверным становится сохранение состояния i . Поэтому к нулю стремится выражение $1 - p_{ij}(\tau, \tau + \Delta\tau)$.

Вернемся к примеру с двумя состояниями. В этом примере существуют четыре вероятности, которые попарно связаны между собой. С учетом принятых обозначений запишем вероятности перехода (от момента τ до момента $\tau + \Delta\tau$) следующим образом:

$$\begin{bmatrix} 1 - a_{12}(\tau)\Delta\tau & a_{12}(\tau)\Delta\tau \\ a_{21}(\tau)\Delta\tau & 1 - a_{21}(\tau)\Delta\tau \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \Delta\tau \begin{bmatrix} -a_{12}(\tau) & a_{12}(\tau) \\ a_{21}(\tau) & -a_{21}(\tau) \end{bmatrix}.$$

Для вероятности некоторого события i , произошедшего в момент времени $\tau + \Delta\tau$, абсолютная вероятность $p_i(\tau + \Delta\tau)$ определяется выражением

$$p_i(\tau + \Delta\tau) = \sum_{j=1,2,\dots} p_j(\tau) p_{ji}(\tau). \text{ В нашем случае мы имеем:}$$

$$p_1(\tau + \Delta\tau) = p_1(\tau) - p_1(\tau)a_{12}(\tau)\Delta\tau + p_2(\tau)a_{21}(\tau)\Delta\tau,$$

$$p_2(\tau + \Delta\tau) = p_2(\tau) + p_1(\tau)a_{12}(\tau)\Delta\tau - p_2(\tau)a_{21}(\tau)\Delta\tau.$$

Так как

$$\lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{p_i(\tau + \Delta\tau) - p_i(\tau)}{\Delta\tau} = p'_i(\tau),$$

то можно записать:

$$p'_1(\tau) = -p_1(\tau)a_{12}(\tau) + p_2(\tau)a_{21}(\tau), \quad p'_2(\tau) = p_1(\tau)a_{12}(\tau) - p_2(\tau)a_{21}(\tau).$$

Величины $p_1(\tau)$ и $p_2(\tau)$ можно определить в результате решения двух приведенных выше дифференциальных уравнений.

Интенсивность a_{ij} в ряде практически интересных случаев можно считать постоянной. Если абсолютные вероятности $p_i(\tau)$ не зависят от времени (в результате того, что процесс уже стабилизировался), то производные равны нулю. Поэтому для величины $p_i(\tau) = \text{const}$ получим два уравнения, из которых одно лишнее, поскольку $p_1(\tau) + p_2(\tau) = 1$.

Рассмотрим еще случай, когда состояние $p_2(\tau)$ будет поглощающим. При этом величина $a_{21}(\tau)$ равна нулю. Для $p_1(\tau)$ (в предположении, что $a_{21}(\tau)$ не зависит от времени) получим $p_1'(\tau) = -a_{12}p_1(\tau)$ или $p_1(\tau) = k \exp(-a_{12}\tau)$.

Приведенные примеры, с помощью которых мы стремились наметить подход к описанию процессов с непрерывным временем, аналогичны процессам с дискретным временем. Применительно к ним не нужно вводить новых понятий. При изучении процессов с непрерывным и дискретным временем использовались состояния, определяемые конечной или счетной последовательностью значений параметра, например последовательностью целых (положительных) чисел. Параметр, которым описывались эти состояния, представлял собой дискретно изменяющуюся величину. Возможны также процессы, где изменение состояния описывается непрерывным параметром. Так можно описать диффузионные процессы. Аналитические решения таких моделей очень сложны и не всегда возможны. При получении решения с использованием ПЭВМ осуществляется переход к дискретному описанию процесса. Такой переход целесообразно осуществить уже на стадии построения модели, что делает ее достаточно простой и понятной.

Понятие цепи Маркова. Под стохастическим процессом будем понимать последовательность случайных переменных $\{X(\tau)\}$, которые соответствуют определенным значениям времени τ . Случайные переменные могут принимать значения, которые изменяются дискретно или непрерывно. Аналогично время τ также может изменяться дискретно или непрерывно.

Стохастический процесс можно описать распределением вероятности случайных переменных $X(\tau_i)$. С помощью функции распределения это можно сделать следующим образом:

$$F[X(\tau_1), X(\tau_2), \dots, X(\tau_n), x_1, x_2, \dots, x_n] = P[X(\tau_1) \leq x_1, X(\tau_2) \leq x_2, \dots, X(\tau_n) \leq x_n].$$

Функция распределения равна вероятности того, что случайные переменные $X(\tau_i)$ не превышают x_i . Процесс определен, если дана n -мерная функция распределения для каждого конечного множества величин τ_1, \dots, τ_n . Процесс можно описать также с помощью условных вероятностей. Условная вероятность того, что случайная переменная $X(\tau_n)$ будет равна x_n в предположении, что случайные переменные $X(\tau_{n-1}), \dots, X(\tau_1)$ будут иметь значения x_{n-1}, \dots, x_1 , записывается следующим образом: $F[X(\tau_n) = x_n | X(\tau_{n-1}) = x_{n-1}, \dots, X(\tau_1) = x_1]$. Значения случайных переменных соответствуют состояниям: в момент τ_1 может произойти одно из событий i_1, i_2, \dots, i_{N_1} , в момент τ_2 — одно из событий i_1, i_2, \dots, i_{N_2} .

В дальнейшем будет рассматриваться одно и то же множество состояний. В каждый момент оно будет состоять из событий i_1, i_2, \dots, i_N . Если состояния

пронумеровать числами $1, 2, \dots, N$, то случайная переменная $X(\tau_n)$ будет с некоторой вероятностью равна одному из них, например j_n . Тогда для вероятности можно записать $P[X(\tau_n) = j_n | X(\tau_{n-1}) = j_{n-1}, \dots, X(\tau_1) = j_1]$.

Можно говорить, что система в момент τ_n находится в состоянии j_n , если в предшествующие моменты она находилась в состояниях j_{n-1}, \dots, j_1 . Состояние системы обусловлено, последовательно, состояниями во всех предшествующих моментах времени. Можно говорить также о системе с $(n-1)$ -кратной связью.

На практике изучать процессы с такой сложной связью трудно. Поэтому применяется ряд упрощающих предположений. Важнейшее из них состоит в том, что для описания процесса достаточно прибегнуть к простой связи.

Процессы с простой связью, протекающие в дискретном времени, называются процессами Маркова или цепями Маркова. Для цепи Маркова можно записать

$$P[X(\tau_n) = j_n | X(\tau_{n-1}) = j_{n-1}, \dots, X(\tau_1) = j_1] = P[X(\tau_n) = j_n | X(\tau_{n-1}) = j_{n-1}].$$

Состояние системы в момент τ_n зависит лишь от состояния в момент τ_{n-1} , т. е. $P[j, \tau_n | i, \tau_{n-1}]$. Цепь описывается условными вероятностями, означающими, что если система в момент τ_{n-1} была в состоянии i , то в момент τ_n она будет в состоянии j .

Эти вероятности называются переходными. Они зависят от параметров τ_n, τ_{n-1} . Эти вероятности можно представить как зависимость от определенного параметра τ_{n-1} (исходного момента) и от разности $\tau_n - \tau_{n-1}$ (между двумя моментами времени).

Если вероятности перехода не зависят от начального момента времени, а зависят лишь от числа шагов, то цепь будет однородной. В противном случае получим неоднородную цепь. Неоднородные цепи описывают физико-химические процессы, когда параметры состояния системы меняются во времени. При моделировании структуры потоков в аппарате можно ограничиться однородными процессами и цепями.

При рассмотрении однородных цепей интервалы времени, в течение которых происходят переходы, обычно принимаются равными. В этом случае величины τ_i путем изменения масштаба могут быть приведены к значениям ряда натуральных чисел $0, 1, \dots, n, \dots$. Вероятности перехода из состояния i в состояние j в однородной цепи для одного периода обозначаются через p_{ij} и образуют переходную матрицу

$$|P| = \begin{vmatrix} p_{11} & p_{12} & \dots & p_{1N} \\ p_{21} & p_{22} & \dots & p_{2N} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ p_{N1} & p_{N2} & \dots & p_{NN} \end{vmatrix}.$$

Для отдельных вероятностей имеем

$$0 \leq p_{ij} \leq 1, \quad \sum_{j=1}^N p_{ij} = 1.$$

Число состояний N будет считаться конечным.

В дальнейшем будем использовать однородные конечные цепи Маркова. Поэтому рассмотрим некоторые основные задачи, относящиеся к этим цепям, хотя их можно распространить и на самые общие случаи. Для нас представляют интерес следующие задачи:

При каких условиях цепь определена, т. е. исходя из какой основной информации можно получить все другие данные о любой ситуации в системе?

Каково распределение вероятности после некоторого числа переходов n (задача абсолютных или безусловных вероятностей) и приближается ли она с ростом n к некоторому предельному распределению (задача стабилизации системы)?

Каковы вероятности перехода из состояния i в состояние j на n -шаге?

Решение этих задач позволяет перейти к более глубокому изучению цепей. С их помощью можно осуществить классификацию отдельных состояний и исследовать разные виды средних величин.

Если есть правило, с помощью которого можно определить вероятность последовательности событий j_0, j_1, \dots, j_n (являющихся реализацией цепи) в моменты $0, 1, \dots, n$, то цепь определена. На основе теоремы условных вероятностей имеем $P(j_n, j_{n-1}, \dots, j_1, j_0) = P(j_n | j_{n-1}, \dots, j_1, j_0)$. Для цепи Маркова получим $P(j_n | j_{n-1}, \dots, j_1, j_0) = p_{n-1,n}$. Следовательно, можно записать $P(j_n, j_{n-1}, \dots, j_1, j_0) = p_{n-1,n} P(j_{n-1} | j_{n-2}, \dots, j_1, j_0)$. Аналогично выводятся все последующие вероятности. Окончательно получим

$$P(j_n, j_{n-1}, \dots, j_1, j_0) = p_{n-1,n} \cdot p_{n-2,n-1} \cdots p_{1,2} \cdot p_{0,1}.$$

Каждая из величин $p_{n-1,n}, p_{n-2,n-1}, \dots, p_{1,2}, p_{0,1}$ представляет собой условную вероятность некоторого события (из данного множества событий $1, 2, \dots, N$) в предположении, что в предшествующий момент произошло другое событие, принадлежащее этому множеству. Эти вероятности и составляют переходную матрицу. Так, p_{j_0} есть вероятность некоторого события из данного множества в начале процесса. Перебирая $j_0 = 1, 2, \dots, N$, получим элементы исходного распределения вероятности. Для определения вероятности последовательности событий j_0, j_1, \dots, j_N достаточно иметь исходное распределение вероятности и матрицу переходных вероятностей.

Основное уравнение цепей Маркова. Цепь Маркова определяется распределением вероятностей в некоторый момент и матрицей переходных вероятностей. Для упрощения предположим, что известно распределение вероятностей в нулевой момент (в начале процесса). Распределение вероятностей по прошествии одного периода (одного шага) определяется с учетом возможных исходных состояний, из которых осуществляется переход к одному общему состоянию. Для распределения вероятностей в первый момент времени получим

$$p_i(1) = p_1(0)p_{1i} + p_2(0)p_{2i} + \dots + p_N(0)p_{Ni} = \sum_{j=1}^N p_j(0)p_{ji}.$$

Отдельные элементы вектора исходных вероятностей умножаются на элементы первого столбца матрицы переходных вероятностей. Для вектора $\bar{p}(1)$, т. е. вероятности отдельных событий после одного периода, имеем в матричной форме $\bar{p}(1) = \bar{p}(0)\bar{P}$.

Вектор исходных вероятностей умножается справа на матрицу переходных вероятностей. Говоря о векторах, мы имеем в виду строки. Можно использовать и столбец, который слева умножается на транспонированную матрицу. Этот случай не находит широкого практического применения. На следующем шаге получим для вектора абсолютных вероятностей $\bar{p}(2) = \bar{p}(1)\bar{P}$. По прошествии n периодов времени (шагов, переходов) будем иметь $\bar{p}(n) = \bar{p}(n-1)\bar{P}$. Если вместо вероятности $\bar{p}(n-1)$ подставить $\bar{p}(n-1) = \bar{p}(n-2)\bar{P}$ и т. д., то в итоге получаем

$$\bar{p}(n) = \bar{p}(1)\bar{P}^n.$$

Данная формула позволяет поставить интересный вопрос. Существует ли такое распределение вероятностей, которое не изменяется при изменении n , другими словами, существует ли стационарное распределение вероятностей? Для этого распределения система однородных уравнений $p = p\bar{P}$, где $p(\bar{I} - \bar{P}) = 0$, должна иметь решение, т. е. определитель $\det[\bar{I} - \bar{P}] = 0$. Это условие для стохастической матрицы \bar{P} выполняется, так как сумма элементов строки равна единице. Система имеет бесконечно много решений, но мы выбираем то, для которого $\sum_{i=1}^N p_i = 1$.

Если существует предельное распределение $\lim_{n \rightarrow \infty} [\bar{p}(n)]$ (разумеется, такое же распределение имеет $\lim_{n \rightarrow \infty} [\bar{p}(n-1)]$, и оно равно \bar{p}), то оно будет стационарным.

Если цепь имеет предельное распределение с ненулевыми вероятностями для всех событий, то при достаточной продолжительности процесса каждое событие произойдет хотя бы один раз. Практически система и при меньшем числе состояний достигнет распределения, близкого к предельному состоянию, уже после 5–10 шагов. В этом случае говорят, что система стабилизируется (переходит в установившийся режим).

Уравнение Чапмана–Колмогорова. Наряду с абсолютными вероятностями нас интересуют вероятности перехода из состояния i в состояние j через n шагов, т. е. переходная вероятность по прошествии произвольного числа шагов, которая обозначается $p_{ij}^{(n)}$. Для их определения применим следующий подход. Найдем вероятность того, что система в нулевой момент будет в состоянии i , по прошествии n_1 периодов – в состоянии k , а спустя еще n_2 периодов – в со-

стоянии j . Так как процесс имеет простую связь, то $P(i, k, j; 0, n_1, n_1 + n_2) = p_i(0) p_{ik}^{(n_1)} p_{kj}^{(n_2)}$.

Чтобы рассчитать вероятность $P(i, j; 0, n_1, n_1 + n_2)$, просуммируем все $P(i, k, j; 0, n_1, n_1 + n_2)$ по k и получим $\sum_k P(i, k, j; 0, n_1, n_1 + n_2) = P(i, j; 0, n_1 + n_2)$. Так

как одновременно $P(i, j; 0, n_1 + n_2) = p_i(0) p_{ij}^{(n_1 + n_2)}$, то можно записать

$$p_{ij}^{(n_1 + n_2)} = \sum_k p_{ik}^{(n_1)} p_{kj}^{(n_2)}.$$

Тем самым получена формула Чапмена–Колмогорова. При $n_1 = n_2 = 1$ будем иметь выражение, определяющее элементы матрицы, являющейся произведением двух матриц вероятностей перехода, т. е. $[p_{ij}^{(2)}] = P^2$.

Вероятности перехода за n шагов из состояния i в состояние j определяются элементами матрицы \bar{P}^n . Этот вывод соответствует правилу, полученному при изучении абсолютных вероятностей. Диагональные элементы матрицы \bar{P}^n дают вероятности $p_{ii}^{(n)}$ возврата к тому же состоянию после n шагов.

Классификация цепей Маркова. Вероятности $p_{ii}^{(n)}$ могут использоваться для определения возможности возвращения в состояние i после того, как было проведено большое число шагов n , т. е. определения, имеет ли $p_{ii}^{(n)}$ при росте n предел, отличный от нуля, а также для проверки того, насколько эта возможность в смысле вероятности близка к нулю. В первом случае речь идет о *возвратных (рекуррентных)*, а во втором – о *невозвратных (транзитивных)* состояниях. Рекуррентные состояния могут быть таковы, что возврат к исходному состоянию может произойти или через любое число шагов, или же лишь по прошествии конечного или бесконечного числа шагов. В первом случае мы имеем *эргодические*, во втором – *периодические*, в третьем – *нулевые рекуррентные* состояния.

Вероятности перехода за n шагов $p_{ij}^{(n)}$ позволяют, кроме того, различать *достижимые* и *недостижимые* состояния. К состоянию j можно прийти от состояния i , если $p_{ij}^{(n)} > 0$, т. е. если существуют ненулевые вероятности перехода из состояния i в состояние j по прошествии n шагов. В противном случае состояние j недостижимо из состояния i . Взаимно достижимые состояния называются *последовательными (сообщающимися)*.

Совокупность сообщающихся состояний называется *замкнутой (изолированной, эквивалентной) группой*. Если цепь имеет одну такую группу, она называется *неразложимой (неприводимой)*. Если все состояния цепи образуют одну замкнутую группу и являются эргодическими, то цепь называется *регулярной*. Если для одного или нескольких состояний $p_{ii} = 1$ (сохранение состояния i достоверно) и к ним есть переход, то система постепенно задерживается в этом состоянии. В этом случае говорят о *поглощающих (абсорбционных)* состояниях.

Остальные состояния обязательно должны быть транзитивными, так как постепенно их вероятности приближаются к нулю.

Рассмотрим теперь раскладываемые цепи. Если цепь *раскладываемая*, то это означает, что можно, перенумеровав состояния в переходной матрице, получить нулевые подматрицы. Этим путем получим либо матрицу

$$\bar{P} = \begin{vmatrix} \bar{P}_1 & \bar{O} \\ \bar{O} & \bar{P}_2 \end{vmatrix},$$

где \bar{P}_1, \bar{P}_2 – квадратные матрицы, либо матрицу

$$\bar{P} = \begin{vmatrix} \bar{Q} & \bar{O} \\ \bar{R} & \bar{S} \end{vmatrix},$$

где \bar{Q}, \bar{S} – также квадратные матрицы.

К основным понятиям, которые будут применяться в дальнейшем, относится также *вероятность первого перехода*. Речь идет о вероятности того, что через n шагов после начала процесса из состояния i впервые появится состояние j :

$$\pi_{ij}^{(n)} = P[X(\tau_n) = j, X(\tau_l) \neq j, l = 1, 2, \dots, n-1 | X(\tau_0) = i].$$

Для $i = j$ можно говорить о вероятности первого возвращения.

Изложенный материал позволяет ознакомиться с основами теории цепей Маркова. Для их практического разрешения возможны два пути. Первый предполагает аналитическое решение задачи с последующим теоретическим анализом результатов решения. Аналитические решения возможны только для самых простых однородных цепей. Второй путь предполагает непосредственное моделирование марковского процесса с использованием ПЭВМ. В этом случае мы переходим к рассмотрению процессов с непрерывным временем.

Свойства процессов с непрерывным временем. Если предположить, что переходы между состояниями могут осуществляться за как угодно малые интервалы времени, то можно описать изменение в непрерывном времени. Основное свойство цепи Маркова – появление некоторого события – зависит лишь от появления события, непосредственно предшествующего первому из них. Если сохранить основное свойство цепи Маркова, то можно говорить о процессе Маркова с непрерывным временем, или просто о процессе Маркова.

Случайные переменные $X(\tau)$ снова получают значения, приписываемые отдельным состояниям. В момент τ_i может наступить одно из состояний i_1, i_2, \dots, i_N ; моменты $\tau_i, \tau_{i+1}, \dots$ различаются на величину $\Delta\tau$, стремящуюся к нулю. С помощью процесса Маркова можно описать явления, в которых изменения происходят в любые моменты времени. Например, дисперсная частица, попавшая в аппарат, может находиться в любой его зоне и непрерывно осуществлять переходы из одной его зоны в другую.

Если изменения происходят в моменты, различающиеся по времени на $\Delta\tau$, то для этого интервала и нужно определять вероятность перехода. Изменяются и вероятности перехода при стремлении $\Delta\tau$ к нулю. Для описания этих изменений следует предположить существование пределов:

$$\lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{p_{ij}(\tau, \tau + \Delta\tau)}{\Delta\tau} = \mu_{ij}(\tau) \geq 0; \quad i \neq j; \quad \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{1 - p_{jj}(\tau, \tau + \Delta\tau)}{\Delta\tau} = \mu_{jj}(\tau) \geq 0.$$

Первый из них представляет интенсивность вероятности перехода из состояния i в состояние j . Второй – интенсивность выхода из состояния j . Матрицу переходных вероятностей, включающую условные вероятности состояний в момент $\tau + \Delta\tau$ при предположении появления определенных состояний в момент τ , можно записать в виде

$$P(\tau, \tau + \Delta\tau) = \begin{vmatrix} 1 - \mu_{11}(\tau)\Delta\tau & \mu_{12}(\tau)\Delta\tau & \dots & \mu_{1n}(\tau)\Delta\tau \\ \mu_{21}(\tau)\Delta\tau & 1 - \mu_{22}(\tau)\Delta\tau & \dots & \mu_{2n}(\tau)\Delta\tau \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mu_{n1}(\tau)\Delta\tau & \mu_{n2}(\tau)\Delta\tau & \dots & 1 - \mu_{nn}(\tau)\Delta\tau \end{vmatrix}. \quad (1.1.40)$$

Поскольку сумма элементов каждой строки равна единице $1 - \mu_{ii}(\tau)\Delta\tau + \sum_{j \neq i} \mu_{ij}(\tau)\Delta\tau = 1$, то $\mu_{ii}(\tau) = \sum_{j \neq i} \mu_{ij}(\tau)$. Обозначим матрицу интенсивностей вероятностей перехода $A(\tau) = |\mu_{ij}(\tau)|$.

Элементы по диагонали имеют знак *минус*. Она связана с матрицей переходных вероятностей $\bar{P}(\tau, \tau + \Delta\tau) = \bar{I} + \bar{A}(\tau)\Delta\tau$. Абсолютная вероятность равна $\bar{p}(\tau + \Delta\tau) = \bar{p}(\tau)\bar{P}(\tau, \tau + \Delta\tau)$. Если воспользоваться интенсивностями, то можно записать $[\bar{p}(\tau + \Delta\tau) - \bar{p}(\tau)]/\Delta\tau = \bar{p}(\tau)\bar{A}(\tau)$. Если записать предел при $\Delta\tau \rightarrow 0$, то получим $\bar{p}'(\tau) = \bar{p}(\tau)\bar{A}(\tau)$ или, перейдя снова к отдельным значениям, имеем

$$\frac{dp_i(\tau)}{d\tau} = \sum_{j=1}^N p_j(\tau)\mu_{ij}(\tau). \quad (1.1.41)$$

Системы дифференциальных уравнений (1.1.41) однозначно определяют соответствующие вероятности, если дано исходное состояние системы, интенсивности $\mu_{ij}(\tau)$ непрерывны и число состояний конечно.

Деление состояний на рекуррентные и транзитивные относится и к процессам Маркова. Если течение процесса не зависит от времени, прошедшего с его начала, то этот процесс будет снова однородным, в противном случае – неоднородным. Матрица интенсивностей перехода для однородного процесса с конечным числом состояний обозначается $\bar{A} \equiv |a_{ij}|$, где интенсивность a_{ij} не зависит от времени.

Однородные процессы Маркова. В случае постоянных интенсивностей переходных вероятностей абсолютная вероятность определяется по формуле

$$\bar{p}'(\tau) = \bar{p}(\tau)\bar{A}. \quad (1.1.42)$$

Это система дифференциальных уравнений для величин $p_i(\tau)$. Если применить функции от матриц, то приведенную формулу можно представить в виде $\frac{d}{d\tau} \ln \bar{p}(\tau) = \bar{A}$. Для решения уравнения получим $\ln \bar{p}(\tau) = \bar{A}\tau + c$, или $\bar{p}(\tau) = \bar{k} \exp\{\bar{A}\tau\}$. Для постоянной \bar{k} можно записать $\bar{k} = \bar{p}(0)$. Вероятность

$\bar{p}(\tau)$ с точностью до исходного вектора $\bar{p}(0)$ определяется степенным рядом. Нельзя ли, однако, простым способом выразить стационарную и транзитивную части абсолютных вероятностей?

Если принять в качестве примера матрицу интенсивностей перехода для двух состояний в виде

$$\bar{A} = \begin{vmatrix} -\alpha & \alpha \\ \beta & -\beta \end{vmatrix},$$

то в результате преобразований системы (1.1.42) получим

$$p(\tau) = p(0) \left[\begin{vmatrix} \beta & \alpha \\ \alpha + \beta & \alpha + \beta \end{vmatrix} + \exp\{-(\alpha + \beta)\tau\} \begin{vmatrix} \alpha & -\alpha \\ -\beta & \beta \end{vmatrix} \right].$$

Первая матрица в квадратных скобках включает векторы стационарных вероятностей. Если учесть, что стационарное распределение не зависит от времени τ , то из системы дифференциальных уравнений следует, что $\bar{p}'(\tau) = \bar{O} = \bar{p}\bar{A}$, где \bar{p} – вектор стационарных вероятностей. Поскольку между переходными вероятностями и интенсивностями существует соотношение $\bar{P} = \bar{I} + \bar{A}\Delta\tau$, то для вектора \bar{p} имеем $\bar{p}(\bar{I} - \bar{P})(\Delta\tau)^{-1} = 0$, а так как $\tau \neq 0$, то $\bar{p} = \bar{p}\bar{P}$.

Это система уравнений, с помощью которых с учетом условия (1.1.40) мы определяем стационарные вероятности в цепи Маркова. Следовательно, процессы с непрерывным и дискретным временем имеют одинаковые по форме предельные распределения. В качестве примеров рассмотрим системы, имеющие два состояния.

Двусторонняя реакция. Система может находиться в двух состояниях ω_1 и ω_2 (ω_1 – нераспавшаяся частица, ω_2 – распавшаяся). Пусть возможен как процесс распада – переход из ω_1 в ω_2 с вероятностью $\alpha\Delta\tau + o(\Delta\tau)$ за время $\Delta\tau$, так и процесс восстановления – переход из ω_2 в ω_1 с вероятностью $\beta\Delta\tau + o(\Delta\tau)$ за время $\Delta\tau$. Итак, в этом случае $A_{12} = \alpha$, $A_{21} = \beta$, а, стало быть, $A_{11} = -\alpha$, $A_{22} = -\beta$. Уравнения (1.1.41) дают

$$\frac{dp_1(\tau)}{d\tau} = -\alpha p_1(\tau) + \beta p_2(\tau), \quad \frac{dp_2(\tau)}{d\tau} = \alpha p_1(\tau) - \beta p_2(\tau).$$

Пусть задано начальное распределение вероятностей $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = 0$. Подставив в первое уравнение $p_2(\tau) = 1 - p_1(\tau)$, получим $dp_1(\tau)/d\tau = -(\alpha + \beta)p_1(\tau) + \beta$, или

$$p_1(\tau) = \exp\{-(\alpha + \beta)\tau\} + \frac{\beta}{\alpha + \beta} [1 - \exp\{-(\alpha + \beta)\tau\}],$$

$$p_2(\tau) = \frac{\alpha}{\alpha + \beta} [1 - \exp\{-(\alpha + \beta)\tau\}].$$

При $\tau \rightarrow \infty$ $p_1(\tau) = \beta/(\alpha + \beta)$, $p_2(\tau) = \alpha/(\alpha + \beta)$, т. е. процесс эргодичен. Если восстановление невозможно (например, радиоактивный распад), то $\beta = 0$ и $p_1(\tau) = \exp\{-\alpha\tau\}$, $p_2(\tau) = 1 - \exp\{-\alpha\tau\}$.

Двухпозиционное реле. Пусть двухпозиционное реле находится под воздействием случайной последовательности управляющих импульсов, имеющих с одинаковой вероятностью знаки «плюс» или «минус», причем положительный импульс создает или сохраняет состояние ω_1 , а отрицательный – состояние ω_2 . Тогда $A_{12} = A_{21} = \alpha$ и, значит, согласно (1.1.40) $A_{11} = A_{22} = -\alpha$. Это частный случай предыдущего примера: $\beta = \alpha$. Найдем переходные вероятности. Решая систему уравнений (1.1.42) с начальными условиями $p_{ik}(\tau_o) = \delta_{ik}$, $i, k = 1, 2$, получаем

$$p_{12}(\tau) = p_{21}(\tau) = \frac{1}{2}[1 - \exp\{-2\alpha(\tau - \tau_o)\}],$$

$$p_{11}(\tau) = p_{22}(\tau) = \frac{1}{2}[1 + \exp\{-2\alpha(\tau - \tau_o)\}].$$

При $\tau \rightarrow \infty$ вероятности перехода стремятся к значению $1/2$.

Часто изучаются процессы, в которых возможности перехода между состояниями ограничены лишь некоторыми из них. Тем самым исследование процесса настолько упрощается, что часто появляется возможность в явном виде выразить вероятности перехода. Если речь идет об аппроксимации действительности с помощью модели, на основе которой изучается поведение системы перед ее стабилизацией, то часто целесообразно абстрагироваться от некоторых аспектов процесса и упростить модель. Примем этот подход при рассмотрении нескольких типов таких моделей.

Процесс Пуассона. Наиболее простым случаем марковского процесса является процесс Пуассона. Речь идет о случае, когда изменения возможны лишь в результате перехода к ближайшему более высокому состоянию.

При этом учитываются предположения, что:

- вероятность перехода из состояния n к состоянию $n+1$ в интервале $(\tau, \tau + \Delta\tau)$ равна $\lambda\Delta\tau + O(\Delta\tau)$;
- вероятность остаться в этом же состоянии в момент $(\tau, \tau + \Delta\tau)$ равна $1 - \lambda\Delta\tau + O(\Delta\tau)$;
- вероятность остальных переходов в сравнении с указанными выше пренебрежимо мала, т. е. равна $O(\Delta\tau)$.

Величины $O(\Delta\tau)$ включают выражения порядка $(\Delta\tau)^2$ и еще более высоких порядков. Для вероятности $P_n(\tau + \Delta\tau)$ того, что система в момент $(\tau + \Delta\tau)$ будет в состоянии n , можем записать

$$P_n(\tau + \Delta\tau) = (1 - \lambda\Delta\tau)P_n(\tau) + \lambda\Delta\tau P_{n-1}(\tau) + O(\Delta\tau).$$

После преобразования и перехода к пределу при $\Delta\tau \rightarrow 0$ имеем $P'_n(\tau) = -\lambda P_n(\tau) + \lambda P_{n-1}(\tau)$. Это соотношение действительно для $n > 0$. Так как состояние $n = -1$ не существует, то для $n = 0$ имеем $P'_0(\tau) = -\lambda P_0(\tau)$.

Если предположить, что в момент $\tau=0$ система находилась в состоянии $n=0$, получим $C=1$. Если $P_0(\tau)$ определено в форме $P_0(\tau)=\exp\{-\lambda\tau\}$, то можно последовательно путем подстановки в последующие уравнения для $n=1,2,\dots$ получить решения для вероятностей $P_n(\tau)$; в частности для $P_1(\tau)$ будем иметь

$$\frac{dP_1(\tau)}{d\tau} = -\lambda P_1(\tau) + \lambda \exp\{-\lambda\tau\},$$

откуда $P_1(\tau) = \lambda\tau \exp\{-\lambda\tau\}$.

В общем случае для $n=1,2,\dots$ получим

$$P_n(\tau) = \exp\{-\lambda\tau\} \left[\lambda \int_0^\infty P_{n-1}(\tau) \exp\{\lambda\tau\} d\tau + c_n \right].$$

Для упрощения последнего выражения необходимо применить один из вариантов преобразования, использующий производящую функцию, относящийся к дискретной переменной, которой в нашем случае является число состояний. В нашем случае после преобразований получим

$$P_n(\tau) = \frac{(\lambda\tau)^n}{n!} \exp\{-\lambda\tau\}.$$

Данный подход целесообразен также и потому, что вместо ряда линейных дифференциальных уравнений теперь решается лишь одно уравнение. Отметим еще, что среднее и дисперсия для распределения Пуассона одинаковы, и равны величине $\lambda\tau$, в чем легко убедиться.

Распределение Пуассона является распределением числа изменений за период τ . Член $P_0(\tau) = \exp\{-\lambda\tau\}$ этого распределения показывает вероятность того, что за время τ изменений не будет. Величину $P_0(\tau)$ можно интерпретировать также как вероятность того, что время ожидания T больше, чем τ , т.е. $P[T > \tau] = \exp\{-\lambda\tau\}$. Наоборот, вероятность того, что время ожидания изменения равно или меньше τ , составит $P[T \leq \tau] = 1 - \exp\{-\lambda\tau\}$.

Мы получили функцию распределения времени между двумя изменениями в системе. Это функция экспоненциального распределения, плотность вероятности которого $\lambda \exp\{-\lambda\tau\}$.

Если число изменений системы в некотором периоде распределяется по закону Пуассона, то для этого процесса распределение времени между изменениями будет экспоненциальным. Процесс Пуассона можно описать и с помощью матрицы интенсивностей перехода:

$$A = \begin{vmatrix} -\lambda & \lambda & 0 & \dots \\ 0 & -\lambda & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda & \lambda \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda \end{vmatrix}.$$

Число состояний здесь бесконечно, но стационарное распределение, как мы видели, существует. Его члены для больших значений n стремятся к нулю, и их сумма равна единице.

Процессы рождения и гибели. Часто можно встретиться с процессами типа Пуассона, допускающими переход лишь на один шаг вперед, но в которых интенсивности изменяются так, что являются функцией состояния, в котором система находилась в предыдущий момент.

Наиболее простой тип такого процесса – *линейное размножение* (рост), когда число элементов, начиная с некоторого уровня, постепенно возрастает пропорционально их числу (например, процесс измельчения с постоянной скоростью, не зависящей от размера частиц).

Матрица интенсивностей вероятностей перехода имеет вид

$$A = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & -\lambda & \lambda & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & -2\lambda & 2\lambda & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & -3\lambda & 3\lambda & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix}.$$

Теперь систему дифференциальных уравнений для абсолютных вероятностей можно представить в виде

$$\frac{dP_n(\tau)}{d\tau} = -\lambda n P_n(\tau) + \lambda(n-1)P_{n-1}(\tau), \quad n \geq 1.$$

Для $n=1$ получим:

$$\frac{dP_1(\tau)}{d\tau} = -\lambda P_1(\tau); \quad P_1(\tau) = c \exp\{-\lambda\tau\}.$$

Если начальное условие записать в виде

$$P_n(0) = \begin{cases} 1, & n=1; \\ 0, & n \neq 1, \end{cases}$$

то получим $c=1$. Последовательной подстановкой получим рекуррентное соотношение для произвольного значения n :

$$P_n(\tau) = \exp\{-\lambda\tau\} \left[\lambda(n-1) \int_0^\tau P_{n-1}(\tau) \exp\{\lambda\tau\} d\tau + c_n \right],$$

где для c_n с учетом начального условия имеем $c_1=1$ и $c_n=0$ при $n \neq 1$. Последовательным вычитанием получим

$$P_n(\tau) = \exp\{-\lambda\tau\} [1 - \exp\{-\lambda\tau\}]^{n-1}, \quad n=1, 2, \dots$$

Для среднего приведенного распределения имеем

$$\langle P_n(n) \rangle = \exp\{-\lambda\tau\} \sum_{n=1}^{\infty} n [1 - \exp\{-\lambda\tau\}]^{n-1}, \text{ а если провести несложные вычисления, получим } \langle P_n(n) \rangle = \exp\{\lambda\tau\}.$$

Дисперсия определяется аналогично $\sigma^2(n) = \exp\{\lambda\tau\} [\exp\{\lambda\tau\} - 1]$. Для этого случая достаточно найти одно решение дифференциального уравнения вместо решения нескольких.

Для аналогичного процесса гибели, в котором число элементов, начиная с некоторого уровня, постепенно убывает пропорционально их числу, матрицу интенсивностей перехода можно представить в виде

$$A = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \mu & -\mu & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 2\mu & -2\mu & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 3\mu & -3\mu & 0 & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots \end{vmatrix},$$

где μ – интенсивность гибели или выхода из строя.

Отсюда можно непосредственно получить систему дифференциальных уравнений

$$\frac{dP_n(\tau)}{d\tau} = -\mu n P_n(\tau) + \mu(n+1)P_{n+1}(\tau).$$

Теперь нужно учесть некоторое начальное количество элементов в системе. Предположим, что это количество $n = n_0$. Тогда граничное условие можно записать в форме $P_n(0) = \delta_{n,n_0}$. Решение системы аналогично предыдущему случаю за исключением того, что нужно учесть исходный уровень процесса. Решение получим в виде

$$P_n(\tau) = \binom{n_0}{n} \exp\{-n_0\mu\tau\} [\exp\{\mu\tau\} - 1]^{n_0-n}.$$

Для определения среднего значения числа состояний, которые прошла система, можно получить следующее выражение $\langle P_n(n) \rangle = n_0 \exp\{-\mu\tau\}$. Дисперсия равна $\sigma^2(n) = n_0 \exp\{-\mu\tau\} [1 - \exp\{-\mu\tau\}]$.

Случайное блуждание с поглощением. Пусть частица может передвигаться по прямой линии под действием случайных толчков. В точках $x=1$ и $x=N$ стоят поглощающие экраны: и пусть при каждом случайном толчке частица передвигается на единицу длины вправо с вероятностью p , влево с вероятностью q , $p+q=1$, однако, попав в точки $x=1$ и $x=N$, частица остается в этих точках. Так, имеем состояния частицы: $\omega_i = \{\text{частица находится в точке } x=i\}$, $i=1, \dots, N$. Переходные вероятности в этом случае равны: $p_{00}=1$, $p_{NN}=1$, $p_{ii+1}=p$, $p_{ii-1}=q$, $p_{ij}=0$, для остальных i и j . Матрица перехода имеет вид

$$\pi_1 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ q & 0 & p & \dots & 0 \\ 0 & q & 0 & p & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & q & 0 & p \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

Случайное блуждание с отражением. Рассмотрим ту же схему, что и в предыдущем примере, с той лишь разницей, что теперь в точках $x=1$ и $x=N$ стоят отражающие экраны, т. е. вероятность остаться в крайних состояниях принимается равной нулю. Все частицы, попавшие в эти состояния, на следую-

щем шаге их покинут с вероятностью, равной единице. В этом случае матрица переходов имеет вид

$$\pi_1 = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ q & 0 & p & \dots & 0 \\ 0 & q & 0 & p & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & q & 0 & p \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}.$$

Подобные системы были обобщены как на случай нелинейных функций состояний, так и на случай возможных изменений интенсивностей вероятностей переходов во времени.

Представляется, однако, что дальнейшее обобщение системы не вносит в оценку изменений реальных процессов существенных уточнений, поскольку уже и для рассмотренных моделей очень трудно собрать точные статистические данные, особенно если речь идет об описании процессов химической технологии в дисперсных системах.

Моделирование структур потоков с использованием цепей Маркова. Для описания потоков со сложной структурой используются комбинированные модели, составленные из идеальных элементов различного типа. Налицо стремление отойти от решения непосредственно системы нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих перенос различных субстанций в объеме, ограниченном поверхностью сложной формы, к модели с сосредоточенными параметрами некоторой топологической структуры. Однако различия в типе составляющих элементов (ячейки идеального смешения, потоки вытеснения, зоны диффузии, застойные зоны и т. д.) иногда затрудняют использование этих моделей в практических расчетах из-за трудности решения уравнений модели, особенно в случае наличия нелинейных и распределенных в пространстве источников (стоков) вещества и тепла.

Более целесообразным представляется построение моделей структуры потоков из множества однотипных элементов, простейшими из которых являются ячейки идеального смешения. Каждая ячейка соответствует участку объема аппарата, в пределах которого градиентом концентрации можно пренебречь. Распределение времени пребывания элементов потока в каждой ячейке подчиняется экспоненциальному закону. Соединив ячейки между собой, можно построить модель структуры потоков, отвечающую действительному характеру движения жидкости. Такие структуры обладают достаточной гибкостью, конструкцию их можно легко деформировать при отражении конкретной топологии потоков и специфических макронеоднородностей содержимого аппарата, связанных с его конструктивными и технологическими особенностями. Ячеечные структуры допускают применение достаточно простых и эффективных алгоритмов расчета, основанных на использовании математического аппарата цепей Маркова.

Допустим, что реальному течению жидкости (газа) в аппарате соответствует некоторая топологическая структура потоков. Структура представлена рядом ячеек идеального смешения, связанных межъячеечными потоками, которые могут иметь самую различную физическую природу и могут быть нестационарными. Каждая ячейка характеризуется объемом V_i и физическими параметрами, определяющими состояние находящейся в ней среды. В зависимости от интенсивности перемешивания в той или иной части аппарата, объемы ячеек могут быть различными. Как показывает практика создания и применения таких моделей, в качестве параметров состояния обрабатываемой среды необходимо принимать интегральные характеристики, такие как содержание в ячейке массы растворенного в жидкой фазе компонента A $M_i^a(\tau) = C_i^a(\tau)V_i$, ее теплосодержание $Q_i(\tau) = \rho c V_i t_i(\tau)$ и т. д.

Рассмотрим в качестве примера циркуляционную модель структуры потоков в смесителе. Для описания циркуляции в пределах объема аппарата ограничимся пятью ячейками, которые соединены между собой в соответствии с возможными линиями тока жидкости. Заметим, что для разных типов перемешивающих устройств схема соединения ячеек будет различной. Ячейка под номером шесть не принадлежит объему аппарата и введена для учета количества целевого компонента, покинувшего аппарат.

При построении модели нет необходимости рассматривать перемешивание как непрерывный процесс. Можно интересоваться перераспределением концентрации ключевого компонента между выделенными ячейками в течение времени $\Delta\tau$. Рассмотрим случайную величину X , которая может принимать дискретные целочисленные значения (в нашем случае по количеству ячеек от нуля до шести). Вероятность того, что X примет одно из возможных значений $x = 1, 2, \dots, 6$, равна $P_i(\tau)$, $i = 1, 2, \dots, 6$.

Величины $P_i(\tau)$ могут быть интерпретированы как вероятности нахождения меченой частицы в ячейке с номером i . Процесс $x(\tau)$, определяемый вектором \bar{P} с элементами $P_i(\tau)$, является однородным марковским процессом с конечным числом состояний, одно из которых ($i = 6$) является поглощающим. Переходные вероятности p_{ij} связаны с объемом аппарата V_a , объемом ячеек V_i , объемным расходом через аппарат V и циркуляционным потоком V_q , создаваемым перемешивающим устройством.

Переходы осуществляются через некоторые определенные моменты времени $\Delta\tau$, в течение которых системы не успевают претерпевать существенных изменений. Расчет вероятности нахождения меченой частицы ключевого компонента в некоторой ячейке в произвольный момент времени может быть проведен по основному уравнению цепей Маркова:

$$P_i(n+1) = \sum_{j=0}^{j=k} P_j(n) p_{j,i}(n), \quad i = 1, 2, \dots, k.$$

Обычно принимается, что целевой компонент с определенной долей вероятности $p_{j,i}$ может перейти только из j -й ячейки в соседнюю i -ю ячейку, связанную потоком. Остальные переходы ввиду малости промежутка времени $\Delta\tau$ невозможны. Это позволяет значительно упростить структуру матрицы переходных вероятностей, которая в нашем случае имеет размерность 6×6 .

Дальнейшее конструирование модели связано с определением явного вида зависимостей для расчета $p_{j,i}$. Здесь можно воспользоваться самыми различными физическими и математическими соображениями, которые должны учитывать закономерности физико-химических процессов и явлений, протекающих в каждой ячейке и аппарате в целом, исходя из их двойственной стохастической и детерминированной природы.

Предположим, что меченая частица находится в ячейке с номером i . Вероятность $p_{i,i}$ того, что меченая частица останется в состоянии i в течение промежутка времени $\Delta\tau$, найдем исходя из экспоненциального распределения времени пребывания в ячейке

$$p_{i,i} = 1 - \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{V_i/V_{qi}}\right), \quad i=1,2,\dots,5,$$

где V_{qi} – объемный поток через ячейку i .

Для случая одноконтурной циркуляции (рис. 1.1.13,а) в аппаратах с пропеллерной мешалкой $V_{qi} = V_u$, $i=1,2,3,4$; $V_{q5} = V_u + V$; $V_{q6} = 0$. Поскольку должно

выполняться условие $\sum_{i=1}^k p_{ij} = 1$, то для $i \neq j$

$$\sum_{i=1}^k p_{ij} = \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{V_i/V_{qi}}\right).$$

Обозначим через v_{ij} долю потока, проходящего через ячейку под номером i и попадающего в ячейку под номером j . Тогда получим

$$p_{ij} = \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{V_i/V_u v_{ij}}\right), \quad i \neq j.$$

Далее разложим экспоненту в ряд Тейлора и перейдем к пределу при $\Delta\tau \rightarrow 0$. После исключения величин второго и более высших порядков малости от $\Delta\tau$ получим $p_{ij} = V_u v_{ij} \Delta\tau / V_i$. Следовательно, для достаточно малого промежутка времени $\Delta\tau$ в случае однонаправленной циркуляции (рис. 1.1.13,а)

$$\begin{aligned} p_{ii+1} &= \frac{V_u \Delta\tau}{V_i}, \quad p_{ii} = 1 - \frac{V_u \Delta\tau}{V_i}, \quad i=1,2,3,4; \\ p_{51} &= \frac{V_u \Delta\tau}{V_5}, \quad p_{56} = \frac{V \Delta\tau}{V_5}, \quad p_{55} = 1 - \frac{(V_u + V) \Delta\tau}{V_i}, \quad p_{66} = 1. \end{aligned}$$

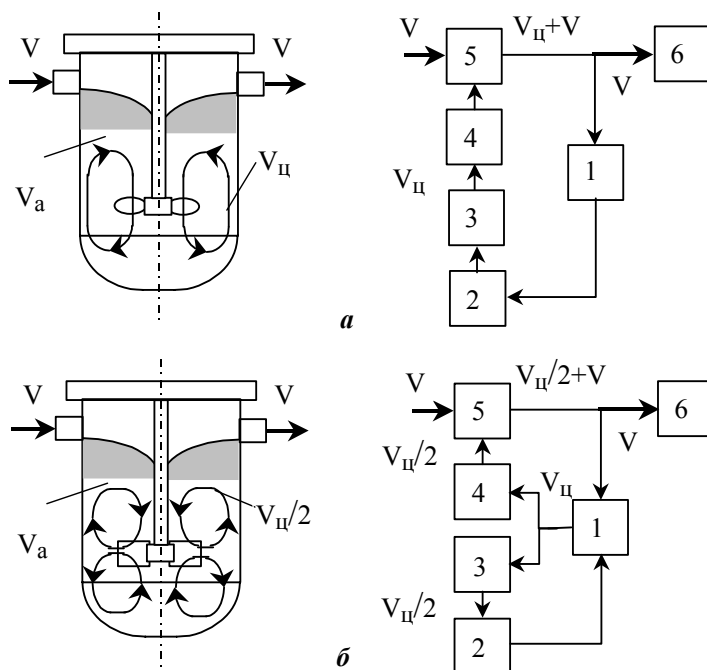


Рис. 1.1.13. Модели структуры потоков в аппарате с механическим перемешивающим устройством:
***a* – одноконтурная циркуляционная модель; *б* – двухконтурная циркуляционная модель.**

Матрица переходных вероятностей имеет следующий вид:

$$\bar{P} = \begin{pmatrix} p_{1,1} & p_{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_{2,2} & p_{2,3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_{3,3} & p_{3,4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{4,4} & p_{4,5} & 0 \\ p_{5,1} & 0 & 0 & 0 & p_{5,5} & p_{5,6} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Опираясь на физическое понятие вероятности, покажем связь абсолютных вероятностей $P_i(\tau)$ с концентрациями целевого компонента в ячейках. Пусть в некоторый момент времени концентрации в ячейках, принадлежащих объему аппарата, были равны c_1, c_2, \dots, c_5 . Масса целевого компонента в аппарате найдется как сумма масс в отдельных ячейках $M = \sum_{i=1}^5 c_i V_i$. Тогда можно предположить, что $P_i(\tau) = c_i(\tau) V_i / M$.

По определению, изменение безразмерной концентрации в ячейке под номером пять (из которой производится вывод жидкости из аппарата) от выражен-

ного в относительных единицах времени называется C -кривой $C(\theta) = V_a c_5(\tau) / M$, откуда находим связь между абсолютной вероятностью $P_i(\tau)$ и $C(\theta)$ $C(\theta) = P_i(\tau) V_a / V_5$.

В общем случае, если i – номер ячейки, в которую импульсно вводится индикатор, то начальные условия процесса имеют следующий вид: $\theta = 0$, $P_i(0) = 1$, $P_j(0) = 0$, $j \neq i$.

В свою очередь, при «вымывании» имеем

$$\theta = 0, P_i(0) = V_i / V_a, i = 1, 2, \dots, k-1, P_k(0) = 0. \quad (1.1.43)$$

Для рассматриваемого примера, если принять объемы ячеек равными, то $\theta = 0$, $P_i(0) = 0,2$, $i = 1, 2, \dots, 5$, $P_6(0) = 0$.

Вероятность того, что меченая частица выйдет из аппарата через N шагов (при $\theta = \Delta\theta N$), равна

$$P_6(\tau) = \sum_0^N P_5(\tau) p_{5,6} = \sum_0^N P_5(\tau) \frac{V \Delta \tau}{V_5} = \sum_0^N C(\theta) \frac{V_5}{V_a} \frac{V \Delta \tau}{V_5} = \sum_0^N C(\theta) \Delta \theta.$$

В пределе при $\Delta\theta \rightarrow 0$ получим $P_6(\theta) = \int_0^\theta C(\theta) d\theta$.

Величина $P_6(\theta)$ (в общем случае $P_k(\theta)$) является функцией распределения времени пребывания индикатора в рассматриваемой системе. Этот вывод совпадает с физической трактовкой вероятности $P_k(\theta) = M(\theta) / M$ как относительной доли массы индикатора, вышедшего из аппарата до момента времени θ .

Для получения функции распределения элементов потока по времени пребывания не потребовалось специально получать кривую отклика путем имитации ступенчатого повышения концентрации индикатора на входе. В этом случае пришлось бы ввести ячейку, из которой осуществляется дозировка индикатора и дать физическую интерпретацию переходных вероятностей и абсолютной вероятности нахождения меченых частиц в этой ячейке.

Моделируя процесс перемешивания с начальными условиями, соответствующими импульсному способу внесения возмущения в поток на входе в аппарат, получим сразу C -кривую и функцию распределения:

$$C(\theta) = P_{k-1}(\theta) V_a / V_{k-1}, F(\theta) = P_k(\theta).$$

При моделировании перемешивания в периодическом режиме следует положить $V = 0$, тогда переходная вероятность $p_{k-1,k}$ также будет равна нулю. Задав начальные условия аналогично (1.1.43), можно определить момент времени $\tau_{см}$, когда абсолютные вероятности $P_i(\tau)$ будут отличаться друг от друга на сколько угодно малую величину ϵ $|P_i(\tau) - P_j(\tau)| \leq \epsilon$, $i \neq j$.

Для заданной степени распределения индикатора по объему аппарата и скорости циркуляции V_y можно установить время, за которое происходит усреднение концентрации введенного в какую-либо ячейку целевого компонента по всему объему аппарата. Для аппаратов с перемешивающим устройством величина V_y равна насосному эффекту мешалки.

Программная реализация данного подхода не вызывает значительных затруднений в связи с появлением ЭВМ с высоким быстродействием.

Подведем итоги. Несмотря на простоту и эффективность рассмотренного выше математического описания структуры потоков для проточных аппаратов, существует еще ряд нерешенных до конца проблем. Имеется возможность для вновь создаваемого аппарата прогнозировать достаточное для его описания количество ячеек, их объем, циркуляционные потоки между ними, что имеет особое значение при проведении проектных расчетов. Имеется также возможность по топологической модели представить конструкцию будущего аппарата. Необходимы методы формализованного построения топологических моделей структуры потоков для аппаратов конкретной конструкции. Достигнутые в настоящее время успехи позволяют говорить о наличии достаточно универсального метода имитационного моделирования работы аппаратов неидеального перемешивания. Сама модель остается практически неизменной, а меняется только матрица переходных вероятностей.

1.1.4. Метод Монте-Карло в инженерном приложении

Метод Монте-Карло – это численный метод решения математических задач при помощи моделирования случайных величин.

Происхождение метода Монте-Карло. Датой рождения метода Монте-Карло принято считать 1949 г., когда появилась первая статья под названием «The Monte Carlo method». Создателями этого метода считают американских математиков Дж. Неймана и С. Улама. В России первые статьи о методе Монте-Карло были опубликованы в 1955–1956-х гг.

Любопытно, что теоретическая основа метода была известна давно. Более того, некоторые задачи статистики рассчитывались иногда с помощью случайных выборок, т. е. фактически методом Монте-Карло. Однако до появления электронных вычислительных машин (ЭВМ) этот метод не мог найти сколько-нибудь широкого применения, ибо моделировать случайные величины вручную – очень трудная работа. Возникновение метода Монте-Карло как весьма универсального численного метода стало возможным только благодаря появлению ЭВМ.

Само название «Монте-Карло» происходит от города Монте-Карло в княжестве Монако, знаменитого своим игорным делом. Дело в том, что одним из простейших механических приборов для получения случайных величин является... рулетка. Стоит ответить на часто задаваемый вопрос: «Помогает ли метод Монте-Карло выигрывать в рулетку?» Нет, не помогает. И даже не занимается этим.

Пример. Для того чтобы было более понятно, о чем пойдет речь, рассмотрим простейший пример. Предположим, что нам нужно вычислить площадь плоской фигуры S . Это может быть произвольная фигура с криволинейной границей, заданная графически или аналитически, связанная или состоящая из нескольких кусков. Пусть это будет фигура, изображенная на рис. 1.1.14. Предположим, что она вся расположена внутри единичного квадрата.

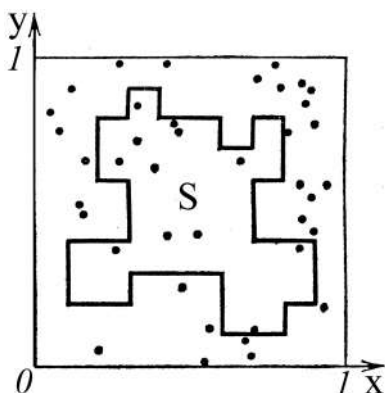


Рис. 1.1.14. К расчету площади произвольной фигуры

Выберем внутри квадрата N случайных точек. Обозначим через N^* число точек, попавших при этом внутрь фигуры. Геометрически очевидно, что площадь S приблизительно равна отношению N^*/N . Чем больше N , тем больше точность этой оценки.

В примере, изображенном на рис. 1.1.14, выбрано сорок точек. Из них 12 точек оказалось внутри S . Отношение N^*/N равно $12/40=0,30$, в то время как истинная площадь S равна $0,35$.

На практике для вычисления площади плоской фигуры метод Монте-Карло не используют: для этого есть другие методы, хотя и более сложные, но зато обеспечивающие большую точность. Метод Монте-Карло позволяет столь же просто вычислять «многомерный объем», т. е. объем тела в многомерном пространстве. И в этом случае метод Монте-Карло часто оказывается единственным численным методом, дающим возможность решить задачу.

Две особенности метода Монте-Карло. Первая особенность метода – простая структура вычислительного алгоритма. Составляется программа для осуществления одного случайного испытания (в примере надо выбрать случайную точку в квадрате и проверить, принадлежит ли она S). Затем эти испытания повторяются N раз, причем каждый опыт не зависит от всех остальных, и результаты всех опытов усредняются. Поэтому иногда метод Монте-Карло называют *методом статистических испытаний*.

Вторая особенность метода – погрешность вычислений пропорциональна $\sqrt{D/N}$, где D – некоторая постоянная, а N – число испытаний. Отсюда видно, что для того, чтобы уменьшить погрешность в 10 раз (иначе говоря, чтобы получить в ответе еще один верный десятичный знак), нужно увеличить N (т. е. объем работы) в 100 раз.

Ясно, что добиться высокой точности таким путем невозможно. Поэтому метод Монте-Карло особенно эффективно используется при решении тех задач, в которых результат нужен с небольшой точностью (5–10%).

Однако одну и ту же задачу можно решить различными вариантами метода Монте-Карло, которым отвечают различные значения D . Во многих задачах

удается значительно увеличить точность, выбрав способ расчета, которому соответствует значительно меньшее значение D .

Задачи, решаемые методом Монте-Карло. Во-первых, метод Монте-Карло позволяет моделировать любой процесс, на проведение которого влияют случайные факторы. Во-вторых, для многих математических задач, не связанных с какими-либо случайностями, можно искусственно придумать вероятностную модель (и даже не одну), позволяющую решать эти задачи. Собственно говоря, это и было сделано в примере с вычислением площади фигуры. Можно говорить о методе Монте-Карло как об универсальном методе решения математических задач. Иногда выгодно отказаться от воспроизведения истинно случайного процесса и вместо этого использовать искусственную модель.

Приведем пример, основанный на открытии, сделанном в XVIII в. французским натуралистом графом де Бюффоном, показавшим, что значение π можно вычислить, наблюдая, как падает иголка на разлинованную плоскость. Рассмотрим плоскость, разграфленную параллельными прямыми, находящимися на расстоянии $2d$ одна от другой. Вычислим вероятность того, что случайно брошенная на плоскость иголка длиной $2l$ пересечет одну из прямых. Оказывается, что эта вероятность задается простым выражением, содержащим π . Для того чтобы проанализировать данную ситуацию, будем описывать положение иголки на плоскости координатами (x, y) ее центра и углом α , который она образует с осью x . Если считать прямые параллельными оси x , то ясно, что вероятность пересечения не зависит от x и является функцией только y и α . В силу симметричности задачи достаточно рассмотреть лишь значения y по модулю d (т. е. значения y от 0 до d) и значения α по модулю $\pi/2$.

Теперь можно уточнить формулировку задачи. Выбирается упорядоченная пара независимых случайных величин (y, α) так, что y равномерно распределено на $[0, d]$, а α равномерно распределено на $[0, \pi/2]$. Иначе говоря, любая точка прямоугольника (рис. 1.1.15) с равной вероятностью может оказаться результатом бросания иголки на плоскость. Остается определить, какие точки этого прямоугольника соответствуют случаю, когда иголка пересекает прямую. Этот анализ распадается на два случая: первый ($d \geq l$) приведен ниже, второй ($d < l$) требует специального рассмотрения.

Иголка с центром в (x, y) , образующая угол α с осью x , пересекает прямую тогда и только тогда, когда $y \leq l \sin \alpha$. Этому условию удовлетворяют только точки, лежащие ниже синусоиды на рис. 1.1.20, точки же, лежащие выше синусоиды, ему не удовлетворяют. Так, вероятность пересечения равна частному от деления площади, ограниченной сверху синусоидой и равной просто l , на площадь прямоугольника, равную $\pi d/2$. Итак,

$$\text{вероятность пересечения} = \frac{l}{\pi d/2} = \frac{2l}{\pi d}.$$

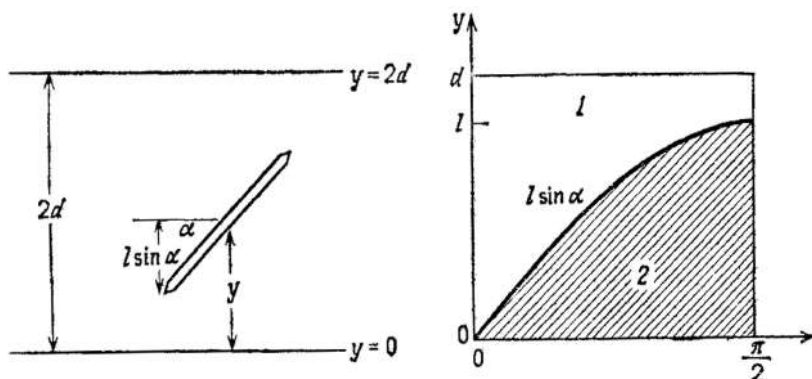


Рис. 1.1.15. Задача Бюффона.

1 – иголка не пересекает прямую; 2 – иголка пересекает прямую.

Далее, по закону больших чисел, впервые установленному Якобом Бернулли, частота появления события в n испытаниях с вероятностью единица сходится к вероятности этого события при n , стремящемся к бесконечности. Из этого закона следует, что при достаточно большой серии испытаний можно оценить вероятность пересечения с любой точностью. Конечно, как уже отмечалось, закон квадратного корня указывает, что для приближения π лишь с пятью десятичными цифрами потребуется огромное число испытаний. Поэтому задача Бюффона дает плохой способ вычисления π .

Итак, с помощью случайных чисел можно приближенно вычислить площадь, ограниченную сверху некоторой кривой. Это наводит на мысль о возможности использования метода Монте-Карло для вычисления интегралов. Конечно, в рассмотренном случае кривая была совсем простой, но этот способ может использоваться даже тогда, когда кривая настолько негладкая, что интегрирование нельзя выполнить как-либо иначе.

В приведенных примерах наш метод вычисления будет справедлив только тогда, когда случайные точки будут не «просто случайными», а еще и «равномерно распределенными» по всему единичному квадрату, изучаемому в примере. Чтобы придать этим словам точный смысл, необходимо познакомиться с определением случайных величин и некоторыми их свойствами.

Общая схема метода Монте-Карло. Допустим, что нам требуется вычислить какую-то неизвестную величину m . Попытаемся придумать такую случайную величину ξ , чтобы $M\xi = m$. Пусть при этом $D\xi = b^2$.

Рассмотрим N независимых случайных величин $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$, распределения которых совпадают с распределением ξ . Если N достаточно велико, то, согласно центральной предельной теореме, распределение суммы $\rho_N = \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N$ будет приблизительно нормальным с параметрами $a = Nm$, $\sigma = b\sqrt{N}$ и $P\{Nm - 3b\sqrt{N} < \rho_N < Nm + 3b\sqrt{N}\} \approx 0,997$.

Если мы разделим выражение, стоящее в фигурных скобках, на N , то получим эквивалентное неравенство и вероятность его останется такой же $P\{m - 3b/\sqrt{N} < \rho_N / N < m + 3b/\sqrt{N}\} \approx 0,997$.

Последнее соотношение перепишем в несколько ином виде:

$$P\left\{\left|\frac{1}{N}\sum_{j=1}^N \xi_j - m\right| < \frac{3b}{\sqrt{N}}\right\} \approx 0,997. \quad (1.1.44)$$

Это чрезвычайно важное для метода Монте-Карло соотношение. Оно дает нам и метод расчета m , и оценку погрешности.

В самом деле, найдем N значений случайной величины ξ (все равно, находить ли один раз по одному значению каждой из величин $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$ или найти N значений величины ξ , так как все эти случайные величины имеют одно и то же распределение и предполагаются независимыми. Из (1.1.44) видно, что среднее арифметическое этих значений будет приблизительно равно m . С большой вероятностью погрешность такого приближения не превосходит величины $3b/\sqrt{N}$. Эта погрешность стремится к нулю с ростом N .

На практике очень часто предпочитают ориентироваться не на оценку сверху $3b/\sqrt{N}$, а на вероятную ошибку, которая приближенно равна $r_N = 0,6745b/\sqrt{N}$. Именно таков порядок фактической погрешности расчета, которая равна

$$\left|\frac{1}{N}\sum_{j=1}^N \xi_j - m\right|.$$

Использование закона больших чисел является лишь одной из возможностей при применении метода Монте-Карло. Другой возможностью является использование средств математической статистики для конструирования различных оценок.

Случайные величины, о которых шла речь, — это идеальные математические понятия. Вопрос о том, можно ли с их помощью описать какие-либо явления природы, решается опытом. Такое описание всегда является приближенным. Более того, случайная величина, которая вполне удовлетворительно описывает какую-то физическую величину в одном явлении, может оказаться плохой характеристикой этой же величины при исследовании других явлений. Точно так же дорога, которую на карте страны можно считать прямой (идеальной математической прямой «без ширины»), становится полосой с изгибами на крупномасштабном плане населенного пункта.

Получение и преобразование случайных величин на ЭВМ. Сама постановка вопроса «получение случайных величин на ЭВМ» иногда вызывает недоумение: ведь все, что делает машина, должно быть заранее запрограммировано. Откуда же может появиться случайность? В этом вопросе и в самом деле есть некоторые трудности, но они относятся, скорее, к философии, и мы на них останавливаться не будем.

Обычно различают три способа получения случайных величин: таблица случайных чисел, генераторы случайных чисел, метод псевдослучайных чисел.

Таблица случайных чисел. Проведем следующий опыт. Напишем на десяти одинаковых бумажках цифры 0,1,2,...,9. Положим эти бумажки в шапку, перемешаем и будем извлекать оттуда по одной бумажке, каждый раз возвращая ее назад и снова перемешивая. Полученные таким образом цифры запишем в виде таблицы, подобно табл. 1.1.5 (цифры для удобства объединены в группы по пять штук).

Таблица 1.1.5

400 случайных цифр

86515	90795	66155	66434	56558	12332	94377	57802
69186	03393	42502	99224	88955	53758	91641	18867
41686	42163	85181	38967	33181	72664	53807	00607
86522	47171	88059	89342	67248	09082	12311	90316
72587	93000	89688	78416	27589	99528	14480	50961
52452	42499	33346	83935	79130	90410	45420	77757
76773	97526	27256	66447	25731	37525	16287	66181
04825	82134	80317	75120	45904	75601	70492	10274
87113	84778	45863	24520	19976	04925	07824	76044
84754	57616	38132	64294	15218	49286	89571	42903

Такая таблица называется таблицей случайных чисел, хотя правильнее было бы назвать ее таблицей случайных цифр. Можно сохранить ее в ЭВМ. И в ходе расчетов, когда понадобится значение случайной величины с равномерным распределением

$$\xi \approx \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & \dots & 9 \\ 0,1 & 0,1 & 0,1 & \dots & 0,1 \end{pmatrix} \quad (1.1.45)$$

будем брать очередное число из этой таблицы.

Самая большая из опубликованных таблиц случайных чисел содержит 1 000 000 цифр. Конечно, она составлялась с помощью более современной техники, чем шапка: была сконструирована специальная рулетка с использованием электроники. Простейшая схема такой рулетки приведена на рис. 1.1.16 (вращающийся диск резко останавливается, и выбирается та цифра, на которую указывает неподвижная стрелка).

Необходимо заметить, что составить хорошую таблицу случайных чисел не так просто, как может показаться. Любые реальные физические приборы вырабатывают случайные величины с распределением, несколько отличным от идеального, т. е. равновероятного распределения (1.1.45). К тому же в ходе опыта возможны ошибки (например, одна бумажка на некоторое время пристала к подкладке). Поэтому составленные таблицы тщательно проверяют с помощью специальных статистических тестов: не противоречат ли те или иные свойства группы чисел гипотезе о том, что эти числа – значения случайной величины (1.1.45).

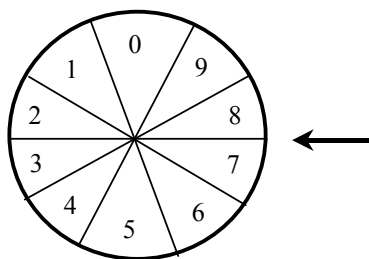


Рис. 1.1.16. Простейшая схема рулетки для получения случайных цифр

Приведем примеры простейших и в то же время важнейших тестов. Рассмотрим таблицу $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$, содержащую N цифр. Пусть число нулей в этой таблице равно v_0 , число единиц – v_1 , число двоек – v_2 и т. д. Вычислим сумму

$$\sum_{i=0}^9 \left(v_i - \frac{1}{10} N \right)^2.$$

Теория вероятностей позволяет предсказать, в каких пределах может лежать эта сумма: она не должна быть слишком большой, так как математическое ожидание каждого из v_i равно $N/10$, но не должна быть и слишком малой, так как это означало бы «слишком закономерное» распределение значений. Любопытно, что такие «слишком равномерно распределенные» значения позволяют быстрее решать некоторые задачи частного вида. Но в качестве случайных универсальных чисел они не годятся.

Таблицы случайных чисел используются при расчетах по методу Монте-Карло вручную, хотя в настоящее время нет особых ограничений на их использование с применением ЭВМ.

Генераторы случайных чисел. Казалось бы, что упоминавшуюся рулетку можно присоединить к ЭВМ и по мере надобности вырабатывать случайные числа. Однако любой механический прибор будет слишком медленным для ЭВМ. Поэтому в качестве генератора случайных чисел возможно использовать шумы в электронных схемах (рис. 1.1.17). Если за некоторый фиксированный промежуток времени Δt уровень шума превысил заданный порог четное число раз, то записывается нуль, а если нечетное число раз, то – единица. Возможны и более совершенные конструкции.

На первый взгляд это удобный способ. Пусть m таких генераторов работают параллельно все время и засылают случайные нули и единицы во все двоичные разряды специальной ячейки. Каждый такт – одно m -разрядное число. В любой момент счета можно обратиться к этой ячейке и взять оттуда значение случайной величины γ , равномерно распределенной в интервале $(0,1)$. Конечно, это значение приближительное, записанное в форме m -разрядной двоичной дроби $0, \alpha_{(1)}, \alpha_{(2)}, \dots, \alpha_{(m)}$, где каждая из величин $\alpha_{(i)}$ имитирует случайную величину с распределением

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

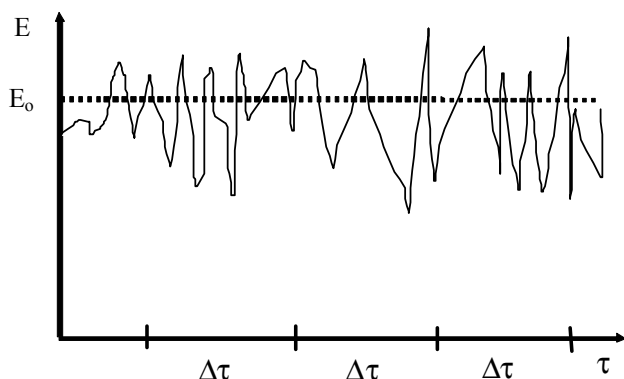


Рис. 1.1.17. Пример шума работы электронного прибора

Этот метод не свободен от недостатков.

Во-первых, трудно проверить «качество» вырабатываемых чисел. Проверки приходится делать периодически, так как из-за каких-нибудь неисправностей может возникнуть так называемый дрейф распределения (т. е. нули и единицы в каком-либо из разрядов станут появляться не одинаково часто).

Во-вторых, обычно расчеты на ЭВМ проводят несколько раз, чтобы исключить возможность случайного сбоя. Но воспроизвести те же случайные числа невозможно, если их по ходу счета не запоминать. А если их запомнить, то мы снова приходим к случаю использования таблиц.

Датчики такого типа, несомненно, окажутся полезными тогда, когда будут производиться специализированные ЭВМ для решения задач методом Монте-Карло. А для универсальных ЭВМ, на которых расчеты с использованием случайных чисел проводят лишь изредка, содержать и эксплуатировать специальное устройство просто нецелесообразно. Лучше использовать так называемые псевдослучайные числа.

Псевдослучайные числа. Поскольку «качество» используемых случайных чисел проверяется с помощью специальных тестов, можно не интересоваться тем, как эти числа получены, — лишь бы они удовлетворяли принятой системе тестов. Можно даже попытаться вычислять их по заданной формуле. Но это должна быть довольно хитрая формула.

Числа, полученные по какой-либо формуле и имитирующие значение случайной величины γ , называются *псевдослучайными числами*. Под словом «имитирующие» подразумевается, что эти числа удовлетворяют ряду тестов так, как если бы они были значением этой случайной величины.

Первый алгоритм для получения псевдослучайных чисел был предложен Дж. Нейманом. Он называется *методом середины квадратов*. Поясним его на примере.

Пусть задано четырехзначное число $\gamma_0 = 0,9876$. Возведем его в квадрат. Получим восьмизначное число $\gamma_0^2 = 0,97535376$. Выберем четыре средние цифры этого числа и продолжим: $\gamma_1 = 0,5353$. Затем возведем γ_1 в квадрат $\gamma_1^2 = 0,28654609$ и снова извлечем четыре средние цифры: $\gamma_2 = 0,6546$ и т. д.

Но этот алгоритм не оправдал себя. Получалось больше, чем нужно, малых значений. Поэтому разными исследователями были разработаны другие алгоритмы. Наибольшее распространение получил алгоритм, названный методом сравнений.

Большинство алгоритмов для получения псевдослучайных чисел имеют вид

$$\gamma_{k+1} = F(\gamma_k). \quad (1.1.46)$$

Если начальное число γ_0 задано, то последующие числа $\gamma_1, \gamma_2, \dots$ вычисляются по одной и той же формуле (1.1.46) при $k = 0, 1, 2, \dots$. Метод середины квадратов также имеет вид (1.1.46), но вместо аналитического задания функции $y = F(x)$ была указана совокупность операций, которые надо проделать над аргументом x , чтобы получить значение y .

Какой должна быть функция $y = F(x)$? Следующий пример позволяет понять, в чем состоит трудность при выборе $y = F(x)$. Например, функцию $y = F(x)$, график которой изображен на рис. 1.1.18а, нельзя использовать для получения псевдослучайных чисел по формуле (1.1.46). В самом деле, рассмотрим в единичном квадрате $\{0 < x < 1, 0 < y < 1\}$ точки с декартовыми координатами $(\gamma_1, \gamma_2), (\gamma_3, \gamma_4), (\gamma_5, \gamma_6), \dots$

Так как $\gamma_2 = F(\gamma_1)$, $\gamma_4 = F(\gamma_3)$, $\gamma_6 = F(\gamma_5)$, ... , то точки расположены на прямой $y = F(x)$. И это очень плохо, ибо случайные настоящие точки должны равномерно заполнять весь квадрат.

Из рассмотренного примера следует, что рассчитывать на успешное использование функции $y = F(x)$ в формуле (1.1.46) можно только тогда, когда график этой функции достаточно плотно заполняет весь квадрат.

Метод сравнений (метод вычетов). Наиболее распространенный алгоритм для получения псевдослучайных чисел был предложен Д. Лемером. В основе этого метода лежит функция

$$y = \{gx\}, \quad (1.1.47)$$

где g – очень большое число, а $\{z\}$ – дробная часть числа z , т. е. $\{z\} = z - [z]$. На рис. 1.1.23,б построен график такой функции при $g = 21$. Можно себе представить, как этот график выглядит при $g = 5^{17}$, однако для удобства реализации на ЭВМ алгоритм строится несколько иначе.

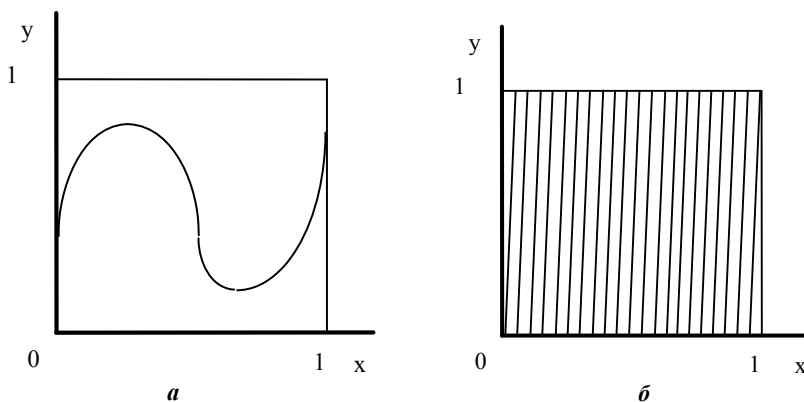


Рис. 1.1.18. К выбору функции $y = F(x)$:

a – такую функцию использовать нельзя, b – правильная функция, покрывающая весь квадрат равномерно.

Определяется последовательность целых чисел m_k , в которой начальное число $m_0 = 1$ задано, а все последующие числа m_1, m_2, \dots вычисляются по одной и той же формуле

$$m_{k+1} \equiv 5^{15} m_k \pmod{2^{40}}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (1.1.48)$$

По числам m_k вычисляются псевдослучайные числа

$$\gamma_k = 2^{-40} m_k. \quad (1.1.49)$$

Формула (1.1.48) означает, что число m_{k+1} равно остатку, полученному при делении $5^{15} m_k$ на 2^{40} . В теории сравнений, разделе теории чисел, такой остаток называют *положительным наименьшим вычетом по модулю 2^{40}* . Отсюда происходят оба названия алгоритма – *метод сравнений* или *метод вычетов*. Формулы (1.1.44) и (1.1.49) легко реализовать на ЭВМ, работающих с 40-разрядными числами, при помощи команды умножения с удвоенным количеством разрядов. Надо использовать младшие цифры произведения. Период последовательности генерируемых псевдослучайных чисел совпадает с отрезком периодичности: $P = L = 2^{38}$. Он содержит все целые числа вида $4n + 1$, не превосходящие 2^{40} .

Достоинства метода псевдослучайных чисел довольно очевидны. Во-первых, на получение каждого числа затрачивается всего несколько простых операций, так что скорость генерирования случайных чисел имеет тот же порядок, что и скорость работы ЭВМ. Во-вторых, программа предельно проста. В-третьих, любое из чисел может быть легко воспроизведено. В-четвертых, нужно лишь один раз проверить «качество» такой последовательности, затем ее можно много раз безбоязненно использовать при расчете однотипных задач.

Единственный недостаток метода – ограниченность количества псевдослучайных чисел, ибо если последовательность чисел $\gamma_1, \gamma_2, \dots$ вычисляется на ЭВМ по формуле (1.1.46), то эта последовательность обязательно периодическая.

Впрочем, приведенный период псевдослучайных чисел для метода сравнений столь велик, что превосходит любые практические потребности.

Преобразование случайных величин. При решении инженерных задач приходится моделировать случайные различные величины. На ранних этапах использования метода Монте-Карло некоторые вычислители пытались для нахождения каждой случайной величины строить свою рулетку. Однако это оказалось совершенно ненужным. Значение любой случайной величины можно получить путем преобразования значений одной какой-либо (так сказать стандартной) случайной величины. Обычно такую роль играет случайная величина, равномерно распределенная в интервале $(0,1)$. Как получить ее значения, мы уже знаем.

Условимся процесс нахождения значения какой-либо случайной величины ξ путем преобразования одного или нескольких значений γ называть розыгрышем случайной величины ξ . Допустим, что нам нужно получить значения случайной величины ξ с распределением

$$\xi \approx \begin{pmatrix} x_1, x_2, \dots, x_n \\ p_1, p_2, \dots, p_n \end{pmatrix}.$$

Вероятность того, что равномерно распределенная в интервале от нуля до единицы величина γ окажется в некотором интервале $(0 < \gamma < p_1)$, $(p_1 < \gamma < p_1 + p_2)$, ..., $(p_1 + p_2 + \dots < \gamma < p_1 + p_2 + \dots + p_i)$, будет равна длине этого интервала p_i . Составим алгоритм розыгрыша ξ на ЭВМ. Для этого расположим числа x_1, x_2, \dots, x_n в ячейках накопителя подряд и вероятности $p_1, p_1 + p_2, p_1 + p_2 + p_3, \dots$ – тоже подряд. Алгоритм розыгрыша случайной величины ξ показан на рис. 1.1.19.

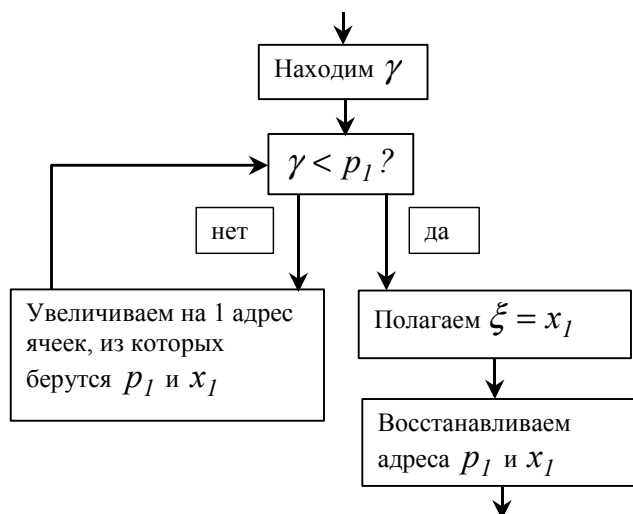


Рис. 1.1.19. Алгоритм преобразования (розыгрывания) случайной величины ξ на ЭВМ

Если все значения ξ равновероятны:

$$\xi \approx \left(\frac{x_1}{n}, \frac{x_2}{n}, \dots, \frac{x_n}{n} \right),$$

то, обозначив $[z]$ целую часть числа z , для разыгрывания ξ можно предложить следующую формулу:

$$\xi = x_i, \quad i = 1 + [n\gamma].$$

Пример. Разыграть десять значений случайной величины

$$\xi \approx \left(\begin{array}{cccccccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 \\ 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.1 \end{array} \right).$$

В качестве значений γ выберем тройки цифр из таблицы случайных чисел, умноженные на 0,001. Получим $\gamma = 0,865; 0,159; 0,079; 0,566; 0,155; 0,664; 0,345; 0,655; 0,812; 0,332$. Соответствующие значения $x_i = 1 + [6\gamma]$ равны 6; 1; 1; 4; 1; 4; 5; 2. Этот опыт равносителен десяти бросаниям игральной кости.

Розыгрыш случайной непрерывной величины. Допустим теперь, что нам нужно получать значение случайной величины ξ , распределенной в интервале (a, b) с плотностью $p(x)$. Значения ξ можно находить из уравнения

$$\int_a^{\xi} p(x) dx = \gamma, \quad (1.1.50)$$

т. е., выбрав определенное значение γ , надо решить уравнение (1.1.50) и найти очередное значение ξ .

Может оказаться, что разрешить уравнение (1.1.50) относительно ξ трудно, например в случае, когда интеграл от плотности $p(x)$ не выражается через элементарные функции или когда $p(x)$ задана графически.

Необходимо предостеречь вычислителей: встречаются статьи, книги, стандартные программы, в которых указаны плохие алгоритмы для получения случайных чисел. Получаемые по этим алгоритмам числа удовлетворяют только простейшим тестам. Использование таких чисел для достаточно сложных задач приводит к ошибочным результатам.

Моделирование систем массового обслуживания. Рассмотрим в качестве примера простую систему обслуживания, которая состоит из n линий (каналов или пунктов обслуживания), каждый из которых может обслуживать заявки, поступающие в случайные моменты времени. Поступающая заявка передается на свободную линию с наименьшим номером, начиная с № 1. Если в момент τ_k поступления k -й заявки линия № 1 занята, то заявка мгновенно передается на линию № 2 и т. д. Наконец, если все линии в момент τ_k заняты, то система дает отказ. Требуется определить, сколько (в среднем) заявок обслужит система за время τ и сколько даст отказов.

Задача такого типа встречается при исследовании работы связанных в единую технологическую цепочку машин и автоматов роторно-конвейерных линий, а также при анализе функционирования целых производств и предприятий. В некоторых частных случаях удастся найти аналитическое решение. В сложных случаях получить конкретный результат возможно только при использовании метода Монте-Карло.

Поток заявок. Первый вопрос, возникающий при рассмотрении такой системы: что представляет собой поток поступающих заявок? Этот вопрос решается опытом, путем достаточно длительного наблюдения за заявками. Изучение потоков заявок в различных условиях позволило выделить некоторые достаточно часто встречающиеся случаи.

Простейшим потоком (или потоком Пуассона) называется такой поток заявок, когда промежуток времени $\Delta\tau$ между двумя последовательными заявками есть случайная величина, распределенная в интервале $(0, \infty)$ по экспоненциальному закону. Формулу для розыгрыша $\Delta\tau$ легко получить из уравнения для экспоненциального распределения, которое в нашем случае запишется так:

$$\Delta\tau = -\lambda^{-1} \ln \gamma. \quad (1.1.51)$$

Так, описанная система обслуживания в соответствии с принятой классификацией является системой типа $M|D|N$.

Обозначим момент освобождения i -й линии через τ_i . За начальный момент расчета выберем момент поступления первой заявки $\tau_1 = 0$. Можно считать, что в этот момент все τ_i равны τ_1 , т. е. все линии свободны. Время окончания расчета равно $\tau_{кон} = \tau_1 + \tau$.

Первая заявка поступает на линию № 1. Значит, в течение времени $\Delta\tau_1$ эта линия будет занята. Поэтому мы должны τ_1 заменить новым значением $\tau_{1нов} = \tau_1 + \Delta\tau_1$, добавить единицу к счетчику выполненных заявок и перейти к рассмотрению второй заявки.

Предположим, что некоторое количество k заявок уже рассмотрено. Тогда надо разыграть момент поступления $(k+1)$ -й заявки. Для этого выберем очередное значение γ и по формуле (1.1.51) вычислим очередное значение $\Delta\tau = \Delta\tau_k$, а затем вычислим момент поступления $\tau_{k+1} = \tau_k + \Delta\tau_k$. Свободна ли в этот момент линия? Для установления этого нужно проверить условие

$$\tau_1 \leq \tau_{k+1}. \quad (1.1.52)$$

Если условие (1.1.52) выполнено, то, значит, к моменту τ_{k+1} линия уже освободилась и может обслуживать эту заявку. В этом случае мы должны заменить τ_1 на $\tau_{k+1} + \Delta\tau_1$, добавить единицу к счетчику выполненных заявок и перейти к следующей заявке. Если условие (1.1.52) не выполнено, то это значит, что первая линия в момент времени τ_{k+1} занята. Тогда мы проверяем, свободна ли вторая линия:

$$\tau_2 \leq \tau_{k+1}. \quad (1.1.53)$$

Если условие (1.1.53) выполнено, то мы заменяем τ_2 на $\tau_{k+1} + \Delta\tau_3$, добавляя единицу к счетчику выполнения заявок, и переходим к следующей заявке. Если и условие (1.1.53) не выполнено, то переходим к рассмотрению третьей линии.

Может оказаться, что при всех i от 1 до n $\tau_i > \tau_{k+1}$, т. е. все линии в момент τ_{k+1} заняты. Тогда надо добавить единицу к счетчику отказов и потом перейти к рассмотрению следующей заявки.

При выполнении условия $\tau_{k+1} > \tau_{\text{кон}}$ опыт заканчивается. Условие проверяется каждый раз при вычислении очередного значения τ_{k+1} . В счетчике выполненных заявок и в счетчике отказов будут храниться числа $n_{\text{вып}}$, $n_{\text{отк}}$.

Описанный опыт повторяется N раз, и результаты всех расчетов усредняются. После этого делается заключение о работоспособности изучаемой линии массового обслуживания.

Проведем оценку емкости кассетного накопителя станка, работающего в составе роторно-конвейерной линии, если поступающие на обработку детали образуют пуассоновский поток с параметром $\lambda = 0,1 \text{ мин}^{-1}$. Длительность обработки станком одной детали составляет 0,1 мин.

Решение. Разберем поставленную задачу в терминах предыдущего примера. Заявками в данном случае являются поступающие в станок детали. Обслуживающим каналом является станок. Интервалы времени между поступающими деталями в результате случайных задержек на предыдущих этапах обработки являются случайными величинами, которые можно рассчитать в соответствии с установленным законом распределения по следующей формуле: $\Delta\tau_3 = -\lambda^{-1} \ln \gamma$.

Необходимость установки кассетного накопителя обусловлена тем, что детали приходят неравномерно – случайным образом. И хотя по условию задачи производительность станка и предшествующего участка соответствуют друг другу, существует вероятность того, что в течение некоторого промежутка времени деталей будет приходить больше, чем их может обработать станок. Поэтому в его конструкции должно быть предусмотрено приемное устройство, куда приходящие «лишние» детали будут размещаться и извлекаться оттуда по мере освобождения рабочего инструмента станка в те моменты времени, когда деталей приходит меньше. Возникает следующий вопрос. Сколько необходимо предусмотреть позиций для размещения деталей в кассетном накопителе?

Построим модель для имитации описанной ситуации и проведения статистических испытаний на ЭВМ в соответствии с поставленной задачей.

Отличие данной задачи от уже рассмотренного примера состоит в количестве обслуживающих каналов. В данном случае канал (станок) – один. Следовательно, необходимо осуществлять проверку только одного условия – закончена ли обработка предыдущей детали к моменту поступления следующей или нет: $\tau \leq \tau_{k+1}$, где τ – очередной момент окончания обработки детали, τ_{k+1} – момент поступления новой детали.

Если это условие не выполнено, деталь должна помещаться в кассетный накопитель. Так, другое отличие состоит в дисциплине очереди, которую образуют приходящие заявки. В предыдущем примере при отказе заявки пропадали, а

мы вели подсчет отказов. В данном случае заявки не пропадают, а образуют очередь. Ее величина в любой момент времени не должна превышать емкости кассетного накопителя. Наша задача состоит лишь в том, чтобы определить верхнюю границу очереди.

Отсчет времени будем проводить с момента прихода первой детали. Деталь сразу поступает на обработку, и, следовательно, рабочий инструмент освободится через время, равное длительности обработки детали $\Delta\tau = \tau_{обр}$.

Вычислим момент поступления второй детали $\tau_2 = \tau_1 + \Delta\tau_2 = \tau_1 + (-\ln\gamma_1/\lambda)$. Если окажется, что $\tau_2 < \Delta\tau$, то к счетчику деталей в накопителе прибавляем единицу. Если же $\tau_2 > \Delta\tau$, то к моменту прихода второй детали рабочий инструмент уже освободился, и она не будет размещена в накопителе, а сразу поступит на обработку.

Пусть к некоторому моменту $\Delta\tau_n$ завершена обработка и очередная деталь извлечена из накопителя. Обозначим количество оставшихся в накопителе деталей через N_R . Предположим, что $N_R > 0$, рассмотрим возможные варианты развития событий. Момент поступления следующей детали найдем по формуле

$$\tau_{n+1} = \tau_n + (-\ln\gamma_n/\lambda).$$

Если условие $(\Delta\tau_n + \tau_{обр}) = \Delta\tau_{n+1} < \tau_{n+1}$ выполняется, то к N_R прибавим единицу. До момента $\Delta\tau_{n+1}$ на обработку может поступить не одна деталь, может оказаться, что

$$\Delta\tau_{n+1} < \tau_{n+2} = \tau_{n+1} + (-\lambda^{-1}\ln\gamma_{n+1}).$$

В этом случае прибавим к N_R не единицу, а двойку и т. д.

Допустим, что к моменту времени $\Delta\tau_{n+1}$ в накопителе стало N_R^* деталей. В момент $\Delta\tau_{n+1}$ одна из них будет извлечена для дальнейшей обработки. В накопителе останется $(N_R^* - 1)$ деталей.

Может оказаться, что в промежутке времени $\Delta\tau_{n+1} - \Delta\tau_n$ не поступит ни одной детали. Это произойдет в случае, если

$$(\Delta\tau_n + \tau_{обр}) = \Delta\tau_{n+1} > \tau_{n+1}.$$

Тогда в момент $\Delta\tau_{n+1}$ в накопителе останется $N_R - 1$ деталей. Проводя вычисления в соответствии с приведенной схемой, мы получим одну из возможных реализаций искусственного процесса рождения и гибели в соответствии с заданными вероятностными характеристиками действительного процесса. Пусть в течение интересующего нас времени непрерывной работы станка максимальная длина очереди (количество деталей в накопителе станка) составила $N_R^{(1)}$. Понятно, что $N_R^{(1)}$ – случайная величина и ее нельзя принять в качестве емкости кассетного накопителя. Проведем расчет по принятой схеме N раз. В результате получим ряд значений $N_R^{(i)}, i=1,2,\dots,N$. Из полученных значений найдем максимальное количество деталей в накопителе $N_{\max} = \max\{N_R^{(i)}\}$. Если N достаточно велико, то N_{\max} может служить оценкой количества позиций для приема деталей в накопителе станка.

Описанный метод позволяет рассчитывать несравненно более сложные системы. Например, величина $\Delta t_{обр}$ может быть не постоянной, а случайной и различной для различных линий. При этом представляется возможным учесть различную производительность станков или различную квалификацию обслуживающего персонала. Схема расчета остается в основном такой же, но значение времени обслуживания придется разыгрывать для каждой линии.

Можно моделировать так называемые системы с ожиданием, в которых заявки сохраняются в системе некоторое время, и если за это время какая-то из линий освободится, то она обслужит эту заявку. Можно учесть случайный выход из строя отдельных станков и случайное время ремонта каждого из них, изменение плотности потока деталей и многое другое.

Чтобы получить имеющие практическую ценность результаты расчетов таких сложных систем, приходится достаточно тщательно изучать действительные потоки заявок, проводить хронометраж работы отдельных узлов и т. д. В некоторых случаях необходимо знать вероятностные законы работы отдельных частей системы. Тогда метод Монте-Карло позволяет проводить расчет работы всей системы, как бы сложна она ни была.

Такие методы расчета чрезвычайно полезны при планировании предприятий: вместо дорогостоящего или невозможного эксперимента в натуре мы можем экспериментировать на ЭВМ, моделируя различные варианты организации работы или использования оборудования.

Моделирование технологических процессов. Метод Монте-Карло может оказаться весьма эффективным при анализе процессов, в которых вещество при переработке проходит через зоны с различными режимами. Пусть изменение свойств веществ в этих зонах зависит от времени нелинейно. Тогда информации о распределении элементов потока вещества по времени пребывания в аппарате в целом для расчета степени обработки недостаточно. Если зон с разным режимом много, то решить задачу аналитически, даже при линейной зависимости параметров процесса от времени, сложно. Тогда метод Монте-Карло может оказаться единственно приемлемым способом решения задачи.

В качестве примера рассмотрим многосекционную сушилку. Пусть высушиваемый материал последовательно проходит через участки с различной температурой. В первую секцию подается воздух с высокой температурой, которая снижается от секции к секции по мере приближения к выгрузке. Такая схема организации процесса может встретиться при сушке термочувствительных продуктов. Для аппарата периодического действия это равноценно проведению процесса с понижением температуры во времени. В нашем конкретном примере увеличение температуры в первых секциях могло быть вызвано стремлением компенсировать потерю производительности. Но после перехода на непрерывный режим работы изменилась не только производительность. Некоторая часть материала по результатам анализа оказалась подвержена тепловой деструкции, пришла в негодность. При непрерывном режиме работы в описанном случае может оказаться, что частицы, которые находились в аппарате более длительное время, в результате окажутся высушенными в меньшей степени, и наобо-

рот. Это кажущееся на первый взгляд противоречие возникает в результате того, что имеет значение не только время пребывания частиц в аппарате в целом, но и то, как это время распределено между отдельными зонами. Важно время обработки частиц в каждой секции аппарата.

При использовании метода Монте-Карло схема расчета процессов с указанными особенностями может быть следующей.

Предположим, что изменение некоторого определенного свойства (в рассматриваемом примере это свойство – влагосодержание материала) в течение промежутка времени $\Delta\tau_i$ от момента входа частицы в некоторую зону i до момента выхода из нее происходит в соответствии с некоторой известной кинетической зависимостью. Короче говоря, имеется возможность вычислить изменения определенного свойства за промежуток времени $\Delta\tau_i$ в этой зоне. Условия процесса в каждой зоне могут быть обобщены в виде кривых сушки в периодическом режиме при разной температуре.

Считая одну секцию в течение промежутка $\Delta\tau_i$ периодически действующим аппаратом, при некоторых допущениях указанные аналитические зависимости для кривых сушки могут быть использованы для расчета изменения влагосодержания частицы в данной секции. Поскольку время $\Delta\tau_i$ – случайная величина, то ее значение может быть определено путем розыгрыша величины γ с последующим ее преобразованием в соответствии с действующей структурой потоков, определяющей распределение времени пребывания вещества в этой зоне. Для ячейки полного перемешивания, в качестве которой может быть принята одна секция аппарата с псевдоожиженным слоем, длительность $\Delta\tau_i$ может быть определена по формуле $\Delta\tau_i = -\langle\tau_i\rangle \ln \gamma_i$, где $\langle\tau_i\rangle$ – среднее время пребывания потока в ячейке с номером i .

Аналогично можно определить значение времени пребывания для каждой зоны в аппарате, после чего рассчитать значение определяемого свойства на момент перехода из одной зоны в другую. После попадания частицы в очередную зону расчет производится в соответствии с новым условием обработки.

Для наглядности и упрощения задачи, а также демонстрации возможностей метода Монте-Карло будем считать, что представление кривых сушки при разных температурных режимах в нашем примере возможно в виде простой зависимости $u = u_0 \exp(-k_t \tau)$, где k_t – постоянная для данного температурного режима величина. На практике для приближенного расчета может оказаться достаточно двух-трех функций для аппроксимации отдельных участков экспериментальных кривых сушки.

Последовательность расчетов влагосодержания частиц на выгрузке видна из рис. 1.1.20. Каждая кривая соответствует зависимости влагосодержания от времени при сушке материала в периодическом режиме при определенной температуре. Выделенные участки кривых представляют одну из возможных «траекторий» имитируемого процесса сушки для отдельной частицы. Предположение об отсутствии обмена влагой между отдельными частицами здесь также остается в силе.

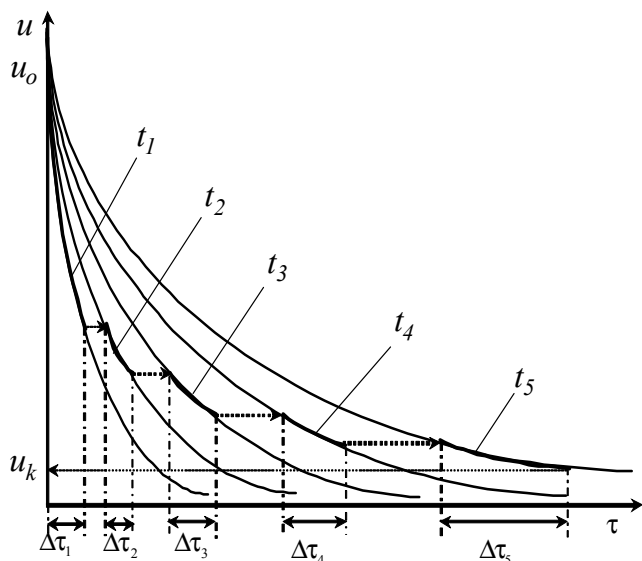


Рис. 1.1.20. Кривые сушки в периодическом режиме и одна из возможных траекторий процесса сушки отдельной частицы в непрерывном режиме

Полученное значение u_k конечного влагосодержания одной частицы является случайной величиной, и по нему нельзя судить о работе аппарата. Для получения полной картины результатов процесса сушки необходимо провести продуманный статистический эксперимент не один раз. Результатом расчета должна стать кривая распределения влагосодержания частиц, попавших на выгрузку, по которой можно судить об эффективности работы аппарата в целом.

Дополнительную информацию может дать распределение времени пребывания частиц в аппарате в целом $\langle \tau_a \rangle = \sum_{i=1}^5 \Delta \tau_i$. Возможно, что решающим факто-

ром для данного примера с термочувствительным материалом может стать время пребывания частиц в аппарате, начиная с момента времени, когда их влагосодержание достигает некоторого критического значения u^* .

Расчет характеризующих сушку параметров по приведенной схеме может быть легко автоматизирован. Моделирование на ЭВМ может сэкономить время и дорогостоящие материалы при поиске оптимальных условий, при которых будет найдено удовлетворительное соотношение между доступным уровнем потерь и уровнем качества материала и производительностью аппарата. Оптимизация проводится за счет изменения размеров секций, температуры воздуха в секциях, времени пребывания.

Подведем итоги. Аналогичная схема расчетов может быть применена и для других технологических процессов, в которых для отдельных частиц обрабатываемого материала наблюдается неравномерное распределение времени пребывания в зонах с разным режимом. Например, указанным способом расчета можно воспользоваться при определении вероятности попадания нерастворенных

частиц на выгрузку из каскада аппаратов непрерывного действия. Изменяющимися от одного аппарата каскада к другому условиями в данном случае будут температура среды, концентрация, интенсивность перемешивания, различная структура потоков. В этом применение метода Монте-Карло значительно упрощает процедуру расчета и позволяет его автоматизировать.

1.2. УПРАВЛЕНИЕ КАЧЕСТВОМ ОБЪЕКТОВ ТЕХНИКИ

1.2.1. Производство дисперсных материалов и изделий на их основе

Необходимые качественные показатели дисперсных материалов достигаются на стадии их производства. Насколько совершенно это производство, настолько высоки качественные показатели выпускаемых на их основе изделия. Производство характеризуется наличием малопроизводительных аппаратов и, как следствие, высокой трудоемкостью, не может удовлетворять современным требованиям. Это явилось причиной системных исследований технологии переработки дисперсных материалов, которые декомпозируются на два основных направления:

- создание стратегии синтеза оптимальных структур для фаз подготовки компонентов и приготовления составов;
- системный анализ существующих технологий, аппаратов и перерабатываемых материалов и разработка требований к вновь создаваемым перспективным технологиям, аппаратам, агрегатам и автоматизированным линиям.

Системные исследования являются неотъемлемой частью создания стратегии синтеза оптимальной структуры производства.

Разработка ключевых положений стратегии синтеза базировалась на системном анализе производства дисперсных материалов как многоуровневой химико-технологической системы. Ее структуре присущи основные свойства многоменклатурных ХТС: многомерность, многосвязность, многоплановость функционирования, эволюционирующий характер, нестационарность технологий и их цикличность. Эти особенности позволяют организовывать совмещенные или мобильные структуры ХТС, устанавливать параллельно работающие аппараты, многократно использовать одни и те же аппараты в пределах одной ХТС. Мобильность производств дисперсных материалов определяется их аппаратурной избыточностью.

Стратегия синтеза оптимальных структур ХТС предусматривает решение оптимизационной задачи поиска:

- значений варьируемых технологических параметров переработки;
- топологических вариантов структуры ХТС;
- физико-механических свойств материалов до переработки при заданных требованиях к их физико-механическим свойствам после переработки.

Исходной информацией является начальный, генерированный на стадии разработки изделия вариант структуры ХТС, годовые объемы производства, номенклатура технологического оборудования, его расположение по производственным зданиям и конструктивно-технологические параметры.

Задача синтеза оптимальных структур ХТС декомпозируется на подзадачи синтеза отдельных процессов переработки. Осуществляется выбор технологического оборудования и последующая оценка уровня оптимальности выбранных решений. С этой целью могут быть использованы эвристические алгоритмы оценки топологических вариантов. Варианты создаются с применением методов случайных чисел, комбинаторного поиска ветвей и границ. Нереализуемые варианты отбрасываются с помощью эвристик, учитывающих в основном требования по обеспечению безопасности производства, например невозможность совмещения отдельных групп компонентов. Направленность поиска обеспечивается минимизацией структурных составляющих и экономических параметров производства.

В различных отраслях промышленности (пиротехнической, химической, фармацевтической, пищевой) приготовление составов имеет свои специфические особенности. Можно выделить следующие основные составляющие производства: смешивание, гранулирование, сушка. Приготовление многокомпонентных гранулированных составов – это сложный многостадийный и многоуровневый технологический процесс. Конечной целью его является получение смеси, соответствующей заданным параметрам: дисперсность гранул, соотношение компонентов в гранулах, сыпучесть смеси, способность к агломерации, влажность, прочность гранул, реологические свойства материала.

Возможны два варианта схемы производства дисперсных материалов.

Первый подразумевает раздельную реализацию отдельных процессов, и для проведения каждого из них используется специальное оборудование, которое может быть разнесено в пределах производственного участка или находиться в различных зданиях.

Второй вариант основан на реализации технологии в одном химико-технологическом агрегате, который является самостоятельным машиностроительным изделием и включает отдельные аппараты, машины, вспомогательное оборудование, приборы КИП и АСУТП, т. е. технические средства, необходимые для производства дисперсных материалов. Экономические преимущества этого варианта безусловны. Ликвидируется ряд промежуточных и вспомогательных операций, снижаются транспортные расходы, уменьшается потребность в производственных площадях и помещениях, сокращается время контакта с опасными веществами. Весьма важны аспекты технологической эффективности и качества продукции. Возможность проведения гранулирования непосредственно вслед за смешиванием в том же аппарате позволяет избежать сегрегации и добиться заданного соотношения компонентов смеси в каждой грануле. Удаление летучего компонента или влаги связующего из гранул совместно с гранулированием обеспечивает *дозревание* гранул, увеличивая тем самым их прочность.

Анализ существующих смесителей и грануляторов должен быть направлен на выявление конструкций, позволяющих обеспечить совмещение смешивания, гранулирования и сушки составов, а также сопутствующей им пластификации составов (пиротехнических) в одном аппарате. Важен выбор способа проведе-

ния смешивания, который должен базироваться на общих технологических принципах.

Часто используется наиболее простой – периодический способ смешивания, при котором цикл работы смесителя включает время загрузки, смешивания и выгрузки. Продолжительность пребывания смешиваемых локальных объемов материалов в аппарате одинакова, поэтому качество распределения частиц в них в пределе соответствует равновесному состоянию для выбранного режима работы. Альтернативой периодическому способу может служить непрерывный проточный способ смешивания. Непрерывные установки смешивания оправданы при больших производительностях.

Для измельчения, смешивания, сушки, гранулирования, дозирования и пресования (формования) разработаны математические модели. Они нашли применение при:

- разработке автоматизированных систем управления, включающих программное обеспечение и системы обратных связей (от неконтактных датчиков химического состава, влажности, температуры, давления и др.);
- решении задач оптимизации поиска рациональных режимов переработки.

Развитие второго направления системных исследований связано с необходимостью комплексного развития структурных составляющих производства дисперсных материалов.

Предложена классификации компонентов и составов по физико-механическим свойствам. Разработана система выбора способов переработки, типов применяемых аппаратов, агрегатов и автоматизированных линий.

На фазах подготовки компонентов и приготовления составов созданы гибкие производственные агрегаты и автоматизированные линии, реализующие операции пневмотранспорта, струйного измельчения, сушки, смешивания и гранулирования. Агрегаты по переработке компонентов включают весовое дозирование, роботизированные технологические комплексы, установки пневмотранспорта, струйные мельницы и барабанные сушилки.

Агрегаты приготовления составов включают лопастные и вибрационные смесители, грануляторы протирочные, тарельчатые и ленточные сушилки. Компоновки модулей и автоматизированных агрегатов зависят от объема производства и физико-механических свойств перерабатываемых материалов.

Выполнение работ по созданию перспективной технологии поточно-механизированных производств показало, что за счет совершенствования конструкции изделий и оборудования возможно: повышение производительности труда в 1,5–2 раза; снижение суммарной трудоемкости производства.

Решение этих задач может быть осуществлено только с помощью принципиально нового, технологического оборудования, каким являются химико-технологические агрегаты.

Совершенствование существующих производств направлено на улучшение качества выпускаемой на продукции, что напрямую связано с достигнутым научно-техническим уровнем используемых для этого химико-технологических агрегатов. Большое значение имеет технический уровень самих производств, их

технологичность – пригодность к выпуску на автоматизированных агрегатах, роторных и роторно-конвейерных линиях. При создании новых ХТА и модернизации существующих необходимо исходить из современных концепций совершенствования объектов техники.

1.2.2. Современные концепции совершенствования объектов техники

Создание объектов современной техники – это сложный многогранный и многоэтапный поиск, принятия и реализации в производстве на основе соответствующих *теорий*, необходимой совокупности организационных, проектных, конструкторских, производственных, технологических, эксплуатационных решений по целевому применению новых или усовершенствованных объектов.

Общая теория создания технических объектов, как и другие теории, должна включать две взаимодополняющие составляющие части: содержательную и формальную (рис. 1.2.1), которые формируются соответственно высшими и низшими уровнями структуры построения методологии научного познания.

Содержательная часть охватывает общенаучный подход к исследуемым и связанным с ними объектам, факторам, явлениям и процессам. В совокупности формируется исходный базис теории, а также выводимое из него по определенным логическим правилам содержание основных определений и категорий, законов и закономерностей, принципов и способов решения инженерных прикладных задач, формирующих методологию данной теории.



Рис. 1.2.1. Структура общей теории создания современной техники

Формальная часть, согласно методологии, охватывает рабочие методики, описывающие порядок и технику решения типовых инженерных задач с использованием соответствующих логико-математических правил, различного рода приемов и алгоритмов.

Если содержательная часть несет концептуальный подход и сущность общей теории создания технических объектов, определяя ее практическую результативность и ценность, то формальная часть более глубоко, строго и конкретно раскрывает содержательную часть, доводя ее до уровня практической реализации.

Общая теория создания технических объектов совершенствуется по мере развития техники, ставящей перед нею новые задачи и выступающей в роли движущего фактора совершенствования теории. Разработка общей теории создания современной техники является сложной научно-технической проблемой.

Проблематичность разработки общей теории создания современной техники, в частности в области создания и производства пиротехнических изделий, определяется тем, что объекты, условия и факторы, формирующие их разработку, производство, эксплуатацию и применение, обладают слабой склонностью к формализации. Они характеризуются многогранностью, сложностью, многими вариантами, непостоянством во времени и недостаточной определенностью, наличием субъективных элементов.

В типичных ситуациях, складывающихся при создании новых объектов техники, не всегда представляется возможным объективно и своевременно *взвесить* возможные варианты реализации весьма высоких и противоречивых требований к ним, определить более или менее приемлемый вариант их схемного построения и конструктивного выполнения, технологии изготовления, способов эксплуатации и применения. Указанные обстоятельства обуславливают резкое повышение требований к уровню теоретического обеспечения создания современной техники.

Не требует особых доказательств то положение, что решение проблем повышения уровня функционального качества новых технических объектов и экономии затрачиваемых на их создание ресурсов зависит от достигнутого уровня разработки общей теории их создания. На основе ее принципов и методов устанавливается и обеспечивается требуемая функциональная и экономическая эффективность новых объектов техники, их технико-экономические уровни, сроки обновления техники, предопределяется *нагрузка* на экономику соответствующего предприятия, принимающего участие в ее создании.

Разработка формальной части общей теории создания объектов ведется в настоящее время в прямой связи с созданием действующих систем автоматизированного проектирования (САПР).

В настоящее время можно говорить о существовании трех формальных подходов к совершенствованию объектов техники: комплексная методология проектирования, системный подход, инженерно-кибернетический подход.

Комплексная методология проектирования разработана в нашей стране и предполагает не только техническое, но и операционное и экономическое проектирование. При становлении комплексной методологии *операционное проектирование* оформилось как новая составная часть общей методологии проектирования. В ходе ее реализации выбираются цели разработки, способы производства, эксплуатации и целевого применения разрабатываемых образцов техники, дается количественная оценка результатов возможных ситуаций с применением различных вариантов этих образцов с целью выработки наиболее рациональных проектных решений. Оно базируется на теории исследования операций, обобщающей и систематизирующей количественные методы оценки ситуации и подготовки решений задач различной природы. Операционное проек-

тирование позволило устанавливать количественное соотношение между результатами технического и экономического проектирования, соизмерять цели и затраты, возможности и потребности, определять совершенство образцов техники на основании комплексных критериев технико-тактико-экономической эффективности, выражаемых в детерминированных и стохастических категориях типа «эффективность – стоимость».

Экономическое проектирование также стало новой составной частью теории создания объектов техники. При этом анализируются пути и способы разработки, промышленной реализации и функционального использования возможных вариантов построения объекта техники с точки зрения минимизации материальных затрат, требуемых для его создания и принятия наиболее экономически обоснованных проектных решений. Благодаря этой составной части комплексная методология проектирования превратила рубль в один из главных аргументов в технических спорах, возникающих при создании объектов техники. Внедрение комплексной методологии в практику их создания:

- резко расширило возможности объективного решения необходимого круга проектных задач, в том числе ранее недоступных методологиям энергетического и технического проектирования;
- изменило ранее сложившиеся (с позиций энергетической и технической методологий проектирования) представления об оптимальных решениях многих традиционных проектных задач;
- усложнило организацию проектирования и потребовало внедрения в практику методов вычислительной математики, программирования и ЭВМ.

В США разработка общей теории создания объектов современной техники, именуемых большими системами, начиная с конца 50-х гг. ведется на основе **системного подхода**, трактуемого американскими исследователями как сумма методов для решения сложных проблем, представленных в виде единого целого. Одной из первых попыток изложения основ теории проектирования больших систем, называемой в США системотехникой, является книга Г. Гуда и Р. Макола, которая содержит общую проблемную формулировку основных вопросов системотехники и упорядоченное изложение основных ее теоретических орудий. Перевод этой книги на русский язык практически совпал с появлением в нашей стране первых работ по комплексной теории проектирования.

Дальнейшее развитие системотехника получила в известных книгах А. Холла, Г. Честната, А. Уилсона и М. Уилсона, М. Рабина. Книга А. Холла ставит целью осознать системотехнику как процесс выбора систем, содержит ее важнейшие принципы и считается в США одним из лучших учебников по системотехнике, несмотря на то, что автор обходит в ней спорные вопросы, возникающие вокруг общих методологических положений системотехники.

Книга Г. Честната является существенным шагом вперед по сравнению с работами и направлена на исследование средств системотехники и содержит большое число полезных идей (в частности, таких, как *идея изменений*, понятие внешней среды системы, состав показателей оценки системы). Однако попытка их разработать и достигнуть методологической законченности системотехники

автору не удалась. Работа А. Уилсона и М. Уилсона посвящена рассмотрению идей системотехники в свете теории информации. Исходя из этой теории, работа по проектированию и разработке новой системы, по сути своей, представляет процесс преобразования информации вплоть до реализации системы в металле. Книга под редакцией М. Рабина, несмотря на название, претендующее на упорядоченное изложение основ системотехники с позиций конца 70-х гг., может рассматриваться только как изложение опыта группы специалистов-практиков по использованию системотехники при разработке управляющих информационных систем.

Проводя анализ развития теории проектирования объектов современной техники в США, нужно отметить и работы П. Хилла и Д. Диксона. Хотя они и не содержат концептуальных разработок системотехники, ценны рабочими материалами и рекомендациями по отдельным методологическим фрагментам указанной теории, в частности таким, как методология изобретательства, конструирования, выбора материалов, принятия инженерных решений (и с учетом требований эргономики, инженерной психологии и технической эстетики).

Непосредственно к системотехнике примыкает возникшая в США логико-аналитическая методология исследования сложных систем, разработанная корпорацией РЭНД как основа теории перспективного военного планирования, названная ее авторами анализом систем. Идея, принципы и методы анализа систем обобщены в книге Э. Квейда. Авторы методологии анализа систем рассматривают ее как необходимое условие развития аппарата исследования операций при перенесении последнего на расширенные проблемы большей сложности, системы более высокого уровня.

Методология анализа систем имеет ограниченное применение при создании объектов современной техники. Она предназначена для проведения анализа технических объектов с целью отбора наиболее перспективных с точки зрения оптимального планирования государственных задач, ресурсов и выдачи рекомендаций. Это в известной степени обусловлено *судейским* положением ее разработчиков – сотрудников корпорации РЭНД. Поэтому методология анализа систем без разработки и дополнения ее адекватной методологией синтеза систем, являющегося главным в процессе создания технических объектов, может рассматриваться только как составная часть общей теории создания современной техники.

Несмотря на ряд прогрессивных идей, высказываемых американскими авторами опубликованных в нашей стране работ по системотехнике, с позиций требований к общей теории создания объектов современной техники разработка ее методологии не может считаться завершенной даже в постановочном плане. Пока системотехника не имеет четко установленных принципов, определений, методов, конкретной структуры построения рабочей методологии, общей теоретической основы, которая с единых позиций объединила бы и увязала между собой ее положения, представляющие собой неупорядоченные своды субъективно формируемых разными авторами искусственных приемов.

Самими американскими специалистами по системотехнике высказываются сомнения в ее универсальности и перспективности. Так, в частности, по словам

А. Холла, «... то, что сейчас называется системотехникой, в конце концов будет рассматриваться как часть общего процесса проектирования. Некоторые идут гораздо дальше и усматривают в постепенном слиянии технического проектирования, исследования операций, системотехники, кибернетики и других областей симптомы грядущего рождения новой объединенной науки». Тем не менее можно назвать ряд книг отечественных авторов, признающих системотехнику как базовую теорию создания современной техники.

Инженерно-кибернетическая методология проектирования сложных объектов современной техники может рассматриваться как следующий шаг в развитии отечественной комплексной и американской системотехнической методологии, со всеми их концепциями комплексного и системного подходов. Она строится на базе кибернетического подхода. Инженерная кибернетика должна объединить методологию решения инженерных задач по управлению качеством различных технических объектов и формировать общую теорию создания новых объектов современной техники.

Анализ каждого из трех подходов показывает, что между ними нет принципиальной разницы, поскольку они опираются на одни и те же разделы общей науки создания объектов техники. Сама наука многогранна, и ее деление на те или иные теории во многом условно. Однако такое деление существует, и каждая из теорий является частью единой теории создания объектов техники.

Теория инженерного управления объединяет методологию формирования и достижения планируемых уровней качества техники на основе программно-целевого подхода. Подход представляет собой совокупность инженерных принципов, методов и приемов выработки и принятия формальных и неформальных решений по управлению качеством изделий. Она отражает главную направленность и суть управленческого подхода к качеству объектов техники и базируется на теории оптимального управления – одного из основополагающих разделов теоретической кибернетики.

В нашей промышленности разработка проблемы управления качеством технических объектов ведется в основном при создании и внедрении так называемой комплексной системы управления качеством продукции. Проблема управления качеством промышленной продукции сегодня приобрела не только научно-техническое, но и большое общественно-политическое значение. Пока достигнут весьма ограниченный методологический задел для теории инженерного управления качеством современной техники. Главное внимание концентрируется на обеспечении и повышении его уровня с помощью различного рода организационно-технических мероприятий, направленных на гарантированную реализацию и стабилизацию в производстве намеченных при разработке уровней качества тех или иных объектов.

Остаются неохваченными теоретические положения и принципы, методы и средства инженерного управления качеством объектов техники при их разработке. На этом этапе жизни объектов техники вырабатываются и принимаются основные решения, определяющие направления, способы и условия их разработки, производства, эксплуатации и целевого применения. Имеются самые

большие возможности по повышению его качества путем выбора оптимальных инженерных решений, диапазон которых резко сужается по мере перехода к этапу производственной реализации проекта.

Непосредственно к теории инженерного управления качеством современной техники примыкает **теория изобретательства**. Она охватывает исследования и обобщает принципы, приемы и методы *рождения* новых конструкторских идей и решений, повышения результативности этого процесса в условиях коллективного творчества, характерного для создания современной техники. Пробразом теории изобретательства, базирующейся на эвристике, изучающей закономерности и методику неформального поиска решений, можно считать разрабатываемый в нашей стране свод эмпирических приемов и правил рационализаторской и изобретательской деятельности, именуемый АРИЗ, а за рубежом – *мозговым штурмом*.

Одним из важнейших направлений повышения качества изделий является **теория технической квалиметрии**. Такое название дано теории измерения качества различных изделий. В рамках технической квалиметрии разрабатываются и объединяются методологии определения номенклатуры и уровня показателей, характеризующих отдельные свойства (частная квалиметрия) и качество объекта техники в целом (общая квалиметрия). Это весьма разносторонний в теоретическом отношении раздел, использующий аппарат весьма большого числа научных дисциплин, обеспечивающих установление уровня показателей свойств создаваемых технических объектов и их качества как функции этих свойств. В зарубежной литературе можно встретить эквивалентное понятие *теории технической квалиметрии*, именуемое *теорией ценностей*.

Теоретическая разработка проблематики частной технической квалиметрии при создании современной техники находится на удовлетворительном уровне и позволяет успешно решать ее задачи теоретическим путем при минимуме натурных экспериментов, в то время как теоретическое обеспечение общей технической квалиметрии нуждается в ускоренном развитии.

Теория исследования операций – теоретическая часть системы управления качеством, которая охватывает методологию анализа и синтеза различного рода целенаправленных действий (операций) с техническими объектами в процессе их создания и функционирования, обеспечивает выработку рациональных инженерных решений по их реализации. Ее методология предполагает выбор целей операций, последовательности их проведения, определяющих параметров и количественных критериев эффективности, оптимальных вариантов операционных решений с учетом различного рода ограничений и дисциплинирующих условий, неполной определенности. При выработке операционных решений на низших уровнях построения объекта техники используются методы классической теории исследования операций. На высших уровнях, где технические объекты приобретают большую размерность и сложность, необходимо использовать приемы и средства методологии анализа систем. Она предназначена для выработки рекомендаций в случаях, когда требуется:

- постановка и исследование задач в условиях большой неопределенности;
- выявление возможных принципов и области применения сложных технических объектов;
- выявление социальных, экономических и других специальных аспектов проблемы их создания и функционирования с позиций оптимального планирования в государственном масштабе.

Непосредственно к теории исследования операций примыкают теории организации и технологии производства. В качестве самостоятельной следует выделить теорию организации разработки современной техники, которая рассматривается в виде их раздела, – это *конструкторская подготовка производства*. Она служит связующим звеном между инженерным и экономическим анализом. Составными частями методологии данной теории являются теории эксплуатации и целевого применения объекта техники.

Теория технической эволюции охватывает исследования и объединяет методологические положения эволюционного подхода к техническим объектам, а также другим объектам и факторам, имеющим прямое или косвенное отношение к созданию и функционированию объектов техники, и включает установление характерных форм, принципов, факторов, закономерностей и механизма их развития. Теория технической эволюции сложных объектов современной техники образуется как сумма теоретических положений, характерных для эволюции различных входящих в них составных частей, имеющих, как правило, различную техническую природу и отраслевую принадлежность.

Прообразом теории технической эволюции можно считать широко известную научную дисциплину, именуемую *историей техники*. Эта дисциплина посвящена изучению техники в историческом, т. е. ретроспективном, аспекте. Несмотря на то что она уже много лет общепризнана и преподается в высших учебных заведениях, к сожалению, до настоящего времени находится на описательной стадии становления.

Непосредственно к теории технической эволюции примыкает **теория инженерного прогнозирования**. Ее методология направлена на исследование и обобщение методологических положений по предвидению возможных направлений, тенденций и результатов развития различных объектов, факторов и процессов. Результаты прогнозирования должны учитываться в ходе принятия инженерных решений при создании и функционировании современной техники. Научной базой для теории инженерного прогнозирования является такая современная научная дисциплина, как прогностика.

Центральной частью методологии совершенствования объектов техники следует считать **теорию построения технических систем**, которая базируется на общей теории систем. Она охватывает исследования и объединяет с позиций системного подхода теории построения структур (конструирования) как объектов в целом, так и их составных частей, имеющих различную техническую природу. Для объекта техники она предусматривает выбор:

- новых или известных принципов построения и действия;
- конструкционных материалов;

- условий сопряжения и увязки при изготовлении, сборке, строительстве, обслуживании и использовании;

- надежного совместного функционирования его составных частей.

В ней предлагается методология установления уровня автоматизации, роли и места человека с учетом его физических и психических возможностей при целевом использовании сложных объектов техники, на основе которых строятся биотехнические системы, являющиеся базой современного производства.

Основы данной теории излагаются в работах по описанию конструкции технических объектов, которые, к сожалению, строились без должного освещения системной природы современной техники. Кроме того, составными частями теории создания объектов техники можно считать теории конструирования, материаловедения, надежности, технической диагностики, эргономики, инженерной психологии. Постоянно возрастающий уровень автоматизации современной техники делает неотъемлемым необходимость существования теоретического обеспечения при создании автоматизированных систем управления ее функционированием.

В состав методологии построения технических систем можно ввести **бионику** в ее инженерном аспекте, которая стала научной основой для *копирования* у природы не только конструкторских решений и терминов, но и эволюционных законов, широко используемых ею в соответствии с принципом системного подхода. Важнейшей составной частью теории построения систем, обеспечивающей разработку ее основного рабочего инструмента, следует считать **теорию моделирования**, которая находит широкое применение при создании объектов техники. При моделировании исследуются, обобщаются и разрабатываются различные методы и средства инженерного априорного воспроизведения объектов, факторов и процессов в виде соответствующих моделей.

Теория технической оптимизации разрабатывает конкретные инженерные принципы, методы и приемы оптимизации большого числа проектных параметров, связанных с созданием объекта техники и его применением. Оптимизация опирается на математическое моделирование и проводится при наличии:

- самой произвольной математической формы выражения для зависимости критериев качества от параметров объекта техники и его функционирования;
- различных ограничений на область изменения значений этих параметров;
- неполной определенности в постановке задачи и начальных ограничений.

Она базируется на разделе математики, называемом математическим программированием и занимающимся изучением и разработкой методов отыскания экстремума функций, на некотором множестве независимых параметров.

Важной составной частью моделирования являются методы **инженерной алгоритмизации**. С использованием ее методов строятся оперативные, математические и комбинированные алгоритмы решения инженерных задач при разработке, производстве, эксплуатации и целевом применении современных объектов техники. Эти задачи представляются в форме логических правил, математических выражений, конструкторов, машинных программ, обеспечивающих формализацию и автоматизацию на основе ЭВМ в процессе их решения. Пред-

полагается максимально широкая ориентация на использование новых разделов математики, быстродействующих ЭВМ с постоянно возрастающими возможностями. Повышается уровень формализации и автоматизации решения инженерных задач при создании и применении современной техники.

Особое место в структуре систем управления качеством занимает **информационное обеспечение**, оформившееся как самостоятельная научная дисциплина и получившее название информатика. Она охватывает вопросы организации сбора, обработки, хранения, поиска и распространения научно-технической информации, необходимой при выработке инженерных решений в ходе создания и применения современной техники. Она может рассматриваться как один из разделов кибернетики, использующий в качестве научной основы математическую теорию информации. Информационное обеспечение предполагает построение и широкое использование различного рода автоматизированных информационно-справочных систем с соответствующими банками данных.

Перечисленные научные дисциплины далеко не исчерпывают те знания, которые могут составить теоретическую основу управления качеством дисперсных материалов. Однако они позволяют:

- предложить концепцию управления качеством изделий, которая должна учитывать основные закономерности управления как науки и его характеристики, иметь конкретную структуру, быть увязанной с общей стратегией управления и иметь формализуемую модель принятия решения;
- разработать методiku системного анализа при управлении качеством сложных технических систем, которая предполагает конкретизацию таких понятий, как система, элемент, системность, применительно к решаемой задаче; определение и уточнение содержания основных этапов системного анализа; обоснование выбора объекта исследования;
- выполнить анализ производства как сложной технической системы; выявить взаимосвязь отдельных ХТА; сформулировать основные требования с позиций управления качеством производства дисперсных материалов.

1.2.3. Управление и его характеристики

Идеология управления, в том числе и идеология управления качеством изделий, начала интенсивно развиваться примерно в 1950-х гг. С тех пор она претерпела существенные изменения, которые коснулись следующих аспектов:

- оценки той роли, которую играют задачи управления;
- принципиальных представлений о процессе и задачах управления.

Изменение **роли задач управления** обусловлено многими причинами, из которых существенны два принципиальных положения.

Во-первых, управление стало рассматриваться как атрибут взаимодействия систем – производства и изделия. Задачи управления имеют вполне сформированную структуру и методологию:

- задаются начальные и заключительные показатели качества изделия;
- формулируется критерий оценки эффективности различных стратегий перехода от начальных показателей качества к заключительным показателям;
- требуется найти такую стратегию, которая оптимизирует критерий оценки эффективности.

В более простой формулировке (для управления малыми системами): задача поиска при заданных ограничениях набора значений переменных, на котором оптимизируется заданный функционал оценки эффективности управления.

Имеет право на существование представление проблемы управления, исходя из идеи всеобщей взаимосвязи объектов, выражающейся категориями зависимости, обусловленности, причинности т. п. Взаимосвязь производства и изделия осуществляется через реализацию потребностей общества. В определенные промежутки времени в большинстве развивающихся систем между ее отдельными частями возникают отношения соподчинения (управления).

В таком случае задача управления должна ставиться и рассматриваться в плане того, что исходной точкой является не начальное и конечное качество изделия, а содержание объекта управления и всего того, что участвует в организации его функционирования. Любые цели управления могут быть достигнуты, если они отражают реально возможное функционирование объекта. Цели определенной подстройки, переделки, реформирования объекта могут быть достигнуты, если: его структура допускает желаемую перестройку; закономерности его функционирования *пересекаются* с преследуемыми целями.

Пусть, например, исследуется функционирование двух взаимодействующих систем (производства и изделия), и это функционирование адекватно описывается некоторым языком L . Предположим, что в определенном промежутке времени одна система управляет качеством другой. Для изучения закономерностей взаимодействия этих систем в данном промежутке времени необходимо поставить и решить задачу управления. Языком описания такой задачи должен стать язык L или близкий к нему, иначе потеряется адекватность представления о функционировании систем (рис. 1.2.2).

Приоритетным является не только структура объекта управления и всего того, что участвует в организации его производства, например производственная база, но и язык, адекватно описывающий функционирование объекта.

Во-вторых, управление рассматривается как принятие решений. Более двух десятилетий назад появилась еще одна тенденция в оценке роли задач управления. Было выдвинуто предположение о близости управления и принятия решений. Это касается близости управления и творческого мышления.

Исходя из предполагаемых механизмов творческого мышления были предложены новые методы управления. Их практическая реализация породила такие успешно развивающиеся направления, как ситуационное управление, интегрированные системы автоматизированного управления, экспертные системы, производственные системы с искусственным интеллектом.

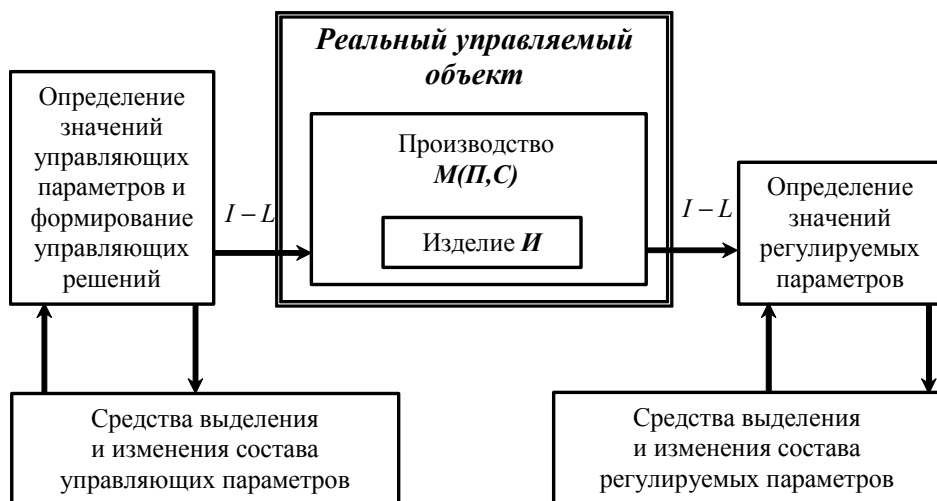


Рис. 1.2.2. Существенные параметры в структуре управления

Практически в каждом направлении при его конкретной реализации в системах управления достигается высокая степень автоматизации принятия решений. Это дает основание говорить о принципиальных возможностях *полной* автоматизации принятия решений в автоматизированных системах управления. Однако целесообразно отметить некоторые ограничения на возможности автоматизации принятия решений в целом.

Мышление человека принято считать речевым мышлением, т. е. некоторой акцией, которая контролируется сознанием. Рассуждая, человек описывает задачу, формирует цели и осуществляет ее решение. На этих этапах инструментом выражения является естественный язык. Поскольку задачи решаются человеком, как правило, успешно, то именно естественный язык обладает принципиальной полнотой описания. Следовательно, языком описания задач управления целесообразно выбрать естественный язык.

Человеком практикуются три вида вывода: дедукция, индукция и откровение (озарение). Вызывает определенные сомнения то, что вывод (получение результата) в целом может быть сведен к лингвистическим конструкциям. Принятие решений имеет принципиальную возможность полной автоматизации, если регулируемый сознанием вывод выражаем языком, т. е. можно говорить об автоматизации только дедуктивных построений (дедуктивного вывода).

Основные компоненты управления. Управление – это взаимодействие управляемого объекта (изделия), управляющего устройства и среды (производства и сферы потребления), в ходе которого происходит целенаправленное и прогнозируемое изменение структуры и конструкции управляемого объекта в рамках его возможного функционирования. Под системой управления можно понимать минимальную по своим возможностям организацию *вещества–энергии–информации* (ВЕИ) в рамках некоторой технологии, благодаря которой реализуется управление.

На основании проведенных рассуждений можно уточнить функциональные части системы управления.

Существенные параметры можно разделить на две группы:

- те, которые участвуют в формировании принятия решений и определяют их содержание, т. е. те, посредством которых и осуществляется управление, – назовем их управляющими существенными параметрами;

- те, по которым оценивается структура объекта, его поведение, словом, качество функционирования, – назовем их для определенности регулируемые существенными параметрами.

Обобщенные существенные параметры и, возможно, созданные системы управления будут зависеть от выбранной для управления из структуры изделия элементарной единицы. Более того, каждая ВЭИ составляющая объекта, выбранная для целей управления, будет определяться своим набором существенных параметров. В этой относительности существенных параметров заключены возможности их широкого выбора и кроются значительные трудности априорного формулирования состава каждой из группы для организации требуемого управления. Поэтому для системы управления важна роль и потребность компонентов по определению значений регулируемых и управляющих параметров, а также выделению и изменению состава этих параметров (рис. 1.2.2.). Язык информационно-энергетического взаимодействия $I-L$ может выступать в двух вариантах: для связи с управляющими воздействиями и для связи с системой управления посредством регулируемых параметров (рис. 1.2.3).

Средства формирования моделей могут быть представлены по-разному. В виде: некоторой взаимодействующей группы специальных объектов, лингвистических конструкций и языка формирования, определенного программно-аппаратного комплекса и т. д.

Существенным является не только то, что при любых реализациях в моделях всегда можно выделить аналог лингвистических конструкций, из которых она формируется, и аналог языка, осуществляющего формирование моделей. Наиболее важной является стратегия построения моделей, которая определяет то, что изменять, когда корректировать, к чему стремиться.

Новые данные об изделии, производстве, качестве функционирования системы управления в целом и т. п. – исходный материал для стратегии построения моделей, которые являются ядром всего комплекса, обеспечивающего формирование моделей.

Основная сложность состоит в том, что невозможно создать стратегию, способную начать работу с *пустыми* моделями. Априорно человек должен создать некую начальную модель, начальную ситуацию, с которой и начнет развиваться процесс управления. Полезность средств диалогового формирования начальных моделей и стратегий (как обучение или идентификация объекта) в структуре управления представляется очевидной (рис. 1.2.3).



Рис. 1.2.3. Формирование моделей в структуре управления

Языки моделирования и имитации. Моделирование и имитация являются центральными событиями в структуре управления. В них вырабатываются наиболее подходящие управляющие воздействия, оценивается качество управления, проводится экспериментирование на моделях изделия, производства и системы управления, принимаются превентивные меры защиты от нежелательных последствий управления.

В настоящее время в структурах управления при моделировании и имитации оперируют описаниями, представленными на языках, близких к естественным языкам, оперируют с нечетко выраженными понятиями, целями, ситуациями, критериями и т. д.

В составе средств моделирования и имитации основная нагрузка ложится не на языки моделирования и имитации функционирования объектов (изделия), а на стратегию моделирования. Какие эксперименты с моделями и в какой последовательности, с какими наборами существенных параметров и т. п. – основное содержание стратегии моделирования. Сюда же можно включить средства коррек-

ции и формирования конструкций языков имитации и моделирования, а также средства диалогового формирования начальных стратегий (рис. 1.2.4). Исходя из принципиальных соображений можно выделить несколько особенностей, характерных для управления качеством сложных технических объектов и значительно влияющих на техническую реализацию системы управления.



Рис. 1.2.4. Вариант структуры управления

Во-первых, объективно обусловленное наличие нескольких параллельных процессов управления. Это касается не только одновременного функционирования различных частей системы управления, но и принципиально порождается самой ее структурой (экспериментирование с моделями, коррекция моделей, выделение и оценка существенных параметров управления).

Во-вторых, объективное, априорно заданное существование объекта управления, для которого изначально отсутствует стратегия управления. Созданная затем для целей управления она может не учитывать особенности конкретного

изделия. При управлении могут корректироваться не только модели, стратегии, цели и языки, но и различные этапы общей стратегии управления.

Управление как *организация производства* проявляется во всех своих *вещественно-энергетически-информационных* качествах. Как показывает практика многих десятилетий, потребность корректировки системы управления при ее функционировании – это не *исключение*, а реальная закономерность организации управления.

В-третьих, массовая (общепринятая) реализация моделей и моделирования лингвистическими средствами на цифровых вычислительных машинах дискретного действия. Это может значительно расходиться с содержанием объекта управления. Например, адекватной моделью может являться обычная инструкция для мастера по проведению конкретной технологической операции.

В-четвертых, существенные различия сложности структур управления в отдельных узлах и в системе управления в целом. Более продуктивным будет принцип подобия сложности структур, когда и часть и система управления в целом в равной степени характеризуются основными функциями (рис. 1.2.4).

1.2.4. Стратегии принятия управляющих решений

Цель данного раздела – провести максимально сжатый анализ известных стратегий управления. При этом мы не делаем различия в том, на что направлено управление. Речь может идти как об управлении техническими объектами при их эксплуатации, так и об управлении качеством при их создании (пиротехническими изделиями). При анализе этих двух, казалось бы, различных задач используются одни и те же стратегии, которые могут отличаться только конкретным содержанием принимаемых решений.

Одна из самых важных особенностей многих современных систем управления характеризуется сложностью и неопределенностью объектов управления. Установилось даже такое мнение, что если объект прост и его математическое описание полностью известно, то изучение поведения системы управления таким объектом должно вкладываться в рамки однозначного алгоритма (классической теории автоматического регулирования). Если же объект сложный, да еще его математическое описание либо вообще неизвестно, либо известно не полностью, то управлением такими объектами должна заниматься кибернетика.

Сложность объектов и их неопределенность не так-то просто оценить. Сложные объекты существуют совсем не для того, чтобы ими управляли. Их существование и функционирование полезно независимо от того, умеем ли мы их хорошо описывать или хорошо ими управлять. Природа не опасается математических трудностей, она существует вне математики, вне зависимости от нашего понимания, и то, что она создает, не всегда вмещается в рамки хорошо изученных математических методов и концепций. Естественным является состояние, когда знания исследователя об объекте управления ограничены, его математические конструкции не полностью определяют этот объект.

Концепция черного ящика. Одним из наиболее важных и емких понятий кибернетики является понятие *черного ящика*, которое появилось в первые годы зарождения кибернетики как самостоятельной науки. С самого начала кибернетика была определена как наука об управлении *очень сложными вероятностными системами, имеющими гомеостатическую природу*. В качестве примера приводились живые организмы, которые по скорости реакции, оперативности обработки информации, способности строить удивительно надежные выводы на основе чрезвычайно скудного объема информации существенно опережали любые технические системы. Основную особенность *черного ящика* подчеркивает не столько сложность системы, сколько ее неопределенность, поскольку сама сложность системы порождается отсутствием ее детального описания. Каждый раз в начале исследования речь идет о недоступной для наблюдения системе. Иногда в буквальном смысле – из-за отсутствия необходимых технических средств проникновения в нее. В других случаях – из-за непонимания механизмов, действующих в системе.

Экстремальное управление реагирует на возможные непредвиденные изменения свойств объекта и в соответствии с этими изменениями способно перестраивать свою работу.

При непрерывном изменении различных возмущающих воздействий задачей экстремального управления является поддержание одного или ряда его показателей на наиболее высоком или наиболее низком, практически достижимом уровне. Одно из основных условий целесообразности применения экстремальных систем – это непрерывное изменение условий оптимальности технологического процесса в результате изменения каких-либо внешних воздействий или характеристик его внутреннего состояния. Система экстремального управления эффективна только при наличии экстремальной характеристики.

Экстремальное регулирование целесообразно применять только тогда, когда экстремальные характеристики непрерывно изменяются.

Управление экстремальными объектами так же, как и обычное управление, может быть организовано по трем основным принципам:

- по возмущениям системы разомкнутого типа с заранее заданной характеристикой управления;
- по отклонениям регулируемой величины (системы замкнутого типа);
- используя сразу оба этих принципа (комбинированные системы).

Основная особенность экстремального управления заключается в том, что существует неопределенность в положении рабочей точки относительно экстремума. Одному и тому же значению показателя экстремума (регулируемой величины) могут соответствовать два значения управляющего воздействия.

Экстремальное управление – это непрерывный поиск экстремума, который осуществляется в виде пробного изменения управляющих воздействий (концентрации двух компонентов), анализа результатов изменений регулируемой величины (светоотдачи) и определения направления изменения управляющих воздействий с целью достижения экстремума.

Дифференциальные системы экстремального управления по своей структуре абсолютно инвариантны к возмущениям, смещающим экстремальную характеристику объекта в вертикальном направлении. Это очень важно, так как другие экстремальные системы плохо реагируют на эти возмущения. Если же в дифференциальной системе организовать дополнительные связи по возмущениям или хотя бы гибкие связи по регулируемому воздействию, то можно практически добиться абсолютной ее инвариантности к возмущениям. Это свойство дифференциальных экстремальных систем управления выгодно отличает их от остальных экстремальных систем. Однако они могут быть построены только там, где удастся построить необходимые модели объекта управления.

Самонастраивающиеся системы. В обычных системах управления заранее задается закон управления, который не зависит от внешних условий их функционирования, внутренних параметров, динамических характеристик входных и выходных сигналов и т. д. Не ставится задача приспособляемости системы к внешним условиям. Даже в экстремальных системах нет возможности подстройки ее внутренних параметров к решаемой задаче, не предусматривается изменение динамических свойств в зависимости от характера возмущающих воздействий.

Шаг вперед в теории и практике автоматического управления был сделан с появлением самонастраивающихся систем, приспособляющихся к изменениям внешних и внутренних условий их функционирования. В них закон управления автоматически и целенаправленно изменялся для достижения требуемых характеристик управления. В самонастраивающихся системах заложены устройства или алгоритмы, с помощью которых удастся получить информацию о статических и динамических характеристиках при их функционировании.

Характерным признаком самонастраивающихся систем является их начальная неопределенность. При появлении неопределенности, в какой бы форме она ни проявлялась, возникает необходимость создания специальных средств ее устранения. Неопределенность может быть внесена внешней средой – неизвестно, как изменяются внешние условия и как нужно изменить структуру и параметры системы, чтобы приблизиться к поставленной цели. Неопределенность может выражаться в недостатке информации об исходном состоянии системы. В дальнейшем в результате самонастройки эта неопределенность постепенно устраняется. Система становится детерминированной и, следовательно, утрачивает качество самонастройки.

Различают самонастраивающиеся системы с пассивной настройкой. Они не изменяют своих параметров, но могут работать в широком диапазоне благодаря специально выбранной конструкции. К другому классу можно отнести системы, настраивающиеся на входной сигнал. Экстремальные системы тоже могут быть отнесены к самонастраивающимся. Они всегда выбирают такие воздействия на объект, которые постоянно поддерживают экстремальные значения регулируемой величины, несмотря на то, что экстремум непрерывно перемещается на плоскости или в пространстве. Некоторые самонастраивающиеся системы приспособляются к изменению их собственных передаточных характеристик.

Комбинированное управление. Опыт автоматизации сложных производств показывает, что детерминированный подход и подход *черного ящика* не исключают друг друга. При управлении сложными и не вполне определенными объектами нужно стремиться к возможно более точному и полному описанию объектов управления и полученные при моделировании сведения использовать для построения системы управления. Если можно сравнительно просто выявить какие-либо закономерности об объекте, то не следует *скрывать* их от системы управления. В ее детерминированной части необходимо использовать то, что известно об объекте достаточно достоверно. Принципы самоорганизации вступают в силу там, где кончаются возможности математического описания. Самоорганизующаяся часть должна только дополнять недостающую информацию при самонастройке системы, которую принято называть комбинированной.

Сложная система управления должна быть комбинированной – детерминированно самоорганизующейся. Только простые задачи управления можно решить либо чисто детерминированными, либо полностью самоорганизующимися системами. Известные в теории управления комбинированные системы обеспечивают наибольшую гибкость настройки. Детерминированная разомкнутая часть, как и связь по возмущению, должна быть точно рассчитана конструктором и обеспечивать быстрое, но грубое управление. Грубое потому, что всякая модель только приближенно описывает объект. Самоорганизующаяся часть аналогична обратной связи в обычных системах – ее необязательно точно рассчитывать, следовательно, нет необходимости глубоких знаний об объекте.

Адаптивное управление. Когда речь шла о самонастраивающемся, самоорганизующемся и комбинированном управлении, то подразумевалась начальная неопределенность объекта, управление которым осуществляется по мере раскрытия этой неопределенности. Управление приспособляется к вновь выясненным особенностям объекта. Возможность управления объектами при неполной и даже очень малой исходной информации основана на применении адаптации (приспособления) и обучения в автоматических системах, которые уменьшают первоначальную неопределенность на основе использования информации, получаемой при управлении.

Наиболее четко эти связи просматриваются при анализе проблемы адаптации в задачах распознавания, управления, фильтрации, надежности, идентификации, где сформулирован общий подход к проблеме адаптации и показано, что многие ранее существующие методы, которые рассматривались как самостоятельные и независимые, вкладываются в рамки этого подхода.

Любая задача оптимизации, в том числе и задача оптимальной адаптации, может быть сведена к выбору лучшего варианта из большого их количества. Качество того или иного варианта определяется некоторым показателем, отражающим степень достижения поставленной цели.

Такая задача принципиально отличается от традиционных задач оптимизации (как детерминированных, так и стохастических) тем, что модель объекта управления неизвестна и нет исходной информации для предварительного расчета оптимального закона управления. В рамках классической теории опти-

мальных систем такая задача просто не имеет решения, в то время как адаптивный подход указывает путь ее решения. Адаптивную систему управления можно существенно упростить, исключив задачу идентификации объекта и заставив ее научиться *подражать* некоторой другой системе, которая может быть принята за эталон. Не важно, какова будет структура новой системы, важно только то, чтобы она хорошо подражала эталонной модели (системе). Если мы хотим, чтобы адаптивная система по своим свойствам приближалась к эталону, то его выбор требует определенной исходной информации. Проще всего за эталон принять эргодическую систему, в контуре которой действует опытный конструктор. Такая система действительно будет достойна подражания, поскольку она может играть роль учителя, обучающего адаптивную систему так, чтобы ее свойства были близки свойствам эталонной модели. Именно на таком принципе построены имитационные системы управления.

Дуальное управление. Нельзя оптимально управлять объектом, не зная его характеристик, но можно управлять объектом далеко не оптимально, уточняя при этом его характеристики и улучшая управление, в пределе приближая его к оптимальному. Недостаточность исходной информации приводит к необходимости совмещать в определенном смысле изучение объекта и управление им. В такой ситуации управляющие воздействия носят двойственный характер. С одной стороны, они должны быть средством изучения, идентификации объекта, а с другой – управлять и приближать объект к желаемому состоянию. Управление, при котором управляющие воздействия носят двойственный характер, принято называть дуальным. В системах дуального управления всегда существует противоречие. Успешное управление возможно лишь при своевременном воздействии на объект. Запоздалое воздействие лишь ухудшает его качество и может нарушить устойчивость системы управления. Своевременно управлять можно лишь тогда, когда достаточно хорошо известны свойства объекта, на идентификацию которых нужно время. Слишком поспешное управление, *во-первых*, не дает хорошего качества, *во-вторых*, не принесет необходимой информации об объекте.

Слишком осторожное управление, хотя и основанное на накопленной информации, но действующее, когда надобность в нем уже миновала, вряд ли даст желаемый результат. Слишком *поспешное* и слишком *медлительное* дуальное управление может оказаться не лучшим или даже совсем плохим.

Существуют соотношения, связывающие управление и изучение объекта, обеспечивающие оптимальное решение задачи. В основу дуального управления положена теория статистических решений, а показателем оптимальности управления является средний риск. Практически всегда испытывается недостаток исходной информации, в том числе и о плотностях распределения. При организации дуального управления нужно позаботиться о том, как восполнить недостающую информацию или как обойтись без точного знания плотности распределения. В такой ситуации выход может быть найден путем применения одного из принципов адаптации.

Для нахождения оптимального вектора неизвестных коэффициентов управляющего устройства можно использовать алгоритмы, аналогичные тем, кото-

рые применяются для определения характеристик объекта. Эти алгоритмы уместно назвать алгоритмами *управления*. Алгоритмы *изучения* и *управления* тесно связаны между собой, что свидетельствует о том, что изучение и управление неразрывны, а это подчеркивает суть дуального управления.

Использование принципов распознавания образов в управлении. Существующее уже многие годы производство дисперсных материалов пока еще математически не описано настолько, чтобы им можно было управлять. *Во-первых*, это производство представляет комплекс очень сложных процессов, использующих сложное оборудование. *Во-вторых*, зачастую нет практически никакой прямой информации об основных его характеристиках, таких как температура и химический состав продуктов переработки. В таких условиях трудно надеяться на успешное управление объектом по известным, уже установившимся схемам.

Таким объектом управляют, правда, не автоматы, а люди. Человек обладает очень важной способностью к действиям, приводящим к нужному результату, но не требующим специального анализа тех причин, которые эти действия порождают. Опытный конструктор не всегда знает почему, но знает твердо, какую операцию в каждом конкретном случае нужно выполнить.

Проблема обучения распознаванию образов привлекла внимание исследователей. Она сделала реальной надежду создать модель передачи машине способности решения неформализованных задач путем специальной обработки существенно ограниченного множества примеров их успешного решения. Сама проблема состоит из двух частей – обучения и распознавания.

Обучение осуществляется путем показа отдельных объектов, в результате чего распознающая система должна приобрести способность реагировать одинаковыми реакциями на объекты одинаковых образов и различными – на объекты различных образов.

Распознавание характеризует действия уже обученной системы. Автоматизация этих процедур и составляет проблему обучения распознаванию образов. В тех случаях, когда человек придумывает и навязывает машине правило, по которому следует различать объекты, проблема распознавания решается частично, так как основную и главную часть проблемы – обучение на примерах – человек берет на себя. При управлении распознающая система должна научиться распознавать различные состояния объекта, и в зависимости от того, к какому образу (классу) относится текущее состояние объекта, выносятся решения о характере воздействия на объект, чтобы привести его в требуемое состояние.

Имитационное управление. Несмотря на огромные успехи в области теории и практики управления, многие этапы создания новой техники не поддаются полной автоматизации, и управление ими осуществляют опытные конструкторы, которые знают, что нужно делать в каждой ситуации. Более того, из своего опыта они могут определить, в какой ситуации в данный момент находится объект проектирования, так как неоднократно в своей деятельности встречались с подобными, но не тождественными ситуациями. В этих ситуациях они принимали различные решения, некоторые из которых приводили к хорошим результатам. Эти решения формируют опыт каждого конструктора, который яв-

ляется основным его инструментом, и чем этот опыт обширнее, тем удачнее действия конструктора. На основании опыта в его сознании формируется некоторая модель управления, которая отражает многие его особенности, но она совсем не похожа на те математические модели, используемые в теории автоматического управления.

Если бы удалось перевести модель из сознания опытных конструкторов в память ЭВМ, то появилась бы возможность использовать ее для автоматизированного управления, хотя бы в режиме советчика. Такой режим еще не позволяет полностью исключить конструктора из проектирования, но приближает к полностью автоматической системе, которая без участия конструктора могла бы управлять сложным и плохо формализованным проектированием.

Сложность заключается в том, что опыт конструктора – очень расплывчатое понятие, и даже он сам часто не может объяснить, что это такое. Он не может точно указать причины своих действий. Конструктор знает, как нужно действовать, но не знает почему. В такой ситуации остается только один выход – обучение на хороших примерах, т. е. не обойтись без основных положений теории обучения распознаванию образов. Эта теория изучает механизмы обучения, применяя которые система управления может *научиться* действовать в различных ситуациях так, как в аналогичных, но не тождественных ситуациях действовали лучшие конструкторы.

На примерах поведения лучших конструкторов можно обучить машину имитировать их действия. Системы, которые предназначены для этого, основаны на принципах теории обучения распознавания образов и называются имитационными системами управления.

Уровень описания многих технологических операций при переработке дисперсных материалов еще не достиг необходимого формального понимания. Создание аналитических моделей, напрямую связывающих качество материала с параметрами проведения технологического процесса, еще не представляется возможным. Поэтому при управлении качеством дисперсных материалов может быть принята концепция распознавания образов в рамках имитационного управления. Данная концепция является наиболее прогрессивной и может быть реализована и без непосредственного применения ЭВМ, роль которой сводится к сбору, хранению и переработке статистической информации, представленной в виде некоторых лингвистических правил.

Модель принятия решений при управлении качеством объектов техники строится исходя из стратегии ситуационного управления, которая, в свою очередь, является одной из практических реализаций идей имитационного управления в их самой общей постановке. Ситуацией является последовательность состояний управляемого объекта – состояний его функционирования.

Система управления должна обладать средствами:

- описания, пополнения и изменения ситуаций;
- обобщения ситуаций;
- выработки гипотез о связях в ситуациях;
- выделения полезных обобщений с позиций задачи управления.

Система имитации моделирует формирование структуры сложной системы и законов ее функционирования. Она играет роль интерпретатора задач управления в памяти вычислительной машины. В ней различают три составляющих:

- имитационную микромодель структуры и законов функционирования объекта управления;

- имитационную модель формирования обобщенного управления объектом;

- имитационную макромодель управления объектом.

Задание *микромодели структуры и законов функционирования объекта управления* сводится к заданию языка построения дискретных сетей и языка описания ситуаций на этих сетях. Часто моделирование связей на различных уровнях управления большой системой удобно осуществлять с помощью дискретной ситуационной сети. Вершинами дискретной ситуационной сети могут быть модели принятия решений. Они имитируют отдельные элементы управляемого объекта, а в целом воспроизводят структуру и функционирование объекта.

Управление дискретной ситуационной сетью имитируется с помощью модели управления. Она конструируется из модулей, которые позволяют строить имитационные модели любой сложности. Базой языка описания имитационных моделей являются простейшие модули. Модули следующего порядка образуются из модулей предыдущего порядка посредством установления между ними связей и формирования устройства управления полученной дискретной ситуационной сети. Язык описания ситуаций задается в виде тройки: (X, R, Φ) , где X – множество атомарных и производных ситуаций, R – множество бинарных отношений, Φ – отображение $X^2 \rightarrow R$. Он предназначен для формализации состояния дискретной сети и точного определения начальных ситуаций управляемого объекта.

Макромодель структуры и законов функционирования является семиотической системой, основу которой составляют следующие модели.

Система, с помощью которой формируются модели решения задач управления, базируется на композиции порождающих грамматик, формирующих обобщенные положения базовых понятий и отношений. Распознавание ситуаций на начальном уровне для установления их непротиворечивости осуществляется *моделью анализа ситуаций*, которая выполняет контролирующую функцию по отношению к решениям, принимаемым на более высоких уровнях.

Нормирование ситуаций, по которым принимаются решения, осуществляется *моделью структурирования*, согласно которой элементы ситуации объединяются в группы в соответствии с имеющимися между ними связями и поставленной целью группирования. Для структурирования ситуаций воплощены правила, число которых соответствует числу различных структур, выделяемых на множестве ситуаций объекта управления. В начальный момент функционирования системы правила структурирования отсутствуют. Они возникают в результате работы модели обобщения, выработки решений по управлению и их оценки человеком. Модель структурирования реализуется после обучения.

Обобщение ситуаций – решений, задаваемых человеком, осуществляется в *модели обобщения ситуаций*. В результате работы этой модели формируется множество предикатов структурирования ситуаций и осуществляется разбиение

множества ситуаций – решений на классы в соответствии с множеством допустимых решений, принимаемых на заданном уровне управления.

Экстраполяция ситуаций на дискретной сети осуществляется с помощью команд управления, формируемых в трансформационной грамматике. Описание решений приводится с помощью *модели экстраполяции ситуаций*.

Результатом функционирования семиотической системы является модель имитации управления объектом (имитационная макро модель управления объектом). В модель входят корреляционная и трансформационная грамматики, образованные в модели формирования обобщенного управления, а также правила, выделяющие оптимальные законы управления, формируемые в данной модели.

Практическое применение метода ситуационного управления связано с разработкой *исходных* и *производных* переменных блоков.

Исходные переменные блоки образуются словарями базовых понятий и отношений, целевыми понятиями и структурами, оценочными функциями. Такие словари и понятия составляются специалистами в решении заданного класса задач управления. *Производные* переменные блоки составляются из построенной дискретной ситуационной сети, корреляционной и трансформационной грамматик, понятий, отношений. Эти блоки образуются в результате функционирования постоянных блоков моделей ситуационного управления.

При управлении качеством однотипных изделий переменные блоки моделей могут содержать одноименные элементы: базовые понятия и отношения, целевые структуры, оценочные функции. Наличие многих одноименных элементов обуславливает возможности создания универсальных моделей решения задач управления качеством пиротехнических изделий.

Объектом управления является изделие в совокупности с его качественными показателями, а управляющей системой является производство этих изделий, где формируется их качество. Качество изделий напрямую связано с их технологичностью. Поэтому модель управления качеством – это обобщенная методика определения технологичности изделия по фазам производства.

1.3. ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ АГРЕГАТ КАК ОБЪЕКТ ПРОЕКТИРОВАНИЯ

1.3.1. Обоснование выбора объекта проектирования

Опыт, накопленный в области машиностроения, показывает, что коренная перестройка химического производства должна быть направлена на создание высокоавтоматизированных и способных к адаптации в условиях конкретного технологического процесса технических средств (машин и аппаратов). Однако он не может быть механически использован в рассматриваемом нами случае.

Бесспорными являются следующие положения:

- создание новых технических средств в химической технологии должно опираться на последние достижения науки;
- эффективное использование последних достижений науки в практике возможно только при обоснованном выборе объекта научных исследований.

В нашем случае объект проектирования или объект научных исследований опирается на два начала:

- химическую технологию как основу получения химических продуктов необходимого качества с заданными потребительскими свойствами;
- технологию химического машиностроения как основу создания технических средств, которые позволяют реализовать конкретную технологическую операцию.

Объектом, в полной мере отвечающим этим двум началам, может стать химико-технологический агрегат (ХТА). Почему именно такое название? Химико-технологический – указывает на принадлежность объекта проектирования к химической технологии. Агрегат – указывает на его принадлежность к химическому машиностроению и, в отличие от отдельных машин и аппаратов, имеет комплексный характер. Выбор ХТА в качестве объекта проектирования требует более детального обоснования.

Рассмотрим ХТА как систему, основные признаки которой относятся к области техники. *Под ХТА как технической системой понимается совокупность процессов, протекающих при проведении отдельной технологической операции, и технических средств для их осуществления.*

Техническая система (ХТА) не является изолированной, поскольку она взаимодействует с внешней средой (сферой эксплуатации). В этом взаимодействии проявляются функции системы, т. е. степень достижения той цели, для которой данный ХТА был создан. Функциональный аспект определяется характером технологической операции, которую должен выполнять ХТА. Потенциальные возможности функционирования ХТА, присущие ему внутренне, ограничиваются воздействием на него внешней среды. Степень реализации функций ХТА зависит от уровня его совершенства, которое закладывается при проектировании и обеспечивается в сфере машиностроительного производства. *ХТА – это реальный материальный объект, который является самостоятельным машино-строительным изделием, включающий отдельные аппараты, машины, вспомогательное оборудование, приборы КИП и АСУТП.*

С этих позиций целесообразно рассмотреть ХТА в трех сферах его существования: в сфере эксплуатации, производства и проектирования. Каждая из них достаточно независимо выдвигает свои требования к ХТА. Техническое совершенство ХТА задается требованиями химического производства (сферы эксплуатации), определяется уровнем сферы его производства и закладывается при проектировании. Посредством ХТА как бы осуществляется связь между химическим и машиностроительным производствами через проектирование.

Сфера эксплуатации. Химико-технологический агрегат можно рассматривать как средство труда, участвующее в производстве. Он объединяет три основных элемента: средства труда, труд человека, предметы труда. Взаимодействие этих элементов и есть производственный процесс, особенности которого вытекают из его назначения. Различают основные и вспомогательные производства.

Основные производства – это те, в которых предмет труда превращается в конечную продукцию с необходимыми потребительскими свойствами. Предмет

труда участвует в нескольких технологических операциях, выполняемых отдельными ХТА, образующими производство. Структура и содержание производства зависят от применяемой технологии и используемого оборудования, свойств сырья и требований к готовому продукту.

К *вспомогательным* производствам относят получение различных видов энергии для нужд основного производства, регенерацию и рекуперацию отходов, изготовление технологической оснастки, ремонт средств труда.

Важным является анализ взаимодействия отдельного ХТА с другими элементами производства. При этом можно выделить две задачи, решение которых позволит определить:

- наиболее эффективные условия применения уже созданного ХТА;
- требования сферы эксплуатации к вновь создаваемым ХТА.

В первом случае ХТА выступает в сфере эксплуатации как конкретный объект с определенной совокупностью свойств, достигнутых в сфере производства. Степень реализации этих свойств зависит от его соответствия другим элементам производства, а именно:

- соответствие предмета (объекта) труда свойствам ХТА;
- соответствие форм организации производства свойствам ХТА;
- соответствие свойств отдельно взятого ХТА свойствам других ХТА единого производственного процесса;
- соответствие свойств ХТА уровню квалификации и подготовленности обслуживающего персонала.

Чем выше степень соответствия сферы эксплуатации ХТА и его свойств, тем выше уровень эффективности использования как отдельного ХТА, так и на производстве в целом. При избыточных для данного производства исходных свойствах ХТА он не может быть использован в полной мере, что приводит к излишнему удорожанию выпускаемой продукции. При недостаточных исходных свойствах ХТА наблюдается нарушение нормального хода производства и ухудшение качества выпускаемой продукции.

Во втором случае при выборе объекта проектирования необходимо обеспечить такие его свойства, без которых невозможна его эффективная эксплуатация в самых различных производствах. Объект проектирования должен:

- включать необходимые технические средства для осуществления некоторой технологической операции;
- иметь возможность адаптироваться в условиях конкретного производства, т. е. выбирать такие параметры работы, при которых обеспечиваются оптимальные условия обработки предмета труда и получение необходимых его качественных показателей в рамках отдельных технологических операций;
- обеспечивать по возможности комплексное использование и полную рекуперацию внешних и внутренних материальных и энергетических ресурсов (воздуха, воды, хладагента, теплоты реакции или фазового превращения).

В полной мере перечисленным требованиям может отвечать только ХТА. Данные требования не зависят от характера конкретной технологической операции, для выполнения которой создается технический объект.

Сфера производства. Совокупность свойств, обеспечивающих качество технического объекта, создается сферой его производства. В этом случае ХТА выступает как предмет труда в машиностроении. Выпуск оборудования включает техническую подготовку производства и непосредственно изготовление.

Техническая подготовка производства закладывает требуемый уровень качества технического объекта, и при этом на нее воздействуют такие факторы ограничения, как общий уровень развития технологических принципов и техники обработки конструкционных материалов. Он определяет возможные границы решения конкретной научно-технической задачи обеспечения соответствующего технико-экономического уровня проекта с заданным опережением (т. е. на заданный период упреждения).

Наиболее существенными факторами технической подготовки производства, определяющими достижимый на начало изготовления уровень технического объекта, являются следующие:

- общий уровень развития науки и техники, как в сфере производства, так и в сфере его эксплуатации;
- потенциал развития технологических принципов, на которых основывается создание данного типа технического объекта;
- наличие (или отсутствие) ранее разработанных и выпускаемых моделей данного типоразмера;
- наличие (или отсутствие) типоразмерного ряда выпускаемых технических объектов;
- наличие (или отсутствие) унифицированных элементов, использование которых возможно в выпускаемом техническом объекте.

Приведенные требования еще раз доказывают, что выбранный нами в качестве объекта проектирования химико-технологический агрегат наиболее полно соответствует условиям технической подготовки производства. Именно при создании ХТА представляется возможным рациональным образом учесть перечисленные выше требования.

Непосредственно изготовление обеспечивает реализацию технических решений, принятых при его подготовке в условиях конкретного предприятия. Степень реализации заложенного в проекте уровня качества зависит от большого числа организационно-технических факторов, характеризующих данное предприятие.

Сфера проектирования. Будущее технического объекта закладывается при его проектировании и предопределяется сочетанием трех показателей: эффективности, стоимости и времени.

Эффективность. Понятие «эффективность», как правило, связывается с понятием технологической операции как системы действий, объединенных единым замыслом и направленных на достижение определенной цели. Тогда под эффективностью технологической операции можно понимать степень ее приближения к выполнению стоящей перед ней задачи. Понятие эффективности технологической операции можно отождествлять с понятием эффективности технического объекта.

Достижение определенной цели объектом проектирования связано с получением необходимого технологического эффекта.

Достигнутая на практике эффективность зависит от того, как успешно при проектировании будут увязаны стоимостные и временные показатели.

Стоимость. Конечный эффект от использования объекта существенно зависит от вложенных в него денежных средств (ресурсов). В зависимости от конкретных условий могут рассматриваться показатели стоимости: проектирования, создания, эксплуатации в течение заданного периода времени.

Соотношение между стоимостью разработки, создания и эксплуатации зависит от конкретных условий изготовления и принятых проектных решений. Денежные средства, затраченные на проектирование и создание технического объекта, должны соизмеряться с его эффективностью на стадии эксплуатации.

Время. Так как проектные решения оказывают влияние на сроки проектирования, то для анализа важны временные показатели. В качестве таких показателей могут выступать: время изготовления объекта, время монтажа и запуска объекта, гарантийный срок его эксплуатации. Чем меньше время проектирования и запуска в эксплуатацию технического объекта, тем быстрее могут быть возвращены средства, затраченные на его создание.

Показатели объекта проектирования **эффективность – стоимость – время** взаимосвязаны. Сразу после изготовления, испытания и пуска в эксплуатацию объект обладает наивысшей эффективностью и основные стоимостные затраты уже сделаны. К окончанию периода эксплуатации эффективность снижается до некоторого допустимого уровня при незначительном росте стоимости. Изменение эффективности объекта определяется изменением условий его применения и затребуемыми в нем проектными решениями.

Именно выбор ХТА в качестве объекта проектирования позволяет наилучшим образом обеспечить взаимосвязь показателей эффективность – стоимость – время. Он способен обеспечить сохранение эффективности при минимальной стоимости в течение всего периода эксплуатации.

Подведем итог. Анализ условий эксплуатации, производства и проектирования объектов химической техники полностью подтверждает правильность выбора в качестве объекта исследования химико-технологического агрегата.

1.3.2. Особенности химической техники

Хорошо известно, что самолетостроение, ракетостроение, кораблестроение развивались значительно быстрее, чем химическое машиностроение. Если бы темпы совершенствования самолетов были те же, что и для химической техники, мы едва ли еще смогли бы летать на поршневых самолетах времен 1950-х гг. Отставание химической техники по темпам развития (совершенствования) связано с недооценкой важности перерабатывающих отраслей промышленности, отсюда – слабым финансированием, стремлением приобрести наиболее сложное оборудование за рубежом в ущерб созданию отечественного.

Каждому направлению развития техники свойственны определенные особенности. В данном разделе ставится задача показать, что существуют также

особенности, делающие химическую технику отличной от машин, самолетов, кораблей, техники для переработки пищевых продуктов и т. д. Эти особенности в основном и определяют достигнутый в настоящее время технический уровень совершенства машин и аппаратов химических производств.

Никакое направление техники не может существовать самостоятельно, различные по назначению направления тесно связаны. Успехи в одной области техники, несомненно, становятся достоянием других ее областей. Например, разработанные для авиации и ракетостроения композиционные материалы находят применение в других отраслях промышленности, в том числе и химической. С другой стороны, любой технический объект является композицией большого числа элементов конструкции, используемых в различных областях техники. Например, барабанный вакуум-фильтр непрерывного действия со сходящим полотном имеет электродвигатель, редуктор, вакуумное оборудование, датчики уровня и т. д. Каждый из перечисленных элементов конструкции применяется в самолетостроении, ракетостроении, кораблестроении и т. д. Это должно было способствовать развитию химического машиностроения. Разработки передовых отраслей, как правило, являлись дорогостоящими и не находили широкого распространения в перерабатывающих отраслях промышленности. Сформулируем объективно существующие, на наш взгляд, особенности химической техники.

1. Узкая направленность. Она вызвана строгим соответствием между машиной или аппаратом и характером проводимого в них технологического процесса. Большое многообразие технологических процессов не позволяет сократить число объектов химической техники. Из-за большого многообразия свойств перерабатываемых материалов, требований к готовой продукции для проведения конкретной технологической операции также используются самые различные машины и аппараты. Например, различают более десяти конструкций выпускаемых промышленно вакуумных фильтров. Необдуманные попытки расширить область применения одних типов аппаратов за счет сокращения выпуска других к положительным результатам не привели. Преодолеть данное противоречие возможно путем создания новых высокоэффективных технических средств с использованием достижений передовых отраслей техники. Например, речь может идти о применении квантовых генераторов непрерывного действия для обеспечения селективного протекания реакции в газовых средах без применения селективных дорогостоящих катализаторов.

2. Потребность в большой дополнительной оснастке для успешного запуска в эксплуатацию химической техники. Данная особенность связана с отсутствием у изготовителей информации о специфике химического производства, где должен найти применение будущий аппарат или машина, и узкой специализацией машиностроительных заводов. Например, часто отсутствуют вспомогательные емкости, запорная арматура на линиях подачи перерабатываемых и вспомогательных материалов, дополнительные фильтры. Для их непосредственного включения в конструкцию машины или аппарата требуются небольшие дополнительные затраты, если использовать внутренние ресурсы конструкции. Например, вспомогательные емкости могут выполнять функции

опор, в качестве корпуса запорной арматуры может быть использован элемент корпуса аппарата, дополнительные фильтры могут быть установлены в патрубках. Машины и аппараты переработки пищевых продуктов во многом лишены данного недостатка.

3. Отсутствие технических средств настройки у аппарата или машины на реализацию конкретной технологии без переналадки технических средств. Например, смесители обладают высокой универсальностью. Но нет возможности их настройки, исходя из требований конкретной технологии без замены мешалки, изменения частоты вращения, конструкции внутренних устройств.

Данная особенность во многом связана с узкой направленностью выпускаемого оборудования. Необходимо создать новые технические средства, способные адаптироваться к условиям проведения конкретного технологического процесса. Такая адаптация возможна благодаря разработке универсальных рабочих органов, например вальцов в валковых машинах, или рабочие органы должны иметь возможность менять свои геометрические размеры и форму при настройке на проведение конкретного технологического процесса. Например, при приготовлении хозяйственных паст самого различного назначения их вязкость меняется в очень широком диапазоне, и для поддержания постоянной интенсивности перемешивания желательнее менять размеры и форму перемешивающего устройства.

4. Трудность обеспечения контроля за исправностью техники при ее эксплуатации. Отсутствуют возможности устранения неисправности без остановки технологического процесса. При эксплуатации технических объектов возможен выход из строя отдельных элементов конструкции из-за разной степени их надежности, что может привести к аварии. Например, нарушилось соединение мешалки и вала смесителя. Мешалка осталась на валу, но во вращение не приводится. Для выявления данной неисправности необходимо контролировать вращение вала и мощность, потребляемую электродвигателем. Выявления неисправности недостаточно, необходимо иметь возможность ее устранить на некоторый конечный период времени до плановой остановки производства. Наиболее распространенным приемом повышения надежности технических объектов является резервирование основных элементов конструкции. Например, аппарат может быть снабжен двумя перемешивающими устройствами. При выходе из строя одной мешалки включается другая. Переход с одного перемешивающего устройства на другое может оказаться полезным и с позиций повышения эффективности перемешивания в целом, если они имеют различные размеры и конструкцию.

5. Большие различия по типам и размерам от самых маленьких до аппаратов на уровне уникальных инженерных сооружений (например, колонные аппараты различного назначения). Данная особенность связана с тем, что существующий уровень развития науки не позволяет создать единые элементы конструкции, применимые для всех типов и размеров аппаратов. Даже использование одних и тех же конструктивных решений не всегда возможно из-за отсутствия надежных методик их расчета и, в первую очередь, сложностей масштабного перехода.

6. Разнообразие перерабатываемых материалов – от самых распространенных – воды и воздуха – до уникальных и сверхтоксичных – например, от-

равляющих веществ при уничтожении химических боеприпасов. Это обуславливает: неоднозначность выбора типа аппарата или машины для обработки создаваемого впервые материала из-за сложности определения его свойств, потенциальную возможность катастрофических последствий в случае аварий. Именно от правильного определения свойств исходных и конечных продуктов во многом зависит качество проектных разработок. Например, включение в конструкцию литьевых машин технических средств измерения вязкости перерабатываемого материала позволит повысить их производительность и во многом стабилизировать качество выпускаемых изделий.

7. Трудность совмещения средств КИП и автоматики с конструкцией аппарата. Они или малоэффективны, или мешают проведению технологического процесса. Необходимо добиться рационального сочетания средств измерения и регулирования с конструкцией самого аппарата. Элементы конструкции могут являться частью системы измерения и регулирования. Например, встроенные расходомеры, клапаны, регуляторы уровня, термопары в качестве перегородок в аппарате с механическим перемешивающим устройством. Необходимые замеры должны проводиться в местах, наиболее ответственных за эффективность работы машины или аппарата.

8. Сдержанное использование методов интенсификации при переработке дисперсных материалов. Они остаются малонадежными и неэффективными. Отсутствуют обоснованные рекомендации по их практическому применению. Сами по себе известные средства интенсификации, основанные на применении различных по природе физических полей или их сочетания, не могут достичь ожидаемого эффекта. Предварительно необходимо обеспечить в аппарате определенный гидродинамический режим, параметры которого зависят от используемого способа интенсификации. Например, применение ультразвука наиболее рационально в аппаратах колонного типа сравнительно небольшой длины для обработки конденсированных сред, движущихся с относительно небольшими скоростями.

К важным внешним факторам, сдерживавшим развитие химического машиностроения, и в том числе средств интенсификации процессов, можно отнести:

9. Неправильное определение эффективного срока эксплуатации оборудования. Он слишком длителен, что приводит к утяжелению и удорожанию оборудования. Затрудняется использование передовых конструктивных материалов, методов их обработки. Сокращение нормативного срока эксплуатации оборудования позволит ускорить техническое обновление химических производств и будет способствовать повышению их эффективности. Срок эксплуатации должен зависеть от типа выпускаемого оборудования, его технического уровня, размера затрат на изготовление и согласовываться с общим прогнозом развития как отдельных машин и аппаратов, так и химического машиностроения в целом.

10. Излишнее неоправданное стремление к созданию аппаратов большой единичной мощности. Необоснованное использование таких машин и аппаратов приводит:

- в отдельных случаях к ухудшению экологической обстановки из-за большой концентрации вредных выбросов;

- к большому сроку эксплуатации оборудования и, как следствие, к его моральному устареванию;
- к сужению круга возможных принимаемых технических решений;
- к исключению возможности использования наиболее эффективных методов интенсификации проводимых процессов;
- к снижению общей эффективности работы оборудования.

Нельзя не отметить возможность получить экономию на единицу выпускаемой продукции за счет сокращения расходов металла на стадии изготовления оборудования и затрат на его обслуживание при эксплуатации. Для предприятия-изготовителя выпускать такое оборудование выгодно из-за его большой стоимости.

Подведем итоги. Перечисленные особенности не являются абсолютно бесспорными и требуют дальнейшего анализа. Опираясь на них, можно сделать вывод о целесообразности пересмотра концепции создания оборудования уже на стадии его проектирования. Значительный прогресс в совершенствовании химической техники может быть достигнут благодаря более широкому использованию средств интенсификации технологических процессов на основе применения последних достижений науки, что отвечает общей тенденции развития техники.

1.3.3. Структура первичной семантической информации

Изучение общих начал, лежащих в основе проектирования, изготовления и эксплуатации типовых ХТА, составляет систему научных знаний о ХТА. Эти знания образуют первичную семантическую информацию.

Основы построения первичной семантической информации. Теоретической основой преобразования *объект – первичная семантическая информация* является принцип неадекватности. Он гласит, что полная адекватность первичной семантической информации объекту познания (проектирования) невозможна. На практике имеет место не абсолютная, а относительная адекватность.

Методологические основы выполнения семантической операции, связанной с получением первичной семантической информации, составляют следующие положения.

Наличие конкретного задания. Данное положение предполагает следующие действия:

- необходимо выбрать из множества объектов ту группу, которая соответствует заданию;
- наложить определенные ограничения на множество признаков, характеризующих данную группу объектов;
- отделить в ограниченном множестве признаков существенные от несущественных.

Количественную и качественную определенность семантической информации можно и нужно выразить конечным числом существенных признаков технического объекта, находящихся в определенном взаимодействии. Если задание нечетко сформулировано, т. е. не определено конечным множеством сущест-

венных признаков, то постановка вопроса об адекватности преобразования вообще теряет смысл.

Упрощение структуры объекта. Реальный объект имеет сложную многоплановую структуру, представление которой в общем виде невозможно. Решение данного противоречия возможно при переходе к последовательному описанию за счет упрощения структуры объекта. Возможно использование математических моделей, позволяющих перейти к одновременному описанию ряда последовательных фактов.

Устранение противоречий между многомерным планом содержания и одномерным планом выражения. При текстовой форме представления семантической информации различают:

- план содержания, или семантика, представляет собой внутреннюю, смысловую сторону объекта (предложения), его логическую структуру;
- план выражения, или синтаксис, является внешней формальной стороной предложения.

Устранение противоречий между многомерным планом содержания и одномерным планом выражения возможно введением в описание большой избыточности: большого числа уточнений, пояснений, параллельных контекстов, схем, графиков, диаграмм и т. д.

Устранение неопределенностей естественного языка. Основным источником неопределенностей естественного языка является неоднозначное соответствие слова и его смыслового значения (полисемия, омонимия, синонимия и др.). Разным количеством логически связанных между собой слов можно выразить одну и ту же мысль. Полностью устранить неопределенность естественного языка невозможно. Свести к минимуму – вполне реально за счет повышения избыточности описания или наложения ограничений на разнообразие значения слов, т. е. приведения их к терминам (однозначности).

Можно говорить о существовании трех типов первичной семантической информации: естественного, модельного, математического. Естественный тип благодаря имеющейся избыточности получил наибольшее распространение. Максимальной адекватностью обладает математический тип, позволяющий выразить структуру объекта, процессы, происходящие в нем, некоторой количественной определенностью. Модельный тип занимает промежуточное положение между естественным и математическим.

Принципы классификации научных знаний. Первичная семантическая информация как система научных знаний может быть достоверна и иметь право на самостоятельное существование, если она правильно отражает объективную действительность и обеспечивает определенный прорыв в развитии производства. Необходимо глубокое выявление содержания и предмета исследований на основании обоснованных принципов классификации научных знаний.

Технологические процессы – это промышленные процессы переработки продуктов природы в средства производства и предметы труда. Изучение технологических процессов с целью поиска наиболее эффективных способов их про-

ведения составляет предмет технологии. Технология возникла как самостоятельная отрасль знания в конце XVIII столетия.

Технология – комплекс научных дисциплин, изучающих практическое применение законов физики, химии, механики и других наук в производственных процессах. В этом проявляется связь технологии с общей структурой научных знаний. С целью дальнейшей детализации и раскрытия содержания технологии остановимся на некоторых принципах классификации наук.

Принцип объективности. Согласно принципу объективности, технология является основополагающей наукой, которая может быть с определенной долей условности разделена на механическую, химическую, биологическую. Механическая технология изучает изменение только внешней формы или физических свойств перерабатываемых материалов. Химическая технология рассматривает глубокие превращения, в которых изменяются не только физические свойства, но также агрегатное состояние и химический состав вещества исходных дисперсных материалов.

Принцип развития. По мере развития химической промышленности происходило деление химической технологии на ряд разделов, охватывающих узкий круг родственных процессов, свойственных только определенным отраслям промышленности. Например, технология неорганических материалов, технология переработки пластических масс и т. д.

Принцип единства исторического и логического. Согласно данному принципу, техника по своему существу едина. Открытие или усовершенствование в какой-либо отрасли производства неизбежно находит применение везде, где оно технически выполнимо и экономически целесообразно. Следовательно, разделение технологии по отраслям является во многом условным.

Классификация научных дисциплин. Остаются нерешенными методологические проблемы классификации научных дисциплин внутри технологии и их связь между собой. Классификация должна осуществляться без нарушения их предметной структуры и взаимосвязи, последовательности их расположения в соответствии со следующими требованиями.

Во-первых, классификация научных дисциплин, входящих в систему знаний о технологии, должна обеспечить их целостное рассмотрение во взаимосвязи.

Во-вторых, требуется свести эти научные дисциплины в соответствующие группы, исходя из тех объективных закономерностей, которые они непосредственно изучают и познают.

В-третьих, их необходимо расположить в логической последовательности от простого к сложному, с учетом степени и масштабов охвата ими различных сторон и аспектов технологии.

В-четвертых, структура их классификации должна быть подвижной, гибкой и с максимальной полнотой отражать дифференциацию и интеграцию наук, обеспечивать системное и первоочередное исследование наиболее важных, актуальных проблем, выдвигаемых практикой.

Эти принципы позволяют не только проследить взаимосвязь различных отраслей знаний и научных дисциплин, но и определить объект их исследования.

Например, химическую технологию образуют общие для ее различных отраслей процессы и аппараты. Изучение типовых процессов, свойственных различным отраслям химической технологии, составляет предмет и задачу научной дисциплины «Основные процессы и аппараты химической технологии». В основе физико-химического механизма типовых процессов лежит перенос массы, количества движения и энергии. Изучение данных явлений входит в задачу научной дисциплины «Явления переноса» – части более общей физической науки. Знание закономерностей переноса энергии, массы и количества движения далеко не исчерпывает всего содержания теоретических основ химической технологии. Подтверждением тому является получивший в последнее время широкое распространение «Системный анализ проблем химической технологии». Выделение системного анализа как самостоятельной совокупности научных знаний объясняется необходимостью первоочередного исследования важных и актуальных для практики проблем кибернетики химико-технологических процессов. Системный анализ позволяет объединить единой стратегией и решить в тесной связи друг с другом задачи: исследования и расчета отдельных типовых процессов в определенном аппаратном оформлении с учетом локальной системы управления; моделирования и оптимизации сложных химико-технологических систем; оптимального проектирования химико-технологических комплексов. На его основе нельзя оценить техническую возможность и экономическую целесообразность создания и эксплуатации химического производства.

Структура первичной семантической информации. Возможная структура первичной семантической информации о ХТА представлена на рис. 1.3.1. Остановимся на предметном содержании отдельных дисциплин, которые условно можно разбить на три группы и отнести к первой дисциплины химической технологии, ко второй – механической технологии и к третьей – специальные, объединяющие знания двух технологий.

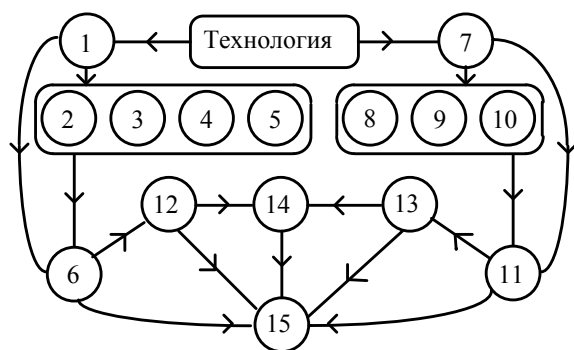


Рис. 1.3.1. Структура первичной семантической информации о химико-технологических агрегатах

К первой группе относятся следующие научные дисциплины.

1. *Основы химической технологии* рассматривают характеристики типовых процессов химической технологии, способы их организации и реализации на уровне технологических схем, принципы построения безотходной технологии.

Даются основы расчета и оптимизации таких схем, рассматриваются следующие вопросы:

- иерархическая организация процессов в химической промышленности;
- критерии оценки эффективности производства;
- общие закономерности химических процессов;
- основы расчета процессов химических превращений;
- понятие химико-технологической системы, методы ее описания, синтеза и анализа;
- сырьевые и энергетические подсистемы, энергия в производстве;
- важнейшие промышленные химические производства.

2. *Химическая термодинамика* рассматривает типовые технологические процессы с позиций химической кинетики и термодинамики. Содержит методы расчета диаграмм фазового равновесия, способы обобщения экспериментальных данных о гетерогенном равновесии и анализ свойственных типовым процессам кинетических закономерностей:

- законы термодинамики для открытых систем;
- анализ основных неравновесных процессов в открытых системах;
- основы термодинамики неравновесных процессов.

3. *Гидромеханика* является базой для большинства научных дисциплин первой группы. Она изучает равновесие и движение жидкостей и газов, а также взаимодействие между жидкостью и твердыми телами, полностью или частично погруженными в жидкость, и ставит своей целью разработку инженерных методов гидродинамического моделирования и гидромеханического расчета элементов конструкции ХТА. Предполагает обобщение следующих знаний в области технической гидромеханики:

- гидростатика;
- модели сплошной среды, методы описания и виды движения, уравнение неразрывности для жидкости и газа;
- уравнение Бернулли для моделей невязкой, вязкой, несжимаемой и сжимаемой жидкости при установившемся движении;
- методы расчета гидравлических сетей;
- силовое воздействие установившегося потока на неподвижную и движущуюся преграду, неустановившееся движение несжимаемой жидкости, явление гидравлического удара;
- понятие о волновых процессах в гидромагистральных.

4. *Механика многокомпонентных сред* – учение о равновесии и течении многокомпонентных сред и связанных с ними явлений переноса количества движения. Она опирается на принципы и методы механики жидкости и газа. Ей присущи все основные атрибуты самостоятельной научной дисциплины, призванной решать многие инженерные задачи, в том числе:

- движение одиночной твердой и деформируемой частиц;
- течение многокомпонентных сред в трубах;
- процессы переноса множества частиц;
- основные уравнения многокомпонентных сред;

- учет силы взаимодействия дисперсных частиц и сплошной фазы, гидро- и пневмотранспорт, взвешенный слой.

5. *Тепловые- и массообменные процессы* основываются на знаниях общих закономерностей явлений переноса количества движения, энергии и массы. Позволяют разрабатывать инженерные методы расчета тепло- и массопереноса в отдельных аппаратах или элементах конструкций ХТА. Рассматриваются способы их рациональной организации. Изучается влияние конструктивного исполнения и геометрических параметров отдельных элементов конструкции на эффективность и пути интенсификации их работы. В том числе:

- основы теории передачи теплоты, промышленные способы подвода и отвода теплоты в химической технике;

- массообменные процессы в системах со свободной границей раздела фаз, абсорбция, перегонка и ректификация, экстракция в системах «жидкость – жидкость»;

- массообменные процессы с неподвижной поверхностью контакта фаз, адсорбция, сушка, ионный обмен, растворение и кристаллизация;

- мембранные процессы химической технологии.

6. *Системный анализ типовых процессов химической технологии* является логическим завершением группы технологических дисциплин [4]. Направлен на разработку достаточно совершенных и надежных имитационных математических моделей, позволяющих проводить оценку эффективности работы объекта проектирования в условиях конкретного производства с целью оптимизации основных технологических параметров его работы. Предполагает знание:

- методов математического моделирования;

- основных принципов системного анализа;

- взаимосвязи явлений, их иерархии и соподчиненности в отдельных процессах и аппаратах;

- иерархической структуры химического производства, принципов его декомпозиции с учетом взаимосвязи отдельных аппаратов.

Вторая группа включает следующие дисциплины механического профиля.

7. *Основы технологии машиностроения* позволяют правильно выбрать геометрические размеры и форму отдельных элементов конструкции ХТА, оценить возможность их изготовления в условиях конкретного машиностроительного производства, затрагивают вопросы оптимизации трудовых и материальных затрат на изготовление ХТА и включают:

- технологическую подготовку производства в машиностроении: составление технического задания, подготовку эскизного и рабочего проекта, оценку технологичности конструкции и возможностей оборудования, разработку технологии обработки деталей и сборки изделий с технико-экономическим обоснованием, проектирование технологической оснастки;

- технологические характеристики типовых заготовительных процессов, методов обработки и сборки при изготовлении машин;

- метрологические основы, оценку точности обработки деталей статистическими методами;
- силовые и прочностные расчеты при конструировании технологической оснастки.

8. *Базовые элементы конструкций ХТА.* Дисциплина рассматривает основы расчета базовых элементов конструкций по:

- основным критериям работоспособности с учетом механических свойств конструкционных материалов, сочетания;
- виду действующих нагрузок;
- возможности отклонения от правильной геометрической формы и номинальных размеров;
- значению коэффициентов запаса по критериям надежности.

Указывает инженерные методы и пути конструирования, отвечающие условиям оптимального использования конструкционных материалов.

9. *Нетиповые элементы конструкций ХТА* – в отличие от предыдущей, дисциплина должна дать ответ на вопрос о том, как рационально выбрать элементы конструкции, обеспечивающие соединение отдельных аппаратов ХТА, определяющие безопасность и удобство эксплуатации, его внешний вид. Содержит методы их расчета.

10. *Проектирование приводов.* В задачу дисциплины входит рациональный выбор привода из условия обеспечения его надежной работы при минимальном потреблении энергии. Под приводом понимается система с обратной связью, способная к адаптации в условиях конкретного ХТА и являющаяся частью локальных АСУ. Стремление объединить два типа приводов нашло отражение в ее содержании:

- электропривод: характеристика его функциональных узлов и элементов, электропривод (с асинхронным двигателем, с двигателем постоянного тока, с синхронным и шаговым двигателем), механические и нагрузочные характеристики, режимы работы, нагрузочные диаграммы и выбор мощностей двигателей;
- гидро- и пневмопривод: структура и типовые схемы, основные энергетические соотношения и внешние характеристики, гидродвигатели возвратно-поступательного действия, мультипликаторы давления, гидромоторы.

11. *Расчет и конструирование ХТА.* С позиций системного анализа эта дисциплина изучает вопросы обеспечения надежности ХТА в целом. Речь идет не о простом соединении отдельных элементов конструкции или аппаратов. Здесь излагаются инженерные методы оптимального проектирования конструкции ХТА. Решаются методологические проблемы построения единой схемы силового нагружения элементов конструкции в условиях изготовления, монтажа, испытаний и эксплуатации ХТА, которые подкрепляются расчетными методиками.

К специальным дисциплинам относятся следующие.

12. *Локальные системы управления ХТА.* Дисциплина рассматривает общие принципы построения локальных систем диагностики и управления отдельных ХТА на основе типовых контрольно-измерительных приборов и средств авто-

матики с использованием микропроцессорной техники. Включает следующие разделы:

- основы теории автоматического управления: декомпозиция системы управления, статические и динамические характеристики объектов и звеньев управления, передаточные функции, типовые динамические звенья систем управления;

- системы автоматического регулирования: статические и динамические характеристики объектов управления, переходные процессы, запаздывание и устойчивость системы регулирования, основные законы управления, релейное регулирование;

- диагностика химико-технологического процесса и химической техники: методы и средства диагностики, элементы метрологии, контроль основных технологических параметров, типовые системы автоматического управления.

13. *Основы экономического моделирования ХТА.* Дисциплина ставит своей целью разработать методы оценки технико-экономических показателей эффективности ХТА на основе его экономической модели. Данная модель должна обеспечить принятие такого инженерного решения, которое позволит достичь необходимых эксплуатационных показателей работы ХТА при сохранении высокого уровня рентабельности его изготовления.

14. *Типовые машины и аппараты химических производств.* Дисциплина должна обобщить опыт создания и эксплуатации машин и аппаратов химических производств. Дать их классификацию. Намечить рациональные пути интенсификации протекающих в них процессов. Выявить рациональные технические решения, обеспечивающие высокий уровень надежности и ремонтпригодности. Создать комплексную методику их расчета, учитывающую особенности проведения различных типовых процессов.

15. *Основы проектирования ХТА.* Дисциплина должна ответить на вопрос, каков будет ХТА, в котором с экономической точки зрения рациональным образом сочетаются его технические характеристики. Проектирование будет эффективным и надежным только в том случае, если оно будет опираться на совокупность системы научных знаний о ХТА и использовать самые современные математические методы в рамках специализированной САПР.

Перечисленные выше научные дисциплины опираются на соответствующие отрасли знаний, но каждая из них имеет ряд особенностей, позволяющих говорить о них как о самостоятельной совокупности знаний. Общим для них является объект научных исследований – ХТА, и они раскрывают содержание первичной семантической информации.

Подведем итоги. Представленный перечень научных дисциплин и установленная между ними взаимосвязь в общем виде образует систему знаний о химико-технологических агрегатах. Построенную таким образом систему знаний необходимо рассматривать как основу для проведения дальнейших исследований по созданию первичной семантической информации.

1.3.4. Обобщенная модель как вторичная семантическая информация

При автоматизированном проектировании инженер должен использовать для взаимодействия с ЭВМ естественный язык. Наиболее важно выбрать метод представления знаний с целью реализации семантической совместимости человека с ЭВМ при преобразовании первичной семантической информации во вторичную. В настоящее время не существует единой теории перехода от одной формы представления информации к другой. Практическая реализация подобных преобразований остается до сих пор прерогативой инженера.

При построении вторичной семантической информации:

- уменьшается содержание первичной семантической информации;
- выявляются существенные признаки объекта проектирования;
- существенные признаки выражаются соответствующими знаками по определенным правилам.

Можно говорить только об относительной адекватности результатов преобразования. В противном случае оно противоречило бы идее логического преобразования семантической информации вообще. Сущность такого преобразования заключается в уменьшении содержания первичной семантической информации, а не в получении ее копии. Выделяют два основных метода сжатия семантической информации: эвристический и модельный.

Для *эвристического метода* сжатия характерно отсутствие строгого задания. Оно не содержит конкретного содержания и выражает лишь плохо сформулированную потребность инженера уменьшить объем первичной семантической информации. Инженер на основании анализа имеющихся знаний об объекте проектирования создает вторичную семантическую информацию (синтез), являющуюся моделью первичной.

При эвристическом сжатии логическая структура первичной информации разрушается и создается новая, с меньшим содержанием. Это достигается либо отбрасыванием несущественных признаков, либо заменой некоторых существенных признаков более общими понятиями, отличными от имеющихся. Для эвристического сжатия характерен субъективизм, т. е. разное понимание людьми существенных и несущественных признаков. В зависимости от опыта инженера может быть достигнута разная степень сжатия и разный уровень обобщения понятий.

Для *модельного метода сжатия* характерно строго формализованное задание. Основой его является обобщенная модель. Содержание первичной семантической информации приспособляется к заданной наперед логической структуре – обобщенной модели. Узловыми моментами ее служат общие и установившиеся понятия области знаний об объекте проектирования. На их основе представляется возможным упорядочить последовательность логических шагов при сжатии. Облегчается выбор существенных признаков, и тем самым обеспечивается выбор типового алгоритма сжатия, пригодного для обработки разнообразной по содержанию информации. Сжатие сводится к тому, что выраженные общими понятиями аспекты модели раскрываются конкретным содержанием информации, находящейся в первичных документах.

Структура обобщенной модели. При создании обобщенной модели необходимо определить:

- единицу смысла семантической информации;
- способы формализованного представления знаний;
- смысловую часть модели;
- признаковую часть модели;
- языковые особенности модели.

Единица смысла. Трудность выбора единицы семантической информации для количественной оценки смысла обусловлена многообразием форм выражения и передачи смысла.

В естественном языке существуют всякого рода неопределенности: синонимия, омонимия, многозначность и др. Их сущность одна и та же – несоответствие плана выражения плану содержания. Одну и ту же мысль можно выразить по-разному и разным числом слов.

Отдельно взятое слово не имеет логического значения. О нем нельзя ничего сказать, кроме того, что оно существует. Слово, как элемент плана выражения, не обладает однозначностью содержания и не может использоваться в качестве единицы смысла.

Два логически связанных слова, из которых одно обозначает предмет, а другое – отношение, образуют предложение, имеющее минимальный уровень плана содержания – факт. Факт не поддается расчленению в семантическом плане. Он является исходной единицей содержания. Различают факты простые и сложные. Носитель простого факта – элементарно простое предложение, состоящее из субъекта и предиката. Структура простого предложения не имеет вариантов, его нельзя разложить на более простые составляющие без потери смысла. Элементарно, простое предложение является тем идеальным случаем, когда план выражения полностью совпадает с планом содержания. Сложный факт можно привести к сумме простых, так как сложное предложение можно представить суммой простых.

В модельном способе представления вторичной семантической информации за единицу смысла принят знак, содержащий предмет и отношение. Эту единицу семантической информации будем называть фактом. Любое сообщение можно выразить определенным числом фактов. Чем больше фактов в сообщении, тем оно содержательнее.

Формальные представления знаний. В основу формального представления знаний положены два понятия: факт и аспект.

Факт α характеризует определенное свойство объекта проектирования и не поддается дальнейшему смысловому делению (применительно к данной книге). Например, фактом может быть тип насоса, напор, мощность, вид привода. Для факта «тип насоса» в качестве значения могут быть осевой, поршневой, плунжерный, центробежный, вихревой. Для факта «мощность» в качестве значения могут быть натуральные числа, не выходящие за пределы разумных величин.

В математической интерпретации факт представляет собой кортеж знаков (букв, слов, символов), длина которого может быть произвольной. Кортежем

длины n является запись вида: $\alpha = \langle a_1, a_2, \dots, a_n \rangle$, где a_1, a_n – первая и последняя компоненты соответственно.

Свойство факта быть кортежем подтверждается двумя особенностями кортежа в интерпретации факта:

- в названиях фактов или их значениях буквы и цифры должны находиться на своих местах, чтобы не было искажения смысла;
- в названии факта или его значении буквы и цифры могут быть одинаковыми или различными.

В математической интерпретации точность факта представляет собой объединение кортежей знаков, выражающих факт. Следовательно, каждый факт характеризуется точностью, т. е. содержит определенное число знаков.

Аспект характеризует предмет, его свойства и отношения с другими предметами. В семантическом плане аспект состоит из фактов. Глубина характеристики объекта определяется числом фактов в аспекте, которое оценивается объемом сведений, необходимых для описания объекта проектирования в рамках конкретной решаемой задачи. Число фактов может быть определено на основании: обобщения статистических данных; строгого аналитического изучения.

Существует оптимальное число фактов в аспекте.

В математической интерпретации аспект представляет собой кортеж знаков, длина которого может быть произвольной. Выражение вида $c = \langle \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m \rangle$, являясь аспектом, представляет собой кортеж длины m .

Аспект может состоять из нескольких частей, число которых может быть произвольным. В большинстве практически интересных случаев в аспекте достаточно выделить только две части. Первая часть P , кортеж знаков длины l , характеризует посредством множества знаков признаковую составляющую аспекта. Число признаков в аспекте соответствует числу фактов β_j , $j = 1 \div l$.

Вторая часть аспекта S , кортеж знаков длины k , характеризует посредством множества знаков смысловую составляющую аспекта. Количество смысловых фактов в аспекте соответствует числу α_i , $i = 1 \div k$.

Аспект можно записать в виде $c = \{P, S\}$; $P = \langle \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_l \rangle$; $S = \langle \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k \rangle$.

Материальным носителем аспекта может являться матрица, представляющая собой типовую структуру аспекта. Факт в аспекте выражается знаками естественного или искусственного языка. Свойство аспекта быть кортежем также подтверждается двумя особенностями кортежа в интерпретации аспекта:

- место каждого факта в аспекте является строго определенным (каждому факту присвоен порядковый номер) и не может быть произвольно изменено;
- в признаковой и смысловой частях аспекта могут встречаться как одинаковые, так и разные сочетания знаков. Пример, одинаковые числовые значения параметров, одинаковые слова во фразах.

Смысловая часть модели. Для каждой конкретной модели номинальные значения полноты и точности есть величины постоянные. Фактически же значения полноты и точности для каждой конкретной семантической информации при ее сжатии являются переменными. Возможны следующие три случая. Содержание

вторичной семантической информации, выраженное множеством существенных признаков, может быть:

а) меньше содержания первичной; формальная модель не обеспечивает сохранения существенных признаков первичной информации при сжатии;

б) больше содержания первичной, т. е. формализованная модель достаточно сложна, она имеет потенциальный семантический запас;

в) полностью адекватно содержанию первичной, т. е. формальная математическая модель обеспечивает сохранение существенных признаков первичной семантической информации.

Для получения большей относительной адекватности необходимо, чтобы логическая структура модели была сложнее логической структуры первичной семантической информации, подлежащей сжатию. Необходима такая организация структуры модели, при которой отдельные факты были бы логически связаны между собой.

Признаковая часть модели. Полная модель вторичной семантической информации содержит помимо смысловой и признаковую часть. Методологические основы создания признаковой части модели включают:

- сбор данных по аспектам признаковой части первоисточников;
- анализ аспектов и выделение из них наиболее общих, характерных для конкретного объекта проектирования;
- раскрытие выделенных аспектов конкретными категориями и понятиями данной отрасли науки и техники.

Языковые особенности модели. Язык, представляя собой знаковую систему любой физической природы, выполняет познавательную и коммуникативную функции. Стремление повысить точность и полноту передачи смысла при сжатии семантической информации привело к созданию формальных, более экономичных грамматических средств. К таким средствам можно отнести:

- дескрипторные словари;
- фиксированные списки словосочетаний, терминов, идиом и др.;
- особенности грамматики – указатели роли, указатели связи, кортежный принцип организации, единство знаков.

Под дескрипторами понимаются наименования понятий, используемые для описания содержания объекта проектирования. Множество дескрипторов оформляется в виде словаря – фиксированного списка. Словарь состоит из единичных слов, терминов, сочетаний слов, фраз и т. д. отобранных для сжатия семантической информации. Дескрипторы расположены в словаре в определенном порядке, чаще всего по алфавиту или предметному признаку. Напротив каждого дескриптора стоит числовой код, позволяющий быстро привести отобранные дескрипторы к виду, удобному для обработки на ЭВМ. В дескрипторный словарь наравне с отдельными словами иногда включают фрагменты словесных описаний.

Для уменьшения неопределенности слов в тексте, уменьшения объема обозначаемого ими понятия в процессе сжатия информации вводятся указатели роли. Указатели роли показывают значение слова (дескриптора) в том или ином контексте. Введение указателей роли позволяет существенно расширить основной

состав дескрипторного информационного языка. Вместо одного дескриптора может употребляться столько дескрипторов, сколько введено указателей роли.

Указатели связи служат для выделения и формирования тематических, предметных классов на основе первичной семантической информации, которые отражают какое-либо понятие или категорию конкретной области науки и техники. При группировке дескрипторов в предметные классы производится разбиение их множества на пересекающиеся и непересекающиеся подмножества. В каждое подмножество включаются дескрипторы, обладающие каким-либо общим свойством или обобщаемые одним понятием.

Информационные языки по степени формализации и соответственно грамматической сложности можно разделить на три группы:

- к первой группе относятся информационные языки, в которых для сжатия семантической информации используются слова естественного языка, не ограниченные заранее предусмотренным списком; это наиболее формализованная группа языков;

- ко второй группе относятся информационные языки, в которых для сжатия используются словари дескрипторов и один из способов грамматической связи;

- к третьей группе относятся информационные языки, в которых для сжатия используются все формальные элементы языка. В грамматическом отношении они являются самыми сложными.

При модельном сжатии первичной семантической информации применяется язык третьего типа как самый совершенный.

Содержание обобщенной модели ХТА. Раскрытию содержания обобщенной модели посвящено последующее содержание книги. В этом разделе делается только первый шаг. Построение любой модели начинается с выбора в рамках системного анализа некоторого магистрального направления ее создания. Такое направление вытекает из построенной нами совокупности знаний о ХТА (рис. 1.4.2).

Согласно определению, структура ХТА зависит от совокупности протекающих в ней процессов и последовательности их проведения. С другой стороны, ХТА является самостоятельным машиностроительным изделием, которому присущи определенные конструктивные особенности. Наличие двух начал нашло отражение в структуре научных знаний о ХТА и должно учитываться при создании обобщенной модели.

Описание ХТА требует реализации некоторого принципа его декомпозиции. Здесь проявляется свойство объекта проектирования быть представленным в виде системы. Систему необходимо рассматривать как совокупность определенным образом связанных между собой элементов, которые в полной мере отражают его структуру и особенности функционирования. При выборе принципа декомпозиции ХТА возникают значительные сложности.

ХТА – это совокупность конструктивных элементов, связанных между собой некоторым образом. Геометрическая форма, размеры и взаимное расположение конструктивных элементов оказывают существенное влияние на протекающие в нем процессы, но не позволяют в полной мере судить об эффективности

функционирования ХТА. В этом случае вне поля зрения остаются технологические параметры его работы.

Описание закономерностей протекающих в ХТА процессов на основании анализа присущих им совокупностей физико-химических явлений, с учетом его геометрических особенностей позволяет решить поставленную выше задачу. При таком подходе отсутствует какая-либо информация о затратах на изготовление ХТА и не представляется возможным оценить наличие технических возможностей его создания.

Каждый в отдельности из приведенных выше способов декомпозиции не позволяет построить единую систему, элементы которой в полной мере отражали бы структуру ХТА и особенности его функционирования. Такая система может быть создана при проектировании сложных химико-технологических систем, электронной аппаратуры, металлообрабатывающих станков, морских и речных судов, летательных аппаратов.

Обобщенная модель ХТА должна включать следующие аспекты как основные элементы его описания.

1. Представление ХТА в виде технической системы, позволяющей описать общие закономерности его функционирования. Она позволит решить ряд важных практических задач:

- осуществить синтез структуры ХТА по заданию на проектирование;
- автоматизировать процесс составления его описания;
- разработать инструкцию по эксплуатации.

2. Функционально-структурную схему, предназначенную для численного описания технологических особенностей работы ХТА. Она рассматривает совокупность физико-химических эффектов и явлений, имеющих место в процессе взаимодействия ансамбля дисперсных частиц со сплошной фазой при наличии внешних воздействий, т. е. смысловой аспект построения модели технологических расчетов объекта проектирования.

3. Конструктивную схему, предназначенную для создания надежной конструкции ХТА и описания его конструктивных особенностей. Для объекта проектирования надежность означает прежде всего безотказную работу в течение экономически обоснованного срока эксплуатации элементов конструкции при возможном сочетании действующих нагрузок и отклонений параметров технологического процесса с учетом коррозионно-эрозионного воздействия внешней и обрабатываемых сред.

4. Схему локальной АСУ, предназначенную для описания автоматического управления и технологического контроля. Задача локальной АСУ – обеспечить максимально эффективную эксплуатацию объекта проектирования при изменении внешних условий. Автоматизация оборудования становится одним из основных источников повышения технического уровня выпускаемого оборудования, обеспечивая уже на стадии изготовления полную готовность ХТА к эффективной эксплуатации.

5. Комплексный критерий качества, предназначенный для всестороннего обоснования принятых проектных решений. Оценка экономической эффектив-

ности создаваемых ХТА возможна на основе комплексного критерия качества, который позволяет обоснованно сравнивать различные проектные решения, вбирая в себя результаты расчетов экономических показателей объекта проектирования как на стадии его создания, так и на стадии эксплуатации.

Выделенные аспекты (каждый по отдельности) характеризуют только одну из сторон ХТА. Для представления объекта проектирования в целом их необходимо логически увязать.

Подведем итоги. Переход к вторичной семантической информации на основе обобщенной модели предполагает выделение базовых категорий. На их основе строятся дальнейшие обобщения: факты и аспекты. Факт отражает свойство объекта, не поддающееся дальнейшему смысловому делению. Аспект объединяет ряд фактов, имеющих общую смысловую нагрузку. Повышение точности и полноты вторичной семантической информации необходимо для создания информационного языка. Словарь языка строится на основе дескрипторов, делящихся на ряд предметных классов. Указатели роли и указатели связи образуют его грамматику. Последующее познание ХТА при его проектировании предполагает раскрытие содержания технической системы, функционально-структурной схемы, конструктивной схемы и комплексного критерия качества.

ГЛАВА 2. КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ДИСПЕРСНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

2.1. ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ

Симметрия кристаллов. В твердых телах, представляющих для нас наибольший интерес, расположение атомов (или молекул) соответствует периодическому повторению определенного «узора» в трех измерениях. Такие твердые тела называются *кристаллами*, а расположение атомов в них – *кристаллической структурой*. Порядок, свойственный расположению атомов твердого тела, часто приводит к симметрии его наружной формы (см. раздел 2.2). Например, металлы могут принять формы с высокой степенью симметрии, которые и связывают с термином «кристаллы». Кристаллы каменной соли имеют форму прямоугольных параллелепипедов с одинаковыми гранями. Эти кристаллы имеют высокую степень симметрии. Напротив, у кристаллов кварца симметрия более низкого порядка. Наблюдая только внешние особенности, кристаллографы смогли накопить большие знания о свойствах симметрии кристаллов еще задолго до создания современных, более прямых методов определения внутренней симметрии в расположении атомов. Некоторые материалы, например металлы, имеют простые кристаллические структуры. У многих химических соединений структуры очень сложны. Большинство материалов имеет сравнительно простые структуры.

Теория связи. В твердом виде вещество существует в равновесном состоянии при более низких температурах, чем в жидком или газообразном виде. Поэтому твердые тела должны иметь самый низкий уровень свободной энергии именно при низких температурах. Кроме того, твердым телам органически свойственна симметрия. Следовательно, при симметричном расположении атомов в пространстве уровень энергии должен быть ниже, чем при хаотическом расположении. Этот вывод можно обосновать с помощью элементарных рассуждений. Атомы твердого тела прочно связаны друг с другом и в то же время не сближаются настолько сильно, чтобы резко возросла плотность тела. Поэтому модель твердого тела должна удовлетворять по крайней мере двум требованиям: она должна объяснять появление сил притяжения между атомами, когда они находятся далеко друг от друга, и возникновение сил отталкивания при слишком сильном сближении атомов.

Такая модель соответствует взаимодействию шаров (например, мраморных), покрытых слоем клейкой пасты. Когда шары коснутся друг друга, паста будет немного способствовать их притяжению и удержит шары рядом. Однако если с помощью внешней силы попытаться придвинуть шары еще ближе, то возникнут большие упругие силы, которые противодействуют сжатию и отодвигают шары до некоторого равновесного расстояния между центрами (оно примерно равно диаметру шаров). Если сталкиваются только *два* шара, наиболее низкое энергетическое состояние будет иметь место при их касании. Для *трех* шаров самому низкому уровню энергии соответствует расположение шаров в вершинах треугольника, причем каждый шар касается двух соседних. Для *семи* шаров, находящихся на одной плоскости, наиболее низкий энергетический уро-

вень достигается при гексагональном расположении, когда шесть шаров окружают один центральный (рис. 2.1.1). При этом расположении взаимодействуют 12 пар – максимальное количество, возможное для семи шаров, лежащих на одной плоскости. Восемь, девять, десять, ..., N шаров, располагаясь вокруг центрального седьмого шара, повторяют бесконечное число раз симметрию исходной группы. При этом идеальном порядке количество взаимодействующих пар максимально, а потенциальная энергия минимальна. Такие двумерные кристаллы существуют только в нашем воображении, но можно представить, что трехмерные кристаллы с низким энергетическим уровнем состоят из множества атомных плоскостей, сложенных друг с другом в определенном порядке, подобно стопке бумажных листов. Существует несколько возможных способов упаковки.

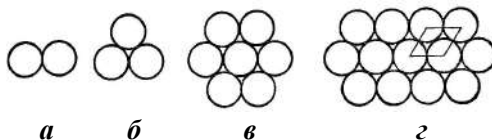


Рис. 2.1.1. Плотная упаковка круглых шаров на плоскости:
***а* – два шара; *б* – три шара; *в* – семь шаров; *г* – множество шаров.**

Представление о связях помогает понять, почему расположению атомов в совершенном кристалле соответствует минимум энергии, а нарушение идеальной симметрии плотно упакованных листов двумерных структур (см. рис. 2.1.1) сопровождается поглощением энергии. Предположим, что симметрия нарушена самым простым способом – изменено положение только одного атома. При удалении атома из внутренней части плоской структуры и перемещении его на край уменьшится общее количество связей в твердом теле. Разрываются шесть связей, а когда этот атом попадает на край, восстановятся только две или три. Атомы на рис. 2.1.2,*а* должны приобрести большую энергию, чтобы перейти к конфигурации рис. 2.1.2,*б*. Это обусловлено тем, что атомы, окружающие «дырку», не могут перестроиться таким образом, чтобы восстановить недостающие связи. Следовательно, расположение с высокой степенью симметрии и есть конфигурация, соответствующая минимуму энергии.

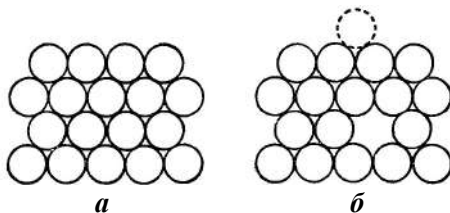


Рис. 2.1.2. Образование вакансии на упакованной плоскости

Если рисунок в расположении атомов многократно повторяется в определенной последовательности, то в нем можно выделить простейшие «строительные блоки» (*элементарные ячейки*), из которых можно построить весь кристалл. Так, каждый атом в плотноупакованной плоскости (см. рис. 2.1.2) окру-

жен правильным шестиугольником из шести других атомов. Положение каждого атома на плоскости можно найти совершенно точно с помощью простой трансляции (т. е. перемещения без поворотов) ромба в плоскости в направлении его сторон. Ромб, показанный на рис. 2.1.1,з, называется **элементарной ячейкой**. Трансляции, необходимые для охвата всех атомов, – это перемещения, кратные межатомным расстояниям. Для трехмерных кристаллов представить элементарные ячейки несколько сложнее, так как они должны быть параллелепипедами. Общее расположение изображено на рис. 2.1.3 (оно не охватывает структуру с гексагональной симметрией). Здесь элементарная ячейка выделена жирными линиями. Длины ребер такой ячейки соответствуют основным трансляциям, так как можно построить всю структуру из единственной элементарной ячейки, бесконечно перемещая ее на эти расстояния. Обычно элементарная ячейка определяется как объем твердого тела, из которого путем бесконечного числа трансляций в трех направлениях можно построить весь кристалл.

Конкретному типу кристаллической структуры не всегда соответствует единственная элементарная ячейка. В ряде случаев в одной и той же структуре можно выделить много элементарных ячеек, например ячейка со сторонами $2a$, $2b$, $2c$ также подходит для кристалла, как и ячейка с размерами a , b , c (рис. 2.1.3). Для множества структур годятся ячейки с совершенно различной геометрией. В ряде случаев целесообразно использовать ячейки с наименьшим количеством атомов. Для других целей удобнее применять ячейки несколько большего объема, если они обладают определенными геометрическими преимуществами, например кубические структуры. У большинства металлов наименьшие элементарные ячейки состоят только из нескольких атомов. Некоторые металлы и многие химические соединения содержат в самой малой элементарной ячейке гораздо больше атомов – десятки и даже сотни.

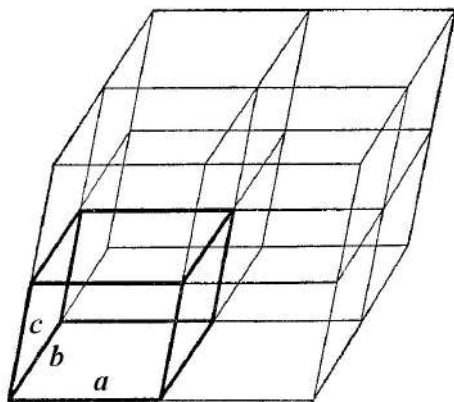


Рис. 2.1.3. Схема, показывающая, как можно застроить пространство переносом элементарной ячейки в направлении ее ребер

Типичные кристаллические структуры. У многих материалов, имеющих практическое значение, кристаллические структуры сравнительно просты. Некоторые из них можно построить, как бы складывая стопку из двумерных плот-

ноупакованных гексагональных структур, которые мы уже неоднократно использовали в качестве примеров. Ниже кратко описаны примеры некоторых типов кристаллических структур.

Гексагональная плотноупакованная структура. В кристаллах часто встречается гексагональная плотноупакованная структура. Она образуется при складывании плотноупакованных плоскостей в простой последовательности: две плотноупакованные плоскости соприкасаются друг с другом таким образом, что каждый атом одной плоскости помещается в углублении между тремя атомами соседней плоскости. Геометрия двух таких плоскостей подробно показана на рис. 2.1.4,а. Светлые кружки изображают атомы в одной плотноупакованной плоскости *A*. Прилегающая к ней плоскость *B* помечена заштрихованными кружками. Отметим, что плоскость *B* можно расположить двумя способами, один из которых показан на рисунке, а другому соответствуют положения атомов в углублениях *C*.

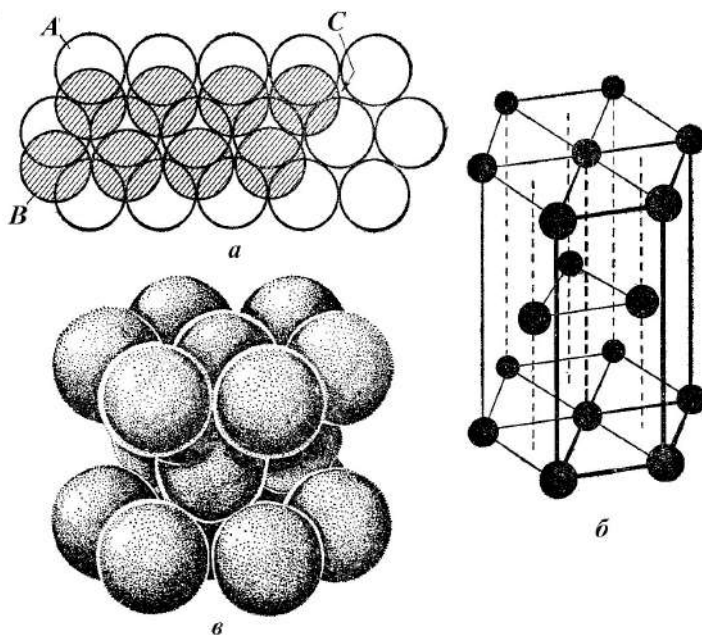


Рис. 2.1.4: а – укладка плотноупакованных плоскостей для кристаллической структуры типа гекс. п. у.; б – относительное расположение атомов в кристалле с гекс. п. у.; в – объемное изображение структуры гекс. п. у.

При любом способе каждый атом второй плоскости соприкасается с тремя атомами первой плоскости, и наоборот. Существенная разница возникает лишь при выборе способа наложения третьей плоскости на вторую. Очевидно, имеются два варианта и для третьей плоскости. Пусть в первых двух плоскостях выполняется последовательность *AB*. Тогда третью плоскость можно наложить таким образом, что она займет положение *A*: атомы в третьей плоскости будут

находиться прямо над атомами первой плоскости. При другом варианте эти атомы займут положения *C*, и атомы третьей плоскости будут находиться точно над впадинами первой. В плотноупакованной гексагональной структуре (сокращенно – гекс. п. у.) выполняется *первый* способ укладки атомных плоскостей – в последовательности *ABAB...*

Небольшой объем со структурой гекс. п. у. схематически показан на рис. 2.1.4,б (этот объем состоит из трех элементарных ячеек). Здесь изображение сделано таким образом, что передние атомы не закрывают атомов, находящихся позади них. Эта структура называется плотноупакованной потому, что она обладает максимальной плотностью упаковки, возможной для жестких шаров. Каждый атом окружен 12 ближайшими соседями: 6 находятся в той же плоскости, 3 – в верхней плоскости и 3 – в нижней плоскости. Расстояние *a* (расстояние между центрами соседних атомов) называется **атомным диаметром**. Схема этой структуры показана на рис. 2.1.4,б.

Кубическая плотноупакованная структура. Родственная кристаллическая структура получается в том случае, когда плотноупакованные плоскости складываются в несколько иной последовательности. Первые две плоскости идут в последовательности *AB*, однако третья смещена по отношению к обеим плоскостям *A* и *B* в положение *C*. Четвертая плоскость занимает положение *A*. В итоге устанавливается повторяющаяся последовательность *ABCABC...* Элементарная ячейка этой кристаллической структуры показана на рис. 2.1.5,а.

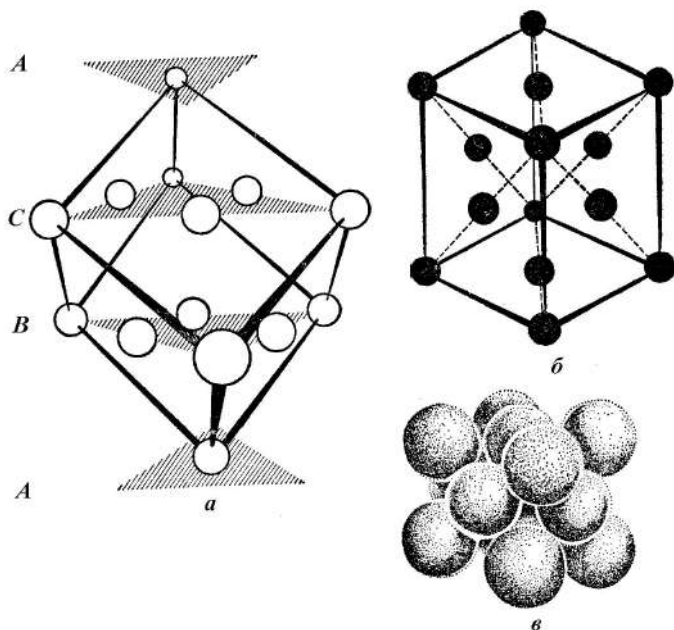


Рис. 2.1.5: *a* – укладка плотноупакованных плоскостей для образования решетки г. ц. к. Элементарный куб – объем, обведенный жирными линиями. Плотноупакованные плоскости обозначены затененными треугольниками; *б* – элементарный куб решетки г. ц. к.; *в* – схема решетки г. ц. к. с соблюдением масштаба в размерах атомов и ребер куба.

Эта ячейка не является минимально возможной, но зато она весьма удобна, так как представляет собой куб. Атомы занимают вершины куба и центр каждой грани. Отсюда и происходит название – **гранецентрированная кубическая структура** (сокращенно – г. ц. к.). Эта структура обладает симметрией, допускающей повороты на 90° относительно любого ребра куба. Более удобный способ изображения этого куба показан на рис. 2.1.5,б, однако при этом не удастся столь же наглядно продемонстрировать последовательность упаковок плоскостей. Гранецентрированная кубическая структура также является плотноупакованной – каждый атом имеет 12 ближайших соседей. Атомы касаются друг друга вдоль диагоналей граней. Объемная модель элементарного куба показана на рис. 2.1.5,в.

Объемно центрированная кубическая структура. Методы укладки плотноупакованных плоскостей, приводящие к построению структур гекс. п. у. и г. ц. к., исчерпывают простейшие способы укладки. Возможны промежуточные последовательности (например, *ABACA...*), но ни один из элементов не кристаллизуется в столь сложную структуру (за исключением отдельных металлов в особых температурных областях). Напротив, многие элементы обладают структурами, которые не образуются из плотноупакованных плоскостей. Одной из таких структур является **объемно центрированная кубическая структура** (сокращенно – о. ц. к.) (рис. 2.1.6). Эта элементарная ячейка представляет собой куб с атомами в каждой вершине и в центре куба. Такая структура не имеет плотной упаковки, поскольку каждый атом окружен только восемью соседями. Следует отметить, что соприкосновение атомов происходит вдоль диагоналей куба.

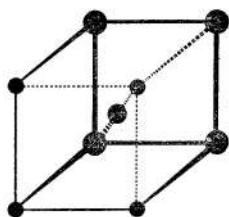


Рис. 2.1.6. Расположение атомных центров в решетке о. ц. к.

Простая кубическая структура. Другая возможная структура – это *простое кубическое* расположение атомов. В элементарном кубе такой структуры атомы расположены только в вершинах куба. Поэтому атомы касаются друг друга вдоль ребер куба (рис. 2.1.7). Эта структура имеет неплотную упаковку. Каждый атом имеет всего шесть ближайших соседей. Такая структура встречается только у одного элемента – полония – и то лишь в определенной области температур. Простая кубическая структура введена потому, что с ее помощью можно упростить дальнейшие полуколичественные расчеты и выводы.

Многие другие элементарные кубические ячейки несложным образом связаны с простой кубической ячейкой. Некоторые структуры можно представить как набор вставленных друг в друга простых кубических подрешеток. Объемно центрированную кубическую решетку можно рассматривать как систему из двух одинаковых простых кубических решеток, причем в одной из них атомы находятся в вершинах кубов (см. рис. 2.1.10), а другая содержит центральные

атомы. Гранецентрированные кубические решетки как бы состоят из четырех идентичных простых кубических решеток, которые расположены определенным образом относительно друг друга.

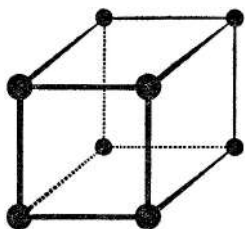


Рис. 2.1.7. Расположение атомных центров в простой кубической решетке

Другие кубические структуры. Многие элементы кристаллизуются в одну из описанных выше структур, но ряд элементов и химические соединения имеют другие структуры. Некоторые из этих структур представляют комбинации (или, напротив, составные части) одной из только что рассмотренных основных кубических структур. В этих комбинированных структурах одна решетка проникает внутрь другой. Несколько таких структур описаны ниже.

Структура алмаза представляет собой сочетание двух гранецентрированных кубических подрешеток, вставленных друг в друга. Элементарная ячейка схематически показана на рис. 2.1.8, *а*. У второй подрешетки начало координат сдвинуто вдоль диагонали куба первой на четверть ее длины в точку. Кубическая решетка алмаза имеет неплотноупакованную структуру, так как каждый атом окружен только четырьмя ближайшими соседями.

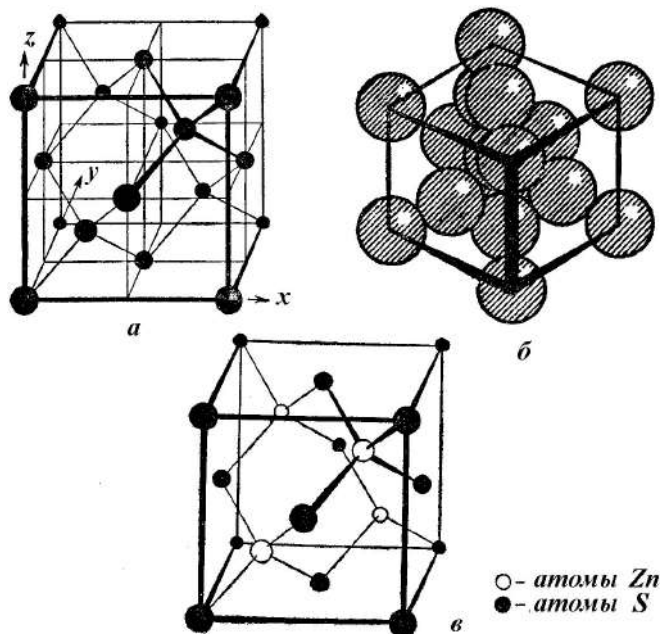


Рис. 2.1.8. Структура алмаза: *а* – основная решетка алмаза; жирными линиями выделены тетраэдрические связи; *б* – масштабное изображение структуры алмаза; *в* – структура цинковой обманки.

На рис. 2.1.8,б с соблюдением масштабов показаны расположения связей с ближайшими соседями атома и геометрия элементарного куба. Если представить себе, что атом находится в центре правильного тетраэдра, то его соседи будут расположены в четырех вершинах этого тетраэдра. Структура алмаза образуется при кристаллизации германия, кремния и углерода (в модификации алмаза).

Если две вспомогательные гранецентрированные кубические решетки заняты атомами разных элементов, то возникает новая структура, которая называется структурой *цинковой обманки* (рис. 2.1.8,б). Важнейшими соединениями с такой структурой являются полупроводник ZnS (который и дал название этому типу структуры), CuCl и многие другие.

Другой тип комбинированной структуры имеет каменная соль NaCl. Элементарная ячейка этой структуры показана на рис. 2.1.9. Она состоит из двух гранецентрированных кубических подрешеток. Первая подрешетка содержит ионы Na, и один из ее узлов расположен в начале координат. Другая подрешетка состоит из ионов Cl, которые находятся на серединах ребер первого куба. Если не делать различия между ионами Na и Cl, то такая решетка будет простой кубической.

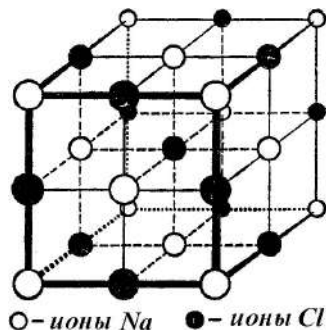


Рис. 2.1.9. Структура кристалла NaCl

Еще одним видом комбинированной кристаллической структуры обладает соединение CsCl. Его решетка состоит из двух вставленных друг в друга простых кубических решеток, причем вершина одной из них расположена в центре другого куба. Одна решетка занята только ионами Cs, а другая – только ионами Cl. Возникающая при этом структура (рис. 2.1.10) называется структурой типа *хлористого цезия*.

Эти примеры охватывают только небольшое количество существующих структур. Среди других структур многие также являются простыми, но некоторые чрезвычайно сложны.

Общие геометрические свойства простых структур. Общие характерные свойства описанных выше основных структур таковы, что можно проводить многочисленные расчеты, относящиеся к деталям их геометрии. Особенно просты расчеты для кубических решеток. Представляют интерес характеристики:

- количество ближайших соседей (**координационное число**);
- **атомный радиус**, определяемый как половина расстояния между ближайшими соседями в кристалле чистого элемента (это расстояние дается в долях ребра куба);

– относительная **плотность** упаковки (доля объема, занятая сферическими атомами, по сравнению с общим объемом, который занят структурой).

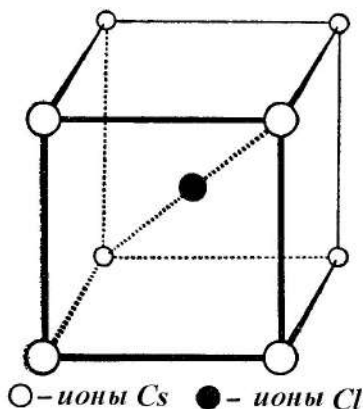


Рис. 2.1.10. Структура кристалла CsCl

Эти данные для элементарных кубических структур приведены в табл. 2.1.1.

Зная тип кристаллической структуры и размеры элементарных ячеек, можно рассчитать атомные радиусы. В большинстве случаев атомные радиусы лежат в интервале от 1 до 2 Å.

Несовершенства в кристаллах. Теория математически идеальных кристаллов чрезвычайно полезна. Она позволяет объяснить многие свойства кристаллической решетки – плотность, диэлектрическую проницаемость, удельную теплоемкость, упругие свойства. Эти свойства называются **объемными**, или **структурно-нечувствительными**. Однако реальные кристаллические тела неидеальны: в них всегда в огромном количестве существуют нарушения структуры, называемые **несовершенствами** (или **дефектами**). Перечисленные выше свойства лишь в слабой степени зависят от этих несовершенств. Однако дефекты структуры оказывают сильное влияние на многие другие свойства кристалла, и в первую очередь на прочность. Свойства, которые сильно зависят от степени совершенства кристалла, называются **структурно-чувствительными**.

Таблица 2.1.1

Некоторые сведения об элементарных кубических структурах

	Простая кубическая	о. ц. к.	г. ц. к.	Решетка алмаза
Координатное число	6	8	12	4
Атомный радиус (a – ребро куба)	$a/2$	$a\sqrt{3}/4$	$a\sqrt{2}/4$	$a\sqrt{3}/8$
Количество атомов в элементарном кубе	1	2	4	8
Плотность упаковки	$\pi/6$	$\pi\sqrt{3}/8$	$\pi\sqrt{2}/6$	$\pi\sqrt{3}/16$

Приведем сводку кристаллографических дефектов:

1. Тепловые колебания.
2. Точечные дефекты:

- вакансии;
 - атомы внедрения;
 - изолированные включения примеси.
3. Линейные дефекты – дислокации.
4. Поверхностные дефекты:
- наружная поверхность твердого тела;
 - внутренние поверхности: границы зерен и другие внутренние границы.

Смещенные атомы. Тепловые колебания атомов твердого тела не приводят к серьезным нарушениям идеальной структуры кристалла. Каждый атом находится в среднем на своем собственном месте. Поэтому каждый атом окружен необходимым числом ближайших соседей, которые расположены на расстояниях, примерно соответствующих совершенной структуре. Невыполнение этих условий приводит к образованию некоторых дефектов решетки: либо у атомов неправильное количество ближайших соседей, либо нарушаются расстояния до ближайших соседей. Эти дефекты в зависимости от их геометрии можно разделить на три группы: точечные, линейные и поверхностные.

Точечные дефекты – это нарушения решетки в изолированных друг от друга точках решетки. Например, точечными дефектами являются *вакансии*, т. е. узлы решетки, в которых нет атомов. Точечными дефектами могут быть *атомы внедрения*, т. е. лишние атомы, поместившиеся в промежутках между атомами, расположенными в узлах решетки. Это могут быть *примеси* – инородные атомы, занимающие места в решетке. Эти три вида дефектов схематически показаны на рис. 2.1.11. Отметим, что размеры этих дефектов примерно равны атомному диаметру.

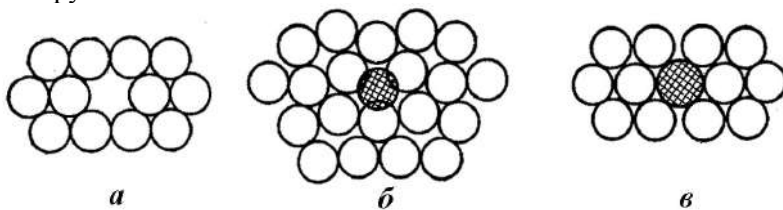


Рис. 2.1.11. Три типичных точечных дефекта:
а – вакансия; *б* – внедренный (междоузельный) атом;
в – атом инородной примеси.

К линейным дефектам относятся *дислокации*, имеющие заметную протяженность только в одном направлении. Такие дефекты оказывают большое влияние на механические свойства твердых тел.

Поверхностные дефекты бывают двух типов: наружные и внутренние. Наружные дефекты точно соответствуют своему названию – это несовершенства, обусловленные тем, что поверхность твердого тела граничит с другой фазой. Твердые тела обладают *поверхностной энергией*; для металлов она имеет порядок 1 дж/м^2 . Внутренние дефекты появляются в тех местах, где происходит переход от одной пространственной ориентации кристаллической решетки к другой. Эти внутренние поверхности также обладают энергией около 1 дж/м^2 .

Относительная ориентация двух соседних кристаллических зерен может принимать бесконечное множество значений; соответственно существует бесконечное разнообразие границ между зернами. Большинство твердых тел состоит из множества зерен, эти тела являются поликристаллами.

Поскольку на поверхности происходит скачкообразное изменение плотности материала, кристаллической структуры или локальной ориентации зерен, поверхности оказывают сильное влияние на механические свойства вещества. Влияние внутренних поверхностей исследовано мало, и здесь еще нет ясности.

Вакансии и атомы внедрения. И вакансии, и атомы внедрения – это дефекты атомных размеров, и их нельзя увидеть в обычный микроскоп. Сначала рассмотрим *вакансии*. Они имеются во всех кристаллах, как бы тщательно последние ни выращивались. Под действием тепловых флуктуаций в реальном кристалле постоянно зарождаются и исчезают вакансии. Формально схему образования такого дефекта для двумерного кристалла можно проследить по рис. 2.1.12. Внутренний атом может сорваться со своего узлового положения в решетке и перейти на поверхность. Для этого перехода необходима энергия. Для большинства кристаллов эта энергия имеет порядок 1 эВ на вакансию.

Детальный механизм образования вакансий в кристаллической решетке не таков, как это показано на рис. 2.1.12. Атом, находящийся внутри кристалла, не может перескочить на поверхность.

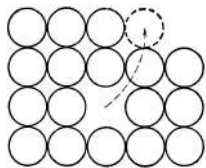


Рис. 2.1.12. Геометрическая схема образования вакансий в двумерной кубической структуре

Такой переход возможен только в том случае, если атом обладает огромной кинетической энергией, необходимой для прохождения через решетку. Тем не менее если атомы в узлах кристаллической решетки располагают необходимой энергией в 1 эВ , вакансии будут образовываться. Это предположение соответствует духу термодинамических расчетов, в которых исследуется только *характер* равновесия, а *не способы*, какими система приходит к равновесию.

Атомы внедрения – это избыточные атомы, проникшие в решетку, но не занимающие ее узлов. Эти дефекты могут быть двух видов:

- атомы внедрения такого же типа, как в узлах регулярной решетки;
- атомы внедрения другого типа (примеси).

Дефекты этих двух видов могут существовать в любой решетке и даже сосуществовать в одной и той же решетке.

Образование внедрений из собственных атомов решетки можно представить схемой рис. 2.1.13,а. Атом переходит с поверхности в объем кристалла и занимает место в одном из междоузлий решетки. При образовании внедрения энергия кристалла возрастает, так как атом проникает в область, где очень велики силы отталкивания между внедренным атомом и его соседями. В плотноупакованных кристаллах, подобных металлическим кристаллам со структурой г. ц. к.

или гекс. п. у., энергия образования внедрений велика (вероятно, от 3 до 5 эВ). Для неплотных структур типа германия энергия меньше.

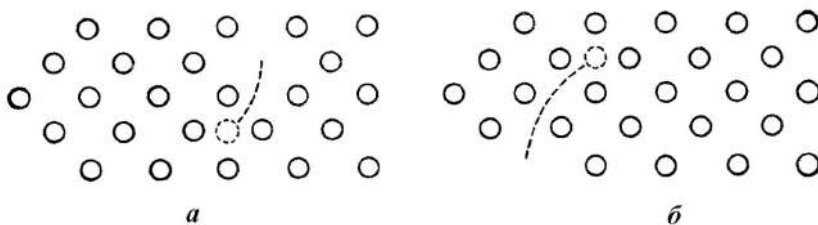


Рис. 2.1.13. Образование атомов внедрения:

а – образование изолированного атома внедрения; *б* – образование атома внедрения одновременно с образованием вакансии.

Внедрение в решетке может образоваться за счет ухода атома из узла решетки непосредственно в междоузлие (рис. 2.1.13,б); при этом в оставленном узле возникает вакансия. Эти дефекты называются *дефектами по Френкелю*. Энергия их образования примерно равна сумме энергий образования вакансии и внедрения.

Внедренная примесь возникает при проникновении инородного атома в междоузлие кристаллической решетки. Энергия образования такого внедрения частично связана с упругой деформацией решетки, что имеет место и при внедрении собственных атомов. Поэтому при небольших размерах примесного атома энергия должна быть мала. Небольшие атомы (водорода, углерода, кислорода и азота) должны поэтому легко образовывать дефекты внедрения в решетках металлов. Этот вывод соответствует действительности: металлические кристаллы часто поглощают очень большое количество указанных примесей. Например, при подходящих условиях цирконий будет поглощать так много водорода, что атомы водорода займут почти все междоузлия решетки.

Образование точечных дефектов. В кристалле в состоянии термодинамического равновесия содержится конечное число вакансий и внедренных атомов. Кроме точечных дефектов, возникших в результате тепловых флуктуаций, могут появиться точечные дефекты иного происхождения. Один из методов получения избыточного (для данной температуры) количества точечных дефектов состоит в резком охлаждении от более высокой температуры, т. е. в *закалке*.

Другой способ создания избыточных дефектов заключается в сильной **деформации** кристаллической решетки, например ковкой или прокаткой. Хотя решетка по-прежнему сохраняет в основном свою кристаллическую природу, но возникают многочисленные дефекты структуры.

Третий метод увеличения количества точечных дефектов состоит в **бомбардировке** твердого тела атомами или частицами с высокой энергией. Быстрые частицы соударяются с атомами решетки и смещают их, образуя при этом дефекты по Френкелю. При этом количество дефектов зависит не от температуры, а от природы кристалла и от бомбардирующих частиц. С помощью такой бом-

бардировки могут достигаться заметные концентрации смещенных атомов, что приводит к значительному изменению свойств материалов.

Электронными дефектами называются нарушения распределения зарядов в твердых телах. Это вовсе не означает, что дефектами являются отклонения от полной равномерности в распределении зарядов в пределах объема элементарной ячейки, поскольку именно в ней распределение зарядов на самом деле неоднородно. Однако отклонения от нормальной периодичности в распределении зарядов или энергии уже являются электронными дефектами. Локальные нарушения распределения зарядов обычно сопутствуют геометрическим дефектам кристалла. Например, атом примеси может иметь совершенно иной заряд, чем атомы основной структуры; соответственно может возникнуть локальное электронное нарушение. Вакансия или атом внедрения могут аналогичным образом приводить к искажениям электрического заряда. В дополнение к этим причинам сами электроны в геометрически идеальной решетке могут двигаться таким образом, что возникнут локальные флуктуации заряда. Кроме того, электроны могут поглощать различное количество тепловой энергии, что приводит к изменению их движения в решетке.

Дислокация представляет собой более сложный структурный дефект. Возможны два предельных вида дислокации – краевая и винтовая дислокации. Любая конкретная дислокация обычно представляет собой сочетание этих двух видов. Геометрические свойства дислокации общего вида описать трудно, но предельные случаи – краевые и винтовые дислокации – можно легко понять при помощи рисунков. Эти виды дислокации мы рассмотрим отдельно.

Краевые дислокации. На рис. 2.1.14,*а* показано расположение атомов, характерное для **краевой** дислокации. Можно считать, что искажение кристаллической структуры вызвано тем, что в часть объема кристалла введена лишняя атомная плоскость.

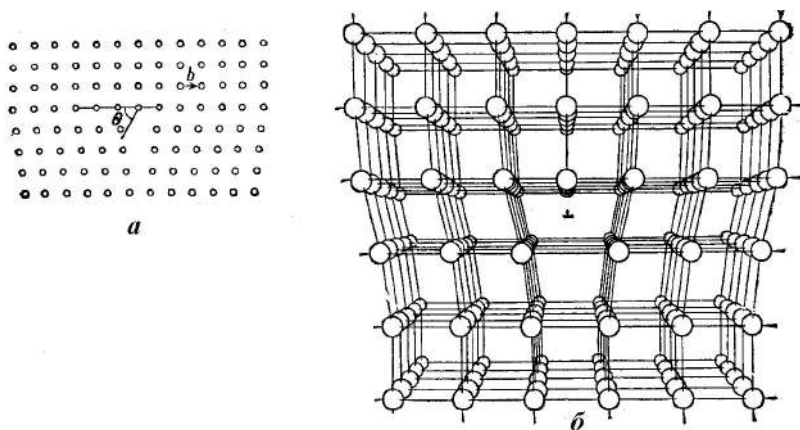


Рис. 2.1.14. Расположение атомов, соответствующее краевой дислокации: *а* – поперечное сечение кристалла; *б* – перспективное изображение расположения атомов вокруг краевой дислокации в кубическом кристалле.

Искажение сосредоточено в основном вблизи нижнего края «полуплоскости» лишних атомов. Под дислокацией понимается линия искажения, которая проходит вдоль края лишней атомной плоскости. Таким образом, в противоположность рассмотренным выше «точечным» несовершенствам структуры дислокация представляет собой «линейный» дефект. На рис. 2.1.14,б показано пространственное расположение атомов возле краевой дислокации в кристалле с простой кубической структурой.

Важнейшая особенность дислокаций состоит в том, что сильные искажения сосредоточены в непосредственной близости от дислокационной линии. В самом деле, вдоль дислокационной линии даже число ближайших соседей атомов может отличаться от координационного числа данной структуры. Однако уже на расстоянии нескольких атомных диаметров в сторону от центра искажения настолько малы, что кристалл в этом месте имеет почти совершенную структуру. Область вблизи дислокационной линии, где искажения чрезвычайно велики, называется **ядром** дислокации. Здесь также очень велики и локальные деформации. В стороне от ядра деформации настолько малы (несколько процентов или менее), что к ним можно применять теорию упругости, и область вдали от ядра дислокации называется **упругой областью**.

Важнейшие особенности нарушения порядка в расположении атомов вокруг краевой дислокации хорошо видны на приведенном рисунке. Искажения возле края лишней полуплоскости вызваны тем, что ближайшие атомы как бы пытаются согласовать свое расположение с резким обрывом лишней плоскости. Поэтому атомы, расположенные непосредственно над краем лишней полуплоскости, испытывают действие сжимающих напряжений: два атомных ряда, слева и справа от лишней плоскости, прижаты друг к другу. Однако непосредственно под лишней полуплоскостью расстояние между аналогичными двумя атомными рядами больше, чем в искаженных участках кристалла. Соответственно в этом месте структура растянута.

Это локальное расширение называется **дилатацией**. Ее возле краевой дислокации можно легко вычислить с помощью простого соотношения. Дилатация Δ в точке, находящейся вблизи краевой дислокации, определяется как

$$\Delta = \Delta V / V = (b/r) \sin \theta.$$

Параметр b , численно равный модулю так называемого **вектора Бюргерса**, – мера величины дислокации и связанных с ней искажений. Параметр r – радиальное расстояние от данной точки до линии дислокации, а θ – угол, определяемый по схеме рис. 2.1.14,а. Кроме растяжения и сжатия решетки, в непосредственной близости от дислокации структура испытывает также сдвиговые напряжения. Искажения, вызванные сдвигом, гораздо сложнее, чем дилатация.

Винтовые дислокации. Для объяснения свойств винтовой дислокации лучше всего воспользоваться следующей моделью. Возьмем совершенный кристалл и сделаем в нем тонкий разрез на некоторую глубину. Затем сдвинем материал по одну сторону надреза вверх на одно межатомное расстояние относительно материала с другой стороны надреза. Теперь снова сомкнем ряды атомов по обе стороны надреза. Внешний вид кристалла после этих операций по-

казан на рис. 2.1.15. Ясно видно, что линия искажений идет вдоль края разреза. Эта линия называется **винтовой** дислокацией.

Основная особенность винтовой дислокации заключается в новом характере атомных плоскостей. Здесь уже нет полностью встроенных атомных плоскостей, перпендикулярных к дислокации. Правильнее сказать, что все атомы находятся на одной поверхности. Эта поверхность является винтовой; она начинается у одного края кристалла и кончается у другого. Отсюда и возникло название этих дислокаций – винтовые. Направление винта может быть как право-, так и левосторонним, а шаг винта может составлять от одного до нескольких межатомных расстояний на один полный оборот винта. У простой дислокации шаг равен одному межатомному расстоянию на один полный оборот.

Как и в случае краевой дислокации, степень искажений зависит от расстояния до центра дислокации. Области, достаточно удаленные от винтовой дислокации, испытывают очень малые локальные искажения. Напротив, области вблизи центра сильно искажены, и здесь возникают локальные нарушения симметрии кристалла. Высота ступеньки на верхней поверхности обычно равна одному параметру решетки. Ряды атомов, перпендикулярные к дислокации, находятся на винтовой поверхности.

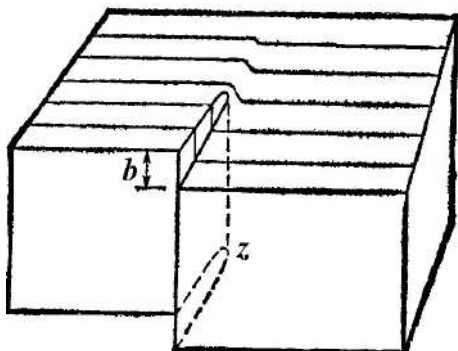


Рис. 2.1.15. Структура кристалла с винтовой дислокацией

Общие свойства дислокации. Геометрические свойства дислокации позволяют установить взаимосвязь краевых и винтовых дислокаций. Рассмотрим совершенный кристалл, внутри которого прочерчена замкнутая кривая C (рис. 2.1.16,а). Единственное ограничение, которое накладывается на эту кривую, состоит в том, что она должна быть либо замкнута внутри кристалла, либо выходить обоими концами на поверхность кристалла. Построим далее внутри кристалла поверхность, опирающуюся на проведенную ранее кривую как на граничную линию. Конечно, в кристалле можно построить множество поверхностей, опирающихся на одну и ту же кривую. В данном случае выбор конкретной поверхности совершенно произволен. Разъединим атомы, расположенные по обе стороны этой поверхности, и сместим *как единое целое* материал с одной стороны поверхности на расстояние b относительно материала, находящегося с другой стороны этой поверхности. Вектор b определяет одновременно и величину, и направление смещения; это вектор Бюргерса дислокации, образующейся в результате проведенной операции.

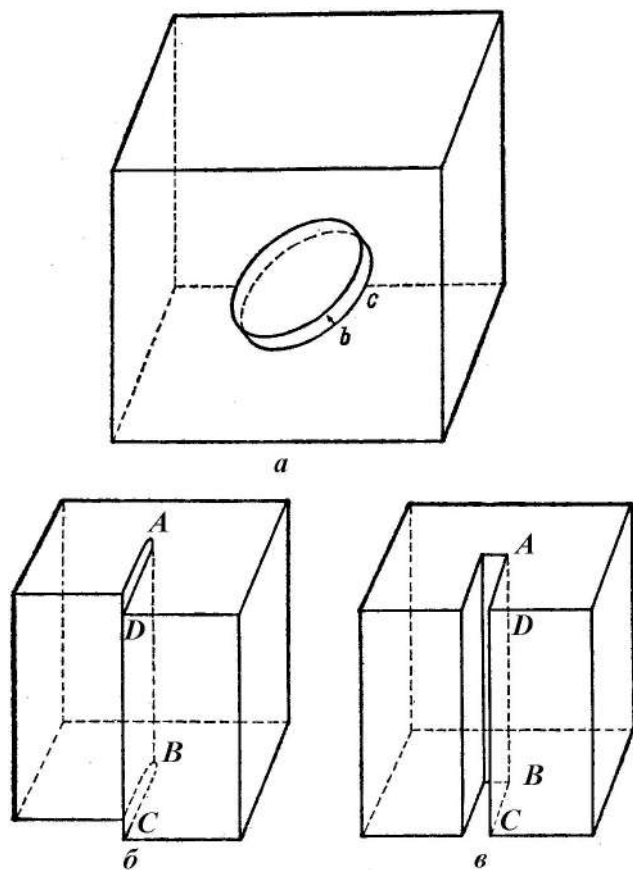


Рис. 2.1.16. Построение дислокационной линии:
***a* — общий метод построения дислокационной линии; б — специальное**
построение для винтовой дислокации; в — специальное построение
для краевой дислокации.

Смещение в зависимости от его направления может привести к образованию полости внутри кристалла или, напротив, к «наползанию» одной части материала на другую. Если образуется полость, заполним ее новыми атомами. Если же произошло наползание, будем удалять из кристалла лишние атомы до тех пор, пока обе стороны разреза не будут точно прилегать друг к другу. В этот момент вдоль проведенной поверхности восстановятся связи между атомами. При этом в кристалле может пройти релаксация, в результате которой форма кристалла будет соответствовать минимуму полной энергии. Линия дислокации определяется как граничная кривая поверхности, вдоль которой производился разрез атомных связей. Вдоль этой граничной линии и сконцентрированы искажения структуры.

Рассмотренная выше картина является общей; при определенных условиях возникают более простые случаи. На рис. 2.1.16,б показан особый случай, соответствующий винтовой дислокации. Замкнутой кривой является при этом пря-

моугольник $ABCD$, одна сторона которого проходит внутри кристалла, а три другие лежат на внешних гранях. Сдвиг материала по обе стороны плоскости $ABCD$ приводит к образованию винтовой дислокации вдоль линии AB . Особый случай, соответствующий краевой дислокации, показан на рис. 2.1.16,в. Определяющей кривой по-прежнему служит контур прямоугольника $ABCD$. Раздвигом материал по обе стороны этой плоскости так, чтобы образовалась полость. Для устранения полости заполним ее одной или несколькими атомными плоскостями. Пусть успевает пройти релаксация, и атомы могут занять положения равновесия. Такая последовательность операций приводит к тому, что в кристалле появляются одна или несколько лишних атомных плоскостей, имеющих форму исходного прямоугольника. В результате образуется краевая дислокация. Как для этих простых случаев, так и для общего случая вектор Бюргерса – это вектор, который определяет и направление, и величину жесткого смещения (смещения тела как единого целого). В случае винтовой дислокации сдвиг и вектор Бюргерса направлены вдоль линии дислокации. В случае краевой дислокации вектор \mathbf{b} перпендикулярен этой линии. Вектор Бюргерса может иметь иные направления относительно дислокации, и дислокация является смешанной: она представляет собой сочетание краевой и винтовой дислокации. Такая смешанная дислокация характеризуется направлением вектора Бюргерса.

До сих пор мы еще не определяли величину вектора Бюргерса, хотя в отношении его размера и направления необходимо сделать определенные замечания. На схеме рис. 2.1.15 вектор Бюргерса по величине точно равен параметру решетки, поскольку при смещении материала по обе стороны разреза ширина образующейся щели должна быть достаточной для вдвигания одной атомной плоскости. Если бы вектор Бюргерса был равен только половине параметра решетки, то не образовался бы достаточный зазор для размещения лишней атомной плоскости и в итоге нельзя было бы создать простую дислокацию. Поэтому **вектор Бюргерса должен быть величиной, кратной параметру решетки**. Общая формулировка состоит в том, что вектор Бюргерса должен быть равен «вектору решетки». При этом условии добавляемый материал в точности заполнит образованную полость в местах, удаленных от дислокационной линии.

Совершенно очевидно, что конкретный вид поверхности, выбранной для построения дислокации в общем случае, не имеет значения. После того как вдоль поверхности разреза восстановлены атомные связи, подавляющее большинство атомов, расположенных возле этой поверхности, но на большом расстоянии от граничной линии, вновь займут места в узлах решетки. Поэтому не имеет особого значения площадь надреза. Важную роль играют только два фактора:

- вектор Бюргерса, относительное направление которого точно определяет общий тип дислокации, а длина характеризует величину дислокации;
- граничная кривая разреза, определяет положение дислокации в кристалле.

Движение дислокации: переползание и скольжение. Дислокации, как и точечные дефекты, могут перемещаться по кристаллической решетке. Движение дислокации связано с большими ограничениями, так как она всегда должна быть непрерывной линией. Возможны два основных вида движения дислокации, названные переползанием и скольжением.

Переползанием называется движение дислокации с краевой компонентой, происходящее при дальнейшем продвижении лишней полуплоскости вглубь кристалла или, напротив, при частичном выдвигании этой плоскости наружу. Поскольку дислокация определяется как граница лишней плоскости, перемещение этой плоскости вглубь кристалла или вытягивание ее наружу вызывает движение дислокации вместе с этой плоскостью. Хотя переползание дислокации и наблюдается в реальных кристаллах, не следует, конечно, представлять себе, что переползание дислокации и в действительности происходит по мере дальнейшего перемещения лишней полуплоскости как физического объекта вглубь кристалла. Такое же движение дислокации фактически осуществляется иным механизмом – путем перехода отдельных атомов из кристалла на границу лишней плоскости (рис. 2.17,а). Например, это могут быть атомы, находящиеся в междоузлиях кристалла. Обратный процесс также называется переползанием; он происходит при аннигиляции вакансий решетки возле нижнего края лишней полуплоскости. В результате происходит удаление вакансий из внутренних областей кристалла (рис. 2.17,б).

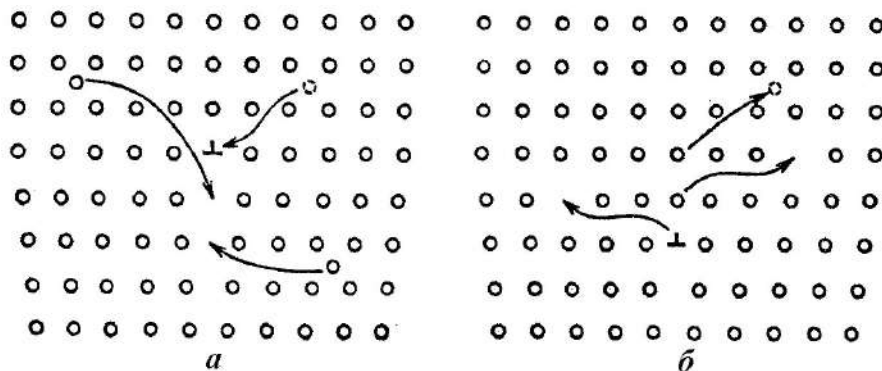


Рис. 2.1.17. Переползание дислокации с помощью:

а – добавления атомов из лишней полуплоскости; б – удаления атомов из лишней полуплоскости.

Теоретический путь описания движения дислокации при их переползании связан с представлением о плоскости скольжения дислокации. Плоскость скольжения для прямолинейной дислокации определяется как плоскость, в которой лежат и вектор Бюргерса самой дислокации, и линия дислокации. Такая плоскость для краевой дислокации показана на поперечном сечении кристалла рис. 2.1.18. Переползание дислокации соответствует движению дислокации вверх или вниз по отношению к плоскости скольжения. Когда движение дислокации на рис. 2.1.18 происходит вниз, дислокация поглощает из кристалла дополнительные атомы, а когда дислокация движется вверх, она поглощает вакансии. Переползание дислокации может осуществляться с помощью четырех разных механизмов:

– вакансии, имеющиеся в решетке, могут аннигилировать у края лишней плоскости;

- вакансии могут возникать в решетке вблизи края лишней плоскости. Такой процесс происходит в тех случаях, когда соседний атом решетки перескакивает на край лишней плоскости. В результате лишняя плоскость продвигается внутрь кристалла. Вакансия, образованная таким путем, может свободно диффундировать в глубь кристалла;
- на край лишней плоскости могут перейти атомы, внедренные в междоузлия решетки;
- внедренные атомы могут появиться внутри кристалла вследствие перескоков атомов с края лишней полуплоскости в ближайшие междоузлия решетки.

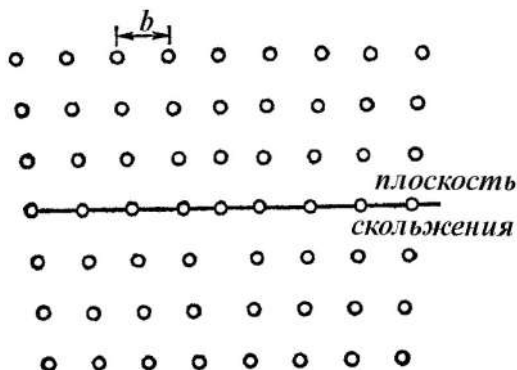


Рис. 2.1.18. Плоскость скольжения краевой дислокации

Рассмотренное нами переползание краевой дислокации носит характер прямолинейного перемещения. Этот механизм применим для любой дислокации, содержащей краевую компоненту. Однако винтовая дислокация не имеет единственной плоскости скольжения, поскольку вектор Бюргерса направлен параллельно дислокационной линии. Поэтому жесткое движение винтовой дислокации никогда нельзя свести к переползанию. Этот вывод согласуется с тем, что винтовая дислокация не содержит лишней полуплоскости. Однако винтовая дислокация может совершать весьма сложное движение, которое наблюдалось экспериментально. Это движение соответствует переползанию краевых дислокаций. Если линия винтовой дислокации скручивается в спираль, то спираль должна иметь краевую компоненту, а следовательно, она имеет возможность переползать. Схема переползания показана на рис. 2.1.19.

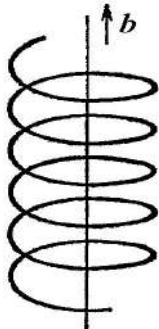


Рис. 2.1.19. Переползание винтовой дислокации

Переполизация вызывает расширение спирали в радиальном направлении. Винтовая дислокация за счет образования спирали создает краевую компоненту переполизации.

Скольжение возникает при совершенно ином характере движения дислокации. Движение краевой дислокации по нормали к плоскости скольжения соответствует добавлению или удалению атомов из лишней полуплоскости. Движение дислокации в самой плоскости скольжения не связано с диффузией атомов в направлении линии дислокации или в противоположную сторону. Это движение осуществляется гораздо легче, поскольку оно не связано с медленными перемещениями атомов, обеспечивающими диффузию. Тщательный анализ расположения атомов (рис. 2.1.20) показывает, что при движении краевой дислокации по плоскости скольжения от одного узла решетки к другому атомы ядра дислокации совершают небольшие перемещения. В результате лишняя полуплоскость, занимавшая определенное положение в кристаллической решетке, соединяется с атомной плоскостью, находящейся под плоскостью скольжения, а соседняя атомная плоскость становится теперь лишней полуплоскостью. Видно, что небольшие согласованные перемещения атомов ядра дислокации эквивалентны движению дислокации из одного места решетки в другое. Такой тип перемещения дислокации называется скольжением.

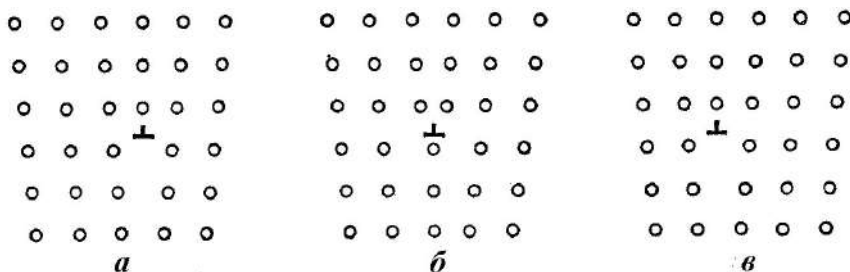


Рис. 2.1.20. Скольжение дислокации

Значение скольжения дислокации можно легко понять с помощью последовательных схем движения дислокации (рис. 2.1.21).

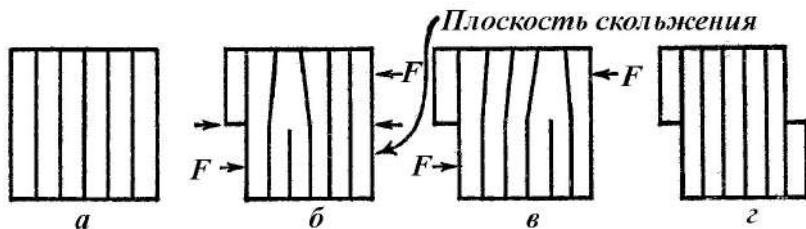


Рис. 2.1.21. Движение краевой дислокации через кристалл вдоль ее плоскости скольжения

Когда дислокация возникает у одной грани кристалла и затем движется через кристалл к его противоположной стороне, верхняя половина кристалла смещается относительно нижней на расстояние, равное параметру решетки. Плавное

движение линии дислокации вызывается действием напряжений сдвига, приложенных к поверхности кристалла. Когда дислокация пройдет через весь кристалл от одной его поверхности до другой, верхняя часть кристалла сдвинется по отношению к нижней на расстояние, равное длине вектора Бюргерса.

Плавное движение возможно и для винтовых дислокаций. Однако, как уже отмечалось, все плоскости, которые содержат винтовую дислокацию, содержат и вектор Бюргерса. Поэтому чистая винтовая дислокация может скользить в любом направлении. Следовательно, плоскости, содержащие винтовую дислокацию, являются плоскостями плавного скольжения.

Подвижность и размножение дислокаций. Для движения и размножения дислокации достаточно относительно малые напряжения. Это обстоятельство имеет решающее значение для той роли, которую играют дислокации в пластической деформации. И движение дислокации, и их размножение являются важными процессами, и мы последовательно рассмотрим каждый из них.

Анализ причин, обуславливающих относительно малую прочность кристалла, позволяет сделать заключение, что в нем обязательно должны находиться дефекты дислокационного типа. Мы уже подчеркивали, что обычно кристаллы могут выдерживать только очень ограниченные упругие сдвиговые деформации – дальнейшая деформация приводит либо к пластическому течению кристалла, либо к его разрушению. Упругая относительная деформация кристалла, в котором нет дислокации, должна была бы до начала пластического течения достигать величины порядка $1/2$. Вопреки этому выводу эксперименты показывают, что пластическое течение начинается уже при деформациях порядка 10^{-4} – 10^{-3} . Каким же образом дислокации могут вызвать пластическое течение при наблюдаемых малых деформациях и соответственно малых напряжениях? В атомном масштабе существует единственный способ вызвать остаточную деформацию – необходимо, чтобы атомы, участвующие в деформации, окончательно переместились из одного места решетки в другое. Если при деформации кристалла атом сместится по отношению к своим соседям лишь на малую часть параметра решетки, то после снятия нагрузки атом легко вернется на свое исходное место в решетке. Деформация кристалла будет упругой.

Рассмотрим эти соображения подробнее. Предположим, что ко всему объему кристалла приложено однородное напряжение сдвига. Пусть в кристалле нет дислокации, а напряжение возрастает до тех пор, пока атомы не «перекаются» по атомам соседней плоскости в следующие узлы решетки. На рис. 2.1.22 показано, что силы, препятствующие смещению атомов относительно друг друга, действуют, как правило, на расстояниях, не превышающих приблизительно половину параметра решетки. Когда деформация решетки достигает примерно этой величины, атомы оказываются в положении неустойчивого равновесия.

Если напряжение уменьшается, атомы возвращаются обратно, но если напряжение хоть немного возрастет, атомы переместятся в новые узлы решетки. Силу сопротивления, которая действует на столь большом расстоянии, нельзя точно определить с помощью закона Гука. Тем не менее максимальная сила сопротивления, действующая при деформации кристалла, по порядку величины оказывается такой же, как в гипотетическом случае применимости закона Гука к дефор-

мациям на расстояние порядка половины параметра решетки. Грубая оценка критического сдвигового напряжения показывает, что по порядку величины модуль сдвига равен 10^{11} Н/м². Уточненные расчеты понижают теоретическое сдвиговое напряжение примерно на один порядок величины. Следовательно, напряжение, необходимое для начала пластической деформации, составляет в отсутствие дислокации около 10% от модуля сдвига, т. е. примерно 10^{10} Н/м².

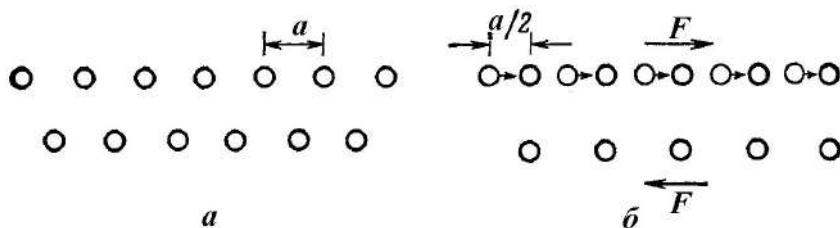


Рис. 2.1.22. Совершенная кристаллическая решетка (а) становится пластически деформированной, когда соседние атомные ряды «перекатываются» один по другому, как это показано на приведенных схемах. Критическое положение неустойчивого равновесия (б), соответствующее преодолению силы сопротивления, достигается в тот момент, когда верхний атомный ряд сместится относительно нижнего на половину параметра решетки.

Экспериментально доказано, что чистые монокристаллы, содержащие всего несколько дислокаций, испытывают пластические деформации при напряжениях порядка 10^5 – 10^6 Н/м², т. е. по крайней мере на четыре или пять порядков величины ниже модуля сдвига этих кристаллов. Таким образом, значение дислокации не исчерпывается только их участием в возникновении деформаций внутри твердых тел. Чрезвычайно важно также, что дислокации оказываются подвижными при напряжениях, значительно меньших модуля сдвига. Чтобы объяснить это, вернемся к рис. 2.1.20, где показано перемещение атомов ядра дислокации, происходящее при движении самой дислокации. Чтобы дислокация передвинулась от одного атомного ряда решетки к следующему, необходимы лишь чрезвычайно малые изменения в расположении атомов. В ядре дислокаций атомы значительно смещены относительно своих нормальных мест в решетке, и некоторые из этих атомов расположены так, что их можно перемещать один за другим уже с помощью очень малой силы. Оказывается, что необходимое для перемещения дислокации из одного места решетки в соседнее напряжение сдвига зависит от размеров ядра дислокации. Если ядро велико по сравнению с параметром решетки, то напряжения сдвига, необходимые для перемещения дислокации, становятся исчезающе малыми. Если размер ядра дислокации равен только одному параметру решетки, то сдвиговые напряжения приближаются к модулю сдвига.

Большинство чистых монокристаллов с малым количеством дислокаций являются мягкими и пластичными. Хорошими примерами пластичных кристаллов могут служить металлы. Однако такие кристаллы, как алмаз, германий и кремний, при комнатной температуре пластически не деформируются: они хрупко

разрываются при соответствующем повышении напряжений. Хрупкость этих кристаллов объясняется тем, что разрушение начинается прежде, чем дислокации могут обеспечить достаточно большие сдвиги. По всей вероятности, в этих материалах движение дислокации сильно затруднено (по сравнению с металлами), но при повышении температуры даже кристаллы германия и кремния становятся пластичными. Увеличение пластичности при высоких температурах свойственно не только этим материалам: такая закономерность наблюдается у многих твердых тел.

Если для объяснения пластической деформации кристаллов в процессе их пластического течения привлекать дислокационные представления, то неизбежно следует логический вывод: при деформации должно происходить размножение – увеличение числа дислокаций. Дело в том, что количество дислокаций, содержащихся в кристалле до его нагружения, недостаточно, чтобы обеспечить большие пластические деформации, наблюдаемые экспериментально. При осмотре деформированных монокристаллов можно обнаружить доказательства того, что должно происходить размножение дислокации. Эти наблюдения не объясняют механизма этого процесса. Возможный механизм размножения дислокации предложен Франком и Ридом (рис. 2.1.23).

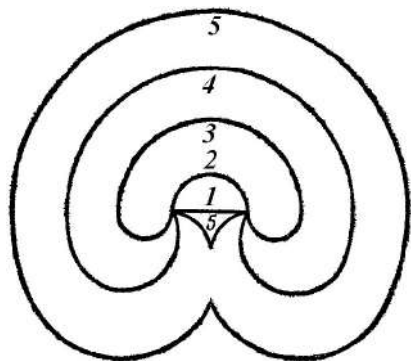


Рис. 2.1.23. Источник Франка–Рида

При увеличении напряжений исходный дислокационный сегмент *1* будет выгибаться и принимать последовательно формы 2–4. При стягивании выступа 5 сегмент примет свою исходную конфигурацию, образуя при этом расширяющуюся дислокационную петлю. Источник Франка–Рида – это только один из многих возможных механизмов размножения дислокации.

В реальных кристаллах это обычно происходит более сложно. Под действием напряжений дислокация выгибается наружу. После «залечивания» остается источник в его исходной конфигурации 5 и образуется расширяющаяся петля.

Взаимодействие дислокаций. Было показано, что пластическая деформация кристаллов осуществляется с помощью дислокационного механизма. Для большинства чистых монокристаллов предельные напряжения сдвига гораздо меньше, чем так называемая теоретическая прочность на сдвиг. Механическая прочность твердых тел чрезвычайно чувствительна к структуре. Поэтому прочность очень зависит от способа приготовления кристалла. Из рассуждений, проведенных в предыдущих параграфах, могло создаться впечатление, что кри-

тическое напряжение для пластического течения любого кристалла можно найти путем простого вычисления подвижности дислокации. Расчеты, основанные на этой предпосылке, не подтверждаются экспериментами. Причина этого расхождения состоит в том, что движение дислокаций сильно затрудняется их взаимодействием с различными дефектами кристалла (в том числе с другими дислокациями). На самом деле критическое напряжение пластической деформации кристалла зависит не столько от собственной подвижности дислокации в идеальной решетке, сколько от величины усилий, необходимых для преодоления дислокацией других дефектов и препятствий, которые также имеются в кристалле. Это свойство кристаллов находит свое подтверждение в отмечавшейся выше экспериментальной закономерности: металлические кристаллы, выращенные со специальными мерами предосторожности против загрязнения любыми примесями, против образования границ зерен и т. д., чрезвычайно легко деформируются пластически.

Причина сильного взаимодействия между дислокациями заключается в том, что другие дефекты, расположенные в непосредственной близости от ядра дислокации, могут вызвать частичное ослабление сильных искажений в расположении атомов ядра. В частности, посторонние включения могут сильно уменьшить локальную энергию дислокации. На рис. 2.1.24 схематически показано взаимодействие крупной примеси с расширенным участком краевой дислокации. Большая примесь легче заполняет расширенный участок под дислокацией, чем размещается в междоузлии совершенной решетки.

Дислокации также сильно взаимодействуют и друг с другом. На начальной стадии пластического течения почти совершенный кристалл деформируется легко. Однако по мере увеличения деформации возрастают и напряжения, необходимые для дальнейшего продолжения деформации. Причина увеличения напряжения состоит в том, что при деформации возрастает количество дислокаций. В результате они начинают хаотически переплетаться друг с другом, и дальнейшее движение их становится затруднительным. Это явление называется **наклепом**. Наклеп представляет собой один из типичных методов получения прочного материала. Этим способом можно повысить прочность стальной заготовки при прокате ее между валками. Валки оказывают на заготовку сильное давление и раскатывают ее в плоские листы. Если сталь выдерживается при низкой температуре, то в листах сохраняется много дислокаций. В результате у этих листов сопротивление пластической деформации выше, чем у стальной исходной заготовки.

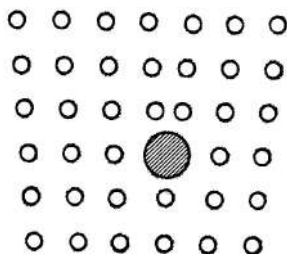


Рис. 2.1.24. Взаимодействие атомов примеси с краевой дислокацией

Подведем итоги. Изучение дефектов структуры кристаллических тел позволяет понять механизмы их разрушения. Среди возможных дефектов определяющими являются дислокации, которые подвижны и способны размножаться. Поэтому характер деформации и разрушения твердых тел зависит от свойств дислокации в твердых телах. Предел прочности твердых тел зависит от сложных взаимодействий дислокаций друг с другом и с другими его дефектами. Эти взаимодействия настолько сложны, что на основе простых дислокационных теорий нельзя предсказывать прочность твердых тел. Теория дислокаций позволяет понять с качественной стороны механические свойства твердых тел.

2.2. МОРФОЛОГИЯ

Наряду с многообразием в размерах частиц дисперсных материалов имеет место и многообразие их форм. Для частиц каждого материала характерна своя преобладающая форма (округлая, угловатая, пластинчатая и т. д.), которая определяется происхождением и свойствами исходного продукта. Форма частиц оказывает существенное влияние на величину удельной поверхности материала, гидродинамическое сопротивление, образование пустот в слое, текучесть материала, угол естественного откоса, прессуемость, лиофильность.

Так же как и размер, определения формы частиц в большинстве случаев условны. Принято разделять частицы, форма которых близка к сферической, на вытянутые, похожие на цилиндр или призмы, и угловатые, похожие на многогранники с неровными краями. Сильно вытянутые нитеобразные частицы характеризуются отношением длины к ширине, плоские частицы – отношением наименьшей толщины к ширине. Отношение наибольшего линейного размера к наименьшему используется как показатель (или фактор) формы. Сравнение численных значений фактора формы имеет смысл лишь для геометрически подобных частиц при строгом определении измеряемых параметров. Наиболее наглядное представление о форме частиц может быть получено прямым визуальным наблюдением их с помощью микроскопа. Возможно также измерение формы как отношения скоростей оседания в вязкой среде изучаемых частиц и равных им по массе сферических частиц того же материала. Применяются и другие косвенные определения. С уменьшением размеров частиц численное выражение фактора формы становится все более затруднительным.

Для оценки формы частиц используют различные коэффициенты и критерии: коэффициент сферичности, коэффициент формы, критерий остроты зерна.

Коэффициент сферичности φ_V представляет собой отношение площади поверхности шара $S_{ш}$, имеющего такой же объем, что и частица, к ее действительной площади поверхности S : $\varphi_V = S_{ш} / S$.

Коэффициент формы является величиной, обратной коэффициенту сферичности: $f = 1/\varphi_V$. В общем случае $f > 1$; $0 < \varphi_V < 1$; для сферических частиц $f = \varphi_V = 1$. Для тел правильной формы коэффициенты f и φ_V приведены в табл. 2.2.1, а для некоторых материалов – в табл. 2.2.2.

Таблица 2.2.1

Коэффициенты формы и сферичности правильных тел

Тело	Коэффициент формы, f	Коэффициент сферичности, ϕ_V
Тетраэдр	1,49	0,670
Куб	1,24	0,806
Октаэдр	1,18	0,846
Икосаэдр	1,07	0,937
Призма: $a \cdot a \cdot 2a$	1,30	0,767
$a \cdot 2a \cdot 2a$	1,31	0,761
Цилиндр: $h=d/2$	1,21	0,827
$h=d$	2,28	0,438
Додекаэдр	1,10	0,912

Универсальным показателем формы частицы является **критерий остроты зерна** $\xi = n/r_3$, где n – среднее число выступов частицы; r_3 – средний радиус закругления углов частицы.

Таблица 2.2.2

Коэффициенты формы и сферичности материалов

Материал	Коэффициент формы, f	Коэффициент сферичности, ϕ
Округлые, окатанные без резких выступов: глина, шамот, речной песок	1,16–1,2	0,83–0,86
Острозернистые, шероховатые, продолговатые: антрацит, неокатанный песок	1,54	0,65
Песок: круглый	1,20	0,83
угловатый	1,37	0,73
остроугольный	1,67	0,60
Вольфрамовый порошок	1,12	0,89
Каменный уголь $d_p=6-11$ мм	1,87	0,54
Стекло дробленое	1,54	0,65
Поливинилхлорид	1,47	0,68
Силикагель	3,03–5,56	0,18–0,33

При различных видах разрушения критерий остроты зерна – различный. Так, при дроблении, воздействии раздавливанием углы при вершинах, а следовательно, и критерий остроты зерна имеют минимальные значения, а при истирании – максимальные. Чем больше радиус закругления, тем ближе форма частицы к форме шара.

Для оценки формы многогранных окатанных частиц или кристаллов удобно применять модифицированный коэффициент сферичности:

$$\phi_c = S_{\text{вн}} / S = \pi d^2 / S, \quad (2.2.1)$$

где $S_{\text{вн}}$, d – площадь поверхности и диаметр вписанного в частицу шара.

Для оценки формы овализованных удлинённых многогранников и кристаллов корректнее использовать коэффициенты овальности:

- для вытянутого эллипсоида вращения $2a > 2b$

$$\varphi_0 = \frac{S_{\text{вн}}}{S} = 2\pi \left(b^2 + \frac{ab}{\varepsilon} \arcsin \varepsilon \right) / S, \quad (2.2.2)$$

- для сплюснутого эллипсоида вращения (сфероид) $2a > 2b$

$$\varphi_0 = \frac{S_{\text{вн}}}{S} = \pi \left(2a^2 + \frac{b^2}{\varepsilon} \ln \frac{1+\varepsilon}{1-\varepsilon} \right) / S, \quad (2.2.3)$$

где $\varepsilon = \sqrt{1 - b^2/a^2}$; a, b – полудлины большой и малой осей эллипса.

Эти параметры используются для описания кинетики и механизма окатки как одного из видов механической обработки дисперсных материалов.

Поскольку кристаллы принадлежат к определенной кристаллографической сингонии, то и дисперсные материалы часто представляют собой частицы с формой выпуклых многогранников. Всего существуют пять правильных многогранников, их основные геометрические параметры приведены в табл. 2.2.3.

Таблица 2.2.3

Пять правильных многогранников (a – длина ребра)

Многогранник	Число и тип граней	Радиус вписанной сферы	Площадь поверхности	Коэффициент сферичности
Тетраэдр	4 равносторонних треугольника	$\frac{a}{12}\sqrt{6}$	$a^2\sqrt{3}$	0,302
Куб	6 квадратов	$a/2$	$6a^2$	0,524
Октаэдр	8 равносторонних треугольников	$\frac{a}{6}\sqrt{6}$	$2a^2\sqrt{3}$	0,605
Додекаэдр	12 правильных пятиугольников	$\frac{a}{4}\sqrt{10 + \frac{22}{\sqrt{5}}}$	$3a^2\sqrt{5(5 + 2\sqrt{5})}$	0,755
Икосаэдр	20 равносторонних треугольников	$\frac{a}{4\sqrt{3}}(3 + \sqrt{5})$	$5a^2\sqrt{3}$	0,829

Существует формула Эйлера, которая однозначно связывает количество основных геометрических элементов любого выпуклого многогранника:

$$E + F - K = 2,$$

где E – число вершин; F – число граней; K – число ребер.

По форме частиц природные и технические дисперсные материалы можно разделить на три морфологических типа: идеальные многогранники, многогранные сrostки и обломочные материалы. В данном параграфе мы частично используем терминологию и классификацию кристаллографии и минералогии.

Первый морфологический тип частиц – идеальные многогранники, форма которых определяется законами симметрии и геометрической кристаллографии. Многие промышленные дисперсные материалы представляют собой совокупности кристаллов, которые широко распространены в природе и технике. К ним относятся: минералы и горные породы, металлы и сплавы, строительные материалы, многие лекарства, сахарный песок, поваренная соль. Элементами ограничения кристаллов являются грани и ребра, точки пересечения ребер – вершины. Симметрия кристаллических многогранников заключается в за-

кономерной повторяемости одинаковых граней, ребер и углов в данном кристалле. Важнейшими элементами симметрии кристаллов являются: плоскость симметрии, ось симметрии и центр инверсии.

Плоскость симметрии – это плоскость, делящая фигуру на две равные части, расположенные относительно друг друга как предмет и его зеркальное отображение. Плоскость, которая делит фигуру на две равные части, не являющиеся зеркальным отображением одна по отношению к другой, не будет плоскостью симметрии.

Ось симметрии – прямая линия, при повороте вокруг которой на 360° несколько раз совмещаются аналогичные части фигуры. Порядок, к которому относится ось, определяется числом совмещений при повороте фигуры вокруг оси на 360° . В кристаллах число порядков осей симметрии ограничено тем, что пространственная решетка кристалла имеет правильное расположение узлов, находящихся друг от друга на определенных расстояниях.

Центр инверсии – точка пересечения линий, соединяющих противоположно равные и обратнопараллельные части фигуры. Следует указать, что симметрическое преобразование, создаваемое центром инверсии (рис. 2.2.1), приводит к понятию об обратной параллельности фигур. В качестве подобных фигур могут быть отрезки, изображенные на рис. 2.2.2 стрелками.

Перечисленные выше элементы симметрии наблюдаются в кристаллических многогранниках либо по отдельности, либо в определенных комбинациях, число которых строго ограничено. Кристаллы, обладающие одинаковым комплексом элементов симметрии, относятся к одному классу. Всего в результате сочетания элементов симметрии получается, включая также класс без элементов симметрии (один) и с одним центром инверсии (один), 32 класса симметрии. Такое разделение кристаллических многогранников на 32 класса симметрии представляет собой основу кристаллографической классификации. Математически доказано, что никаких иных сочетаний видов симметрии в кристаллах, а стало быть, никаких других, кроме перечисленных 32 классов симметрии, существовать не может.

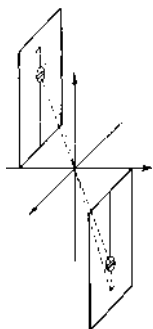


Рис. 2.2.1. Центр инверсии

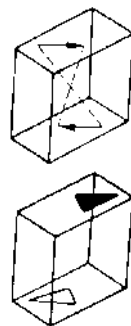


Рис. 2.2.2. Обратнопараллельные фигуры

При анализе кристаллографических классов легко заметить, что некоторые из них характеризуются наличием общих элементов симметрии. Это обстоятельство

во позволяет применить общую классификацию кристаллов с подразделением их на несколько сингоний или кристаллографических систем (см. табл. 2.2.4). Разделение кристаллов на крупные группы – сингонии – значительно облегчает изучение не только геометрии кристаллов, но и их физических свойств. В ряде случаев кристаллы, относимые к одной и той же сингонии, оказываются близкими между собой по физическим свойствам.

Таблица 2.2.4

Кристаллографические сингонии	
Категория	Сингония
Низшая	Моноклинная Триклинная Ромбическая
Средняя	Тригональная Тетрагональная Гексагональная
Высшая	Кубическая

Элементы симметрии определяют и формы кристаллов. По характеру внешнего огранения кристаллы разделяются на две группы: простые формы и сложные формы. Простыми формами называются такие многогранники, которые состоят из одинаковых граней, имеющих симметричное расположение. Примерами простых форм служат октаэдр, тетраэдр, куб. Сложные формы представляют собой комбинацию в одном кристалле нескольких простых форм. Примером такой комбинации может служить шестигранная гексагональная пирамида, представляющая комбинацию шести наклонных, собственно пирамидальных граней и основания пирамиды, называемой моноэдром.

Простые формы могут быть как замыкающими пространство (закрытые формы), так и открытыми. Число типов простых форм, входящих в различные кристаллографические комбинации, является строго ограниченным и, как показывает математический анализ, равняется 47.

Для обозначения простых форм применяется (рис. 2.2.3) особая терминология, в основу которой положены древнегреческие слова:

- *моноэдр* (1) – простая форма, состоящая из одной грани;
- *диэдр* (2) – состоит из двух пересекающихся граней;
- *пинакOID* (3) – состоит из двух параллельных граней;
- *тетраэдры* (4–6) – состоят из четырех треугольных непараллельных граней;
- *трапецoэдры* (7–9) – простые формы, с боковыми ребрами, не параллельными между собой;
- *ромбoэдр* (10) – простая форма, грани которой имеют форму ромбов, представляет собой куб, деформированный вдоль оси;
- *скаленoэдры* (11–12) – простые формы, сходные с трапецoэдрами;
- *пирамиды* (13–19) – состоят из трех или более граней, пересекающихся в одной точке. По форме поперечного сечения пирамиды называются: ромбическими, тригональными и т. д.;
- *дипирамиды* (20–26) – представляют собой две одинаковые пирамиды, сложенные своими основаниями; они различаются по числу граней: дигексагональная (24 грани), дитетрагональная (16 граней) и т. д.;

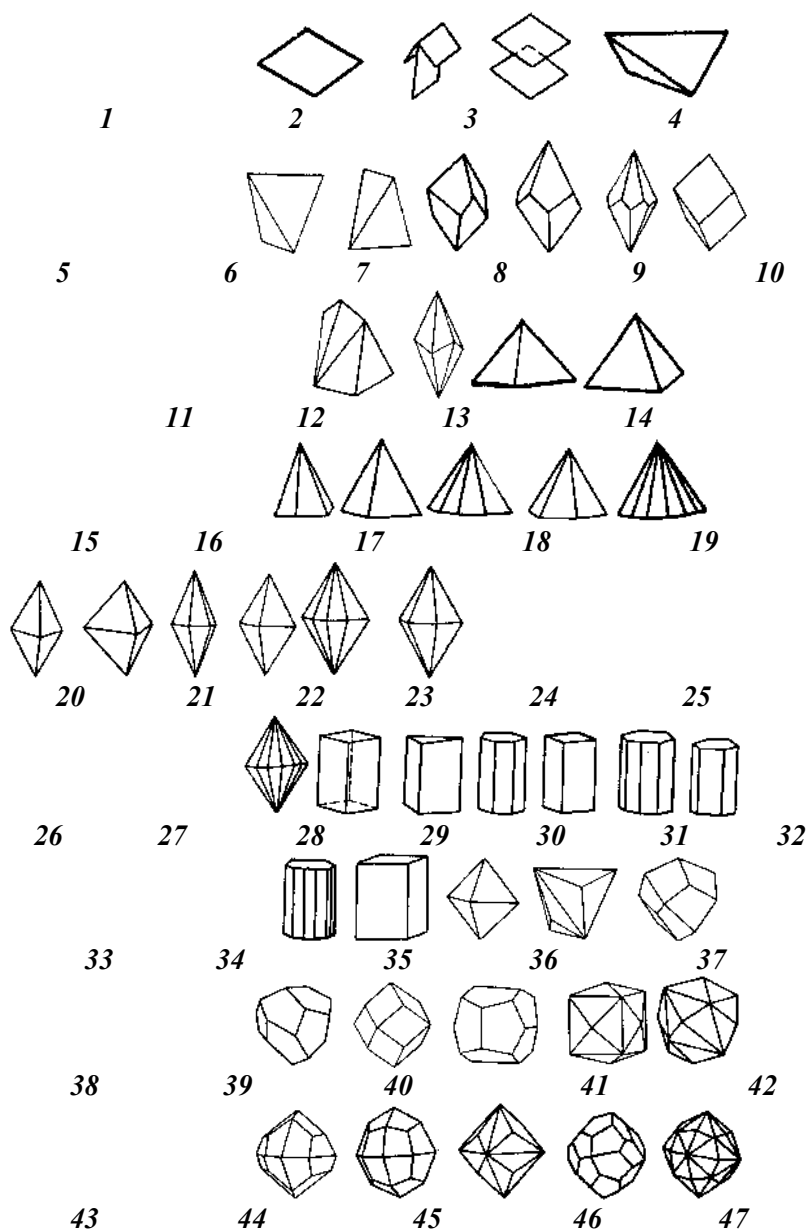


Рис. 2.2.3. Простые формы в кристаллах

– *призмы* (27–33) – состоят из трех или большего числа граней, пересекающихся по параллельным ребрам. Так же как и пирамиды, по форме поперечного сечения призмы называются: ромбическими (27), тетрагональными (30), дитетрагональными (31), гексагональными (32);

– *куб (гексаэдр)* (34) – состоит из шести квадратных граней;

– *октаэдр* (35) – состоит из восьми равносторонних треугольных граней;

- *тригонитетраэдр* (36) – форма, производная от тетраэдра (на каждой грани тетраэдра по три грани в виде равнобедренных треугольников);
- *тетрагонитетраэдр* (37) – форма, производная от тетраэдра (на каждой грани тетраэдра по три неправильных четырехугольника);
- *пентагонитетраэдр* (38) – форма, производная от тетраэдра (на каждой грани тетраэдра по три пятиугольника);
- *ромбододекаэдр* (39) – состоит из двенадцати граней в виде ромба;
- *пентагондододекаэдр* (40) – состоит из двенадцати пятиугольников;
- *тетрагексаэдр* (41) – форма, производная от куба (на каждой грани куба по четыре равнобедренных треугольника);
- *гексатетраэдр* (42) – форма, производная от тетраэдра (на каждой грани тетраэдра по 6 равнобедренных треугольников);
- *дидододекаэдр* (43) – 24-гранник;
- *тетрагонтриоктаэдр* (44) – форма, производная от октаэдра (на каждой грани октаэдра по три неправильных четырехугольника);
- *тригонтриоктаэдр* (45) – форма, производная от октаэдра (на каждой грани октаэдра по три грани в виде равнобедренных треугольников);
- *пентагонтриоктаэдр* (46) – форма, производная от октаэдра (на каждой грани октаэдра по три пятиугольника);
- *гексаоктаэдр* (47) – 48-гранник (на каждой грани октаэдра по шесть треугольников).

Описанные простые формы кристаллов и их комбинации в природе образуются чрезвычайно редко. Поэтому они являются как бы идеализированными моделями кристаллических многогранников. Отклонения реальных кристаллических многогранников от описанных простых форм вызываются, *во-первых*, неодинаковым развитием граней, принадлежащих различным простым формам кристалла, и, *во-вторых*, неравномерным асимметричным развитием граней одной и той же простой формы. Обычным приемом при исследовании реальных кристаллов является их идеализация, т. е. превращение неидеального огранения в идеальную форму.

Второй морфологический тип частиц – многогранные сростки. Минералы в природе встречаются как в виде отдельных монокристаллов, так и в виде закономерных сростков – двойников и закономерных сростков – агрегатов. В зависимости от условий кристаллизации из одного и того же вещества могут образоваться кристаллы, по внешней форме сильно отличающиеся друг от друга. Внутренняя же их структура, естественно, всегда неизменна.

Отклонение формы реальных кристаллических многогранников от описанных выше идеальных фигур объясняется тем, что выросшие в природных условиях грани кристаллов очень часто не являются математически правильными плоскостями. Кроме того, на гранях реальных кристаллов всегда можно обнаружить различные виды так называемой «сложной скульптуры» в виде штрихов, бугорков роста или ямок растворения. Исследование условий образования кристаллических многогранников различных минералов показывает, что асимметрическое развитие граней одной и той же простой формы во многом зависит от положения и ориентировки кристаллов на месте образования. Огромное

влияние на формирование граней при их росте также оказывают условия среды, в которой они образуются.

Часто наряду с образованием отдельных одиночных кристаллов возникают различные их сростки – беспорядочные или закономерные. Интересный случай представляют двойниковые образования двух или нескольких кристаллов, закономерно срастающихся между собой в непараллельном положении (рис. 2.2.4). Образование таких сростков обусловливается обычно различными осложнениями кристаллизации (изменениями температуры, концентрации растворов), препятствующими выделившимся из раствора элементарным кристалликам расположиться строго параллельно, что необходимо для правильного развития образующегося из них крупного одиночного кристалла.

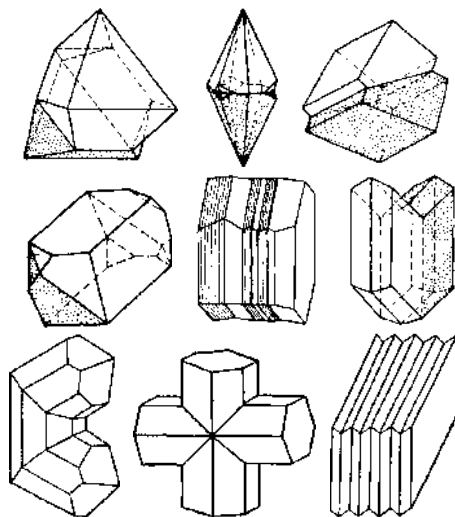


Рис. 2.2.4. Двойники

Помимо первичных или возникающих непосредственно при росте кристаллов нередко образуются также и вторичные двойники, например в результате механических воздействий (прокатка и наклеп металла) тепловых напряжений (при неравномерном расширении или сжатии отдельных частей кристалла от нагрева или охлаждения). Часто возникают двойниковые структуры при полиморфных превращениях, особенно если значительно изменяются удельные объемы различных модификаций, как у α и β кварца (SiO_2).

Другим видом сростков являются эпитаксические – закономерное срастание кристаллов различных веществ или полиморфных модификаций вещества, кристаллизующихся в различных сингониях. Необходимым условием для образования эпитаксических сростков является сходство кристаллохимических свойств срастающихся веществ – плоские сетки, по которым происходит срастание, должны быть близки по строению. Допустимые пределы различия параметров решетки при эпитаксии составляют 15–20% для ионных кристаллов, 7–12% для кристаллов с металлическими связями и 3–5% для кристаллов с остаточными связями. При эпитаксических срастаниях некоторые кристалличе-

ские элементы сросшихся кристаллов (границы, ребра) оказываются параллельными. Наглядным примером первичных эпитактических срастаний могут служить сростки кристаллов йодистого калия (KI) и слюды-мусковита $[\text{KA1}_2](\text{OH})_2(\text{AlSi}_3\text{O}_{10})$. Йодистый калий кристаллизуется в кубической сингонии, мусковит – в моноклинной (рис. 2.2.5).

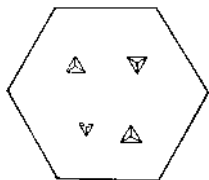


Рис. 2.2.5. Кубики KI, закономерно выросшие на пинакоид слюды

В природе встречаются весьма разнообразные формы кристаллов одного и того же минерала. На кристаллическом индивиду минерала появляются, развиваясь преимущественно неравномерно, различные грани; соответственно этому кристаллы приобретают разнообразный облик: или они равномерно развиты по различным направлениям (изометрические формы), или же образуют таблитчатые, пластинчатые, игольчатые, волокнистые, скелетные, дендритообразные и иные формы. Скелетные и дендритообразные формы возникают при преимущественном росте кристалла вдоль его различных кристаллографических осей; примером могут служить кристаллы снега или ледяные узоры на стеклах, образуемые быстрорастущими кристаллами льда (рис. 2.2.6), или окислы марганца, кристаллизующиеся в тонких трещинах пород.

Особенно часто минералы встречаются в виде случайных незакономерных сростков. Агрегаты могут состоять из кристаллов как одного минерала (мономинеральные агрегаты), так и нескольких (полиминеральные агрегаты).

Друзы – сростки хорошо сформированных кристаллов, разных по высоте и различно ориентированных, но прикрепленных одним концом к общему плоскому или вогнутому основанию.



Рис. 2.2.6. Дендритные кристаллы снега

Параллельные агрегаты характеризуются параллельным расположением кристаллов.

Секреции – минеральные образования, заполняющие пустоты в горных породах. Заполнение пустот происходит в результате постепенного отложения веществ на их стенках от периферии к центру.

Конкреции – образования округлой (шарообразной, яйцевидной) или иногда неправильной формы, имеющие обычно радиально-лучистое или, реже, скорлуповатое строение.

Оолиты (яйцевидные камни) – сферические образования небольших размеров, имеющие концентрически-скорлуповатое строение. Поперечное сечение шариков колеблется от долей миллиметра до 5 мм.

Псевдооолиты – образования, по форме аналогичные оолитам, но не имеющие концентрически-скорлуповатого строения.

Сферолиты – шарообразные тела радиально-лучистого строения.

Дендриты – древовидные агрегаты, напоминающие листья папоротника, ветви дерева.

Натечные формы – плотные массы, часто с весьма причудливыми очертаниями: почковидными, червеобразными, сосулькообразными.

Зернистые агрегаты – агрегаты, сложенные кристаллическими зернами. В зависимости от величины зерен такие агрегаты могут быть:

- крупнозернистыми (от 5 до 10 мм);
- среднезернистыми (от 1 до 5 мм);
- тонкозернистыми (до 1 мм).

Землистые агрегаты – мягкие, мучнистые образования, по внешнему виду напоминающие рыхлую почву. Они состоят из мелких рыхлоупакованных кристаллов или представляют собой аморфные формы минералов.

Налеты и примазки – тонкие пленки минералов на поверхности других минералов или горных пород. В зависимости от частиц минерал может быть представлен вышеописанными формами. Приведем характерные примеры формы частиц промышленно значимых дисперсных минералов, часто подвергаемых механической обработке.

Алмаз (C). Сингония – кубическая. Имеет типичную атомную структуру с плотной упаковкой атомов. Кристаллы – октаэдры, ромбододекаэдры, тетраэдры (рис. 2.2.7). Грани кристаллов обычно округленные. Часто наблюдаются двойники сростания. Агрегаты – зерна, желваки, сплошные. Твердость 10. Хрупок. Плотность 3,5.

Практическое значение. Прозрачные бесцветные или слабо окрашенные разновидности алмаза используются в ювелирном деле как драгоценные камни первого класса. Бурые, желтые и черные алмазы применяются для изготовления буровых коронок, вращающихся алмазных пил, а также для шлифования очень твердых материалов, например синтетического корунда или самого алмаза.

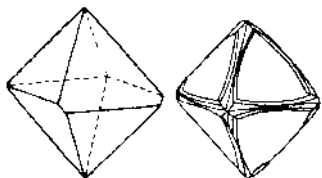


Рис. 2.2.7. Кристаллы алмаза

Пирит – серный колчедан, железный колчедан (FeS_2). Сингония – кубическая. Часто встречается в виде крупных хорошо образованных кубических, пентагондодокаэдрических, реже – октаэдрических кристаллов (рис. 2.2.8). Часто образует вкрапленники (кристаллики или округлые зерна). Агрегаты – сплош-

ные, конкреции, секрети. Твердость 6–6,5. Хрупок. Плотность 4,9–5,2. Практическое значение: сырье для получения серной кислоты.

Корунд (Al_2O_3). Известны три полиморфные модификации:

– $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (корунд) – тригональная модификация, наиболее устойчивая в природных условиях и образующаяся в широком температурном интервале (от 500 до 1500°C);

– $\beta\text{-Al}_2\text{O}_3$ – гексагональная модификация, устойчивая при более высоких температурах. Превращение $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ в $\beta\text{-Al}_2\text{O}_3$ происходит при температурах 1500–1800°C;

– $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ – кубическая модификация; получается искусственным путем при прокаливании гидрата окиси алюминия до температуры ниже 950°C.

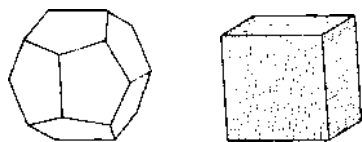


Рис. 2.2.8. Кристаллы пирита

Особо выделяют наждак, представляющий собой смесь мелкозернистого корунда с магнетитом, гематитом, полевым шпатом и кварцем.

Кристаллы корунда – бочонковидные, столбчатые, пирамидальные (рис. 2.2.9). Синтетический корунд иногда образует гексагональные пластинки. Двойники – простые по пинакoidу, иногда – полисинтетические по ромбоэдру. Агрегаты – сплошные зернистые. Хрупок. Спайности нет. Твердость 9. Плотность 3,95–4,10.

Практическое значение. Обычный непрозрачный корунд представляет собой ценный огнеупорный и абразивный материал, но так как природные запасы его невелики, то его получают в значительных количествах путем электроплавки бокситов. Такой электрокорунд употребляется для изготовления абразивных шлифующих порошков и различных изделий (кругов, пластинок и т. д.), применяющихся для обработки металлов и камней.

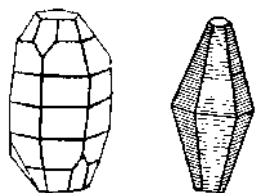


Рис. 2.2.29. Кристаллы корунда

Шпинель (MgAl_2O_4). Сингония – кубическая. Кристаллы – октаэдры. Часты двойники (рис. 2.2.10). Агрегаты – мелкие друзы. Твердость 8. Хрупка. Плотность 3,5–3,7. Практическое значение: используется в ювелирном деле как сверхогнеупор и абразивный материал (шпинелевые наждаки). В настоящее время шпинель получают синтетическим путем.

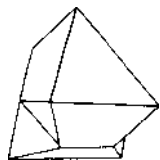


Рис. 2.2.10. Двойник шпинели

Кварц (SiO_2). Известны две полиморфные модификации:

- $\alpha\text{-SiO}_2$ – тригональная модификация (рис. 2.2.11), устойчивая ниже 573°C ;
- $\beta\text{-SiO}_2$ – гексагональная модификация, устойчивая при более высоких температурах.

Двойники – встречаются часто. Агрегаты – друзы, зернистые, плотные. Твердость 7. Хрупок. Плотность 2,65.

Практическое значение. Наибольшее практическое значение имеет жильный кварц, используемый в фарфоровом и фаянсовом производстве, а также в качестве плавня в металлургии. Кварцевые пески являются важнейшим сырьем для стекольной промышленности и приготовления формовочных смесей в литейном производстве. Метаморфические песчаники и кварциты являются строительными материалами.

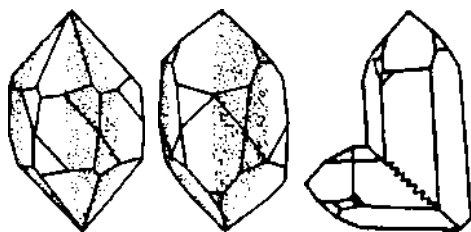


Рис. 2.2.11. Кристаллы кварца ($\alpha\text{-SiO}_2$)

Апатит. Сингония – гексагональная (рис. 2.2.12). Кристаллы хорошо образованные – шестигранные призмы или иглы, реже – короткостолбчатые. Агрегаты – друзы, зернистые, плотные, тонкокристаллические, иногда – землистые массы. Твердость 5. Хрупок. Плотность 3,18–3,21.

Практическое значение. Апатит используется как сырье для фосфорных удобрений, производства фосфорной кислоты и ее солей, в керамике (изготовление «костяного фарфора») и в ряде других областей.

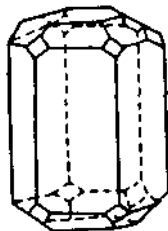


Рис. 2.2.12. Кристалл апатита

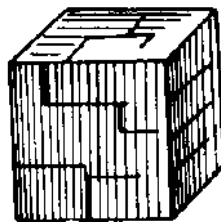


Рис. 2.2.13. Кристалл галита

Галит – каменная соль (NaCl). Сингония – кубическая. Кристаллы – кубические (рис. 2.2.13). Агрегаты – друзы, сплошные, зернистые, плотные, столбчатые, плотные кристаллические корки и пластины. Твердость 2,5. Очень хрупок. Плотность 2,1–2,2. Практическое значение: галит применяется главным образом как пищевой продукт и консервирующее средство, а также в химической, металлургической, кожевенной и других отраслях промышленности.

Третий морфологический тип – обломочные частицы. К этому типу относят частицы, возникшие в результате разрушения других, ранее образовавшихся частиц. Образуются они также из продуктов жизнедеятельности растительных и животных организмов, а также из продуктов выпадения из водной или воздушной среды материалов любого происхождения. Одной из характерных особенностей обломочных частиц является неоднородность их состава, обусловленная составом материалов, подвергшихся разрушению. Встречаются образования, состоящие из продуктов выветривания как силикатных, так и несиликатных пород, например обломочные известняки.

К этому типу относятся также искусственные кристаллические материалы, полученные плавлением с последующим разрушением блоков. Для них характерны неправильная форма и высокая дефектность, которая максимальна на поверхности и постепенно убывает к центру. Это вызвано интенсивными механическими воздействиями при измельчении блоков.

По крупности слагающих обломков описываемые материалы делятся на четыре группы:

- грубообломочные, сложенные более чем наполовину обломками крупнее 1 мм в поперечнике;
- среднеобломочные, состоящие более чем наполовину из зерен размером от 1 до 0,1 мм;
- мелкообломочные, сложенные преимущественно зернами размером от 0,1 до 0,01 мм;
- тонкообломочные, состоящие более чем наполовину из частиц меньше 0,01 мм.

В зависимости от степени окатанности и размера слагающих обломков описываемые породы подразделяются на несколько типов:

- острозернистые, коэффициент овальности до 0,2;
- зернистые, коэффициент сферичности от 0,2 до 0,5;
- овализованные, коэффициент сферичности от 0,5 до 0,9;
- шарообразные, коэффициент сферичности от 0,9.

Изменение формы у каждого морфологического типа частиц при механической обработке в симметричных динамических условиях происходит по-своему. Это вызвано не только различиями морфологического плана, но и внутренними особенностями структуры этих типов частиц.

Подведем итоги. Природные и промышленные дисперсные материалы состоят из частиц различного морфологического типа, который определяет макроскопические свойства дисперсной системы в целом. В природе существует достаточно большое число дисперсных материалов правильной формы, однако

практического применения в промышленности они не находят, там приходится сталкиваться с дисперсными частицами, форма которых далека от идеальной.

2.3. СВОЙСТВА ДИСПЕРСНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Дисперсный материал – это совокупность большого количества твердых частиц. Особый характер такой системы обуславливается тем, что при его обработке частицы дисперсного материала ведут себя иначе по сравнению с твердыми телами или жидкостями.

Свойства дисперсных материалов, отличающие их от жидкостей и твердых тел, характеризуются рядом показателей. Некоторые из них весьма специфичны и используются для конкретных случаев воздействия на дисперсный материал тех или иных факторов.

Только в идеальном дисперсном материале отсутствуют силы связи между частицами; для реальной совокупности частиц такие связи существуют и оказывают значительное влияние на характер протекания различных технологических процессов. Рассмотрим наиболее важные характеристики дисперсных материалов, которые в основном и учитываются специалистами при разработке и эксплуатации различного оборудования для их переработки и хранения.

Гранулометрический состав. Отдельные частицы дисперсного материала имеют обычно неправильную форму и их линейные размеры, определенные в различных направлениях, отличаются друг от друга. В качестве определяющего линейного размера может быть принят характерный размер l , рассчитываемый по трем измерениям частицы: $l = abh/3$, где a – длина обмеряемой частицы; b – ширина частицы; h – высота частицы.

В качестве характеристики линейного размера зерна часто применяется величина его эквивалентного диаметра l , который определяют как диаметр шара, имеющего такой же объем, что и данное зерно. Выразив объем зерна отношением его массы к плотности частицы, получим выражение для определения l :

$$l = \sqrt[3]{6m/\pi\rho_d},$$

где m – масса частицы; ρ – плотность частицы.

Для определения гранулометрического состава (процентного содержания частиц различных размеров и среднего диаметра частиц) различных сыпучих материалов могут использоваться различные методы. Метод непосредственного измерения используют в основном для кускового и крупнозернистого материала. При этом частицы измеряют с помощью соответствующего мерительного инструмента. Следует иметь в виду, что достоверная картина распределения частиц по их размерам может быть получена только при достаточно большом числе измерений. По этой причине такой метод весьма трудоемок и применяется достаточно редко.

Наиболее часто применяется так называемый ситовой анализ. Этот метод заключается в разделении порции дисперсного материала на фракции с помощью последовательного просеивания через набор сит с отверстиями различной величины. Сквозь отверстия данного сита проходят частицы, наибольший линейный размер которых меньше величины отверстий сита. Так, значение класса

определяют размером отверстий соседних сит. Если в результате ситового анализа получают ряд фракций со средними размерами зерен l_i , а их массовые доли составляют величину M_i , то средний эквивалентный диаметр зерен всей смеси рассчитывается по формуле $l = \sum_{i=1}^n M_i l_i$, где n – число сит плюс одно.

Седиментационный анализ удобен для мелкозернистых и порошкообразных материалов. Он основан на различии скоростей осаждения твердых частиц в жидкости. Для определения гранулометрического состава тонких порошков используют, как правило, более сложные методы, требующие наличия специальной аппаратуры – фильтрационный анализ; электроклассификация; фотоимпульсный метод; телевизионный и кондуктометрический методы.

На практике часто пользуются графической формой дисперсионного анализа дисперсного материала. На графике по оси абсцисс откладываются средние значения диаметров частиц l_i каждого класса, полученные, скажем, в результате ситового анализа. Причем число классов или фракций i не должно быть менее 5 и более 20. При малом числе классов трудно получить наглядную характеристику фракционного состава, а при увеличении числа классов свыше 20 некоторые из них становятся непредставительными по составу попавших частиц и общая картина распределения искажается случайными отклонениями. По оси ординат откладывается процентный состав классов в пробе. По полученной дифференциальной кривой можно определить процентное содержание частиц материала для любого интервала значений их условных диаметров.

В зависимости от размеров частиц дисперсные материалы подразделяются на кусковые (l_{\max} превышает 10 мм); крупнозернистые ($l_{\max} = 2 - 10$ мм); мелкозернистые ($l_{\max} = 0,5 - 2$ мм); порошкообразные ($l_{\max} = 0,05 - 0,5$ мм); пылевидные (l_{\max} менее 0,05 мм).

Порозность. Слой дисперсного материала занимает больший объем, чем твердое тело, из которого может быть получена совокупность зерен той же массы, что и первоначальное твердое тело. Это вызвано наличием в слое свободных пространств между частицами. Количество этих свободных пространств может для одного и того же дисперсного материала изменяться в довольно широких пределах, в зависимости от взаимного расположения (упаковки) частиц, которое носит случайный характер. Для данного конкретного момента времени слой характеризуется величиной порозности:

$$\varepsilon = V_0 / V_{cm} = (1 - V_d) / V_{cm},$$

где V_0 – объем, приходящийся на свободные пространства между зернами; V_d – объем дисперсных частиц в слое.

В случае смешивания зерен двух видов порозность слоя не аддитивна, так как зерна меньшего размера могут произвольным образом заполнять свободные пространства между большими зернами, уменьшая общую порозность. Расчет порозности смеси в этом случае производится по зависимостям, включающим в себя эмпирические коэффициенты. Именно наличием пустот в слое (его порозностью) объясняется различие значений насыпной плотности частиц дисперс-

ного материала от его пикнометрической плотности, под которой понимают среднюю плотность материала самой частицы (значение пикнометрической плотности выше значения плотности насыпной).

Насыпная плотность. Насыпная плотность ρ_n – это масса сыпучего материала, находящаяся в единице занимаемого им объема. Величину ρ_n используют для определения требуемого объема бункеров, смесителей, при расчетах затрат энергии на смешивание.

Насыпная плотность сыпучего материала является функцией от размеров составляющих его частиц, их средней пикнометрической плотности ρ_d , влажности U , порозности ε . Порозность, или плотность упаковки частиц в слое, как уже указывалось, величина непостоянная. Например, при смешивании происходит разрыхление материала и ρ_n при этом уменьшается, приближаясь к предельному значению $\rho_{n,\min}$. Одним из способов уплотнения материала, вплоть до достижения значения $\rho_{n,\max}$, является вибрация стенок сосуда (бункера). Отношение $\rho_{n,\max}/\rho_{n,\min}$ для некоторых дисперсных материалов, например для речного песка, достигает значения 1,5.

Наиболее простой способ определения насыпной плотности состоит в следующем. Емкость с заранее известным внутренним объемом V_{cm} методом свободного истечения через воронку заполняют сыпучим материалом. После ее заполнения уровень материала выравнивают по верхнему краю емкости, убирая его излишки. Затем емкость взвешивают. Насыпная плотность дисперсного материала в этом случае рассчитывается по формуле

$$\rho_n = G_d / V_{cm},$$

где G_d – вес дисперсного материала.

Для одного и того же материала (с одинаковой пикнометрической плотностью) величина ρ_n будет увеличиваться по мере уменьшения размера частиц.

По величине насыпной плотности различают: легкие дисперсные материалы (ρ_n – менее 600 кг/м³); средние (ρ_n = 600 – 1100 кг/м³); тяжелые (ρ_n = 1100 – 2000 кг/м³); весьма тяжелые (ρ_n – свыше 2000 кг/м³).

Влажность. Влажность дисперсного материала определяет подвижность его частиц. Увеличение влажности увеличивает силы сцепления частиц и ухудшает текучесть дисперсного материала, что способствует образованию комков и статических сводов над отверстием бункеров. Для характеристики количества влаги, содержащейся в твердом материале, используют два понятия: влажность и влагосодержание.

Под влажностью U понимают отношение веса влаги, содержащейся в дисперсном материале, к весу влажного материала:

$$U = (G_g - G_c) / G_g,$$

где G_g – вес влажного материала; G_c – вес абсолютно сухого материала.

Под влагосодержанием U^* понимают отношение веса влаги, содержащейся в дисперсном материале, к весу абсолютно сухого материала:

$$U^* = (G_g - G_c) / G_c.$$

Величины U и U^* могут быть также выражены в процентах.

Для определения влажности могут быть использованы прямые и косвенные методы. К прямым методам относится непосредственное измерение веса влаги и веса сухого вещества в навеске после сушки. Это наиболее простой и точный метод. Известен метод экстракции, при котором влага поглощается некоторым поглощающим воду веществом. Косвенные методы позволяют судить о влажности путем измерения функционально связанных с ней величин и характеристик: электрических, механических, оптических.

Присутствие влаги увеличивает плотность дисперсного материала. Для кусковых и зернистых материалов:

$$\rho_{нв} = \rho_n(1 + U^*),$$

где $\rho_{нв}$ – плотность влажного материала.

Для порошков:

$$\rho_{нв} = \rho_n \left[\frac{1 + U^*}{1 + U^* \rho_d / 3\rho_c} \right],$$

где ρ_c – плотность жидкости, заполняющей поры дисперсного материала.

По содержанию влаги сыпучие материалы делятся на:

- сухие, содержащие влагу, химически связанную с материалом;
- материалы, содержащие гидроскопическую влагу, которая имеет с ним физико-химическую связь. Обычно это вещества, склонные к поглощению влаги из воздуха за счет адсорбции или диффузии;
- сырые или мокрые, содержащие внешнюю влагу, которая имеет механическую связь с материалом.

Если внешняя влага образует пленку на поверхности частиц материала, то его считают сырым; если влага занимает свободные пространства между частицами, то материал считают мокрым, так как он практически превращается в суспензию. Простой тепловой сушкой можно удалить механически связанную влагу и частично физико-химическую. Удаленную путем сушки влагу называют свободной.

Угол естественного откоса. Углом естественного откоса ϕ_α называют угол, образуемый линией естественного откоса дисперсного материала с горизонтальной плоскостью. Его величина зависит от сил трения, возникающих при перемещении частиц дисперсного материала и сил сцепления между ними, которые, в свою очередь, зависят от формы и размера частиц, а также от влажности. Увлажнение материала приводит к увеличению угла естественного откоса.

Величину угла естественного откоса с достаточной точностью можно определить следующим образом: отрезок горизонтальной цилиндрической трубы устанавливают вертикально и заполняют испытываемым материалом. Затем трубу медленно поднимают. Высыпавшийся материал располагается на плоскости под углом естественного откоса. Следует иметь в виду, что величина угла ϕ_α зависит от состояния поверхности опорной площадки. Чем меньше шероховатость этой площадки, тем меньше угол естественного откоса для одного и того же материала. Снижается значение угла ϕ_α и в случае, когда опорная поверхность вибрирует.

Угол естественного откоса определяет подвижность дисперсного материала, его необходимо учитывать при проектировании лотков, течек, выпускных конических отверстий бункеров. Следует принимать угол наклона поверхностей, по которым стекает данный дисперсный материал, к горизонту большим, чем величина угла естественного откоса. При работе с малоподвижными дисперсными материалами внутренние поверхности бункеров шлифуют или с помощью вибраторов приводят в колебательное движение с малыми амплитудами.

Обычно для большинства дисперсных материалов величина угла естественного откоса лежит в пределах 25–50°. Наибольшая подвижность частиц дисперсного материала соответствует минимальному углу естественного откоса; по мере его увеличения подвижность частиц уменьшается. В некоторых классификациях сыпучих материалов используется величина нормального напряжения в слое σ_α , которая связана с углом естественного откоса материала.

Угол естественного откоса дисперсного материала характеризует его текучесть и определяется как максимальный угол наклона свободной поверхности слоя к горизонтальной плоскости. С увеличением размера частиц и коэффициента формы этот угол возрастает. Например, для свинцовой дроби $\delta=1,28$ мм угол естественного откоса составляет 23°; для дроби $\delta=15$ мм – 43°, для речного песка – 32°, для цемента – 40°.

Сыпучесть. Этот параметр есть комплексный показатель целого ряда физико-механических свойств. Под сыпучестью материала понимают такое его состояние, при котором между его частицами отсутствует сплошная материальная связь. Степень сыпучести характеризуется количеством материала, проходящего через единицу площади выпускного отверстия в единицу времени.

Сыпучесть оценивают временем высыпания определенной навески испытуемого материала из конусообразной воронки с углом раствора 60° через отверстие диаметром 1–7 мм. Диаметр отверстия зависит от размера частиц дисперсного материала. Используя численное значение времени высыпания, можно определить коэффициент сыпучести (текучести) K_{sp} :

$$K_{sp} = \tau r^{2,58} / G,$$

где τ – время вытекания сыпучего материала из воронки, с; r – радиус отверстия воронки, мм; G – величина навески сыпучего материала, г.

Также сыпучесть количественно определяется при помощи относительного коэффициента сыпучести \bar{K}_{sp} , который характеризует способность составляющих дисперсный материал частиц к относительной подвижности и выражается через угол естественного откоса материала φ_α :

$$\bar{K}_{sp} = 1 - \sin 1/\varphi_\alpha + \sin \varphi_\alpha.$$

Сыпучесть определяет многие конструктивные особенности бункерных и дозирующих устройств смесителей. От нее зависит продолжительность операций заполнения и опорожнения смесителей.

Подвижность частиц. Эту характеристику принято оценивать величиной начального сопротивления сдвигу $\sigma_{от}$. Она указывает на степень связности дисперсного материала и определяет силу сцепления частиц. В лабораторных

условиях строят диаграмму зависимости предельных касательных напряжений $\sigma_{i\tau}$, при которых происходит сдвиг слоев дисперсного материала, от нормальных напряжений σ_i (давления на слой). Каждому значению σ_i соответствует определенное значение $\sigma_{i\tau}$. Величину $\sigma_{0\tau}$ при $\sigma_i = 0$ называют начальным сопротивлением сдвигу.

При помощи диаграммы $\sigma_{i\tau} = f(\sigma_i)$ определяется также угол внутреннего трения φ_f и коэффициент внутреннего трения f_{mp} , равный $\operatorname{tg}\varphi_f$. Подвижность частиц характеризуется величиной начального сопротивления сдвигу $\sigma_{i\tau}$ и углом внутреннего трения φ_f (коэффициентом внутреннего трения f_{mp}), который есть не что иное, как угол наклона диаграммы $\sigma_{i\tau} = f(\sigma_i)$ к оси абсцисс.

Для связных дисперсных материалов можно записать:

$$\sigma_{i\tau} = \sigma_{0\tau} + \varphi_f \sigma_i.$$

Величина $\sigma_{0\tau}$ определяется по диаграмме $\sigma_{0\tau} = f(\sigma)$, или приближенно по следующей зависимости:

$$\sigma_{0\tau} = h_0 \rho_n / 4,$$

где h_0 – высота свободно стоящей вертикальной стенки дисперсного материала.

Для определения величины h_0 в открытый ящик, одна из стенок которого может перемещаться наподобие задвижки вертикально вниз, засыпают исследуемый материал. При постепенном опускании задвижки фиксируют предельную высоту h_0 , при которой свободно стоящая стенка дисперсного материала обрушивается.

Величина начального сопротивления сдвигу $\sigma_{0\tau}$ является основной характеристикой, влияющей на образование сводов в бункерах.

Угол внешнего трения. Дисперсный материал, как правило, хранится и перерабатывается в емкостях, выполненных из стали, чугуна, пластмасс. У стенок бункеров предельные касательные напряжения отличаются по величине от предельных касательных напряжений внутри массы дисперсного материала, так как при одном и том же нормальном давлении коэффициент трения f_{mp} частиц одна о другую отличается от коэффициента трения f_1 частиц о стенку бункера. Коэффициент f_1 называют коэффициентом внешнего трения дисперсного материала по испытываемому и определяют как тангенс угла внешнего трения φ'_f . Под углом внешнего трения понимают минимальный угол наклона плоскости, при котором частицы дисперсного материала свободно скатываются.

Угол трения дисперсного материала о стенки бункера не должен быть больше угла внутреннего трения. В противном случае сдвиг будет происходить не по стенке бункера, а по расположенной вблизи с ней поверхности внутри материала. От коэффициента внешнего трения зависит выбираемый угол наклона стенок и ребер бункера.

Коэффициент уплотнения дисперсного материала. Уплотнение дисперсного материала имеет место при наличии динамических нагрузок и вибрации и сопровождается вытеснением воздуха из пустот, а также возникновением моле-

кулярных сил между частицами материала. В результате дисперсный материал уплотняется и его насыпная плотность возрастает.

Коэффициент уплотнения выражается отношением массы уплотненного материала к массе того же объема дисперсного материала до уплотнения. На практике коэффициент уплотнения K_{σ} зависит от коэффициента внутреннего трения f_{mp} и приближенно может быть определен из зависимости

$$K_{\sigma} = 1 + 0,2 f_{mp}.$$

Для различных дисперсных материалов K_{σ} колеблется от величины 1,05 до 1,5. У легкосыпучих материалов коэффициент уплотнения имеет меньшие значения. Иногда вместо коэффициента уплотнения используют пористость дисперсного материала под нагрузкой ε_{σ} .

Определенному значению ε_{σ} ставится в соответствие и определенное значение насыпной плотности при этой же нагрузке $\rho_{нс}$, которая отличается в сторону больших значений по сравнению с отсутствием давления на материал.

Слеживаемость. При длительном хранении без перемещения многие мелкодисперсные материалы способны уплотняться и слеживаться, теряя сыпучесть. Уплотняется материал из-за постепенного перераспределения частиц в слое (мелкие вклиниваются в зазоры между более крупными) и при увеличении влажности.

Степень слеживаемости оценивают по сопротивлению разрушения столбика сыпучего материала под нагрузкой. По величине разрушающей нагрузки, приходящейся на единицу площади испытуемого столбика, сыпучие материалы условно делятся на категории слеживаемости: легкая, незначительная, средняя и сильная. Степень слеживаемости снижают уменьшением влажности продукта, увеличением размеров частиц гранулированием, а также разбавлением частиц различными наполнителями, например тальком, аэросилом.

Классификация дисперсных материалов в соответствии с их свойствами. Необходимость и практическое значение классификаций обуславливает то, что оптимальная конструкция какого-либо аппарата для переработки дисперсных материалов не может быть рекомендована для любого из них ввиду значительного различия в свойствах. Встает вопрос о границах применимости такого аппарата. Здесь и используются различные классификации дисперсных материалов, позволяющие рекомендовать тот или иной аппарат для целой группы веществ, близких по своим свойствам и характеру поведения.

Одним из распространенных способов классификации дисперсных материалов является предложенный Р. Карром метод оценки наиболее важной их характеристики – сыпучести суммой баллов по пяти показателям. В качестве показателей были выбраны: угол естественного откоса φ_{α} ; коэффициент уплотнения K_{σ} ; угол обрушения (производная от внутренних напряжений в слое); коэффициент неоднородности фракционного состава; коэффициент внутреннего трения f_{mp} . Каждый из этих показателей может быть оценен по 25-балльной шкале. Хорошо сыпучий дисперсный материал должен иметь сумму баллов, близкую к 100. Самая плохая сыпучесть оценивается суммой баллов от 0 до 19.

По такому принципу дисперсные материалы делятся на 7 классов, в каждом из которых происходит дополнительное деление на группы – по 3 в каждом классе, а всего – 21. В результате составляется таблица свойств для дисперсных материалов каждой группы, близких по своим физико-механическим свойствам.

Тем не менее при всей полезности подобной классификации следует отметить, что она, как, впрочем, и некоторые другие (например, классификация, приведенная в РТМ 26-01-129-89, берущая за основу комплексный показатель параметров дисперсных материалов), выполнена без достаточного научного обоснования группировки сыпучих материалов по тем или иным физико-механическим свойствам, а в данном случае – по пяти показателям, в классы.

В качестве физико-механических свойств, оказывающих наибольшее влияние на характер проведения технологических процессов, чаще других отмечаются: относительная влажность $U_{отн}$; пикнометрическая плотность ρ_d ; характерный размер частиц l ; нормальное напряжение в слое σ_α ; начальное сопротивление сдвигу под нагрузкой $\sigma_{от}$; угол внутреннего трения φ_f ; насыпная плотность под нагрузкой $\rho_{нс}$; пористость под нагрузкой ϵ_σ .

На основании данных была предпринята попытка классификации дисперсных материалов методом автоматической классификации, структура алгоритма которого состоит из следующих этапов: группировка параметров методом экстремальной группировки; выделение фактора, соответствующего каждой из групп, и определение конечной характеристики; классификация объектов по факторам. Если данную совокупность параметров можно сгруппировать и разделить несколькими способами, получая результаты, несколько отличающиеся друг от друга, то лучше будет тот, который обеспечит наиболее четкое выделение факторов. Таким способом (методом) является метод, известный как *метод экстремальной группировки*.

Для сравнения и группировки параметров этим методом их необходимо представить в некотором стандартном виде, общем для всех параметров. Обычно анализируемые параметры приводят к централизованной и нормированной форме. Количественной мерой связи параметров при этом будут служить коэффициенты корреляции, из которых составляется корреляционная матрица. Далее составляется алгоритм экстремальной группировки с учетом того, что между параметрами должна существовать наиболее тесная связь, а между группами – наименее тесная.

В результате вычислений была получена следующая группировка:

1-я группа – относительная влажность $U_{отн}$;

2-я группа – характерный размер частиц l , начальное сопротивление сдвигу под нагрузкой $\sigma_{от}$, насыпная плотность под нагрузкой $\rho_{нс}$;

3-я группа – пикнометрическая плотность ρ_d , нормальное напряжение в слое дисперсного материала σ_α , угол внутреннего трения φ_f , пористость под нагрузкой ϵ_σ .

Для каждой группы был вычислен соответствующий фактор, который является определенным соотношением параметров. Для первой группы фактором

будет единственный параметр – влажность; для второй фактор можно назвать макрохарактеристикой; для третьей – микрохарактеристикой. Для удобства дальнейших расчетов фактор в каждой группе заменяют соотношением параметров, значение которых наиболее близко значению фактора (показателем этого является значение коэффициента корреляции).

Фактор F_2 для второй группы можно заменить произведением параметров l и $\rho_{нс}$. Для третьей группы фактор F_3 заменяется произведением параметров ρ_d и ϕ_f . Для первой группы фактором остается параметр $U_{отн}$.

Результаты группировки показали, что вместо восьми параметров можно использовать пять: $U_{отн}, l, \rho_{нс}, \rho_d, \phi_f$, что значительно снижает трудоемкость исследований при подборе оборудования и существенным образом не сказывается на точности результатов.

Далее проводится группировка сыпучих материалов по их параметрам методом «Спектр». Ее проводят на основании близости свойств объектов в одной группе и максимального различия свойств объектов разных групп.

Метод группировки «Спектр» заключается в следующем. Пусть в пространстве параметров находится некоторая совокупность точек. Предположим, что эта совокупность точек распадается на две изолированные друг от друга группы **A** и **B**. Координатами точек будут значения выбранных методом экстремальной группировки параметров. Можно взять в качестве исходной любую точку области и отбирать из оставшихся ближайшую к ней по координатам (параметрам). Затем – ближайшую к первым двум; затем – к первым трем; четверем и т. д. Мерой близости будет являться величина Φ – аналог потенциала электрического поля. При отборе первой же точки, принадлежащей другому множеству (**B**), значение меры близости Φ будет существенно меньше, чем на предыдущих шагах, так как предполагается, что множества **A** и **B** изолированы друг от друга. Процедура, в зависимости от заданной (пороговой) величины меры близости Φ , может распространяться на любое число групп.

Методика определения принадлежности нового сыпучего материала к одной из групп основана на определении среднего значения параметров в каждой группе и сравнения их с аналогичными параметрами нового сыпучего материала. Значения параметров необходимо перевести в безразмерные единицы, а затем определить сравнительный коэффициент K_n , по которому делают вывод о принадлежности нового материала к соответствующей группе:

$$K_n = \sqrt{(F_{1,n} - F_{1,n})^2 + (F_{2,n} - F_{2,n})^2 + (F_{3,n} - F_{3,n})^2},$$

где $F_{1,n}, F_{2,n}, F_{3,n}$ – средние значения факторов для нового материала; $F_{1,n}, F_{2,n}, F_{3,n}$ – средние значения факторов для каждой группы; n – номер группы.

Новый материал относят к одной из групп, для которой значение K_n будет минимальным. Используя основные параметры дисперсных материалов, представляется возможным их деление на пять групп, в каждой из которых материалы имеют сходные свойства. Это дает возможность подбирать оборудование для переработки определенной группы материалов (а не для каждого в отдель-

ности). При этом для классификации были использованы всего пять указанных выше параметров: $U_{отн}$, l , $\rho_{нс}$, ρ_d , φ_f .

Сравнивая классификацию, на основании восьми параметров, выраженных через комплексный показатель h , видно, что и по этому показателю сыпучие материалы можно условно разделить на те же пять групп. При этом состав групп практически одинаков в том и другом случае. Это подтверждает правомерность замены факторов соотношением параметров и, как следствие, исключение из рассмотрения таких параметров, как нормальное напряжение в слое σ_α , начальное сопротивление сдвигу под нагрузкой $\sigma_{0\tau}$, пористость под нагрузкой ε_σ , которые на практике достаточно сложно измерить и оценить.

Практическая ценность данной классификации не вызывает сомнений. Она дает возможность достаточно просто подбирать оборудование для переработки группы материалов, а не каждого в отдельности.

Подведем итоги. Рассматривая физико-механические свойства дисперсных материалов, можно сделать вывод о том, что какую-либо характеристику материала, например его подвижность, нельзя оценить однозначно: она зависит от влажности, размеров частиц, угла внутреннего и внешнего трения, начального сопротивления сдвигу. В то же время для жидкостей или газа достаточно указать только вязкость (плотность). Поэтому возникают трудности при создании классификаций или таблиц свойств сыпучих материалов. Очевидно, следует группировать сыпучие материалы с близкими физико-механическими свойствами в отдельные классы.

2.4. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ ПО РАЗМЕРАМ

2.4.1. Методы анализа дисперсного состава материала

Дисперсные материалы, состоящие из частиц различных размеров, являются полидисперсными. Чаще обрабатываются именно полидисперсные материалы. При исследовании природных минеральных материалов можно обнаружить частицы различных размеров, как и для любых дисперсных систем, образующиеся при измельчении. При образовании дисперсных частиц в результате кристаллизации и их росте при слиянии друг с другом следует ожидать возникновения полидисперсной системы. Монодисперсные материалы в природе встречаются очень редко, и когда они образуются, то сохраняются очень недолго. Иногда система достаточно удовлетворительно характеризуется одним размером частиц. В других случаях оказывается необходимой информация о распределении частиц по размерам. Графическое представление распределения частиц по размерам может быть недостаточным для полного количественного определения полидисперсного материала. Существует ряд математических и визуальных методов, с помощью которых могут быть описаны полидисперсные материалы. Некоторые из наиболее распространенных методов рассматриваются в данной главе.

Средний и медианный диаметры. Наиболее простая характеристика группы частиц с различными диаметрами – это сумма диаметров всех частиц, деленная на их полное число:

$$\langle l \rangle = \sum l_i N_i / \sum N_i. \quad (2.4.1)$$

Величина $\langle l \rangle$ называется средним диаметром частиц. Медианный диаметр частиц может быть определен путем записи диаметров частиц в порядке их возрастания и нахождения такого диаметра, который делит полученный ряд пополам.

Пример 2.4.1. Из приведенного ниже распределения частиц по диаметрам определить средний и медианный диаметры дисперсных частиц.

Интервал диаметров l , мкм	Число частиц N_i
10–20	30
20–30	90
30–50	50
50–100	20
100–200	10

Используя формулу (2.4.1), можно составить следующую таблицу (середина интервала диаметров выбирается как наилучшая оценка размера всех частиц в этом интервале):

Средняя точка l_i , мкм	Число частиц N_i	$N_i l_i$
15	30	450
25	90	2250
40	50	2000
75	20	1500
150	10	1500
	200	7700

Средний диаметр равен $7700/200 = 38,5$ мкм. Из таблицы видно, что медианный диаметр лежит между значениями 20 и 30 мкм. По приведенным данным более точная оценка этой величины невозможна.

Хотя такие оценки распределения частиц по размерам весьма простые, ни средний, ни медианный диаметры сами по себе не дают достаточной информации о нем. Добавочные сведения дает установление того, насколько хорошо средняя или медианная величина представляет все частицы в дисперсном материале. На практике дисперсные частицы обычно описываются некоторой средней величиной, причем распределение частиц по размерам полностью игнорируется. Такая оценка размеров частиц является очень неточной.

Гистограммы. Кроме определения средней и медианной величин, распределение частиц по размерам может быть представлено в виде гистограмм или линейных диаграмм.

Пример 2.4.2. Результаты, полученные в примере 2.4.1, представим в виде графика зависимости числа частиц от их диаметра.

На рис. 2.4.1 изображено распределение частиц по диаметрам в виде линейной диаграммы (зависимость N_i от l). Форма такой кривой распределения может быть легко изменена путем изменения величины интервала диаметров.

Интервал диаметров l , мкм	Средняя точка l_i , мкм	Величина интервала диаметров Δl , мкм	Число частиц N_i	$N_i / \Delta l$
10-20	15	10	30	3
20-30	25	10	90	9
30-50	40	20	50	2,5
50-100	75	50	20	0,4
100-200	150	100	10	0,1

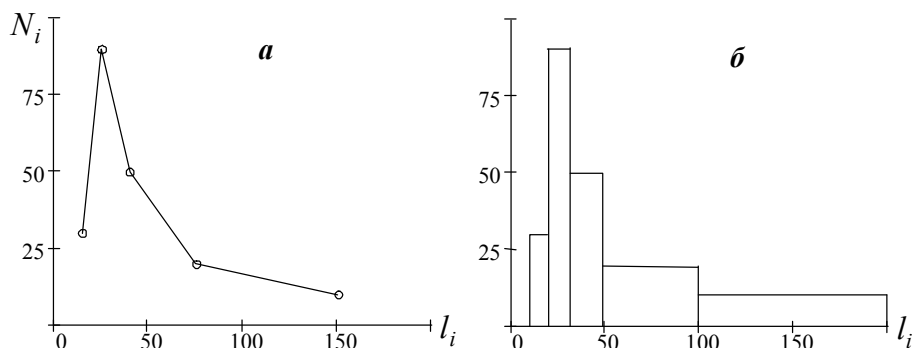


Рис. 2.4.1. Распределение дисперсных частиц по размерам:
а – в виде линейной диаграммы; **б** – в виде гистограммы.

На рис. 2.4.1,б изображено распределение частиц по диаметрам в виде гистограммы (зависимость $N_i / \Delta l$, от l). Гистограмма представляет собой совокупность смежных прямоугольников. Площадь каждого прямоугольника равна числу частиц, диаметр которых попадает в данный интервал. Графики такого типа дают наглядное представление о распределении дисперсных частиц по размерам.

Для высокодисперсных материалов один интервал размеров частиц может охватывать числа, которые различаются несколькими порядками величин. В таких случаях гистограмма не будет давать требуемых сведений о распределении, так как на фоне большого числа мелких частиц распределение более крупных полностью исказится. Это распределение может оказаться необходимым в приложениях, где существенную роль играет масса или поверхность частиц.

Существуют разные способы более наглядного представления распределения крупных частиц по размерам. Один из них заключается в том, что на оси абсцисс откладывают логарифмы диаметров частиц. Это позволяет представить распределение по размерам так, что можно наблюдать более широкий диапазон размеров частиц. Однако масштаб на оси ординат должен быть изменен таким образом, чтобы сумма площадей всех прямоугольников, образующих гистограмму, была пропорциональна общему количеству присутствующих частиц. Это достигается путем деления числа частиц в каждом интервале на разность

логарифмов наибольшего l_k и наименьшего l_n размеров частиц для данного интервала $\Delta \lg = \lg l_k - \lg l_n$. Величина ординаты

$$N_{\Delta \lg l} = \frac{N}{\Delta \lg}. \quad (2.4.2)$$

Эта величина определяется для каждого интервала размеров. Сходное выражение может быть написано для площади поверхности частиц, их массы или объема. Ввиду соотношения $m = \rho_d V$ распределение по массе может быть получено из распределения по объему, и наоборот.

Пример 2.4.3. Данные, приведенные в примере 2.4.1, можно представить графически в форме зависимости $N_{\Delta \lg l}$ от $\lg l$.

Интервал, мкм	Средняя точка, мкм	N	$\Delta \lg$	$N_{\Delta \lg l}$
10–20	15	30	0,30	100
20–30	25	90	0,18	500
30–50	40	50	0,22	227
50–100	75	20	0,30	67
100–200	150	10	0,30	33

Данные представлены в виде непрерывной кривой на рис. 2.4.2.

Непрерывные кривые такого типа часто используются для иллюстрации различия распределений частиц по концентрации, их площади поверхности или массе для одного и того же дисперсного материала. Различия в форме кривых возникают, когда в аэрозоле присутствует большое количество мелких частиц. В этом случае мелкие частицы существенно больше определяют концентрацию, чем массу и площадь поверхности.

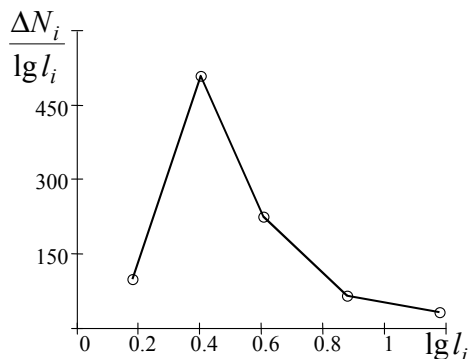


Рис. 2.4.2. Распределение частиц по размерам, выраженное через логарифм диаметра

Пример 2.4.4. Построить распределение частиц по площади поверхности S и объему V для аэрозоля, рассмотренного в примере 2.4.1, в том же виде, как в примере 2.4.3. Нормализовать величины, откладываемые на оси ординат, таким образом, чтобы приведенные площади поверхности и объемы частиц были сопоставимыми для одинаковых интервалов.

Величины ΔS определяются умножением числа частиц в каждом интервале на квадрат диаметра в средней точке интервала. Величины ΔV определяются умножением числа частиц в каждом интервале на куб диаметра в средней точке интервала. Нет необходимости умножать ΔS на π и ΔV на $\pi/6$, так как эти постоянные сокращаются, когда значения ΔS и ΔV нормализуются делением на сумму всех величин.

Интервал, мкм	ΔS	$\Delta S/(S_{\Sigma}\Delta \lg l)$	ΔV	$\Delta V/(V_{\Sigma}\Delta \lg l)$
10–20	6750	0,047	101300	0,007
20–30	56250	0,650	1406300	0,167
30–50	80000	0,757	3200000	0,310
50–100	112500	0,780	8437500	0,600
100–200	225000	1,561	33750000	2,399
	$S_{\Sigma} = 480500$		$V_{\Sigma} = 46895100$	

Сравнение данных, приведенных на рис. 2.4.3, показывает, что такие характеристики аэрозоля, как площадь поверхности его частиц и их объем (масса), определяются главным образом крупными частицами, тогда как мелкие частицы определяют в основном концентрацию. Поэтому, представляя распределение частиц по размерам, надо прежде всего ориентироваться на подлежащий изучению параметр дисперсного материала – концентрацию частиц, их площадь поверхности или объем (масса).

Математическое представление распределения. Если интервалы размеров частиц становятся очень малыми, то гистограмма начинает приближаться к плавной кривой. Это дает возможность представить распределение плавной кривой или даже некоторой функциональной зависимостью:

$$dN_i = f(l) dl. \quad (2.4.3)$$

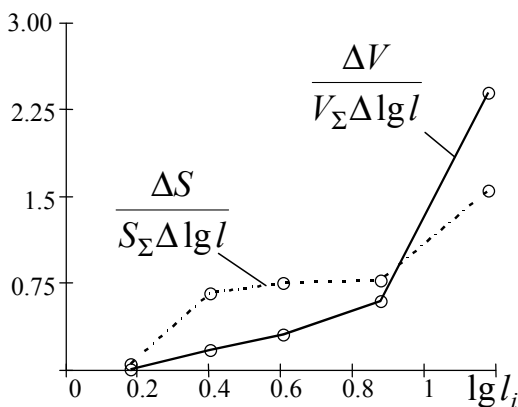


Рис. 2.4.3. Распределения частиц по размерам, выраженные через логарифм диаметра, площадь поверхности частиц и объем частиц

Здесь dN_i – число частиц в интервале размеров от l до $l + dl$. Для построения кривой такого вида требуется анализ размеров большого числа частиц. Ес-

ли бы было возможно определить некоторые характеристические параметры распределения, то функциональная форма могла бы быть использована для представления целого семейства кривых. Было сделано много попыток найти функциональную форму. Обычно подобные уравнения удовлетворительно описывают дисперсные материалы, образующиеся из одного специфического источника, но не пригодны для описания любых дисперсных материалов.

Имеется одна широко применяемая форма, которая подходит для описания дисперсных материалов, образующихся из различных источников. Эта форма есть логарифмически-нормальное распределение. Для понимания применимости логарифмически-нормального распределения необходимо рассмотреть основные свойства нормального распределения.

Нормальное распределение. Многие явления, которые, казалось бы, происходят более или менее случайно, проявляют определенную закономерность, которую можно использовать для предсказания будущих событий. Так, для единственного бросания монеты невозможно предсказать, выпадет «орел» или «решка». При многократном подбрасывании монеты частота выпадения «орла» составит приблизительно 50%. Чем больше число испытаний, тем точнее будет выполняться данное приближение.

Предположим, что было сделано 100 испытаний, записано количество выпавших «орлов» и эксперимент повторен много раз. Оказывается, что на каждые 100 испытаний выпадает около 50 «орлов», причем в каждом отдельном эксперименте число выпавших «орлов» будет больше или меньше 50. Если частота выпадения «орлов» вычерчена как функция количества «орлов», выпавших в 100 испытаниях, то форма полученной кривой будет описываться известной функциональной зависимостью. Эта кривая, известная как «нормальная» кривая, описывает нормальное распределение вероятности случайной величины. Основное достоинство нормального распределения в том, что оно предсказуемо. Это распределение определяется двумя параметрами – средним значением $\langle l \rangle$ и стандартным отклонением σ , которые определяются следующим образом:

$$\langle l \rangle = \sum_{i=0}^{\infty} N_i l_i / \sum_{i=0}^{\infty} N_i, \quad (2.4.4)$$

$$\sigma = \sqrt{\sum_{i=0}^{\infty} N_i (\langle l \rangle - l_i)^2 / \sum_{i=0}^{\infty} N_i - 1}. \quad (2.4.5)$$

Пример 2.4.5. Вычислить стандартное отклонение σ для данных, приведенных в примере 2.4.1. Среднее значение составляет 38,5 мкм.

Интервал, мкм	Средняя точка, мкм	N_i	$\langle l \rangle - l_i$	$N_i (\langle l \rangle - l_i)$
10–20	15	30	23,5	16568
20–30	25	90	13,5	16403
30–50	40	50	-1,5	113
50–100	75	20	-36,5	26645
100–200	150	10	-111,5	124323
		$N_{\Sigma} = 200$		184052

Стандартное отклонение $\sigma = [184052/(200 - 1)]^{1/2} = (925)^{1/2} = 30,4$ мкм.

Средние значения и стандартные отклонения могут быть вычислены для любого набора данных. Для данных, подчиняющихся закону нормального распределения, среднее значение лежит в средней точке ряда данных (т. е. оно является и медианным значением) и 67% площади под кривой нормального распределения приходится на интервал $[\langle l \rangle - \sigma, \langle l \rangle + \sigma]$.

Нормальное распределение используется при обработке различных статистических данных, таких как средний рост и вес детей, оценки больших групп студентов и даже частота изготовления кондитерских изделий с большим или меньшим весом на производственной линии. Можно было бы предположить, что размеры дисперсных частиц также нормально распределены.

В большинстве случаев это предположение не выполняется. Кривая распределения частиц по размерам для многих дисперсных материалов сходна с показанной на рис. 2.4.4, $l_g = 1$ мкм, $\sigma_g = 2$ мкм. Из этой кривой следует, что мелких частиц гораздо больше, чем крупных. Кривая на рисунке, как говорят, скошена в сторону больших размеров частиц.

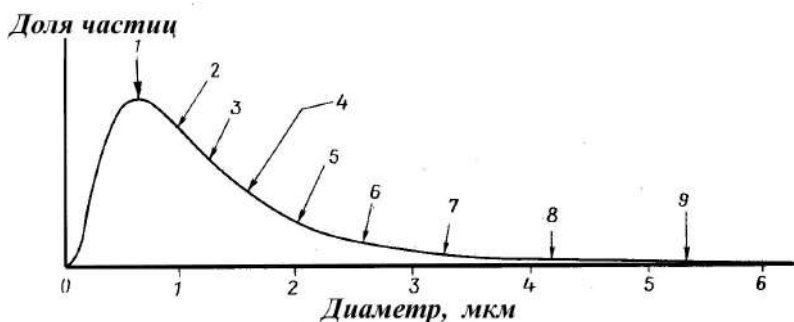


Рис. 2.4.4. Пример логарифмически-нормального распределения

Диаметр на рис. 1.4 (мкм) соответственно: 1 — счетная мода (0,62); 2 — счетный медианный (1,0), 3 — счетный средний (1,27); 4 — среднеквадратичный или поверхностная мода (1,62); 5 — среднекубический (2,08); 6 — поверхностный медианный (2,61); 7 — поверхностный средний (3,32); 8 — массовый медианный (4,23); 9 — массовый средний (5,37).

Логарифмически-нормальное распределение. Было обнаружено, что скошенные графики распределений частиц по размерам удастся привести к виду нормального распределения, если вместо размеров частиц использовать их логарифмы. Это приводит к расширению интервалов размеров малых частиц и к сужению интервалов размеров крупных частиц. Если полученный таким образом новый график похож на нормальное распределение частиц, то говорят, что частицы распределены по логарифмически-нормальному закону, и распределение называется логарифмически-нормальным распределением. По аналогии с нормальным распределением среднее значение и стандартное отклонение определяются как

$$\log l_g = \frac{\sum_{i=0}^{\infty} N_i \log l_i}{\sum_{i=0}^{\infty} N_i}, \quad \log \sigma_g = \sqrt{\frac{\sum_{i=0}^{\infty} N_i (\log l_g - \log l_i)^2}{\sum_{i=0}^{\infty} N_i - 1}}. \quad (2.4.6)$$

Параметры, определяемые формулами (2.4.6), называются средним геометрическим диаметром и стандартным геометрическим отклонением.

Пример 2.4.6. Вычислить средний геометрический диаметр l_g и стандартное геометрическое отклонение σ_g для данных, приведенных в примере 2.4.1. Вычислим средний геометрический диаметр.

Интервал, мкм	l_i	N_i	$\log l_i$	$N_i \log l_i$
10-20	15	30	1,176	35,283
20-30	25	90	1,398	125,815
30-50	40	50	1,602	80,103
50-100	75	20	1,875	37,501
100-200	150	10	2,176	21,761
	200			300,463

Средний геометрический диаметр будет равен:

$$l_g = \log^{-1}(300,463/200) = \lg^{-1}(1,502) = 31,8 \text{ мкм.}$$

Вычислим стандартное геометрическое отклонение.

Интервал, мкм	N_i	$\log l_g - \log l_i$	$N_i (\log l_g - \log l_i)^2$
10-20	30	0,326	3,195
20-30	90	0,104	0,983
30-50	50	-0,100	0,496
50-100	20	-0,373	2,777
100-200	10	-0,674	4,538
	200		11,989

Стандартное геометрическое отклонение:

$$\sigma_g = \log^{-1}[11,989/199]^{1/2} = \log^{-1}0,245 = 1,760.$$

Отметим, что σ_g является безразмерной величиной, так как представляет собой отношение диаметров.

При логарифмически-нормальном распределении стандартное геометрическое отклонение представляет собой интервал размеров частиц, которые имеют 67% всех частиц. Этот интервал заключает диаметры от l_g/σ_g до $l_g\sigma_g$.

В случае нормального распределения такой интервал равен просто удвоенному стандартному отклонению. В свою очередь, 95% частиц имеют размеры, заключенные в интервале от $l_g/(2\sigma_g)$ до $l_g 2\sigma_g$.

Таким образом, для монодисперсного аэрозоля σ_g равно единице, тогда как в случае нормального распределения σ_g равно нулю.

Логарифмически-нормальное распределение может быть записано в виде функции

$$f(l) = \frac{1}{\sqrt{2\pi/\ln\sigma_g}} \exp\left\{-\frac{(\ln l - \ln l_g)^2}{2\ln^2\sigma_g}\right\}, \quad \int_0^{\infty} f(l)dl = 1.$$

Другие способы определения среднего размера. Существует ряд различных средних или медианных величин, которые можно определять в качестве характеристики распределения частиц по размерам. Можно определить средний массовый диаметр как диаметр частицы, произведение массы которой на число частиц в единице объема дисперсного материала равно полной массе частиц в единице его объема. Средний поверхностный диаметр можно определить как диаметр частицы, произведение площади поверхности которой на число частиц в единице объема дисперсного материала равно общей площади поверхности частиц, содержащихся в единице его объема. Для логарифмически-нормального распределения частиц по размерам можно написать соотношение

$$l_p = l_g \exp(p \ln^2 \sigma_g), \quad (2.4.7)$$

где p – параметр, определяющий различные возможные диаметры. Ниже приведены значения параметра p для различных определений диаметров частиц дисперсного материала. На рис. 2.2.4 показаны положения этих диаметров на графике типичного логарифмически-нормального распределения.

Значения параметра p , уравнение (2.4.7), для различных определений диаметров частиц дисперсного материала:

- 1) счетная мода, параметр равен $p = -1$;
- 2) счетный средний геометрический или счетный медианный диаметр $p = 0$;
- 3) средний арифметический диаметр $p = 0,5$;
- 4) среднеквадратичный или поверхностная мода, определяется как

$$\sqrt{\frac{\sum N_i l_i^2}{\sum N_i}},$$

параметр равен $p = 1$;

- 5) среднекубический диаметр $p = 1,5$;
- 6) поверхностный медианный диаметр $p = 2$;
- 7) поверхностный средний диаметр, определяется как

$$\log^{-1} \sqrt{\frac{\sum N_i (\log l_i)^2}{\sum N_i}},$$

параметр равен $p = 2,5$;

- 8) массовый медианный диаметр $p = 3$;
- 9) массовый средний диаметр $p = 3,5$.

Мода характеризует максимум в счетном распределении частиц по размерам. Выражения диаметра под номерами 1–5 относятся к счетному распределению, под номерами 6–7 – к поверхностному распределению, под номерами 8–9 – к объемному распределению. Важно отметить, что независимо от метода

определения диаметра значения σ_g будут одинаковыми. Так, для логарифмически-нормального распределения σ_g будет одинаковым при измерении количества частиц, их поверхности или массы.

При логарифмически-нормальном распределении объемный или массовый медианный диаметр всегда будет больше, чем поверхностный медианный диаметр, который, в свою очередь, больше, чем медианный диаметр, найденный из распределения числа частиц по размерам.

Описание функции распределения частиц по размерам. Большинство промышленных дисперсных материалов является продуктом измельчения (дробление, разламывание, истирание) крупных кусков либо ряда других технологических процессов (осаждение, кристаллизация, конденсация, распыление). Независимо от способа получения дисперсный продукт содержит в своем составе частицы самого разнообразного размера, причем размеры одних частиц могут быть в сотни и тысячи раз больше размеров других частиц. Например, концентрат никелевой руды состоит из частиц размером от 0 до 150 мкм, цемент – 0–100 мкм, микросферический катализатор для крекинга нефти – 10–600 мкм, шихта для производства кокса – 0,01–2 мм. Несколько меньше различие в размерах частиц сыпучих материалов природного происхождения, однако их состав тоже является полидисперсным. Отмеченное обстоятельство – важная особенность природных и промышленных дисперсных материалов.

Иногда применяются дисперсные материалы, приближающиеся по своему составу к монодисперсным, т. е. состоящим из частиц одинакового размера и формы. В промышленных условиях такие продукты могут быть получены либо искусственным путем при тщательно контролируемых условиях, когда однородность гранулометрического состава является целью производства (стеклянные шарики, гранулы некоторых химических продуктов), либо вследствие разделения полидисперсного материала на узкие классы. К монодисперсным приближаются также некоторые материалы природного происхождения.

Наиболее важная характеристика дисперсного материала – распределение частиц по размерам, которая может быть выражена различными способами. Чаще всего применяются функции счетного $n(\delta)$ и массового $g(\delta)$ распределения частиц по размерам:

$$dn = n(\delta)d\delta; \quad dg = g(\delta)d\delta,$$

где dn и dg – соответственно численная и массовая доли частиц размером $(\delta, \delta+d\delta)$. Очевидно, эти функции должны удовлетворять условиям

$$\int_{\delta_{\min}}^{\delta_{\max}} n(\delta)d\delta = 1; \quad \int_{\delta_{\min}}^{\delta_{\max}} g(\delta)d\delta = 1.$$

Используются также интегральные характеристики распределения $R(\delta)$ и $D(\delta)$, представляющие собой процент (по массе) частиц, размер которых соответственно больше или меньше значения δ :

$$R(\delta) = 100 \int_{\delta}^{\delta_{\max}} g(\delta)d\delta; \quad D(\delta) = 100 \int_{\delta_{\min}}^{\delta} g(\delta)d\delta.$$

Статистика дисперсных материалов уже довольно хорошо изучена в экспериментальном отношении. Из многочисленных наблюдений известно, что функция распределения частиц по их размерам в большинстве случаев имеет один хорошо выраженный максимум асимметричной формы с крутым спадом в сторону мелких частиц и пологим – в сторону крупных. Были сделаны неоднократные попытки математического описания кривых распределения.

Асимметричные кривые распределения в общем случае описываются уравнением вида

$$n(\delta) = \frac{dn}{d\delta} = n \left(\frac{(\delta - \delta_{\min})(\delta_{\max} - \delta)}{\delta_{\max} - \delta_{\min}} \right), \quad (2.4.8)$$

где $n(\delta)$ – логарифмически нормальная функция; δ – размер частиц, изменяющийся в пределах $\delta_{\min} < \delta < \delta_{\max}$. Практическое использование уравнения (2.4.8), называемого неидеальным логарифмически-нормальным законом, довольно сложно. Учитывая, что нижний предел размеров частиц, особенно для высокодисперсных материалов, очень мал и практически определить его невозможно, обычно принимают $\delta_{\min} = 0$. Учитывая также, что спад кривой $n(\delta)$ со стороны крупных частиц довольно плавный, для описания кривой распределения в области $\delta < \delta_{\max}$ можно принять $\delta_{\max} = \infty$. А. Н. Колмогоров на основании простых гипотез о характере дробления частиц показал, что гранулометрическая характеристика измельчаемого материала стремится к логарифмически нормальной:

$$g(\delta) = \frac{A}{\delta\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(\ln \delta - \ln \delta_m)^2}{2\sigma} \right],$$

где A – постоянная нормировки; δ_m – медиана; σ – дисперсия распределения. По определению, медиана δ_m равна такому размеру частиц, для которого половина всего количества частиц имеет размер больше δ_m , половина – меньше. (Это определение не зависит от вида функции $g(\delta)$.)

В тех же предположениях относительно предельных размеров частиц дифференциальная кривая распределения может быть аппроксимирована и степенным выражением, которое в наиболее общей форме записывается как

$$g(\delta) = A\delta^m \exp(-\alpha\delta^p), \quad (2.4.9)$$

где α, m, p – параметры распределения.

Постоянная A выбирается обычно так, чтобы $\int_{-\infty}^{\infty} g(\delta) d\delta$ выражался в долях

единицы или в процентах. Выражение (2.4.9) обобщает ряд известных аналитических форм записи кривых распределения. Они отличаются между собой тем, что описывают распределения различной степени асимметрии и крутизны максимума. Столь же широкой общностью обладает и формула Свенсона, которая в дифференциальной форме может быть записана в виде

$$g(\delta) = A \left(\frac{\delta}{\delta_0} \right)^{n-1} \exp \left[- \left(\frac{\delta}{\delta_0} \right)^{n/p} \right], \quad (2.4.10)$$

где n, p, δ_0 – параметры распределения.

Экспериментальные исследования состава порошков по размерам частиц показали возможность их описания в одних случаях логарифмически-нормальным, в других – различными степенными законами. При надлежащем выборе параметров степенные законы, выраженные как в форме (2.4.9), так и в форме (2.4.10), вполне пригодны для описания кривых распределения тех дисперсных материалов, к которым применим и логарифмически-нормальный закон. Из известных частных видов степенного закона (2.4.9) наибольшее практическое применение находит уравнение Розина–Раммлера

$$g(\delta) = \alpha p A \delta^{p-1} \exp(-\alpha \delta^p), \quad (2.4.11)$$

где α характеризует тонины помола; p – внутреннюю структуру дисперсного материала, «равномерность» его состава.

По результатам обработки ситовых анализов продуктов измельчения получена формула Розина–Раммлера в интегральном виде

$$R(\delta) = 100 \exp \left[- (\delta / \delta_0)^p \right].$$

На рис. 2.4.5 приведены примерные графики интегральных характеристик R и функций массового распределения g для трех дисперсных материалов при $\delta_0 = \text{idem}$ и различных значениях p . Если $p < 1$, кривая $g = g(\delta)$ напоминает гиперболу, если $p > 1$, имеет явно выраженный максимум в области небольших значений δ . Чем выше значения p , тем большая часть материала сосредоточена в узком диапазоне размеров частиц. При $p = \infty$ предыдущая функция вырождается в

$$R(\delta) = 100[1 - \Theta(\delta - \delta^*)],$$

где Θ – функция Хевисайда, т. е. материал становится монодисперсным. На практике обычно $p = 0,8 - 1,5$.

Для определения параметров распределения α и p удобно использовать интегральную характеристику:

$$R(\delta) = A \exp(-\alpha \delta^p).$$

Для определения постоянной A приведенные формулы нормируются. Удобно нормировать так, чтобы $\int_0^\infty g(\delta) d\delta = 1$. Нормировка приводит к выражению

$$A = p \alpha^{\frac{m+1}{p}} \left[\Gamma \left(\frac{m+1}{p} \right) \right]^{-1},$$

где $\left[\Gamma \left(\frac{m+1}{p} \right) \right]$ – гамма-функция.

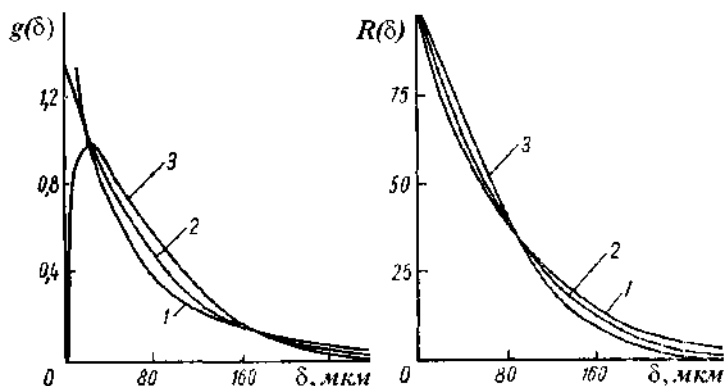


Рис. 2.4.5. Гранулометрическая характеристика дисперсных продуктов:
1 – $p=0,85$; 2 – $p=1$; 3 – $p=1,25$.

2.4.2. Критерии качества разделения дисперсных материалов

При сравнении работы классификаторов различных типов часто используют показатели эффективности их работы, которые показывают степень завершенности процесса и чистоту выделенного продукта. Требования к показателям эффективности:

- он должен быть количественным и монотонным, т. е. быть больше для такого процесса, у которого при прочих равных условиях достигается большая разница во фракционном составе обоих продуктов;
- для идеальной классификации, обеспечивающей полное разделение по фракциям, показатель эффективности должен составлять 100% или единицу;
- показатель должен быть равен нулю, если фракционный состав продуктов классификации не отличается от исходного материала, в этом случае разделение отсутствует. Показатель также должен быть равен нулю при попадании всего материала в один продукт (транспортирование);
- количественная оценка должна быть однозначна и не зависеть от того, по какому из продуктов ее определяют.

Важной и весьма информативной характеристикой классификатора служит кривая разделения $\varphi(\delta)$, называемая также функцией парциальных выносов. Кривая разделения показывает долю массы частиц с размером δ , выходящих в крупный или мелкий продукты. Типичная кривая разделения (для выноса в мелкий продукт) показана на рис. 2.4.6. Степень крутизны кривой разделения $\varphi(\delta)$ характеризуется отношением, которое называется эффективностью разделения:

$$\chi_{\varphi} = \delta_{25} / \delta_{75}, \quad (2.4.12)$$

где δ_{25} и δ_{75} – размеры частиц, выход которых в мелкий продукт составил соответственно 25 и 75%. Значения параметра χ_{φ} инвариантны по отношению к дисперсному составу исходного материала и поэтому могут служить для срав-

нения эффективности работы классификаторов. Обычно величину эффективности разделения χ_ϕ указывают одновременно с диапазоном размеров, для которого оно получено.

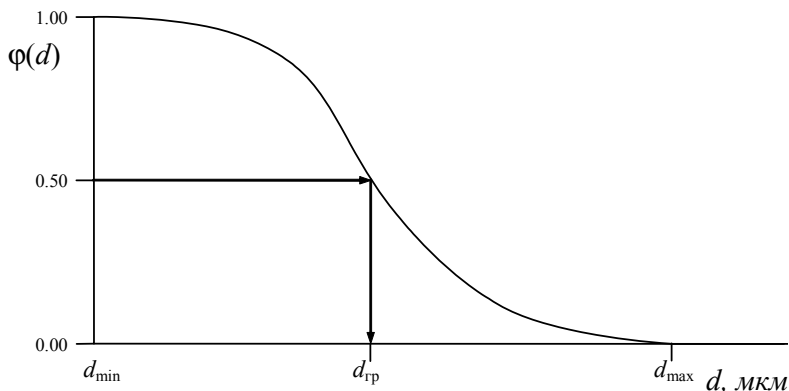


Рис. 2.4.6. Кривая разделения (парциальных выносов)

Размер $\delta_z = \delta_{50}$ частиц, которые разделились поровну между крупным и мелким продуктами, называется граничным размером разделения. Значение функции парциальных выносов при $\delta_z = \delta_{50}$ равно $\phi(\delta_z) = 0,5$. Величина δ_z определяет область применения классификатора.

Понятия граничного и равновесного размера имеют разный смысл, но связаны друг с другом и могут совпадать по значению.

Для мелких частиц, размер которых близок к нулю, значения функции парциальных выносов могут быть меньше единицы $\phi(\delta \rightarrow 0) < 1$, что объясняется их оседанием на более крупных частицах порошка, вместе с которыми они выходят в грубый продукт.

Величина δ_m является наибольшим размером частиц, которые классификатор пропускает в мелкий продукт. В некоторых случаях параметр δ_m может стать определяющим критерием оценки работы аппарата применительно к конкретному технологическому процессу.

Кривые разделения являются предметом изучения специалистов по классификации и разработчиков аппаратуры. Технологи же интересуют показатели процесса, связанные с изменением исходного гранулометрического состава материала при классификации. Поэтому наряду с характерными размерами δ_z и δ_m , а также функцией парциальных выносов $\phi(\delta)$ для оценки качества разделения и применимости классификатора в конкретном случае используется также ряд других показателей. Таких как КПД классификатора, степень извлечения, загрязнение продуктов частицами противоположных классов.

В описании классификации важную роль играет понятие идеального разделения, при котором частицы мельче граничного размера выносятся в тонкий,

а крупнее – в грубый продукт классификации. Кривая идеального разделения описывается ступенчатой функцией:

$$\varphi(\delta) = \begin{cases} 1 & \text{при } 0 \leq \delta < \delta_{\text{гр}}, \\ 0,5 & \text{при } \delta = \delta_{\text{гр}}, \\ 0 & \text{при } \delta > \delta_{\text{гр}}. \end{cases}$$

При идеальной классификации $\varphi(\delta = \delta_{\text{сп}}) = 0,5$. Частицы мельче граничного размера выносятся в тонкий продукт, а крупнее – в грубый продукт, при этом $\delta_{0,75} \rightarrow \delta_{0,25} \rightarrow \delta_{\text{сп}}$, а показатель эффективности $\chi_{\varphi} \rightarrow 1$.

Основным содержанием классификации является образование из исходного полидисперсного материала нескольких продуктов с более однородным гранулометрическим составом. При разделении на две части изображенная на графике (рис. 2.4.7) функция $D_{\text{м}}(\delta)$ полных проходов, характеризующая дисперсный состав мелкого продукта, расположена левее, а крупного – правее функции $D_{\text{к}}(\delta)$, характеризующей состав исходного продукта.

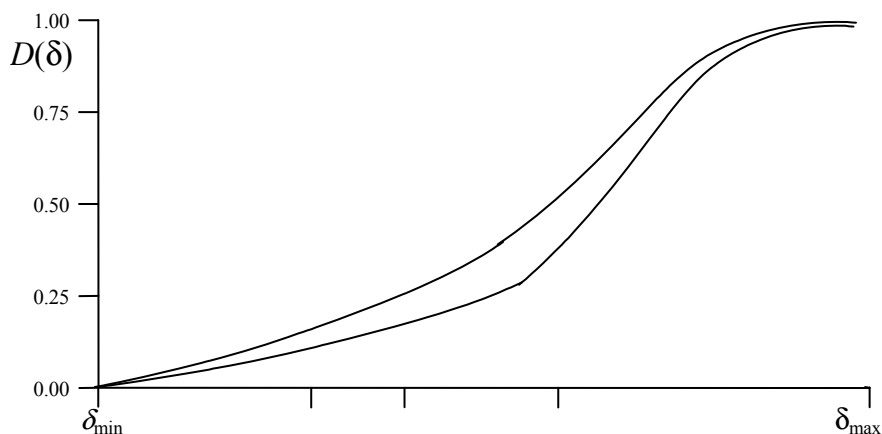


Рис. 2.4.7. Функция полных проходов

Функции полных проходов и полных остатков $D(\delta)$ и $R(\delta)$ порошков могут быть получены в результате анализа дисперсного состава и представлены в виде таблиц. Функции связаны соотношением $D(\delta) = 1 - R(\delta)$ и при изображении на одном графике дают симметричную картину относительно линии $D(\delta) = R(\delta) = 0,5$, поэтому выбор интегральной кривой не имеет значения для анализа классификации.

При решении различных теоретических и прикладных проблем пользоваться табличными значениями функций распределения неудобно. Целесообразно представить табличные данные $\delta - R(\delta)$ или $\delta - D(\delta)$ в виде аналитического выражения, которое должно быть по возможности теоретически обоснованным,

т. е. должно опираться на закономерности изучаемого явления, иметь, возможно, меньшее число параметров и должно быть применимо к возможно большему числу дисперсных систем, чтобы при переходе от одной системы к другой менялись бы только значения коэффициентов.

Плотности распределения $f_{ucx}(\delta)$ исходного материала, а также $f_m(\delta)$ и $f_k(\delta)$ продуктов разделения получаются дифференцированием соответствующих функций распределения.

Функции, аппроксимирующие кривые полных проходов (остатков), должны удовлетворять условиям $R(\delta_{\min}) = 0$, $R(0 \leq \delta \leq \delta_{\max}) = 1$.

Обычно величины δ_{\min} и δ_{\max} значительно отличаются от размеров, по которым ведется контроль дисперсного состава в большинстве технологических процессов. Кроме того, вопрос о корректности определения значений δ_{\min} и δ_{\max} остается открытым. На основании этого можно не требовать от аппроксимирующих функций $R(\delta)$ и $D(\delta)$ тождественного равенства нулю и единице при $\delta = \delta_{\min}$ и $\delta = \delta_{\max}$, а ограничиться только требованием стремления к единице $R(\delta_{\min}) \rightarrow 1$ и нулю $R(\delta_{\max}) \rightarrow 0$.

Связь между исходным составом порошка и составом продуктов разделения однозначно устанавливается кривой разделения. Зависимости для преобразования гранулометрического состава исходного материала при классификации могут быть получены из уравнений материального баланса частиц узкой фракции $(\delta, \delta + d\delta)$.

Предположим, что на вход классификатора подается дисперсный материал с производительностью G_{ucx} и гранулометрическим составом, определяемым плотностью распределения $f_{ucx}(\delta)$. Расход содержащейся в материале узкой фракции с размером частиц в пределах от δ до $\delta + d\delta$ составит $G_{ucx} f_{ucx}(\delta) d\delta$. Тогда выход этой фракции в мелкий продукт, согласно определению кривой разделения, составит $G_{ucx} f_{ucx}(\delta) \varphi(\delta) d\delta$. Всего в мелкий продукт попадет часть G_m поступающего материала, причем

$$G_m = G_{ucx} \int_{\delta_{\min}}^{\delta_{\max}} f_{ucx}(\delta) \varphi(\delta) d\delta.$$

Относительная величина

$$\bar{\varphi} = \frac{G_m}{G_{ucx}} = \int_{\delta_{\min}}^{\delta_{\max}} f_{ucx}(\delta) \varphi(\delta) d\delta$$

называется полным выходом (выносом) мелкого продукта из классификатора.

Обозначая плотность распределения частиц мелкого продукта $f_m(\delta)$, уравнение баланса массы фракции с размером частиц от δ до $\delta + d\delta$ примет вид

$$G_m f_m(\delta) d\delta = G_{ucx} f_{ucx}(\delta) \varphi(\delta) d\delta, \quad (2.4.13)$$

откуда получаем уравнение, связывающее кривую разделения с плотностью распределения частиц по размерам в мелком продукте:

$$f_m(\delta) = \frac{f_{исх}(\delta)\varphi(\delta)}{\bar{\varphi}}. \quad (2.4.14)$$

Аналогично рассчитывается выход и гранулометрический состав крупного продукта классификации:

$$G_k = G_{исх}(1 - \bar{\varphi}), \quad f_k(\delta) = \frac{f_{исх}(\delta)[1 - \varphi(\delta)]}{1 - \bar{\varphi}}. \quad (2.4.15)$$

Величины

$$n_{кр}(\delta) = f_{исх}(\delta) (1 - \varphi(\delta)), \quad n_m(\delta) = f_{исх}(\delta) \varphi(\delta)$$

называются плотностями распределения крупного и мелкого продуктов в частных остатках. Смысл кривых $n_{кр}(\delta)$, $n_m(\delta)$ и их связь с плотностью распределения $f_{исх}(\delta)$ исходного продукта становятся понятны при их нанесении на одном графике (см. рис. 2.4.8).

Функции полных проходов продуктов разделения могут быть получены путем интегрирования левой и правой частей уравнений (2.4.14), (2.4.15):

$$D_m(\delta) = \frac{1}{\bar{\varphi}} \cdot \int_{\delta_{\min}}^{\delta} f_{исх}(\delta) \varphi(\delta) d\delta, \quad D_k(\delta) = \frac{1}{1 - \bar{\varphi}} \cdot \int_{\delta_{\min}}^{\delta} f_{исх}(\delta) (1 - \varphi(\delta)) d\delta.$$

Для определения функций распределения частиц в мелком и крупном продуктах необходимо знать кривую разделения и выход продуктов.

Обратная задача заключается в определении кривой разделения классификатора по функциям полных проходов (остатков) исходного порошка и одного из продуктов разделения. После представления функций $R_m(\delta)$, $R_{исх}(\delta)$ или $D_m(\delta)$, $D_{исх}(\delta)$ в виде аналитических выражений кривая разделения после дифференцирования полученных выражений с учетом выхода мелкого продукта $\bar{\varphi}$ найдется из уравнения

$$\varphi(\delta) = \bar{\varphi} \cdot \frac{f_m(\delta)}{f_{исх}(\delta)}.$$

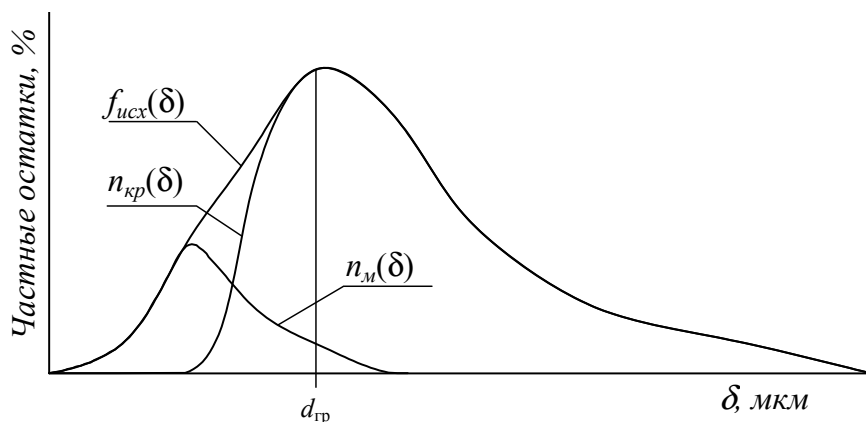


Рис. 2.4.8. Гранулометрическое распределение в частных остатках исходного материала и обоих продуктов разделения

При идеальной классификации преобразование гранулометрического состава описывается уравнениями:

$$\bar{\varphi} = \int_{\delta_{\min}}^{\delta_{zp}} f_{ucx}(\delta) d\delta = D_{ucx}(\delta_{zp}),$$

$$f_m(\delta) = \begin{cases} \frac{f_{ucx}(\delta)}{\varphi} & \text{при } \delta \leq \delta_{гр}, \\ 0 & \text{при } \delta > \delta_{гр}, \end{cases} \quad f_k(\delta) = \begin{cases} 0 & \text{при } \delta \leq \delta_{гр}, \\ \frac{f_{ucx}(\delta)}{1-\varphi} & \text{при } \delta > \delta_{гр}, \end{cases} \quad (2.4.16)$$

где $D_{ucx}(\delta_{гр})$ – полный проход через ячейку сита с размером, равным граничному размеру разделения в исходном продукте.

Обычно кривую разделения $\varphi(\delta)$ преобразуют к безразмерному аргументу $\tilde{\delta} = \delta/\delta_{гр}$, в результате чего появляется общая для всех кривых точка $\varphi(1) = 0,5$. Общий вид кривой при этом не меняется (рис. 2.4.6).

В некоторых случаях кривая разделения может быть аппроксимирована выражением

$$\varphi(\tilde{\delta}) = 1 - \exp \left[- \ln(2) (\tilde{\delta})^{ks} \right], \quad (2.4.17)$$

где ks – коэффициент, зависящий от конструкции аппарата. Если известен коэффициент эффективности разделения χ_φ аппарата, то для определения коэффициента ks можно воспользоваться формулой

$$ks = \ln \left[\frac{\ln(0,75)}{\ln(0,25)} \right] / \ln(\chi_\varphi).$$

Формула (2.4.17) справедлива для $\varphi(\tilde{\delta}) = 0,05 \div 0,7$. В случае малых значений $\tilde{\delta}$, когда $\varphi(\tilde{\delta}) > 0,7$, при ее использовании получают более высокие значения, чем наблюдаются в опытах.

Иногда вместо критерия эффективности χ_φ используют величину χ , определяемую по выражению

$$\chi = \left(\frac{d\varphi(\tilde{\delta})}{d\tilde{\delta}} \right)_{\tilde{\delta}=1},$$

являющемуся предельным переходом формулы (2.4.12) к бесконечно малому интервалу отклонения контрольных размеров от граничного. Геометрически показатель χ равен тангенсу угла наклона касательной к кривой $\varphi(\tilde{\delta})$ в точке $\tilde{\delta}=1$. При идеальной классификации $\chi \rightarrow \infty$ (касательная стремится к вертикали). Это не вполне удобно для сравнения аппаратов с высокой эффективностью.

При сравнении работы классификаторов различных типов кроме критериев χ_φ и χ используют и другие показатели эффективности их работы, которые показывают степень завершенности процесса и чистоту выделенного продукта.

Показатели эффективности должны давать однозначную численную оценку эффективности разделения. Для идеального процесса показатель эффективности должен быть равным 100% или единице. Показатель эффективности должен быть равным нулю для такого процесса, в котором состав продуктов классификации не отличается от состава исходного материала или если весь материал попадает в один из продуктов (транспортирование).

Показатели эффективности разделения условно можно разделить на две группы. Первая из них связана с численной оценкой степени отклонения реальной и идеальной кривых разделения. Критерии этой группы дают оценку совершенства того или иного аппарата без связи с параметрами разделяемого материала и технологическим процессом, в котором он установлен.

К первой группе относятся рассмотренные выше показатели эффективности χ_ϕ и χ , которые получили широкое распространение и наиболее часто приводятся в литературе. Для определения критерия χ_ϕ достаточно знать значения кривой разделения в двух характерных точках.

К первой группе критериев эффективности относятся также интегральные показатели кривой разделения. Например, для оценки разделительной способности аппарата может служить критерий полноты разделения:

$$\phi = 0,29 \frac{\delta_{cp}}{\int_{\delta_{cp}}^{\delta_{\max}} \varphi(\delta) d\delta - \int_{\delta_{\min}}^{\delta_{cp}} \varphi(\delta) d\delta + (\delta_{cp} - \delta_{\min})}.$$

Этот показатель, как и критерии χ_ϕ и χ , является независимым от основных технологических параметров процесса: способа разделения, состава исходного продукта, производительности аппарата и скорости потока воздуха, поэтому он применим для сравнения двух разных классификаторов. Недостаточная распространенность показателя до недавнего времени была связана с трудностями вычисления площадей под или над кривой разделения. Если кривая не подчинялась какой-либо функциональной закономерности, то использование данного показателя теряло смысл. В настоящее время в связи с широким использованием электронных вычислительных средств эти трудности ушли в прошлое.

Для оценки эффективности используются также показатели, характеризующие процесс площадью S ошибочной выдачи частиц (рис. 2.4.6). Она определяется как площадь между идеальной и реальной кривыми разделения:

$$S = S_1 + S_2 = \int_0^1 [1 - \varphi(\tilde{\delta})] d\tilde{\delta} + \int_1^{\delta_{\max}} \varphi(\tilde{\delta}) d\tilde{\delta}. \quad (2.4.18)$$

С приближением кривой разделения к идеальной кривой ее площадь стремится к нулю $S \rightarrow 0$.

Обычно технологические последствия от неидеального разделения в области мелких и крупных частиц носят различный характер. В формуле же (2.4.18) качество разделения по одну и по другую сторону от граничного размера учитывается совместно. Поэтому было предложено отдельно рассчитывать площади ошибочного выхода частиц в областях $\delta < \delta_{гр}$ и $\delta > \delta_{гр}$. Для этого используются

два показателя: коэффициент полезного действия классификатора η , численно равный площади S_3 :

$$\eta = S_3 = \int_0^1 \varphi(\tilde{\delta}) d\tilde{\delta}$$

и степень проскока ε :

$$\varepsilon = S_2 = \int_1^{\tilde{\delta}_{\max}} \varphi(\tilde{\delta}) d\tilde{\delta}.$$

Для идеального процесса $\eta \rightarrow 1$ и $\varepsilon \rightarrow 0$.

Кривые разделения являются предметом изучения специалистов по аппаратному оформлению процессов классификации. Технологи же интересуются показателями, связанными с тем, как изменится при разделении исходный гранулометрический состав материала и какими свойствами будут обладать продукты разделения. Эти аспекты процесса отражают критерии эффективности второй группы, оперирующие показателями гранулометрического состава материала до и после разделения.

Для расчета критериев второй группы исходный материал и продукты разделения анализируются относительно некоторого контрольного размера δ^* — чаще всего относительно размера ячейки контрольного сита.

Наиболее простыми критериями этой группы являются коэффициент полезного действия (КПД) по Розину–Раммлеру для выхода мелкого η_m и крупного η_k продуктов. Причем под коэффициентом полезного действия понимается доля каждой из двух фракций, вышедшая в «свой» продукт:

$$\eta_m = \frac{1 - R_m(\delta^*)}{1 - R_{ucx}(\delta^*)} \bar{\varphi} = \frac{D_m(\delta^*)}{D_{ucx}(\delta^*)} \bar{\varphi}, \quad \eta_k = \frac{D_k(\delta^*)}{D_{ucx}(\delta^*)} (1 - \bar{\varphi}).$$

Критерии η_m и η_k весьма наглядны, однако они не инвариантны по отношению к гранулометрическому составу исходного материала. Поэтому их использование оправдано при сравнительной оценке режимов работы аппаратов в отдельных технологических процессах, но они не дают возможности сравнить работу аппаратов безотносительно к конкретной технологической линии. При идеальной классификации по границе, равной контрольному размеру сита $\delta_{cp} = \delta^*$, оба критерия равны единице.

Обобщением критериев η_m и η_k являются критерии E_m и E_k Ханкока–Луйкена. Их строят как разность между выходом частиц фракции в целевой продукт и загрязнением другого продукта разделения. Например, для мелкого продукта:

$$E_m = \frac{1 - R_m(\delta^*)}{1 - R_{ucx}(\delta^*)} \cdot \bar{\varphi} - \frac{R_m(\delta^*)}{R_{ucx}(\delta^*)} = \frac{R_{ucx}(\delta^*) - R_m(\delta^*)}{R_{ucx}(\delta^*) \cdot [1 - R_{ucx}(\delta^*)]} \cdot \bar{\varphi}.$$

Аналогично для крупного продукта:

$$E_k = \frac{R_k(\delta^*) - R_{ucx}(\delta^*)}{R_{ucx}(\delta^*) \cdot [1 - R_{ucx}(\delta^*)]} \cdot (1 - \bar{\varphi}).$$

Критерии η_m , η_k и E_m , E_k нашли широкое распространение при оценке эффективности классификации и оптимизации технологических режимов процессов разделения в химической технологии и смежных отраслях промышленности. Их преимуществом является относительная простота определения, поскольку для этого необходим всего лишь рассев продуктов классификации на одном контрольном сите.

Классификация полидисперсного материала приводит к образованию двух продуктов с более однородным гранулометрическим составом. Повышается упорядоченность состояния механической системы частиц, что эквивалентно убыванию ее энтропии как меры беспорядка в системе. На этом основана третья группа критериев эффективности разделения. С таким подходом косвенно связан по физическому смыслу используемый в теплоэнергетике коэффициент повышения равномерности структуры порошка:

$$e = a_m / a_{исх},$$

где a_m и $a_{исх}$ – показатели степени в формуле распределения Розина–Раммлера (2.4.11) для мелкого и исходного порошка.

Любой из критериев второй группы легко и однозначно может быть получен при известном гранулометрическом составе исходного материала и кривой разделения с помощью формул (2.4.16). Восстановление же кривой разделения по любому из критериев эффективности невозможно. Поэтому преимущество всегда следует отдавать непосредственно кривым разделения, а критерии эффективности использовать только для оценки преимуществ или недостатков того или иного аппарата.

Подведем итоги. Значительное различие в размерах частиц дисперсных материалов осложняет математическое описание аэродинамики и тепло-, массопереноса в двухфазных потоках и применение полученных результатов для расчета технологического оборудования. В инженерной практике, полидисперсный материал заменяют фиктивным монодисперсным, что значительно упрощает анализ и описание различных явлений. Известно множество методов усреднения размеров частиц полидисперсного материала, каждый из которых имеет серьезные недостатки. Явления, наблюдаемые в полидисперсных системах частиц, невозможно интерпретировать с помощью некоторых зависимостей для монодисперсного материала даже в тех простейших случаях, когда представляют интерес только его интегральные характеристики, т. е. при усреднении размеров частиц по любому из существующих методов неизбежны серьезные ошибки.

2.5. ДИСПЕРСНЫЙ МАТЕРИАЛ КАК ОБЪЕКТ СУШКИ

Характеристика материалов как объекта сушки. При анализе свойств материалов, от которых зависит продолжительность сушки и выбор конкретного типа и типоразмера аппарата, надо учитывать свойства, характеризующие как диффузионное, так и термическое сопротивление материалов. Необходимо иметь представление о механизме переноса влаги, структуре пор материала, гидродинамических условиях процесса сушки.

В зависимости от того, в каком фазовом состоянии находится влага и по каким каналам (порам) она перемещается, можно рассматривать механизм ее переноса. Например, при жидкой фазе обычно принимают капиллярный механизм переноса, идущий под действием разности капиллярных потенциалов. Кроме этого механизма, рассматривают для жидкости так называемый механизм пленочного течения жидкости, протекающей на границе раздела фаз «твердое тело – жидкость». Этот механизм идет под действием градиента расклинивающего давления пленки. Если перенос влаги идет в газообразной форме, то возможно несколько механизмов переноса. В зависимости от размеров пор может произойти или нормальная диффузия по закону Фика, или вязкое течение, описываемое уравнением Пуазейля. Если радиус пор $r < 100$ нм, перенос влаги (пара) будет определяться молекулярным кнудсеновским режимом течения из-за того, что длина свободного пробега молекулы пара больше радиуса капилляра. При таком режиме перенос внутри капилляра не подчиняется закону Фика, а течение газа – уравнению Пуазейля.

При этом механизме переноса влаги преобладающим является соударение молекул со стенками капилляра, в то время как при обычной диффузии молекулы взаимодействуют друг с другом.

При нормальных условиях средняя длина свободного пробега молекулы воздуха равна 64 нм, а молекулы водяного пара – 42 нм. С увеличением температуры увеличивается длина свободного пробега. Количество газа J , протекающего в единицу времени, через единицу площади сечения капилляра при этом механизме переноса можно определить по формуле

$$J = \frac{8}{3} \sqrt{\frac{M}{4\pi RT}} r \frac{p_1 - p_2}{L},$$

где $p_1 - p_2$ – перепад давления на концах капилляра длиной L , R – универсальная газовая постоянная; T – абсолютная температура.

Совсем другой механизм возникает при размере пор, близких к радиусу молекулы удаленной влаги. Диффузия пара в ультрамикropорах более схожа с растворением газов в твердых телах и не похожа на обычную диффузию.

Особенность пористой структуры определяет то, насколько свободно перемещается влага к поверхности, а от этого зависит время сушки.

От чего же зависит пористая структура материала? Она зависит от суммарного объема пор, их размеров, удельной поверхности и кривой распределения пор по радиусам.

Суммарный объем пор единицы массы материала равен

$$V = \frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_{uc}},$$

где ρ – плотность материала, ρ_{uc} – истинная плотность материала.

Удельная поверхность материала определяется поверхностью стенок его пор и зависит от количества пор различных размеров, т. е. от распределения объема по радиусам. На процесс сушки влияет пористая структура материала. Влияние изменения пористости материала на условия, при которых происходит

перемещение влаги в порах, можно установить, рассматривая кривые распределения объема пор по радиусам. На механизм переноса влаги и тепла в материале влияет форма связи влаги с материалом. При переходе от одной формы связи к другой изменяется расположение остающейся влаги в порах.

Влагосодержание материала, соответствующее состоянию равновесия его с окружающей средой (теплоносителем), используется для оценки движущей силы сушки. Она оценивается по относительной влажности ϕ и температуре. Анализируя кривые изотерм сорбции – десорбции, можно оценить материал как объект сушки. По изотермам определяют, соответствует ли требуемая остаточная влажность равновесной и какова потенциальная возможность воздуха как сушильного агента. Чтобы выбрать тип аппарата, надо учитывать адгезионно-когезионные свойства материала, характеризующиеся коэффициентом K_{a-k} , который определяется как функция степени подвижности материала и угла внутреннего трения по соотношению

$$2/K_{a-k} = 1 + 2f^2 - 2f\sqrt{1+f},$$

где f – коэффициент внутреннего трения.

Для определения количества тепла, необходимого для сушки материала надо знать его тепловые характеристики – коэффициент теплопроводности λ , коэффициент температуропроводности α и теплоемкость c_p .

Формы связи влаги с материалом в зависимости от интенсивности энергии связи могут быть различны. Различают химическую, физико-химическую и физико-механическую форму связи. При сушке большинства химических продуктов удаляют влагу, связанную с материалом физико-механической или физико-химической формами связи, в частности адсорбционной. Это влага, связанная с веществом силами Ван-дер-Ваальса или при помощи водородных связей между гидроксильными группами на поверхности высушиваемого материала и молекулами удаляемой жидкости.

Центрами адсорбции могут быть разнообразные макро- и микродефекты, обладающие определенным силовым полем с адсорбционной способностью от некоторого максимума и до нуля. Это могут быть пустые щели кристаллической решетки, отдельные, вырвавшиеся из решетки частицы, чужеродные частицы. На них и происходит адсорбция паров различных жидкостей. Влага, связанная с адсорбцией по своим физическим свойствам отличается от обычной свободной воды. Ее пленки больше напоминают твердое тело, чем жидкость, а ее строгая ориентация больше напоминает ориентацию кристаллического вещества. Теплоемкость адсорбционной воды меньше теплоемкости свободной воды. По уравнению П. А. Ребиндера можно определить свободную энергию одного моля адсорбированного вещества: $E = -RT \lg \phi$. По этому уравнению рассчитаны энергии связи влаги с различными материалами.

Величины энергий связи влаги со всеми исследованными полимерными материалами не превышают тепловых эффектов при обычном взаимодействии Ван-дер-Ваальса. Энергия связи влаги с материалами зависит от внутренней пористой структуры полимера. Наиболее прочно влага связана с материалами,

имеющими ультрамикropористую структуру (катионитная и анионитная смолы, полиэтилен низкого давления, лавсан). Для удаления влаги из ультрамикropор необходимо затратить дополнительное количество энергии на преодоление сил отталкивания адсорбционных полей противоположных стенок пор.

Для определения видов связи влаги с материалом применяется кинетический метод термограмм сушки. Этот метод позволяет из одного опыта определить все виды связи влаги с данным материалом при сравнительно малой длительности опыта (несколько часов). При этом методе при конвективной сушке автоматически записывается термограмма, представляющая собой кривую изменения разности температур Δt тонкого слоя высушиваемого материала толщиной 1–2 мм и постоянной температуры воздуха в термостате в зависимости от времени τ . Одновременно на той же диаграммной ленте потенциометра записывается кривая сушки, характеризующая изменение среднего влагосодержания U высушиваемого материала с течением времени τ . На термограмме наблюдается ряд сингулярных точек, проектирование которых на кривую сушки позволяет найти влагосодержание, соответствующее определенному виду связи влаги с материалом в этих точках. Общий вид термограммы и кривая изотермической сушки представлены на рис. 2.5.1.

Граничные влагосодержания полимерных материалов при различных формах связи влаги с ними изменяются при повышении температуры.

Кроме адсорбционного, известен еще ряд методов определения пористой структуры материалов. Метод статистической обработки микрофотографий, метод ртутной порометрии, фильтрационный метод Б. В. Дерягина, метод электронной микроскопии, рентгеновский метод, метод капиллярной пропитки, метод радиоактивных индикаторов, разработанный М. П. Воларовичем, Н. В. Чураевым.

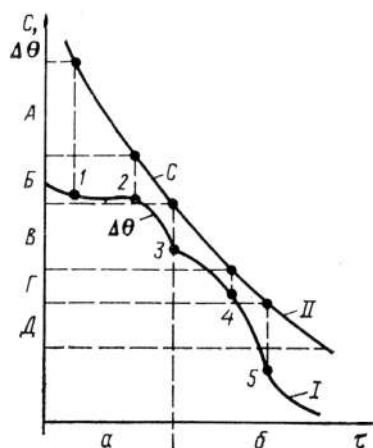


Рис. 2.5.1. Термограмма (I) и кривая сушки (II) капиллярно-пористых материалов (1–5 – сингулярные точки): а – область влажного состояния вещества; б – область гигроскопического состояния вещества; А–Д – интервалы существования различных форм связи влаги.

Метод статистической обработки микрофотографий весьма трудоемок и неприменим для исследований тонкопористых материалов, что объясняется ограниченной разрешающей способностью микроскопа.

Применение метода ртутной порометрии для тонкопористых материалов предполагает создание больших давлений (70 и 350 МПа для пор радиусом 10 и 2 нм соответственно). Это может привести к деформации образца.

Фильтрационные методы пригодны только для исследования тел со сквозными порами и непористых порошков.

Метод электронной микроскопии трудоемкий и, кроме того, неприменим для изучения внутренней структуры отдельных частиц. При нормальных условиях работы температура объекта в результате термического воздействия электронного пучка составляет 200–300°C, а иногда и значительно выше (при усилении электронной эмиссии), что недопустимо для ряда материалов.

Рентгеновский метод точен для монодисперсных систем, но значительно осложняется для полидисперсных, каковыми являются реальные материалы. При соизмеримых размерах пор и частиц получаются сходные дифракционные картины, что уменьшает истинность замеров. Кроме того, для рентгеновских установок требуется специальное помещение.

Метод радиоактивных индикаторов пригоден только для определения сквозных пор и требует специально оборудованного помещения.

Наиболее рациональным методом для исследования внутренней пористой структуры материалов как объектов сушки следует считать адсорбционный метод, основанный на обработке экспериментально полученных изотерм сорбции-десорбции. Метод дает возможность оценить не геометрические размеры реальных пор в материале, а особенности его строения как объекта сушки. Учитывает вид связи влаги с материалом и влияние измерения пористой структуры материала на механизм массопереноса. Методика проведения эксперимента достаточно близка к условиям сушки.

Анализ экспериментальных изотерм сорбции-десорбции и полученных на их основе структурных характеристик различных по свойствам материалов положен в основу классификации материалов как объектов сушки.

По коллоидно-физическим свойствам А. В. Лыков предложил разделить твердые влажные материалы на три группы: капиллярно-пористые, коллоидные и капиллярно-пористые коллоидные. Эта классификация влажных материалов не является строгой, однако имеет большое практическое значение при обобщении результатов исследования сушки различных материалов.

К капиллярно-пористым материалам относятся те, в которых жидкость в основном связана капиллярными силами. Эти тела при обезвоживании становятся хрупкими и в сухом виде могут быть превращены в порошок. Они мало сжимаются и впитывают любую смачивающую жидкость. Капиллярные силы в них значительно превышают силы тяжести. Это силикагель, керамика, гипс, поливинилхлорид.

К коллоидным телам относятся материалы, в которых преобладают адсорбционная и осмотическая связь влаги. Эти тела при высушивании значительно сжимаются, сохраняя свою эластичность, при увлажнении они впитывают наиболее близкие по полярности жидкости. Размеры молекул у этих тел сравнимы с размерами микрокапилляров. Это желатин, растворы полимеров.

К капиллярно-пористым коллоидным телам относятся материалы, в которых жидкость имеет различные формы связи, присущие как капиллярно-пористым, так и коллоидным телам. Для этих материалов характерны свойства первых двух видов, стенки их капилляров эластичны и при поглощении жидко-

сти набухают, а при высушивании дают усадку. Это глина, торф, пищевые продукты, полимерные материалы типа полибутилметакрилата или поливинилбутираля.

В качестве определяющей характеристики материала как объекта сушки принимается критический радиус пор, т. е. радиус наиболее тонких пор, из которых необходимо удалить влагу для достижения заданной конечной влажности. Термин «пора» понимается условно и может применяться как к действительно пористым материалам, так и к непористым. Значения критического радиуса пор рассчитывают по функции распределения пор по радиусам $f(R)$, получаемым из кривых гигроскопического равновесия.

При сушке влага удаляется из пористых материалов последовательно, сначала из крупных пор, а затем из более мелких, при этом существует однозначная взаимосвязь между влажностью материала и наибольшим радиусом пор, заполненных жидкостью, устанавливаемая следующим соотношением:

$$\varphi = \frac{\rho_{жс}}{\rho} \int_{R_{\min}}^R f(R) dR,$$

где R_{\min} – минимальный радиус поры для данного материала; R – текущий радиус на кривой распределения пор по размерам, соответствующий данной влажности материала φ .

Тепловые характеристики. Интенсификация сушки связана с повышением температуры сушильного агента. Температурный режим сушки назначается с учетом допускаемой температуры нагрева материала, т. е. температуры, при которой высушенный продукт получается стандартного качества, обладает наилучшими технологическими свойствами. Нагревать материал необходимо, учитывая также его свойства, такие как:

- теплостойкость, т. е. способность материала противостоять нагреву до температуры, при которой материал переходит в иное фазовое состояние (плавление, размягчение);
- термостойкость, т. е. способность материала противостоять нагреву до температуры, при которой происходит необратимое изменение качества (ухудшение физической или химической структуры);
- термостабильность – способность материала длительно выдерживать нагревание при определенной температуре без изменения свойств продукта, например без его разложения.

Материалы нетермостойкие и нетермостабильные в общем случае называют термолабильными.

Для выполнения тепловых расчетов сушильных аппаратов необходимо знать тепловые характеристики (теплоемкость, теплопроводность, температуропроводность высушиваемых материалов), от которых зависит выбор рационального метода и режима сушки материала.

Решение вопроса о возможности применения для сушки конкретного продукта аппаратов с активными гидродинамическими режимами зависит не только от диффузионного сопротивления, определяемого внутренней пористой

структурой материала, но и от его способности воспринимать необходимое для сушки количество тепла.

Тепловые характеристики необходимо знать также при обработке результатов экспериментальных исследований тепло- и массопереноса, определении механизма переноса тепла во влажном материале, анализе форм и видов связи влаги с материалом. Для нахождения тепловых коэффициентов влажных материалов следует отдать предпочтение методам, обеспечивающим кратковременность теплового воздействия и незначительный перепад температур в материале. При исследовании влажных дисперсных материалов как объектов сушки особый интерес представляет изучение зависимости тепловых коэффициентов от влагосодержания (рис. 2.5.2).

Зависимости $\alpha = f(U)$ и $\lambda = f(U)$ имеют вид S-образных кривых, на которых можно выделить три сингулярные точки:

I – точка соответствует минимуму при низком содержании влаги;

II – точка перегиба;

III – соответствуют максимуму на кривой $\alpha = f(U)$ и второй точке перегиба на кривой $\lambda = f(U)$.

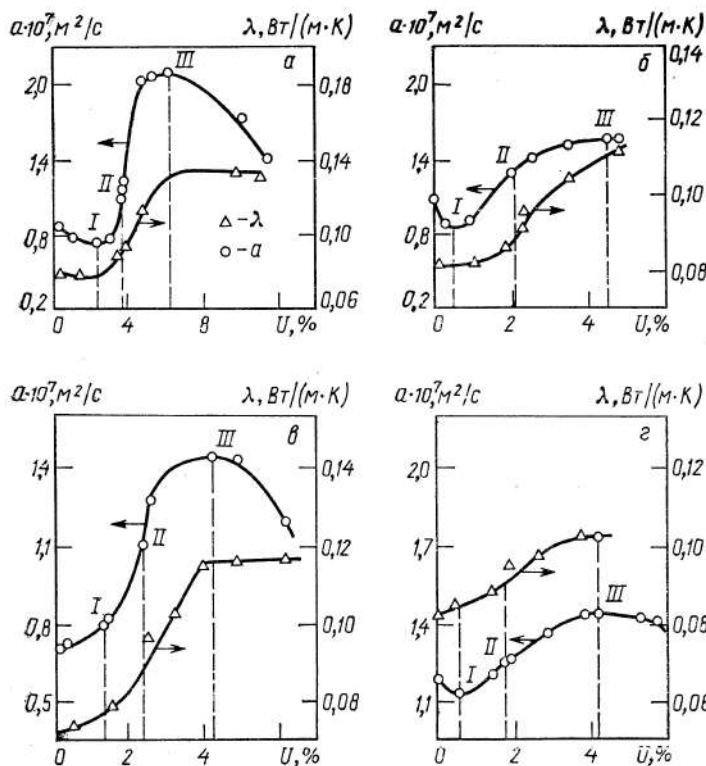


Рис. 2.5.2. Зависимости коэффициентов теплопроводности и температуропроводности полимерных материалов от влагосодержания:
a – сополимер стирола МС; **б** – полистирол ПС-СУ; **в** – полистирол ПСБ;
г – полистирол ПС-С.

Для объяснения такого характера зависимостей их сопоставляют с другими характеристическими кривыми, отражающими различные формы связи влаги с материалами.

На рис. 2.5.3, кроме тепловых характеристик λ и α , нанесены термограмма, кривая изотермической сушки и кривая зависимости от влагосодержания для полистирола ПСБ.

Сингулярные точки 2 и 3 на кривых тепло- и температуропроводности совпадают с достаточной степенью точности ($\pm 8\%$) с сингулярными точками на термограммах изотермической сушки и кривой зависимости дифференциальных теплот испарения от влагосодержания. Сингулярные точки 3 на термограмме и кривой дифференциальных теплот испарения соответствуют максимальному содержанию гигроскопической влаги 2 и 1 – границе поли- и мономолекулярной адсорбции. Сингулярная точка 1 на кривых теплофизических характеристик соответствует заполнению монослоя. Вид кривых $\lambda = f(U)$ и $\alpha = f(U)$ Л. В. Чудновский объясняет водными мостиками, влияющими на теплоперенос во влажных материалах с пористой структурой.

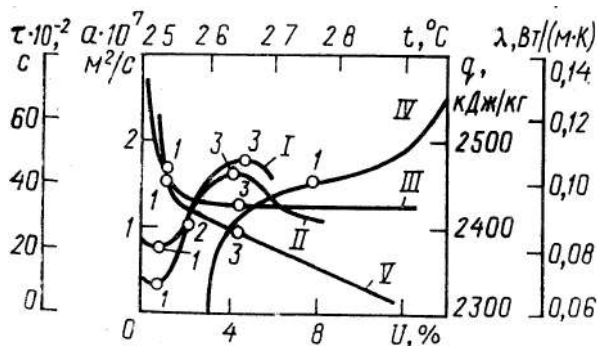


Рис. 2.5.3. Зависимости коэффициентов теплопроводности (I), температуропроводности (II), дифференциальных теплот испарения (III) от влагосодержания, а также (IV) и кривая изотермической сушки (V) полистирола ПСБ (1, 2, 3 – сингулярные точки).

Теплопроводность порошкообразного сухого материала имеет наименьшее значение, объясняющееся плохим тепловым контактом между отдельными частицами. С увеличением количества адсорбированной влаги коэффициент λ возрастает вплоть до влагосодержания, соответствующего количеству адсорбционно-связанной влаги. Это обусловлено появлением сначала тонкой, затем все более утолщающейся пленки жидкости, которая улучшает тепловой контакт. Пленка не только связывает (силой поверхностного натяжения) отдельные частицы, но и облегчает переход от одной частицы к другой. По мере увеличения количества адсорбированной влаги, начиная с абсолютно сухого состояния, коэффициент температуропроводности полимеров плавно уменьшается, при влагосодержании, соответствующей области мономолекулярной адсорбции, достигает наименьшего значения. Затем плавно возрастает до влагосодержания, соответствующего полимолекулярной адсорбции.

Уменьшение температуропроводности при низком влагосодержании связано с тем, что наиболее прочно связанная жидкость имеет существенно измененные свойства: малую подвижность молекул, большую плотность; увеличение теплоемкости материала с ростом влагосодержания.

При дальнейшем увеличении влагосодержания коэффициенты тепло- и температуропроводности резко возрастают, а при максимальном содержании гигроскопической влаги материалов принимают максимальные значения. Это обстоятельство следует увязать с появлением капиллярной конденсации влаги в микропорах, в результате которой происходит уменьшение объемной доли воздуха в порах материала. Поры по мере увеличения влагосодержания заполняются жидкостью, значения λ и α растут за счет уменьшения теплового сопротивления и поведения «мостиков» между отдельными частицами материала.

С увеличением влагосодержания полимерных материалов с максимальным содержанием гигроскопической влаги коэффициенты температуропроводности уменьшаются, а коэффициенты теплопроводности практически не изменяются.

Для определения теплопроводности влажной пористой частицы материала $\lambda_{вл.мат.}$ необходимо:

- знать эквивалентную теплопроводность $\lambda_{экв}$ насыпного слоя влажного материала с порозностью ϵ ;
- принять в качестве простейшей модели такого слоя модель, состоящую из чередующихся плоских слоев влажного твердого пористого скелета системы и газа;
- выбрать направление теплового потока, параллельное слоям:

$$\lambda_{вл.мат.} = \frac{\lambda_{экв}}{1-\epsilon} - 0,02 \frac{\epsilon}{1-\epsilon}.$$

Порозность слоя материала можно определить по соотношению

$$\epsilon = 1 - \frac{\rho_n}{\rho_{с.м}},$$

где ρ_n – плотность насыпного материала; $\rho_{с.м}$ – плотность сухого пористого материала.

$$\rho_{с.м} = \frac{1}{\frac{1}{\rho_{ис}} + \frac{U_{max}}{\rho_{ж}}},$$

где $\rho_{ис}$ – истинная плотность материала; $\rho_{ж}$ – плотность жидкости, удерживаемой материалом; U_{max} – максимальное содержание гигроскопической влаги.

Теплоемкость и температуропроводность влажного пористого материала можно определить из выражений

$$c_{вл} = c_{с.м}(1-U) + c_{ж}U, \quad a_{вл.м} = \frac{\lambda_{вл.м}}{\rho_{вл.м}}.$$

Тепловые характеристики дисперсных материалов существенно зависят не только от химического состояния и молекулярной структуры, но и от физико-механического состояния дисперсной системы: пористости частиц, порозности насыпного слоя, влагосодержания материала, форм связи влаги с материалом.

Классификация влажных материалов. Влажные материалы как объекты сушки характеризуют по технологическим свойствам (допустимая температура нагрева, токсичность, взрывоопасность), по агрессивному состоянию (твердые, пастообразные, суспензии, растворы) и по химическому составу.

Но этого мало для выбора рационального типа сушильного агрегата. НИИХИММАШем предложена классификация, в основу которой положены следующие характеристические числа: Bi, Bi', Fo, Fo' , которые обуславливают тип теплофизической задачи. По значению числа Lu материалы разбиты на три типа: I – $Lu = 0,1 - 0,5$; II – $Lu = 0,02 - 0,1$; III – $Lu = 0,005 - 0,02$, которые, в свою очередь, по значениям чисел Bi, Bi', Fo, Fo' подразделены на 5 классов. Для каждого класса продуктов рекомендованы соответствующие сушильные аппараты.

Критерий Bi характеризует относительное влияние внешнего и внутреннего диффузионного сопротивления на кинетику процесса. При $Bi < 0,1$ внутреннее диффузионное сопротивление пренебрежимо мало по сравнению с внешним сопротивлением и скорость сушки лимитируется скоростью массоотдачи (внешняя задача). Наоборот, при $Bi > 100$ скорость сушки полностью определяется сопротивлением проводимости массы внутри материала, и влажность материала у поверхности быстро принимает равновесное значение (внутренняя задача). Интервалу $Bi = 0,1 - 100$ соответствует переходная область, в которой на кинетику сушки влияет как внешнее, так и внутреннее диффузионное сопротивление:

$$Bi = \frac{\beta R}{D \rho_V A_p},$$

где β – кинетический коэффициент массоотдачи; D – кинетический коэффициент массопроводности; ρ_V – объемная плотность материала, $l = A_p c_p$ – тангенс угла наклона линии равновесия.

Межфазный тепло- и массоперенос можно разделять на внешний, внутренний и балансовый. Внешнюю и внутреннюю задачи разграничивают по значениям числа Bi (теплового или диффузионного), получаемым из краевых условий. При $Bi > 20$ задача считается внутренней, при $Bi < 0,1$ – внешней. Недостаток классификации материалов по типу теплофизических задач заключается в следующем. Принятые как определяющие, параметры (температуропроводность и коэффициенты термодиффузии, коэффициент теплоотдачи и коэффициент массоотдачи) зависят не только от природы материала, но и от конкретного метода и режима его обработки.

Наиболее рациональна классификация, в основу которой положены факторы, определяемые природой и свойствами материала, влияющие на кинетику тепло- и массопереноса при сушке и не зависящие (в первом приближении) от параметров процесса. П. А. Ребиндер предложил классификацию форм связи влаги с материалом и детализировал ее применительно к химическим материалам. Дисперсные материалы разделены на 4 класса.

К *первому классу* относятся материалы, в основном сыпучие, подобные капиллярно-пористым телам и удерживающие жидкость в неопределенных соотношениях физико-механической формы связи.

Продукты *второго класса* удерживают еще адсорбционно-связанную жидкость. Этот класс подразделяется на две подгруппы. К первой относятся материалы, удерживающие жидкость силами физической (ван-дер-ваальсовой) адсорбции с энергией связи 4,2–4,8 кДж/мм, удаление которой при сушке может происходить при температуре материала 60–80°C.

Ко второй подгруппе относят материалы, удерживающие жидкость обратной активированной адсорбции с энергией связи 42–84 кДж/мм, удаление которой может происходить только при температуре материала не ниже 200–300°C.

Третий класс – это продукты, подобные капиллярно-пористым телам, удерживающим, кроме перечисленных форм связанной жидкости, также осмотические и структурно-связанные жидкости.

Это и пастообразные продукты (в том числе и тиксотропные пасты), в растворы, сыпучие и полусыпучие.

К *четвертому классу* относятся продукты, содержащие, кроме перечисленных форм, химически связанную жидкость.

Эта классификация отражает специфику сушки материалов с различными формами связи, но еще не позволяет определить целесообразный тип аппарата и хотя бы ориентировочно оценить время сушки.

Наиболее полно отражают свойства объектов сушки характеристики, определяющие внутреннюю структуру материала и его тепловые характеристики, позволяющие оценить диффузионное сопротивление движению влаги к поверхности и термическое сопротивление материала. Это позволяет учесть в первом приближении особенности кинетики сушки и оценить ее продолжительность.

Классификация влажных дисперсных материалов предусматривает разделение дисперсных материалов на четыре группы в порядке уменьшения критического диаметра пор, что связано с усложнением внутренней пористой структуры дисперсного материала и увеличением диффузионного сопротивления движению влаги к поверхности материала и, следовательно, с возрастанием времени сушки. Материалы в данной классификации делятся еще на разряды по мере возрастания их адгезионно-когезионных свойств, затрудняющих получение устойчивых гидродинамических режимов сушки. В классификационную таблицу вводят условное обозначение материала в виде шифра из трех цифр, первая из которых обозначает группу материала, вторая – подгруппу, третья – разряд.

Первая группа – непористые и широкопористые материалы (диаметр пор выше 10 нм). Удаляемая у них влага – свободная и влага микрокапилляров. Продолжительность сушки материалов этой группы не превышает 0,5–3,0 с. Пример материалов первой группы – сополимер стирола с дивинилбензолом.

Ко второй группе относятся однородные и неоднородно пористые материалы с критическим диаметром пор до 6 нм. Удаляемая влага – свободная, влага макро- и микрокапилляров из переходных пор диаметром до 6 нм, а также адсорбционно-связанная влага с поверхности частиц и со стенок переходных пор. Для преодоления сил адсорбции и отрыва молекул удаляемой жидкости от поверхности необходимо к материалу подвести дополнительную энергию. Время сушки материалов второй группы составляет от 3 до 40 с. К таким материалам относятся суспензионный поливинилхлорид и сополимер стирола МС.

К третьей группе относятся материалы с критическим диаметром пор от 6 до 2 нм. Они содержат все виды влаги (капиллярную, адсорбционно-связанную). Время сушки этих материалов от 2 до 20 мин. Эти материалы сушат теплом, необходимым для его прогрева и испарения связанной влаги.

Четвертую группу составляют материалы с ультрамикропористой структурой. Поры у этих материалов соизмеримы с размерами молекул удаленной жидкости. У них удаляется прочносвязанная влага в процессе глубокой сушки до влагосодержания 0,2–0,1% и ниже. Время сушки составляет десятки минут, а иногда даже несколько часов. Это зависит от эквивалентного диаметра частиц, так как силы отталкивания в порах соизмеримы с размерами молекул удаляемой жидкости, что значительно затрудняет прохождение молекул к поверхности частиц.

В этом случае требуется энергия, достаточная для преодоления сил отталкивания, быстро возвращающих по мере уменьшения радиусов микропор. Эта энергия иногда может превышать теплоту адсорбции. В эту группу входят материалы с диаметром частиц от 1 до 2 мм. Это катионитная смола КУ-2-8 ЧС, анионитная смола ЭДЭ-10П, гранулированные лавсан и капрон.

Подведем итоги. На основе производственного опыта были даны рекомендации по аппаратурному оформлению сушки для каждой группы квалификационной таблицы. Рекомендуемые типовые аппараты обеспечивают необходимое время сушки, позволяют подвести при сушке тепло, достаточное для разрушения соответствующих форм связи и сообщения молекулам удаляемой жидкости энергии на преодоление сил отталкивания.

2.6. МЕТОДЫ УСРЕДНЕНИЯ СВОЙСТВ ДИСПЕРСНЫХ МАТЕРИАЛОВ

2.6.1. Среднее значение признака

Усреднение – это процесс приведения дисперсного материала к единому (общему) значению признака, близкому к так называемой средней его величине. Но при этом возникает вопрос: что понимать под средним значением признака в дисперсном материале? Вопрос на первый взгляд тривиален. Однако имеются различные типы и различные значения средней величины.

Закон распределения имеет различные статистические параметры, которые характеризуют центр распределения. Из них наиболее действенной оценкой среднего значения признака является математическое ожидание случайной величины M_a . На практике точное значение его неизвестно. Возникает необходимость судить о нем по приближенной характеристике $\langle a \rangle$, получаемой по имеющимся выборочным значениям случайной величины a_i :

$$\langle a \rangle = f(a_1, a_2, \dots, a_i, \dots, a_n). \quad (2.6.1)$$

Выборочные средние значения могут быть различными в зависимости от вида функции (2.6.1) или характера определяющей их процедуры (правила). Наиболее строго средняя выборка как оценка математического ожидания находится в соответствии с принципом максимального правдоподобия. По этому принци-

пу найденная средняя величина должна с наибольшей вероятностью соответствовать истинной (генеральной) средней для всей возможной совокупности.

Не всегда среднее значение характеризует случайную величину как параметр статистической совокупности. В технологических расчетах нередко возникает необходимость определить среднее из заданного набора неслучайных чисел. Найденная в этом случае средняя величина будет характеризовать среднюю величину «смеси» этих чисел.

Средняя нескольких величин является результатом действий, выполненных по определенному правилу над данными величинами. Она представляет собой одну из данных величин либо какую-нибудь новую величину, промежуточную между наименьшей и наибольшей из данных величин. Средних величин, как следствие использования «правил», может быть несколько. Каждый тип средней соответствует своему «правилу». Если «правило» выражено при помощи математической формулы, которая указывает, какие действия должны быть проделаны над членами статистической совокупности, то такие типы средних будем именовать *аналитическими*. *Неаналитические* (их еще называют *позиционные*) средние – это те, которые зависят от занимаемого ими места (позиции) в ряду чисел. Например, средняя арифметическая величина является аналитической средней, а медиана, которая делит всю совокупность на две равные части, будет являться позиционной средней.

Многообразие средних выдвигает задачу их классификации и определения места использования. Средняя арифметическая, гармоническая, геометрическая, степенная являются особыми формами начальных моментов различного порядка. Так, средняя гармоническая является начальным моментом минус первого порядка, средняя геометрическая – нулевого порядка. С помощью формул начальных моментов можно получить различные средние величины. Статистическая средняя величина отображает объективно существующий уровень, к которому стремятся получаемые значения случайных величин. Задача состоит в том, чтобы определить, какая из средних величин определяет этот уровень.

Для любой статистической совокупности чисел характерно детерминированное свойство, которое не изменяется при любых возможных вариантах значений a_i . Средняя величина определяется как значение $\langle a \rangle$ переменной a_i , которое при подстановке $a_i = \langle a \rangle$ не изменяет детерминированное свойство совокупности. Из этого определения следует, что детерминированным свойством a является функция $f(a)$, и искомая средняя согласно этому детерминированному свойству находится с помощью равенства

$$f(\langle a \rangle, \langle a \rangle, \dots, \langle a \rangle) = f(a_1, a_2, \dots, a_n).$$

Детерминированным свойством средней арифметической является сумма значений a_i :

$$f(a_1, a_2, \dots, a_n) = \sum c_i a_i = \langle a \rangle \sum_{i=1}^n c_i.$$

Детерминированным свойством средней гармонической является

$$\sum \frac{c_i}{a_i} = \frac{1}{\langle a \rangle} \sum_{i=1}^n c_i,$$

где c_i – весовой коэффициент.

Детерминированным свойством степенной средней является

$$\sum c_i a_i^k = \langle a^k \rangle \sum_{i=1}^n c_i.$$

Детерминированным свойством средней геометрической является

$$\sum c_i \lg a_i = \langle \lg a \rangle \sum_{i=1}^n c_i.$$

Выбор формулы средней не производится механически, он осуществляется путем анализа основных свойств изучаемого процесса и определения детерминированных свойств совокупности чисел, его характеризующих.

На практике в технологических расчетах каждая из аналитических средних является показателем, пригодным для оценки только некоторой группы признаков. Применение средней из одной группы для другой группы теряет физический смысл и является неправильным. Соответствие между типом средней величины и анализируемого признака определяется математическим видом уравнения, по которому рассчитывается среднее значение признака в смеси. Например, среднее содержание твердой фазы ϕ в смеси потоков суспензии определяется зависимостью

$$\frac{1}{\langle \phi \rangle} = \sum \frac{c_i}{\phi_i}.$$

Здесь величина $\langle \phi \rangle$ есть средняя гармоническая взвешенная, так как приведенная формула для нее соответствует формуле этого типа средней. Определение для этого признака (содержание твердого) средней арифметической величины по правилу $\langle \phi \rangle = \sum c_i \phi_i$ будет неверным, так же как, например, неверно определение среднего гармонического содержания ключевого компонента (металла) в смеси.

Подведем итоги. При выборе типа средней (если такой выбор допустим) важно учесть, какие ее свойства полезны при оценке изучаемого процесса. Например, если важно выбрать такую величину, чтобы сумма квадратов отклонений от нее была минимальна, то целесообразно в качестве средней взять среднюю арифметическую. Если важно, чтобы сумма абсолютных отклонений от средней величины была минимальной, то тогда за среднюю величину следует принять медиану. К моде прибегают, когда хотят использовать наиболее характерный параметр данной совокупности. Следует также руководствоваться удобством и простотой расчета, надежностью исходных данных. Например, случайные ошибки в замерах a_i могут не сказаться на моде, если они не искажают частоту величины a , определяющей модальное значение.

Рассматриваемые ниже типы средних, их определения и свойства.

2.6.2. Средние аналитические значения признака

Средней арифметической взвешенной совокупности чисел $a_1, a_2, \dots, a_i, \dots, a_n$, заданной с весами $g_1, g_2, \dots, g_i, \dots, g_n$, будет величина

$$\langle a_1 \rangle = \frac{\sum_{i=1}^n g_i a_i}{\sum_{i=1}^n a_i} = \sum_{i=1}^n c_i a_i, \quad (2.6.2)$$

где $c_i = g_i / \sum g_i$ – относительный вес; $\sum_{i=1}^n c_i = 1$.

Для равных весов средняя арифметическая взвешенная равна простой средней арифметической $\langle a_1 \rangle = 1/n \sum a_i$. Математическое ожидание есть предел $\langle a \rangle \rightarrow M_a$ при $n \rightarrow \infty$, поэтому формула (2.6.2) может быть распространена на всю генеральную совокупность значений a_i , выраженную в виде плотности (частоты) распределения $P(a)$ в пределах от $a_1 = a_{\min}$ до $a_2 = a_{\max}$:

$$\langle a \rangle = \int_{a_1}^{a_2} a P(a) da.$$

По физической сути средняя арифметическая ряда членов $a_1, a_2, \dots, a_i, \dots, a_n$ с весами $g_1, g_2, \dots, g_i, \dots, g_n$ является центром тяжести оси a , к которой в точках a_i приложена сила тяжести c_i . Для арифметической средней сумма отклонений отдельных членов ряда (с учетом веса) от ее величин равна нулю, т. е. $\sum (c_i a_i - \langle a \rangle) = 0$. Сумма квадратов отклонений членов ряда от средней арифметической меньше суммы квадратов их отклонений от любой другой величины.

Нахождение средней арифметической распределения облегчается применением формулы

$$\langle a_1 \rangle = A + \frac{\sum_{i=1}^n g_i (a_i - A)}{\sum_{i=1}^n a_i} = A + \sum_{i=1}^n c_i (a_i - A),$$

где A – произвольно выбранное число, относительно которого центрируют остальные члены.

Средняя геометрическая взвешенная определяется по формуле

$$\langle a_2 \rangle = \sqrt[r]{a_1^{g_1} a_2^{g_2} \dots a_n^{g_n}}, \quad r = \sum_{i=1}^n g_i. \quad (2.6.3)$$

Для относительных весов c_i эта формула имеет вид

$$\langle a_2 \rangle = a_1^{c_1} a_2^{c_2} \dots a_n^{c_n} = \prod_{i=1}^n a_i^{c_i}.$$

При $c_i = \text{const}$ средняя равна

$$\langle a_2 \rangle = \sqrt[r]{a_1 a_2 \dots a_n}, \quad r = n.$$

Расчет средней геометрической величины легче осуществить с помощью логарифмов. В этом случае

$$\lg \langle a \rangle = \frac{g_1 \lg a_1 + g_2 \lg a_2 + \dots + g_n \lg a_n}{g_1 + g_2 + \dots + g_n} = \sum_{i=1}^n c_i \lg a_i. \quad (2.6.4)$$

Для непрерывно меняющейся величины a , заданной плотностью распределения $P(a)$, средняя геометрическая величина определяется уравнением

$$\lg \langle a \rangle = \int_{a_1}^{a_2} \lg a P(a) da.$$

Логарифм средней геометрической является средней арифметической логарифмов членов ряда. Поэтому для логарифмов членов ряда и логарифмов средней геометрической величины характерны те же свойства, которые указаны для средней арифметической величины.

Средняя геометрическая и средняя арифметическая величины связаны между собой ориентировочной формулой

$$\langle a_2 \rangle \approx \langle a_1 \rangle - \frac{\sigma_a^2}{2\langle a_1 \rangle}.$$

Средняя геометрическая не является, строго говоря, оценкой неизвестного математического ожидания, так как в пределе при увеличении числа n она стремится к величине, меньшей математического ожидания. Однако она часто применяется в технических расчетах. В частности, используется для оценки средних темпов изменения величины какого-либо признака, среднего диаметра дисперсных частиц и др.

Средняя гармоническая взвешенная – это величина, обратная арифметической. К ней приводят вычисления средней плотности смеси, влажности смеси и др. Средняя гармоническая используется, когда суммируют обратные величины. Средняя гармоническая взвешенная дискретных величин находится по формуле

$$\langle a_3 \rangle = \frac{g_1 + g_2 + \dots + g_n}{\frac{g_1}{a_1} + \frac{g_2}{a_2} + \dots + \frac{g_n}{a_n}} = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{c_i}{a_i}} \quad (2.6.5)$$

при

$$c_i = \text{const}, \quad \langle a_3 \rangle = \frac{1}{\sum \frac{1}{a_i}}.$$

Для непрерывного распределения

$$\langle a_3 \rangle = \frac{1}{\int_{a_1}^{a_2} \frac{1}{a} P(a) da}.$$

Приведенные формулы для гармонической средней применимы при условии $a_i \neq 0$, в противном случае выражение (2.6.5) теряет смысл. Необходимо также,

чтобы вся совокупность a была положительна или отрицательна. Отрицательные значения a_i может давать процедура центрирования замеренных величин $a_i - A$ относительно центра A . Если часть a_i положительна, а часть отрицательна, то необходимо, чтобы сумма обратных величин не была равна 0, т. е. $\sum g_i / a_i \neq 0$.

Поскольку величина $1/\langle a_3 \rangle$, обратная средней гармонической, равна средней арифметической обратных членов ряда $1/a_i$, то для этих обратных величин применимы свойства, характерные для арифметической средней. Эти средние связаны между собой ориентировочной зависимостью

$$\langle a_3 \rangle \approx \langle a_1 \rangle - \frac{\sigma_{a_1}^2}{\langle a_1 \rangle},$$

где $\sigma_{a_1}^2$ — дисперсия членов рассматриваемой совокупности относительно средней арифметической.

Средняя степенная взвешенная равна корню m -й степени средней арифметической, рассчитанной для m степеней совокупности a_i ($m \neq 0$):

$$\langle a_4^m \rangle = \sqrt[m]{\frac{g_1 a_1^m + g_2 a_2^m + \dots + g_n a_n^m}{\sum g_i}} = \left(\sum_{i=1}^n c_i a_i^m \right)^{1/m}. \quad (2.6.6)$$

Для непрерывных распределений средняя степенная величина определяется

$$\langle a_4^m \rangle = \sqrt[m]{\int_{a_1}^{a_2} a^m P(a) da}, \quad m \neq 0.$$

Если $m = 2$, средняя степенная соответствует средней квадратичной величины, она равна корню квадратному из средней арифметической квадратов членов:

$$\langle a_4^2 \rangle = \sqrt{\frac{\sum g_i a_i^2}{\sum g_i}} = \sqrt{\sum_{i=1}^n c_i a_i^2}.$$

Если все a_i неотрицательные или неположительные, то $\langle a_4^2 \rangle$ имеет единственное значение, соответствующее знаку a_i . Если же совокупность содержит положительное и отрицательные значения a_i , то среднее квадратичное может иметь либо одно, либо два значения $\langle a_4^2 \rangle$. Во втором случае за среднее квадратичное взвешенное принимают абсолютное значение корня со знаком, соответствующим арифметической средней. Сказанное в полной мере относится и к биквадратичной средней, у которой $m = 4$.

Когда $m = 3$, средняя степенная взвешенная величина соответствует кубической взвешенной и представляет собой корень кубический из средней арифметической кубов членов совокупности:

$$\langle a_4^3 \rangle = \sqrt[3]{\frac{\sum g_i a_i^3}{\sum g_i}} = \sqrt[3]{\sum_{i=1}^n c_i a_i^3}.$$

Средняя кубическая всегда дает одно действительное значение независимо от характера членов совокупности.

Из (2.6.6) следует также, что при $m=1$ средняя степенная величина соответствует средней арифметической, а при $m=-1$ соответствует средней гармонической. Можно показать также, что когда m стремится к 0, средняя степенная величина приближается к средней гармонической. Средняя степенная величина является обобщенной средней, а формулы (2.6.2) и (2.6.5) – частным случаем выражения (2.6.6).

С увеличением m средняя степенная величина возрастает. Поэтому средняя квадратичная величина больше средней арифметической величины, но меньше средней кубической. Между рассмотренными средними величинами существует соотношение $\langle a_3 \rangle \leq \langle a_2 \rangle \leq \langle a_1 \rangle \leq \langle a_4^2 \rangle \leq \langle a_4^3 \rangle$. Средняя степенная связана приближенной формулой со средней арифметической

$$\langle a_n^{(m)} \rangle \approx \langle a_1 \rangle + \frac{(m-1)\sigma_{a_1}^2}{2\langle a_1 \rangle}.$$

Когда m равняется 0, 1, 2, эта формула отражает связь средней степенной величины соответственно со средней гармонической, геометрической и квадратичной. При условии нормального распределения величины $\ln a$ существует более точный переход от степенной средней к геометрической и арифметической:

$$\langle a_4^{(m)} \rangle = \langle a_2 \rangle \exp(m\sigma_{\ln a}^2), \quad \langle a_1 \rangle = \langle a_4^{(m)} \rangle \exp\left[\frac{1}{2}\sigma_{\ln a}^2(1-m)\right],$$

где $\sigma_{\ln a}^2$ – дисперсия натуральных логарифмов величины a относительно средней арифметической $\langle y \rangle = \langle \ln a \rangle$.

Средняя квадратичная является средней геометрической между средней арифметической и средней антигармонической $\langle a_5 \rangle$:

$$\langle a_4^{(2)} \rangle = \sqrt{\langle a_3 \rangle \langle a_5^{(2)} \rangle}.$$

Квадрат средней квадратичной величины равен сумме квадратов средней арифметической и дисперсии:

$$(\langle a_4^{(2)} \rangle)^2 = \langle a_1^2 \rangle + \sigma_a^2.$$

Средняя антигармоническая взвешенная равна сумме квадратов членов совокупности, деленной на сумму самих членов с учетом весов:

$$\langle a_5^{(2)} \rangle = \frac{g_1 a_1^2 + g_2 a_2^2 + \dots + g_n a_n^2}{g_1 a_1 + g_2 a_2 + \dots + g_n a_n} = \frac{\sum_{i=1}^n c_i a_i^2}{\sum_{i=1}^n c_i a_i}. \quad (2.6.7)$$

Для непрерывных распределений

$$\langle a_5^{(2)} \rangle = \int_{a_1}^{a_2} a^2 P(a) da.$$

Формула имеет смысл, если сумма произведений $\sum g_i a_i \neq 0$. Она применима к совокупности, состоящей из одних положительных или одних отрицательных членов. Антигармоническая средняя является частным случаем средней степенной арифметической:

$$\langle a_5^{(m)} \rangle = \frac{g_1 a_1^m + g_2 a_2^m + \dots + g_n a_n^m}{g_1 a_1^{m-1} + g_2 a_2^{m-1} + \dots + g_n a_n^{m-1}} = \frac{\sum_{i=1}^n c_i a_i^m}{\sum_{i=1}^n c_i a_i^{m-1}}.$$

При $m=1$ последняя формула переходит в формулу средней арифметической, а при $m=0$ или $m=2$ получается соответственно средняя гармоническая и средняя антигармоническая. Средняя антигармоническая величина зависит от средней арифметической и связана с ней соотношением

$$\langle a_n^{(2)} \rangle \approx \langle a_1 \rangle + \frac{\sigma_{a_1}^2}{\langle a_1 \rangle}.$$

Средняя антигармоническая всегда больше средней квадратичной или равна ей.

Средней экспоненциальной взвешенной называется величина $\langle a_6^{(k)} \rangle = b$, рассчитываемая по формуле

$$k^b = \frac{g_1 k^{a_1} + g_2 k^{a_2} + \dots + g_n k^{a_n}}{g_1 + g_2 + \dots + g_n} = \sum_{i=1}^n c_i k^{a_i} \quad (2.6.8)$$

или

$$\langle a_6^{(k)} \rangle = \frac{\lg \left(\sum_{i=1}^n g_i k^{a_i} \right) - \lg \left(\sum_{i=1}^n g_i \right)}{\lg k} = \frac{\lg \left(\sum_{i=1}^n c_i k^{a_i} \right)}{\lg k}.$$

Для одной и той же совокупности a_i в общем случае может быть столько средних экспоненциальных значений, сколько значений может иметь k . Величина k должна отвечать условиям $k > 0$ и $k \neq 1$. Часто параметр k равен основанию натурального логарифма e . Строго говоря, формула (2.6.8) дает значение средней экспоненциальной арифметической. Могут быть средние экспоненциальные геометрические, гармонические и т. д. в зависимости от того, какие действия совершаются над величиной k^{a_i} .

При увеличении k $\langle a_6^{(k)} \rangle$ также возрастает. Когда k стремится к 1, средняя экспоненциальная приближается к средней арифметической, а когда k стремится к 0 или ∞ , средняя экспоненциальная стремится соответственно к минимальному и максимальному члену ряда: $\langle a_6^{(k)} \rangle \rightarrow a_{\min}$ $\langle a_6^{(k)} \rangle \rightarrow a_{\max}$.

Связь средней экспоненциальной $\langle a_6^{(k)} \rangle = b$ со средней арифметической $\langle a_1 \rangle$, средней квадратичной $\langle a_4^{(2)} \rangle$, средней кубической $\langle a_4^{(3)} \rangle$, средней степенной $\langle a_4^{(m)} \rangle$ выражается формулой

$$k^b = 1 + \langle a_1 \rangle \lg k + \frac{\langle a_4^{(2)} \rangle (\lg k)^2}{2} + \frac{\langle a_4^{(3)} \rangle (\lg k)^3}{2^3} + \dots + \frac{\langle a_4^{(m)} \rangle (\lg k)^m}{m^m}.$$

Средняя радиальная взвешенная есть величина $\langle a_7^{(k)} \rangle = d$, которая удовлетворяет уравнению

$$k_7^d = \frac{g_1 k^{1/a_1} + g_2 k^{1/a_2} + \dots + g_n k^{1/a_n}}{g_1 + g_2 + \dots + g_n} = \sum_{i=1}^n c_i k^{1/a_i}. \quad (2.6.9)$$

Это равенство имеет смысл при $k > 0$ и $k \neq 1$.

Полусумма крайних членов представляет собой среднюю арифметическую наименьшего $a_1 = a_{\min}$ и наибольшего $a_2 = a_{\max}$ членов:

$$\langle a_8 \rangle = \frac{g_1 a_1 + g_2 a_2}{g_1 + g_2}. \quad (2.6.10)$$

Подведем итоги. При симметричном законе распределения $\langle a_8 \rangle$ может являться ориентировочной оценкой для среднего арифметического. Полусумма крайних членов дает наименьшее значение максимума отклонений.

Семейство средних величин не ограничено распространенными средними. Имеются специальные средние со специфическим характером, например тригонометрические средние и др.

2.6.3. Средние неаналитические (позиционные) значения признака

Неаналитические средние – это средние величины, определяющиеся в зависимости от положения членов совокупности, которую они характеризуют.

Медианой, или центральной величиной, называется такая точка на оси a , перпендикуляр к которой делит поверхность, заключенную под кривой плотности распределения, на две равные части. Если последовательность чисел дана без весов, то медианой будет служить число $a = Me$, которое делит эту последовательность пополам: число членов, предшествующих Me , равно числу членов, следующих за ним.

Несколько сложнее обстоит дело, когда задаются веса, но плотность неизвестна. Если дан ряд $a_1, a_2, \dots, a_i, \dots, a_n$ с весами $d_1, d_2, \dots, d_i, \dots, d_n$, то медианой, в случае нечетного числа членов, будет служить тот его член, который занимает место $(n+1)/2$. Значение медианы определяется следующим неравенством:

$$d_1, d_2, \dots, d_{S-1} < \frac{n+1}{2}, \quad d_1, d_2, \dots, d_S \geq \frac{n+1}{2}.$$

Иными словами, в случае нечетного числа членов медианой будет служить член ряда, соответствующий частоте, которая в сумме со всеми частотами предыдущих членов даст меньшую величину суммы частот всех последующих членов. При четном числе членов условились за медиану принимать среднюю арифметическую члена a_S , занимающего $n/2 = S$ -е место и следующего за ним:

$$Me = \frac{a_S + a_{S+1}}{2}.$$

Если объем выборки велик, определение Me связано с некоторыми трудностями.

При известной функции распределения $P(a)$ медианой будет такое число, для которого справедливо следующее равенство:

$$\int_{a_1}^{Me} P(a) da = \int_{Me}^{a_2} P(a) da.$$

Для совокупности, представленной гистограммой, медиана может быть найдена по следующей упрощенной формуле:

$$Me = a_S + \frac{a_{S+1} - a_S}{n_S} \left(\frac{1}{2} \sum_{i=0}^m n_i - \sum_{i=0}^{S-1} n_i \right), \quad (2.6.11)$$

где n_S – число замеров, попавших в медианный интервал; a_S – нижняя граница медианного (т. е. содержащего медиану) интервала. Для определения этого интервала необходимо последовательно (слева направо) суммировать частоты интервалов n_i . Тот интервал, в котором накопленная частота $\sum_i^S n_i$ равна или превышает половину всех остальных n_i , будет медианным, т. е.

$$\sum_{i=1}^S n_i \leq \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m n_i.$$

Более точно медиану можно определить как корень уравнения

$$(Me - a_1)^{d_1} (Me - a_2)^{d_2} \dots (Me - a_S)^{d_S} = (a_{S+1} - Me)^{d_{S+1}} \dots (a_n - Me)^{d_n}. \quad (2.6.12)$$

Однако точное решение приведенного уравнения связано с вычислительными трудностями, поэтому можно воспользоваться приближенным его решением.

Дисперсия медианы при увеличении числа проб (увеличении объема выборки) стремится к значению

$$\sigma_{Me}^2 = \frac{\sigma_a^2}{0,64},$$

т. е. при прочих равных условиях колебания относительно медианы на 25% выше колебаний среднего арифметического $\sigma_{Me} = 1,25\sigma_a$.

Медиана является частным случаем более общего параметра распределения, который носит название *квантиля*. Квантиль есть такое значение a , при котором функция распределения принимает значение вероятности, равное $P(a)$. Так, квантиль, отвечающий $P(a) = 1/2$, и будет медианой. Если взять число b , равное отношению двух целых положительных чисел $b = P(a)/q$, причем $P(a) + q = k$, то квантиль выражается таким значением a , для которого справедливо равенство

$$\int_{a_1}^b P(a) da = b \int_b^{a_2} P(a) da. \quad (2.6.13)$$

Если $P(a) + q = 4$, то $b = 1/3$; $2/2$ и $3/1$ и квантили носят название квартилей. Зная несколько квантилей для разных уравнений, легко представить себе характер распределения.

Модой (еще ее называют нормой, преобладающим значением, модальным значением, главным значением и др.) является то значение a , которое повторяется наибольшее число раз. Как следует из приведенной формулировки, моде соответствует наибольшая ордината кривой плотности распределения $P(a) = Mo = \max$.

Практически не исключены распределения, в которых несколько значений a_i могут иметь наибольшие и близкие между собой частоты. Такие распределения

называются соответственно двух-, трехмодальными и т. д. Чаще возможны случаи, когда встречаются несколько членов ряда, имеющих частоту, значительно превышающую частоту других членов. Такие частоты, являющиеся максимальными лишь по сравнению с частотами соседних членов, соответствуют второстепенным модам.

По аналогии с модой значение a_i , которое встречается наименьшее число раз, называется *антимодой*. Для моды число отклонений, равных нулю, максимально, для антимоды это число минимально. Антимодальное распределение имеет вогнутую кривую плотности распределения.

Если ряд взвешен a_i, d_i , то мода взвешенного ряда называется центральным членом. Центральный член и медиана взвешенного ряда могут совпасть в частном случае, зависящем от характера распределения.

Если построена гистограмма распределения, то мода может быть вычислена по следующей приближенной формуле:

$$Mo = a_S + (a_{S+1} - a_S) \frac{n_S - n_{S-1}}{(n_S - n_{S-1}) + (n_S - n_{S+1})},$$

где a_S – нижняя граница модального интервала, т. е. интервала, имеющего наибольшую частоту $n_S = \max$; $a_{S+1} - a_S$ – ширина модального интервала; n_S, n_{S-1}, n_{S+1} – частота, соответствующая модальному интервалу, предшествующему ему и последующим за ним интервалам.

Для несильно асимметричных распределений оценить величину моды можно по следующей формуле Пирсона:

$$Mo \approx \langle a \rangle + 3(Me - \langle a \rangle) = 3Me - 2\langle a \rangle,$$

где $\langle a \rangle$ – среднее арифметическое. При симметричном распределении мода, медиана и среднее арифметическое совпадают.

Высшее значение соответствует тому члену ряда, который, будучи умноженным на свою частоту, даст наибольшую величину, т. е. $aP(a) = \max$. Так же как и мода, высшее значение может быть главным и второстепенным. Последнее соответствует условию, при котором произведение величины числа на его частоту является относительно, но не абсолютно наибольшим. Аналогично, низшее значение – это тот член ряда, произведение которого на частоту – наименьшее по сравнению с произведением других членов на соответствующую им частоту, т. е. $aP(a) = \min$. Высшее значение удобно использовать, когда хотят по распределению качественного состава компонента определить его количественную характеристику. Например, по распределению содержания ключевого компонента в смеси $a = \alpha$ определить его количество в потоке, равное $\dot{V}\alpha$, где \dot{V} – производительность потока.

Разделительным значением ряда невзвешенных членов a_i называется такое значение $a_0 = a_S$, которое можно разделить на две части так, чтобы сумма значений одной его части k и всех предшествующих членов равнялась сумме значений второй части $a_S(k-1)$ и всех последующих членов:

$$a_1 + a_2 + \dots + ka_S = (1-k)a_S + a_{S+1} + \dots + a_n.$$

В случае, когда ряд взвешен a_i, c_i , то за разделительное значение принимается такое a_S , которое удовлетворяет условиям:

$$c_1 a_1 + c_2 a_2 + \dots + c_{S-1} a_{S-1} < c_S a_S + c_{S+1} a_{S+1} + \dots + c_n a_n;$$

$$c_1 a_1 + c_2 a_2 + \dots + c_S a_S > c_{S+1} a_{S+1} + c_{S+2} a_{S+2} + \dots + c_n a_n.$$

Если существует равенство суммы членов обеих половинок ряда:

$$c_1 a_1 + c_2 a_2 + \dots + c_S a_S + c_{S+1} a_{S+1} + c_{S+2} a_{S+2} + \dots + c_n a_n,$$

то существует множество разделительных значений, содержащихся в интервале $a_S - a_{S-1}$. В этом случае за разделительное значение принимается среднее арифметическое:

$$a_0 = \frac{c_S a_S + c_{S+1} a_{S+1}}{c_S + c_{S+1}}.$$

Разделительное значение a_0 для непрерывного распределения удовлетворяет условию

$$\int_{a_1}^{a_0} aP(a)da = \int_{a_0}^{a_2} aP(a)da.$$

Подведем итоги. Если разделительное значение не является членом совокупности, то сумма абсолютных отклонений от него равна произведению разделительных значений на величину $a_S(2S-1)$, где S – порядковый номер наибольшего из членов ряда, не превышающий разделительное значение, а n – общее число членов. Если же разделительное значение является ее членом, то эта сумма определяется по формуле $[2S - n + 2(S+1)]a_S$.

2.6.4. Общие свойства средних величин

Рассмотрим некоторые общие свойства средних величин, которые могут быть полезны при их использовании в технологических расчетах.

Во-первых, как следует из самой формулировки средней, для всех рассмотренных средних величин справедливо условие $a_{\min} \leq \langle a \rangle \leq a_{\max}$. Равенство здесь имеет силу лишь в том частном случае, когда все a_i равны между собой.

Во-вторых, если значения a_i увеличить (уменьшить) в n раз, говорят, что средняя обладает свойством однородности, если она тоже увеличится (уменьшится) в n раз. К однородным средним относятся средняя арифметическая, геометрическая, гармоническая, степенная, полусумма крайних членов. Экспоненциальная и радиальная средние величины неоднородны. Все неаналитические средние однородны.

В-третьих, при увеличении (уменьшении) одного a_i , или членов ряда, арифметическая, геометрическая, гармоническая, экспоненциальная средние величины возрастают (убывают). Средняя степенная, сумма крайних членов возрастают или убывают в зависимости от того, какое значение имеет изменяемый член в данной совокупности.

Медиана, квантили, разделительная величина также относятся к неубывающим средним. Мода, антимода принадлежат к этой категории только для взве-

шенной совокупности и при условии, что меняется только величина a_i какого-либо ряда, но не его вес c_i .

В-четвертых, средняя величина $\langle a \rangle$ называется ассоциированной, если она не меняется при подстановке в данную совокупность вместо любого члена. Средняя антигармоничная не является ассоциированной средней. Арифметическая, геометрическая, степенные средние, экспоненциальные, радиальные обладают свойством ассоциативности. Позиционные средние величины не ассоциативны.

В-пятых, средняя обладает свойством обратимости, если она равна обратной средней обратных членов ряда, т. е. если сохраняется условие

$$\langle a \rangle = f(a_1, a_2, \dots, a_n) = \frac{1}{f\left(\frac{1}{a_1}, \frac{1}{a_2}, \dots, \frac{1}{a_n}\right)}.$$

Из аналитических средних величин только средняя геометрическая обладает этим свойством. Из позиционных средних обратима медиана, когда число членов совокупности нечетно, и мода.

В-шестых, средняя обладает свойством переносимости, если ее значение возрастает на величину k , когда члены ряда совокупности a_i также увеличены на k , т. е.

$$f(a_1 + k, a_2 + k, \dots, a_n + k) = f(a_1, a_2, \dots, a_n) + k = \langle a \rangle + k.$$

Из аналитических средних этим свойством обладают арифметическая, экспоненциальная и полусумма крайних членов. Из позиционных средних переносимыми являются мода, антимода, медиана.

В-седьмых, средняя обладает свойством потенциальности, если ее значение оказывается возведенным в степень k , когда члены совокупности возводятся в эту степень:

$$\langle a \rangle^k = f(a_1^k, a_2^k, \dots, a_n^k) = [f(a_1, a_2, \dots, a_n)]^k.$$

Из аналитических только геометрическая средняя обладает таким свойством. Из позиционных средних – обладают мода, антимода, медиана, если число членов совокупности нечетно.

В-восьмых, средняя называется симметричной, если она сохраняет свое значение при перемене мест любых двух членов совокупности. В этом смысле аналитические средние симметричны и неаналитические средние несимметричны.

В прикладных расчетах возникает задача определения средней по преобразованной совокупности величин a_i . Например, замеряется параметр a , по которому рассчитывается другой параметр $b = f(a)$. Сравним средние $\langle a \rangle$ совокупности a_1, a_2, \dots, a_n и $\langle b \rangle$ совокупности b_1, b_2, \dots, b_n .

Обозначим $\langle a_1 \rangle$, $\langle a_2 \rangle$, $\langle a_3 \rangle$, $\langle a_6 \rangle$, $\text{Me}[a]$, $\text{Mo}[a]$ – соответственно среднюю арифметическую, геометрическую, гармоническую, экспоненциальную медиану и моду совокупности a_i и соответствующие средние совокупности b_i $\langle b_1 \rangle$, $\langle b_2 \rangle$, $\langle b_3 \rangle$, $\langle b_6 \rangle$, $\text{Me}[b]$, $\text{Mo}[b]$:

а) при преобразовании типа $b = Ka$:

$$\langle b_1 \rangle = K \langle a_1 \rangle, \quad \langle b_2 \rangle = K \langle a_2 \rangle, \quad \langle b_3 \rangle = K \langle a_3 \rangle, \quad \text{Me}[b] = K \text{Me}[a], \quad \text{Mo}[b] = K \text{Mo}[a];$$

б) при преобразовании типа $b = C + Ka$:

$$\langle b_1 \rangle = C + K\langle a_1 \rangle, \quad \text{Me}[b] = C + K\text{Me}[a], \quad \text{Mo}[b] = C + K\text{Mo}[a];$$

в) при преобразовании типа $b = 1/a$:

$$\langle b_2 \rangle = 1/\langle a_2 \rangle, \quad \langle b_3 \rangle = 1/\langle a_3 \rangle, \quad \text{Me}[b] = 1/\text{Me}[a], \quad \text{Mo}[b] = 1/\text{Mo}[a];$$

г) при преобразовании типа $b = a^k$:

$$\langle b_2 \rangle = \langle a_2 \rangle^k, \quad \text{Me}[b] = (\text{Me}[a])^k, \quad \text{Mo}[b] = (\text{Mo}[a])^k;$$

д) при преобразовании типа $b = k^a$:

$$\langle b_2 \rangle = k^{\langle a_2 \rangle}, \quad \text{Me}[b] = k^{\text{Me}[a]}, \quad \text{Mo}[b] = k^{\text{Mo}[a]}.$$

В результате преобразований величин $b = f(a)$ соотношение между средними совокупностями a_i и b_i меняется и зависит от вида функционального преобразования. При дальнейшем изложении, если не оговорено, используется арифметическая средняя.

Подведем итоги. Необходимо помнить, что средние значения свойств дисперсных материалов, с которыми мы будем оперировать в дальнейшем, являются условными и относительными. Эта условность определяется:

– во-первых, условной величиной порции, для которой величина свойства принимается постоянной;

– во-вторых, неизбежными ошибками в опробовании и анализе дисперсного материала.

Когда утверждается, что в данном потоке материала среднее содержание целевого компонента составляет $\langle c \rangle$, то эта величина фактически складывается из объективно существующей средней величины плюс колебания, связанных с ошибкой ее определения. Выявление составных частей колебаний не всегда представляется возможным.

2.7. МЕТОДЫ КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА ДИСПЕРСНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Важнейшим аспектом производства дисперсных материалов и изделий на их основе является организация оперативного контроля качества в условиях серийного производства.

2.7.1. Измерение химического состава

Используемые в настоящее время методы контроля химического состава не в полной мере удовлетворяют требованиям быстро развивающейся технологии. Применяющиеся в производстве методы контроля массовой доли компонентов требуют перевода пробы в раствор и последовательного разделения компонентов. Длительность процедуры анализа составляет от 2–4 часов для физико-химических методов (спектрофотометрия; атомная абсорбция) до 4–8 часов для классических химических методов (титриметрия, гравиметрия). Тем не менее эти методы продолжают развиваться.

Трудоемкость и длительность используемых методов приводят к невозможности контроля непосредственно при изготовлении составов и изделий, сдерживают дальнейшее развитие и вызывают издержки производства. Нарушается ритмичность, требуются специальные помещения для временного хранения из-

готовленных составов, меняются и способы транспортировки, что может привести к расслоению или слеживанию составов. Анализ уже готовых изделий без разрушения методом «мокрой» химии также невозможен.

Одним из наиболее перспективных методов, позволяющих преодолеть отмеченные трудности, является неразрушающий метод рентгенофлуоресцентного анализа (РФА). При его использовании излучение, полученное с помощью рентгеновской трубки, падает на анализируемый образец (рис. 2.7.1). В результате этого взаимодействия образец излучает вторичное рентгеновское излучение, которое в отдельных компонентах является характерным для химического состава образца. Содержащиеся в образце атомы сорта Z_i излучают с типичными для них длинами волн λ_i ; атомы Z_i излучают пропорционально концентрации C_i и интенсивности его вторичного излучения \dot{I}_i . Величины \dot{I}_i и λ_i фиксируют с помощью спектрометра и определяют Z_i и C_i , т. е. проводят качественный и количественный анализ.

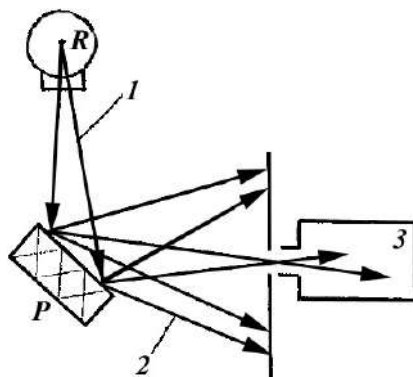


Рис. 2.7.1. Принципиальная схема метода РФА

Возможности применения РФА, обусловленные современным техническим и методическим уровнем его развития, можно охарактеризовать следующим образом:

- анализ возможен для большинства элементов периодической системы, начиная с элемента с порядковым номером $Z = 9$ (фтор) и, в особых случаях, с элемента $Z = 6$ (углерод);
- РФА позволяет проводить количественный анализ в области концентраций, начиная с 10^{-2} – $10^{-4}\%$ (сверху область концентрации не ограничена, возможен анализ вплоть до 100%);
- точность анализа достигает $\Delta C/C = 0,1 - 0,5\%$. В области наиболее низких концентраций она ниже. Здесь абсолютная погрешность чаще всего равна порядку величины предельно определяемой концентрации 10^{-2} – $10^{-4}\%$;
- скорость проведения анализа очень высока (время на определение одного компонента составляет примерно одну минуту);
- приборы для анализа определяют обычно среднее значение на плоской поверхности образца диаметром около 40 мм, а глубина образца, охватываемая анализом, составляет максимально 0,1–0,5 мм от поверхности;
- возможен анализ компактных, порошкообразных и жидких образцов.

В табл. 2.7.1 приведены характеристики некоторых современных отечественных рентгенофлуоресцентных анализаторов.

Для осуществления РФА требуется знание физических закономерностей первичного рентгеновского излучения и его взаимодействия с веществом, а также целого комплекса вопросов, связанных с явлениями при определении концентраций данным методом. К этим вопросам следует отнести проблемы, связанные с влиянием матрицы образца, величины зерна и качества поверхности, условиями изготовления образцов.

Таблица 2.7.1

Технические характеристики отечественных РФ-анализаторов

Характеристики	Приборы			
	VRA-30	СРМ	КРАБ	БАРС
1. Диапазон анализируемых элементов	<i>F–U</i>	<i>Na–U</i>	<i>Gr–W</i>	<i>Co–U</i>
2. Предел обнаружения, %	$10^{-4} \text{ } 10^{-2}$	$10^{-4} \text{ } 10^{-2}$	10^{-3}	0,1
3. Аппаратурная погрешность, %	0,2	0,2	0,5	0,8
4. Продолжительность измерения, мин	1	3	0,6	1-4
5. Потребляемая мощность, кВт	7	8	0,6	0,06
6. Масса, кг	1400	1110	50	13

Специфика составов: большая номенклатура веществ различного состава и свойств исключает прямой перенос имеющегося опыта на практику работ с ними на приборах РФА. Излучение указанных вопросов для сложных композиций позволяет выявить и исключить влияние, снижающее точность и воспроизведение результатов анализа, а также сформулировать требования к методикам РФ-определения массовых долей компонентов в смесях.

Форма, размер и распределение зерен в анализируемом образце оказывают сильное влияние на интенсивность флуоресцентного излучения. В общем случае влияние величины зерна в однофазных и многофазных системах при исследованиях с помощью рентгеновских лучей пренебрежимо мало, если выполняется условие

$$d_d[\mu_p(\lambda_c) - \mu_i(\lambda_c)] \ll 1,$$

где d_d – диаметр частиц, см; $\mu_i(\lambda_c)$ – коэффициент ослабления частиц i -го сорта см^{-1} ; $\mu_p(\lambda_c)$ – средний коэффициент ослабления образца, см^{-1} ; λ_c – длина волны флуоресцентного излучения, см.

Из приведенного выше соотношения следует, что влиянием величины зерна можно пренебречь, если средний коэффициент ослабления образца соответствует коэффициенту ослабления содержащихся в образце отдельных зерен, что в конкретных составах практически не встречается.

Зависимость интенсивности флюоресценции от давления прессования анализируемых образцов имеет следующий вид (рис. 2.7.2). Для изделий из энергонасыщенных составов давление прессования обычно превышает 100 мПа. В этой области, как видно на рис. 2.7.2, дальнейшее увеличение давления прессования мало влияет на интенсивность флюоресценции. В области более низких давле-

ний прессования должны производиться дополнительные исследования по выявлению его влияния на интенсивность флюоресценции.

Применения РФА используют стандартные образцы. Поэтому РФА можно рассматривать как относительный метод анализа. Образец может быть принят в качестве стандартного, если он отвечает ряду требований.

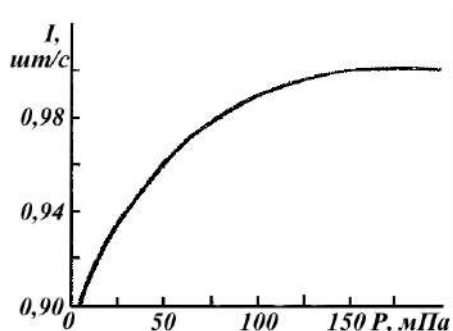


Рис. 2.7.2. Зависимость интенсивности флюоресценции от давления прессования

Во-первых, концентрация химических элементов известна с минимально возможной погрешностью. От стандартных образцов зависит в значительной мере правильность результатов анализа, полученных методом РФА. Чаще всего для определения концентрации химических элементов в стандартных образцах используют мокрые химические методы.

Во-вторых, для стандартных анализируемых образцов должен быть применен единый метод изготовления. Для твердых образцов необходима однообразная отработка поверхности, дающая одинаковую структуру и шероховатость поверхности. При обработке порошковых образцов оказывается, что способ измельчения исследуемого материала и параметры прессования в значительной мере определяют регистрируемую интенсивность флюоресценции.

В-третьих, серия стандартных образцов должна состоять из достаточно большого числа стандартных образцов, чтобы можно было получить статистически надежные коэффициенты регрессии в эмпирических соотношениях концентрация–интенсивность. Эти стандартные образцы должны быть распределены в интересующей области концентраций равномерно относительно концентрации определяемого элемента.

Подведем итоги. Метод неразрушающего рентгенофлуоресцентного экспресс-анализа пригоден для определения массовых долей компонентов в смесях с погрешностью 0,2–1% и временем определения одного компонента 1–2 мин. Метод применен для контроля однородности смесей.

2.7.2. Неконтактный метод измерения влажности

Свойства дисперсных материалов в значительной степени определяются влажностью компонентов и составов в целом. Существующие стандартные методы определения влажности сложны, малопроизводительны и не поддаются автоматизации. Поэтому был испытан инфракрасный (ИК) влагомер ВК-204. Работа влагомера основана на измерении отношения отраженных от исследуе-

мых продуктов сигналов. Сигналы соответствуют аналитической (на которую сильно воздействует влага) и реперной (на которую влага воздействует слабо) длинам волн в ИК-области спектра.

Влагомер состоит (рис. 2.7.3) из оптического преобразователя I и измерительного вычислительного блока II. В оптическом преобразователе с помощью двух ламп накаливания 1 формируется световой поток, направленный на объект измерения 13, который движется (или находится в состоянии покоя) перпендикулярно плоскости оптической оси. Часть отраженной от объекта измерения 13 энергии принимается объективом 2 преобразователя и направляется на два светофильтра 3 и 4, установленные на диске 5, приводимом во вращение электродвигателем 6. Светофильтры 3 и 4 поочередно пропускают излучение в ИК-области с длинами волн 1,95 (аналитическая) и 1,75 (реперная) МКМ. Импульсы ИК-излучения со светофильтров 3 и 4 направляются на фоторезистор 7, которые затем преобразуются в электрические сигналы. Для распознавания этих сигналов с помощью двух магнитодиодов 8 и 9 и постоянного магнита 10, установленного на вращающемся диске 5 со светофильтрами 3 и 4, вырабатываются синхронные с измеряемыми сигналами управляющие импульсы.

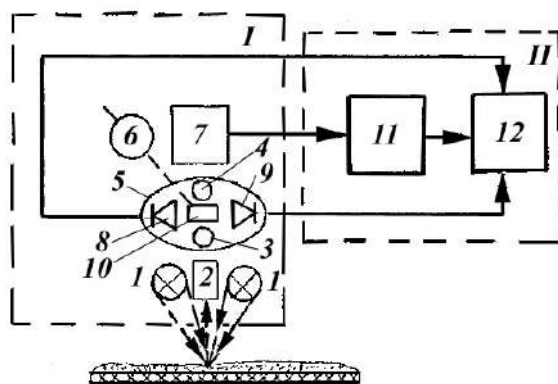


Рис. 2.7.3. Функциональная схема влагомера ВК-204:

I – оптический преобразователь; II – измерительно-вычислительный блок;
1 – лампы накаливания; 2 – объектив; 3 и 4 – светофильтры; 5 – диск
модулятора; 6 – электродвигатель; 7 – фоторезистор с усилителем;
8 и 9 – магнитодиоды; 10 – магнит; 11 – аналого-цифровой преобразова-
тель; 12 – микропроцессор; 13 – объект измерения.

Измерительные и управляющие импульсы подаются на вход измерительного вычислительного блока, где амплитуда измерительных сигналов аналого-цифровым преобразователем II преобразуется в двоичный код за счет введения в микропроцессор 12 программы, описывающей кусочно-линейную зависимость между влажностью и оптическим показателем измеряемого продукта.

В качестве примера на рис. 2.7.4 приведена градуировочная характеристика для $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ и SiO_2 . Исследования показали, что разработанный влагомер

ВК-204 может использоваться для измерения влажности дисперсных продуктов, не содержащих электропроводящих элементов с погрешностями, удовлетворяющими технологические потребности производства.

Влагомер в настоящем его исполнении может быть использован для экспресс-анализа продуктов в условиях производства.

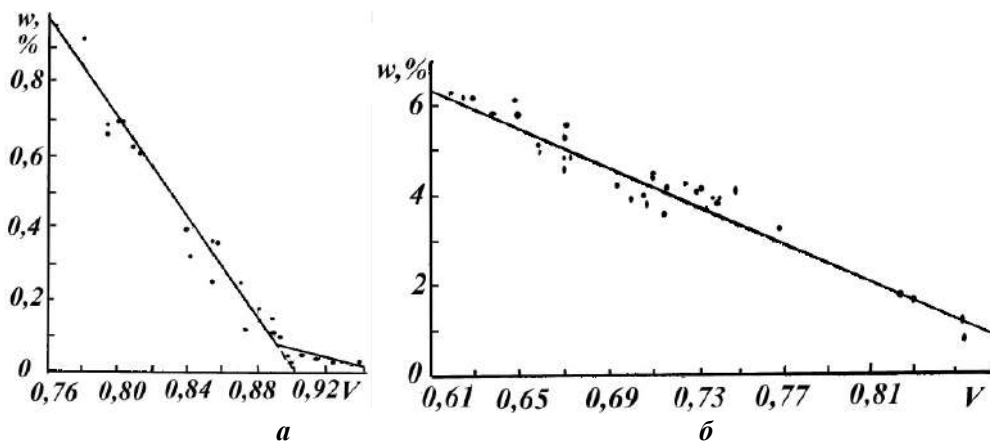


Рис. 2.7.4. Характеристики градуировки: a – для $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$; b – для SiO_2 .

Подведем итоги. После соответствующей доработки конструкции оптического преобразователя, связанной с обеспечением безопасности, прибор может быть использован для непрерывного бесконтактного измерения влажности продуктов непосредственно в технологическом процессе с выдачей управляющего сигнала о текущем значении влажности в АСУ.

2.7.3. Методы и средства контроля дисперсного состава материалов

Инструментальные методы анализа дисперсного состава. Для определения размеров частиц порошков применяются различные способы, объединенные общим названием *методы дисперсионного анализа*. Эти методы делятся на прямые и косвенные. К прямым относится непосредственное измерение размеров частиц с помощью некоторого масштаба, будь то шкала микроскопа или ячейки сит. К косвенным методам – определение размеров по какому-либо признаку, непосредственно от них зависящему, например по скорости оседания в вязкой среде, скорости растворения, отражению света суспензией, адсорбционной способности и др. Разнообразие применяемых в настоящее время методов дисперсионного анализа весьма велико. Объясняется это не только большим ассортиментом порошков, отличающихся своей природой и дисперсностью, но и специфичностью их применения. Часто оказывается, что характеристика дисперсности, удовлетворительная в одном случае, неприемлема в другом.

Для опытного определения зернового состава дисперсного вещества применяются методы ситового, микроскопического и седиментационного анализа,

центрифугирования. Хотя указанные методы приближенные, получаемые результаты в большинстве случаев удовлетворяют практическим потребностям.

В настоящее время не существует ни одного достаточно универсального метода дисперсионного анализа, который даже с ограниченной надежностью мог бы быть приложен ко всему многообразию порошкообразных материалов. В связи с этим возникает необходимость правильного выбора способа определения дисперсности с учетом конкретных физико-химических свойств, условий получения и использования порошков. Непременным требованием в этом случае является соответствие изучаемых свойств порошка и процесса его переработки одной из возможных характеристик дисперсности.

Дисперсностью порошка называют характеристику размеров и формы частиц, составляющих порошок. Дисперсность выражается функцией распределения и некоторой величиной, средней для частиц порошка, а также удельной поверхностью порошка. Размеры частиц могут быть определены одним из способов, описанных выше. Например, распределение может быть выражено как функция объемов, поверхностей или одного из линейных размеров. Наиболее распространенным является распределение по (условному) диаметру.

Удельной поверхностью порошка называют отношение суммарной поверхности частиц к их весу. Легко видеть, что для порошка из неодинаковых частиц средняя удельная поверхность частиц, вообще говоря, не равна удельной поверхности порошка.

Ситовой анализ. К прямым методам дисперсионного анализа относятся ситовой и микроскопический. Ситовой анализ заключается в просеивании пробы исследуемого материала через набор сит и в определении процентного содержания остатка на каждом из них по отношению к весу исходной пробы. Изготовление тканых сит с размерами отверстий ячеек менее 60–40 мкм технически крайне затруднительно.

Сетки с такими мелкими ячейками содержат множество отверстий неправильной формы, размеры которых значительно отличаются от среднего. Это ведет к искажению гранулометрического состава по данным ситового анализа. Известны приемы получения сеток обработкой металлических пластин либо травлением, либо электродуговым способом. Таким путем удается получать геометрически совершенные отверстия с размерами до 5 мкм.

Микроскопический анализ. Определение гранулометрического состава так называемой подситовой фракции порошков, под которой обычно подразумевают фракцию с размерами частиц менее 40–60 мкм, выделенную просеиванием, может быть произведено с помощью микроскопа. Микроскопический анализ (в том числе с электронной оптикой) заключается в измерении условных размеров и в подсчете числа частиц в заданном интервале размеров, либо визуально, либо по микрофотографиям препарата. Микроскопия дает надежные и воспроизводимые результаты только при тщательных измерениях (точность пропорциональна корню квадратному из сосчитанного числа частиц). Микроскопия с обычной световой оптикой применяется для частиц с размерами выше 0,5 мкм, а с электронной – в интервале 0,001–10 мкм. Нижняя граница размеров зерен,

которые еще могут быть измерены микроскопом, определяется его предельной разрешающей способностью.

Микроскопический анализ является единственным методом, позволяющим непосредственно определить размеры частицы и оценить ее форму, он дает возможность определить выраженное в процентах относительное содержание частиц данного размера, т. е. частичную концентрацию. На практике, однако, больший интерес представляет определение состава частиц по их весу – весовая концентрация. Необходимый в таких случаях пересчет может быть осуществлен, если предположить, например, что частицы геометрически подобны, а распределение частиц по размерам внутри узкой фракции с размерами от δ_i до δ_{i+1} таково, что $f(\delta)=dn_i/d\delta=\text{const}$. Тогда весовое содержание этой фракции равно

$$g_i^0 = \frac{n_i(\delta_{i+1} - \delta_i)(\delta_{i+1}^2 + \delta_i^2)}{\sum_i n_i(\delta_{i+1} + \delta_i)(\delta_{i+1}^2 + \delta_i^2)}.$$

Здесь l – число выбранных интервалов; n_i – число частиц, сосчитанных в каждом i -м интервале.

Обычно для пересчета концентраций частиц в весовые пользуются более простым расчетом, в котором принимают вес фракции равным весу среднего по размеру зерна, умноженному на число частиц в этой фракции. Такой расчет оправдан лишь тогда, когда интервалы $\delta_{i+1}-\delta_i$ выбраны очень узкими. Подсчет зерен, размеры которых жестко ограничены, требует тщательности и потому не может быть выполнен достаточно точно. Практически удобнее выбирать широкие интервалы. Но в этом случае упрощенный пересчет становится очень неточным, и необходимо пользоваться приведенной здесь формулой.

Седиментационный анализ. Из косвенных методов определения гранулометрического состава порошков наиболее широко применяются в практической работе седиментационные. Седиментационный анализ основан на зависимости скорости осаждения (седиментации) однородных частиц в вязкой среде от их размеров. Для определения гранулометрического состава порошков, состоящих из очень малых частиц (менее 2–3 мкм), ввиду медленности их оседания в поле сил тяжести применяют центробежные поля.

Определение гранулометрического состава по наблюдению седиментации может быть произведено посредством измерения во времени на заданной высоте следующих величин: концентрации твердой фазы, плотности суспензии, веса осадка. Концентрацию измеряют путем отбора проб через фиксированные промежутки времени, по рассеянию и поглощению света, по поглощению радиоактивного излучения.

Скорость падения в жидкости частиц неправильной формы может значительно отличаться от скорости движения сферических частиц равной массы. Разница в скорости зависит также от ориентации анизометричных частиц относительно направления их движения. Однако вряд ли имеется практическая возможность учета формы частиц. Поэтому порошки с резко анизометричными частицами исследовать седиментационным путем вообще не рекомендуется. При практических измерениях принимают за размер частиц диаметр эквива-

лентной по скорости падения сферической частицы, т. е. явно или неявно считают частицы сферическими, оговариваясь, что размеры являются седиментационными.

Метод воздушной классификации состоит в том, что навеску сухой пыли продувают через ряд цилиндрических или конических сосудов различного диаметра. Широко распространен также метод классификации путем взвешивания частиц восходящим потоком жидкости (отмучивание).

Эквивалентный диаметр. Наряду с многообразием в размерах частиц дисперсных материалов имеет место и многообразие их форм. Как правило, частицы одинаковой массы всегда отличаются по форме. Для каждого материала характерна своя преобладающая форма (округлая, угловатая, пластинчатая), которая определяется свойствами исходного продукта и слабо зависит от методов измельчения.

Для реальных дисперсных материалов невозможно однозначно определить среднее значение размера одиночной частицы или группы частиц, образующих узкую фракцию. Выбор способа получения среднего размера δ обычно зависит от метода анализа гранулометрического состава материала. При ситовом анализе за средний размер узкой фракции часто принимают среднее арифметическое из размеров отверстий соседних сит. При микроскопическом анализе значение δ полагают равным среднему (арифметическому или геометрическому) из измерений частицы в двух или трех взаимно перпендикулярных направлениях. Во многих случаях за средний размер частицы принимают диаметр шара, эквивалентного данной частице:

- по объему;
- по поверхности;
- по скорости витания при том или ином законе сопротивления (чаще – линейном и квадратичном);
- по площади проекции на некоторую фиксированную плоскость.

Для частиц изометрической формы эквивалентный диаметр по объему обычно на 5–15% больше размера отверстия в сите.

Удельной поверхностью любой частицы называют отношение площади ее полной или только внешней поверхности к объему или весу. Неидеальные кристаллические твердые тела, например разрушенные механической обработкой, состоят из множества первичных микрокристаллитов, называемых в рентгеноструктурном анализе областями когерентного рассеяния, из которых состоят вторичные частицы. Такие твердые тела часто имеют поры. Для неидеальных кристаллов различают три вида поверхности:

- внешняя поверхность S_1 , ограничивающая вторичные частицы;
- внутренняя поверхность S_2 , образованная открытыми порами;
- поверхность первичных кристаллитов S_3 . Поверхность по Брунауэру–Эмметту–Теллеру (БЭТ), часто используемая в литературе, представляет собой сумму внешней и внутренней поверхностей.

Здесь необходимо отметить, что термин «поверхность раздела фаз» не однозначен. Действительно, площадь границы раздела с твердым телом определяется доступностью ее для молекул среды. Известно, однако, что молекулы жидкостей

и газов существенно отличаются своими размерами. Поэтому величина поверхности твердого тела с очень узкими порами зависит от размера молекул среды. Так, площадь поверхности частиц, измеряемая по сорбции жирных кислот или красителей, часто заметно меньше, чем измеряемая по сорбции воды или азота.

Гранулометрический состав является наиболее полной дисперсной характеристикой порошка. Однако во многих случаях достаточной, а порой и единственно необходимой является величина удельной поверхности. В настоящее время наиболее часто ее определяют двумя методами: по воздухопроницаемости спрессованного слоя порошка (S_{yo}) и по эффекту низкотемпературной адсорбции азота ($S_{БЭТ}$), последний метод разработан Брунауэром, Эмметтом и Теллером.

Определение удельной поверхности по воздухопроницаемости является самым распространенным методом дисперсионного анализа порошков. Этот метод широко применяется в научных исследованиях, и особенно для контроля производственных процессов. Метод отличается простотой аппаратного оформления, быстротой измерений и легкостью расчетной работы. Известны два его варианта. В одном из них, разработанном Козени и Карманом, используется эффект фильтрации через слой спрессованного порошка воздуха при атмосферном давлении, в другом (метод Дерягина) – тот же самый эффект при значительном разрежении. В обоих вариантах их основой являются теоретические или экспериментальные закономерности течения газов через пористые тела.

Основой теории метода Козени–Кармана является соотношение Пуазейля для течения вязких жидкостей по трубам. Пористое тело моделируется системой параллельных капилляров. В расчеты вносится из экспериментальных данных поправка на их извилистость. Вводится понятие гидравлического радиуса, величина которого определяется пористостью слоя и удельной поверхностью порошка. Для случая, когда размеры пор сравнимы с длиной среднего свободного пробега молекул газа при температуре опыта, вводится поправка на скольжение и молекулярное течение.

Чаще используют массовую удельную поверхность материала, если известно, что в слое присутствуют частицы с размерами $\delta_1, \delta_2, \delta_3, \dots, \delta_i, \dots, \delta_n$, с относительными массовыми долями $g_1, g_2, g_3, \dots, g_i, \dots, g_n$, где

$$\sum_i^N g_i = 1.$$

Среднемассовый диаметр частиц

$$\bar{d}_p = \sum_i^N \delta_i g_i.$$

В практической работе возникает необходимость в определении по данным гранулометрического состава удельной поверхности порошков. Если функция $g(\delta)$ – весовое распределение частиц по размерам, то

$$S_{yo} = \sum_i \frac{\beta g_i}{\delta_i} = \beta \int_{\delta_{\min}}^{\delta_{\max}} \frac{g(\delta)}{\delta} d\delta, \quad (2.7.1)$$

где S_{yo} выражено в единицах площади на единицу объема.

Отношение численных коэффициентов поверхности к объему частиц β для шара и куба с гладкими стенками равно 6. Для частиц измельченных материалов, форма которых отлична от правильной, а поверхность неровная, это отношение может принимать значения, значительно большие 6, часто в 2–4 раза. Величина β зависит от природы материала, способа его измельчения, размера частиц и должна быть определена прямыми измерениями в каждом конкретном случае. С этой целью можно, например, воспользоваться измерением площади поверхности какой-либо фракции одним из сорбционных методов. Формула (2.7.1) в виде суммы удобна для вычисления удельной поверхности по экспериментальным измерениям гранулометрического состава. Когда значение $g(\delta)$ дано в аналитическом виде, применяется интегральная форма (2.7.1).

Вследствие большого разнообразия размеров и форм частиц материала найти величины его поверхности расчетным методом очень трудно. Только для монодисперсного материала, состоящего из сферических или кубических частиц, удельная поверхность определяется по простейшей формуле

$$S_{y0} = \frac{6}{\delta}.$$

Для цилиндра с диаметром δ и высотой h

$$S_{y0} = \frac{2}{\delta} \left(2 + \frac{\delta}{h} \right).$$

Для полидисперсного материала значение S_{y0} можно вычислить лишь приближенно на основании ряда упрощающих предпосылок, главные из которых следующие:

- замена частиц неправильной формы шарообразными или кубическими частицами;
- ввиду отсутствия обоснованных методов выбора наименьшего и наибольшего размера частиц эти величины должны быть заданы;
- пренебрежение поверхностью в изломах и трещинах частиц.

Произведем подсчет удельной поверхности, предполагая справедливым распределение Розина–Раммлера:

$$S_{y0} = \frac{\beta}{\delta_0} \Gamma \left(2 - \frac{2}{p} \right). \quad (2.7.2)$$

Значение гамма-функции находят из таблиц для заданного p , измеренного по экспериментальным данным.

Следует подчеркнуть, что вычисление S_{y0} по формуле (2.7.2), даже с учетом значения коэффициента формы частиц, приводит к заниженным результатам. Для более точного определения величины удельной поверхности пыли применяются различные экспериментальные методы. Наиболее простой из них основан на измерении коэффициента фильтрации газа или жидкости через слой. Метод турбидиметрии состоит в нахождении интенсивности поглощения и рассеяния света при его прохождении через слой суспензии из исследуемого образца. Он может быть использован лишь для совершенно непрозрачных частиц размером более 3 мкм (во избежание дифракции). Широко применяются также

различные методы, связанные с поверхностными реакциями растворения, сорбции, смачивания и т. д.

Удельная поверхность различных промышленных дисперсных материалов колеблется в широких пределах от 200 до 2000 м²/кг. Форма, состояние поверхности частиц и гранулометрический состав материала оказывают большое влияние и на его другие физические характеристики (порозность, угол естественного откоса).

Для контроля дисперсности пиротехнических материалов применяются два традиционных метода:

- определение гранул метрического состава (ГМС) сухим ситовым рассевом;
- определение удельной поверхности на приборах типа ПСХ.

Ситовый метод длителен и не позволяет контролировать ГМС порошков с размерами частиц менее 40 мкм, а по методу определения удельной поверхности невозможно контролировать дисперсность порошков, если их удельная поверхность менее 1500 см²/г.

Необходим поиск новых методов и внедрение приборов, позволяющих значительно сократить продолжительность контроля дисперсного состава порошкообразных материалов. Например, можно использовать систему SKC-2000 – микрофотометрический классификатор порошков. Система SKC-2000 объединяет ЭВМ, измерительное устройство, диаграммный самописец и центрифугу.

Принцип действия системы SKC-2000. Исследуемый порошок распределяется в среде седиментационной жидкости и при помощи фотоэлектрического датчика регистрируется скорость оседания частиц по изменению оптической плотности суспензии.

Осаждение частиц проходит в гравитационном поле, а при необходимости с применением сил центробежного поля и по закону Стокса вычислительной машиной производится расчет гранулометрического состава порошка. Диапазон измерений: 0,1–500 мкм. Продолжительность седиментации и вычислений около 30 мин.

На установке SKC-2000 был исследован гранулометрический состав компонентов, для которых анализ дисперсного состава традиционными методами затруднителен.

Для правильного выполнения анализа на установке SKC-2000 необходимо выбрать дисперсионную среду, отвечающую требованиям седиментации, установить и задать машине максимальный размер частиц.

При выполнении работ на установке SKC-2000 были выявлены следующие недостатки данного метода:

- необходимость отдельной подготовки пробы;
- необходимость для каждого опыта подбора оптимальной концентрации суспензии;
- возможность недостоверного представления характеристик дисперсности компонентов с формой частиц, сильно отличающейся от сферической.

Этот метод может быть рекомендован для сравнительного определения дисперсности порошков в условиях заводской или цеховой лабораторий.

Для сокращения продолжительности и обеспечения возможности автоматизации контроля дисперсности материалов была поставлена задача – создать

принципиально новые методы анализа. В результате этих работ был разработан прибор ЭИП-11т – электронный измеритель порошков, предназначенный для анализа дисперсного состава порошкообразных материалов в диапазоне размеров от 63 до 0,5 мкм по семи фракциям.

Принцип действия прибора ЭИП-11т заключается в:

- последовательном переводе пробы анализируемого порошка в аэрозольное состояние;
- электризации частиц;
- электростатической классификации заряженных частиц по дифференциальным фракциям;
- измерении совокупных зарядов фракций.

Прибор выполнен из трех блоков: блока 1, блока 2 и нейтрализатора. Блок 1 в автоматическом режиме осуществляет:

- перевод пробы анализируемого порошка в аэрозольное состояние;
- электризацию частиц;
- электростатическую классификацию (разделение заряженных частиц по семи дифференциальным фракциям);
- осаждение их на пластинах индукционных датчиков;
- преобразование электрических зарядов, накопленных на датчиках, в пропорциональные электрические сигналы и передачу их на блок 2.

Блок 2 выполняет аналоговую обработку сигналов, поступающих с датчиков блока 1 по алгоритму определения процентного соотношения уровней сигналов по семи каналам, с последующим преобразованием результата в цифровой код.

Нейтрализатор нейтрализует остаточные заряды на элементах и деталях осадительного конденсатора измерительной линии, зарядного устройства и других элементов корпуса, выполненных из диэлектрических материалов.

Методика работы на приборе ЭИП-11т проста, не требует специальной подготовки персонала и заключается в следующем. Проба образца помещается в приемный бункер распылителя. Крышка распылителя закрывается, нажимается кнопка «стоп», через 1–2 с – кнопка «пуск». По окончании автоматического процесса измерения производится считывание с цифровых индикаторов значений содержания фракций в процентах в интегральном или дифференциальном выражении. В течение одного часа на приборе ЭИП-11т можно провести около 20 анализов. Первоначально прибор ЭИП-11т отработывался для контроля дисперсного состава порошкообразных материалов, не проводящих электрический ток (тальк, кальцит, мел, фосфорит). Необходимо было исследовать возможность его применения для контроля дисперсности электропроводных дисперсных материалов. Для каждого исследуемого образца проводилось по 10 параллельных испытаний. Прибор ЭИП-11т показал хорошее воспроизведение результатов по фракциям.

Для проверки достоверности показаний прибора ЭИП-11т исследуемые образцы усреднялись, от каждого усредненного образца отбирались пробы по 5 г и рассеивались ручным мокрым рассевом на узкие фракции. Чистоту рассева фракций контролировали под микроскопом МИМ-8. При удовлетворительной чистоте фракции анализировались на приборе ЭИП-11т.

При анализе узких фракций было обнаружено недостаточно качественное разделение пробы по размерам частиц. Причиной некачественного разделения пробы на фракции могла служить несовершенная конструкция осадительного фильтра и высоковольтного электрода. В связи с этим были заменены осадительный фильтр и высоковольтный электрод. На переднюю панель блока 1 выведены регуляторы параметров прибора, обеспечивающие качественное разделение порошка на фракции. Полученные данные показывают удовлетворительное соответствие результатов эксперимента с фактическим гранулометрическим составом испытуемых компонентов.

Подведем итоги. Опыт эксплуатации прибора ЭИП-11т подтвердил его достаточную надежность, высокое быстродействие и простоту обслуживания. Прибор ЭИП-11т может быть положен в основу создания автоматизированного быстродействующего устройства для контроля дисперсности компонентов, пригодного для встраивания в технологические линии.

ГЛАВА 3. ДИСПЕРСНЫЕ СИСТЕМЫ

3.1. ДИСПЕРСНЫЕ СИСТЕМЫ АЭРОЗОЛЬНЫХ ЧАСТИЦ

3.1.1. Частицы аэрозоля в атмосфере

В природе явления испарения и конденсации играют большую роль. Под круговоротом воды в природе понимают образование облаков вследствие конденсации воды, которая затем возвращается на землю в виде дождя или снега. Как показывают фотографии земной поверхности, сделанные из космоса, наиболее отчетливой характеристикой Земли является ее облачный покров. Облака и туманы снижают видимость и могут оказывать существенное влияние на температуру воздуха вблизи земной поверхности. Туманы, взаимодействуя с промышленными выбросами, образуют аэрозоли, которые токсичны для некоторых видов растений, а в отдельных случаях опасны для человека. Многие промышленные выбросы, находящиеся в виде аэрозолей, образуются при конденсации жидкостей.

Не менее важно и испарение жидких капель. Например, для того чтобы максимальное количество распыляемых пестицидов достигало растений, нужно снизить их испарение до минимума. При производстве таких пищевых продуктов, как порошковое молоко или растворимый кофе, для улучшения их качества необходимо проводить их испарение как можно быстрее. При улавливании аэрозолей испарение и конденсация приводят к изменению распределения аэрозольных частиц по размерам, что может повлиять на эффективность работы улавливающей аппаратуры. Поэтому в последнем случае желательно поддерживать неизменные условия.

Атмосфера содержит громадное число частиц различного происхождения: космического, земного (пыль, поднятая с континентов воздушными течениями, высохшие морские брызги и т. д.), атмосферного (облака), биологического и антропогенного. Аэрозольные частицы, двигаясь вместе с воздушной массой, перемешиваются, сталкиваются друг с другом, образуя конгломераты, вступают в химические реакции с газами, разрушаются, растут (в результате конденсации на них водяного пара), осаждаются на поверхность земли в результате седиментации и вымываются каплями облаков и осадков. Поэтому установить происхождение частицы в той или иной пробе аэрозоля чрезвычайно трудно. К счастью, в атмосфере в среднем существует равновесие между образованием и исчезновением частиц определенных размеров. Это позволяет при теоретическом анализе эволюции аэрозольной компоненты в атмосфере в качестве необходимых входных данных использовать эмпирические спектры частиц, имеющие универсальный характер и содержащие незначительное число свободных параметров. Формирование этих спектров происходит в основном под влиянием конденсации, коагуляции и седиментации.

В сухом воздухе размеры аэрозольных частиц изменяются от групп в несколько молекул до частиц радиусом около 20 мкм. Частицы размером меньше $5 \cdot 10^{-3}$ мкм существуют в значительных концентрациях только в окрестностях

источника, поскольку они в результате броуновского блуждания быстро коагулируют или захватываются более крупными аэрозольными частицами. Верхний предел размера частиц лимитируется их седиментацией. Влияние частиц разных размеров на различные атмосферные процессы показано на рис. 3.1.1, заимствованном из [3].

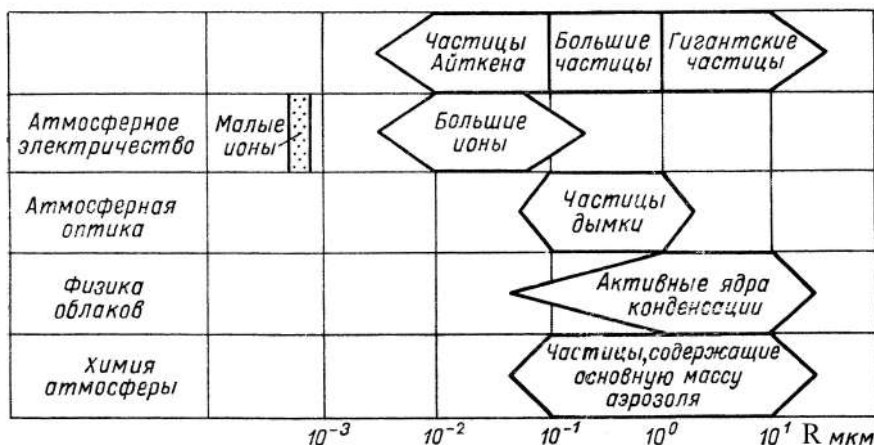


Рис. 3.1.1. Классификация различных аэрозолей и роль частиц различных размеров в различных областях метеорологии

При $R \leq 0,1$ мкм частицы группируются в пределах некоторых определенных размеров, физического объяснения *линейчатого спектра* пока не найдено. Где-то между 0,01 и 0,5 мкм спектр частиц по размерам имеет максимум, причем R_{\max} сдвигается вправо с увеличением высоты над поверхностью земли. Б. Г. Андреев установил, например, что в Средней Азии на высоте 250 м $R_{\max} \approx 0,05$ мкм, а на высоте 2000 м $R_{\max} \approx 0,2$ мкм.

В диапазоне $R_{\max} \leq R \leq 10$ мкм эмпирическое распределение удовлетворительно аппроксимируется формулой Юнге:

$$f(R) \approx aR^{-n}, \quad (3.1.1)$$

где $f(R)dR$ – число частиц в единице объема воздуха с радиусом в интервале $(R, R+dR)$; n и a – некоторые постоянные, зависящие от высоты и происхождения воздушной массы (n – слабо, a – сильно). Над континентом в нижней тропосфере $n \approx 4$. С высотой n несколько увеличивается и для верхней тропосферы становится равным 5. Над океаном до высоты 2 км n приблизительно равно 3. Анализ показывает, что n имеет различные значения для больших и гигантских частиц. Излом в кривых распределения наблюдается где-то в диапазоне от 0,5 до 1 мкм. Вблизи поверхности земли $n \approx 3,6$ при $R \geq 1$ мкм и $n \approx 2,0$ при $R \leq 1$ мкм. Модель распределения аэрозольных частиц по размерам в атмосфере, предложенная Юнге, приведена на рис. 3.1.2; она является типичной для осредненных атмосферных условий. Отметим, что Юнге и Макларен предпола-

гают также возможным существование минимума в диапазоне 10^{-3} – 10^{-2} мкм. Концентрация частиц в окрестности максимума (10^{-2} мкм $\leq R \leq 10^{-1}$ мкм) над континентом составляет 10^3 – 10^4 см $^{-3}$, над морем – 10^2 см $^{-3}$. Концентрация частиц радиусом больше 1 мкм чрезвычайно мала, порядка 0,1–1,0 см $^{-3}$.

Плотность вещества ρ_a в частицах аэрозоля исследована мало; из имеющихся данных можно сделать вывод, что ρ_a колеблется в пределах от 1 до 2 г/см 3 и зависит, естественно, от относительной влажности.

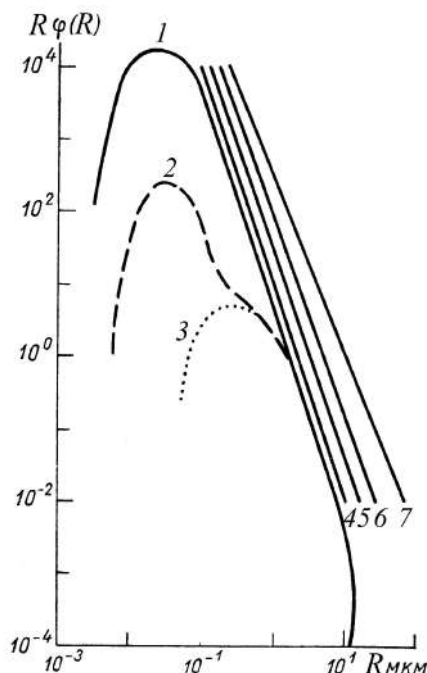


Рис. 3.1.2. Модель распределения аэрозольных частиц по размерам в атмосфере: 1 – над континентом (при 70%-ной влажности); 2 – над океаном; 3 – в прибрежных аэрозолях; 4, 5, 6, 7 – сдвиг распределения за счет роста смешанных частиц, содержащих около 20% растворимого вещества, при влажности соответственно 95, 97, 99, 100%.

Заряженные частицы при $R \leq$ мкм несут в большинстве случаев только один элементарный заряд; процент частиц, несущих два элементарных заряда, заметно увеличивается при $R \geq 0,1$ мкм. В окрестности максимума распределения приблизительно одна треть частиц заряжена положительно, одна треть – отрицательно и одна треть является нейтральной. При уменьшении радиуса доля заряженных частиц быстро падает, при увеличении – возрастает.

Аэрозольные частицы в атмосфере находятся в различных состояниях: в твердом – нерастворимые частицы пыли, в жидком – капельки солевого раствора. Наиболее обычное явление – смешанные частицы, состоящие из твердого нерастворимого ядра и жидкой пленки солевого раствора. Обводнение час-

тиц начинается уже при влажности 30%, что позволяет считать частицы в некотором приближении сферическими. Сдвиг вправо кривой континентального распределения за счет обводнения при влажности выше 70% для смешанных частиц, содержащих около 20% растворимого вещества, показан на рис. 3.1.2.

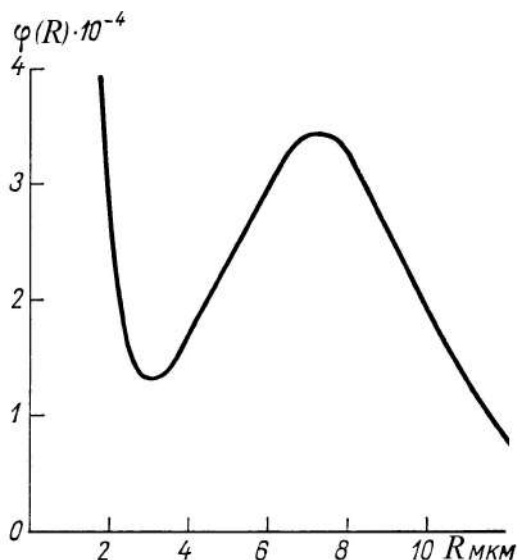


Рис. 3.1.3. Пример спектра облачных капель в слоистом облаке, при влажности $0,06 \text{ г/м}^3$, горизонтальное усреднение порядка $1,5 \text{ км}$, высота порядка 100 м над нижней границей

При относительно малых пересыщениях, обычно существующих в облаках, только частицы с $R \geq 0,1 \text{ мкм}$ могут превратиться в непрерывно растущие капли. Спектр облачных капель в области $R \leq 3 \text{ мкм}$ мало изучен. По имеющимся скудным данным можно сделать вывод, что в диапазоне $1 \text{ мкм} \leq R \leq 3 \text{ мкм}$ он имеет минимум (рис. 3.1.3). Для диапазона размеров $2 \text{ мкм} \leq R \leq 20 \text{ мкм}$ в настоящее время накоплен большой объем экспериментального материала. Различными исследователями предлагались различные аналитические выражения для аппроксимации данных. Наиболее широко и удачно использовалась аппроксимация эмпирических распределений с помощью так называемого гамма-распределения

$$f(R) \approx \frac{N}{\Gamma(1+\mu)} \frac{R^\mu}{\beta^{\mu+1}} \exp(-R/\beta), \quad (3.1.2)$$

где N – концентрация капель; β и μ – некоторые параметры; $\Gamma(\mu)$ – гамма-функция. Подробную методику аппроксимации с помощью представленной зависимости разработал Л. М. Левин. К аналогичному типу относится, например, известное эмпирическое распределение Хргиана–Мазина $\mu = 2$, наиболее обоснованная конкретная форма которого имеет следующий вид:

$$f(R) \approx 1,45 \frac{C_w}{\rho_w \langle R \rangle^6} R^2 \exp(-3R/\langle R \rangle),$$

где C_w – водность; ρ_w – плотность воды.

Средние радиусы в эмпирических распределениях для облаков, не дающих осадки, группируются обычно в окрестности 6 мкм, их положение зависит от формы облачности, т. е., в конечном счете, от ее происхождения, изменяясь приближенно от 4 до 8 мкм. Концентрация капель в диапазоне $2 \text{ мкм} < R < 20 \text{ мкм}$ составляет несколько сотен в 1 см^3 , зависит от высоты и происхождения облака. Типичные спектры для различных облаков приведены на рис. 3.1.4.

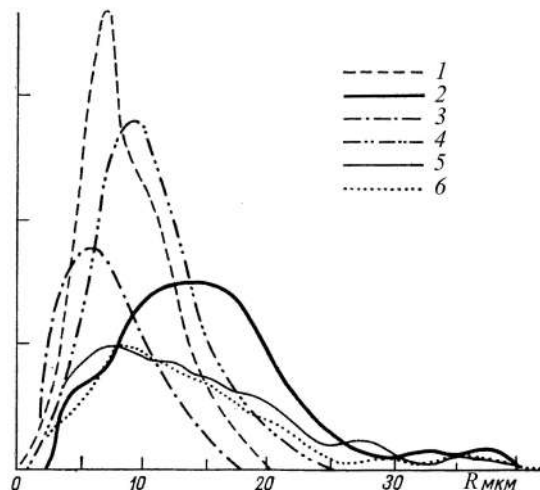


Рис. 3.1.4. Типичные спектры облачных капель (по оси ординат – произвольные единицы): 1 – кучевые облака, 2 – мощные кучевые, 3 – слоистые кучевые, 4 – высокослоистые, 5 – слоисто-дождевые, 6 – слоистые.

Подведем итоги. Спектры капель сильно меняются от одного физически бесконечно малого объема к другому (см. рис. 3.1.4). Наблюдаются явно выраженные колебания спектра частиц. Можно предположить, что имеется несколько независимых распределений, в результате сложения которых образуется конечное распределение. Связано это с изменением механизма коагуляции частиц в увеличении их размера, поскольку в области больших размеров проявляется преимущество дискретного характера роста частиц в результате коагуляции над их регулярным ростом за счет конденсации. Так, основным свойством распределения дисперсных частиц (капель) является его дискретность. В этой связи можно говорить о том, что имеется несколько связанных между собой иерархических уровней дисперсной системы.

3.1.2. Фрактальная размерность и дисперсные системы

Дисперсная система на каждом иерархическом уровне является открытой макроскопической системой. Открытость обусловлена наличием обмена веществом и энергией с другими системами или между соседними уровнями. Макроскопичность обусловлена тем, что на каждом уровне дисперсная система может состоять из большого числа принимаемых за элементарные частицы. В силу макроскопичности каждого уровня дисперсной системы, а также ввиду сложно-

сти полного контроля внешних условий достаточно полное и адекватное их описание может быть проведено на основе статистической теории. При этом могут быть получены выражения, описывающие процессы, происходящие в различных пространственно-временных масштабах.

Однако процессы, которые могут иметь место в открытых макроскопических системах, настолько сложны, что в настоящее время лишь немного можно изложить с достаточной полнотой и последовательностью. Во многих случаях при выборе математических моделей приходится в большей мере полагаться на интуицию и эмпирические данные. Удачным дополнением, а в некоторых случаях и заменой статистических методов могли бы быть динамические уравнения, описывающие поведение сложных нелинейных систем. Интенсивное развитие нелинейной динамики во многом вызвано введением новых понятий, одним из которых является понятие фрактальной размерности, давшее возможность использовать ее достижения в решении практических задач. Принципы и понятия теории фрактальной размерности нашли широкое применение в математике и теоретической физике. Однако химическая технология не являлась до сих пор объектом приложения данной теории. По-видимому, сложность заключается в неоднозначности самого понятия *фрактальность*.

Речь идет о поведении динамической диссипативной системы (дисперсной системы). Наиболее доступной (если не единственной) численной характеристикой хаотического поведения является размерность аттрактора. Если дисперсную систему можно рассматривать как некоторое точечное множество, то и для анализа ее равновесного состояния наиболее приемлем расчет размерности множества дискретных объектов. Размерность точечного множества можно определить различными способами.

Фрактальная размерность. Опишем то, что принято называть *фрактальными* свойствами и *фрактальной* размерностью обширного класса кривых или процессов.

Предположим, что нам дан очень нерегулярный отрезок кривой (недифференцируемой в бесконечно большом числе точек – такие траектории описывает частица, совершающая броуновское движение в жидкости). Требуется вычислить длину некоторой его части, заключенной между точками *A* и *B*, и размерность отрезка. На *более формальном* уровне мы хотим узнать «полную длину» множества, занятого состояниями, и размерность этого множества. Трудно удержаться от искушения и не высказать предположение о том, что размерность этого множества равна 1. Как мы увидим, такое предположение, вообще говоря, неверно.

С целью определения длины отрезка выберем длину мерного стержня, равную, например, ϵ . Затем попытаемся сосчитать число сторон (одинаковой длины ϵ) открытого многоугольника, вершины которого расположены на кривой. Если ϵ – достаточно малая величина, то несущественно, с какого конца – *A* или *B* – мы начинаем. В результате получим некоторую оценку длины $L(\epsilon)$. В отличие от регулярной, бесконечно дифференцируемой кривой, в нашем случае оценка длины $L(\epsilon)$ сильно зависит от ϵ . Следовательно, оценку $L(\epsilon)$ необхо-

димо знать при нескольких значениях ε . Еще лучше было бы знать аналитическую формулу для функции $L(\varepsilon)$, например вида $L(\varepsilon) \approx A\varepsilon^{1-d}$. Константа d больше или равна единице. Постоянная d называется *фрактальной* размерностью исследуемой кривой и может быть нецелым числом.

Попытаемся понять природу фрактальной размерности. Начнем с прямой в евклидовом пространстве, имеющей размерность 1. Следовательно, для любого положительного целого N отрезок $0 \leq x < X$ может быть разложен на N неперекрывающихся отрезков вида

$$\frac{(n-1)X}{N} \leq x < \frac{nX}{N},$$

где n принимает значения от 1 до N . Каждый из этих отрезков получается из целого преобразованием подобия с коэффициентом подобия $r(N) = 1/N$.

Аналогично, плоскость имеет размерность 2. Следовательно, для любого точного квадрата (числа) N прямоугольник $0 \leq x < X$, $0 \leq y < Y$ может быть разложен на N неперекрывающихся прямоугольников вида

$$\frac{(k-1)X}{\sqrt{N}} \leq x < \frac{kX}{\sqrt{N}}, \quad \frac{(m-1)Y}{\sqrt{N}} \leq y < \frac{mY}{\sqrt{N}},$$

где k и m принимают значения от 1 до \sqrt{N} . Каждая из этих частей получается из целого преобразованием подобия с коэффициентом подобия $r(N) = 1/\sqrt{N}$.

В общем случае, если $N^{1/d}$ – положительное целое число, то d – мерный прямоугольный параллелепипед, может быть разложен на N параллелепипедов, каждый из которых получается из исходного параллелепипеда преобразованием подобия с коэффициентом подобия $r(N) = 1/N^{1/d}$. Так, емкостная размерность d (от *англ.* capacity dimension) характеризуется соотношением

$$d = -\frac{\ln N}{\ln r(N)}. \quad (3.1.3)$$

Попытаемся теперь вычислить размерность *множества Кантора* точек, расположенных вдоль какой-то части плоскости. Она определяется через число N шаров диаметра ε , необходимых для покрытия данного множества.

Рассмотрим равномерное распределение N_o точек вдоль некоторой линии (рис. 3.1.5), или одномерного многообразия в трехмерном пространстве. Множество точек можно покрыть малыми кубами с ребром длиной ε . Вместо кубов можно взять сферы радиуса 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 следующим законом подобия:

$$N(\varepsilon) \approx 1/\varepsilon^d. \quad (3.1.4)$$

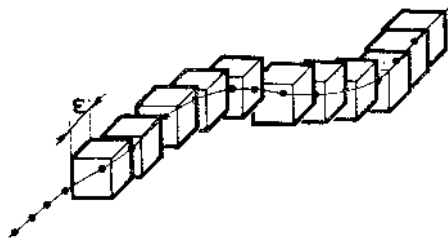


Рис. 3.1.5. Пример покрытия множества точек кубиками ϵ

Взяв логарифм от правой и левой части соотношения (3.2.4), получим

$$d = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln N(\epsilon)}{\ln(1/\epsilon)}. \quad (3.1.5)$$

Если мы хотим знать расположение множества с точностью до ϵ , то для указания его нам необходимо знать положение $N(\epsilon)$ сфер, покрывающих множество. Следовательно, размерность множества Кантора можно интерпретировать как характеристику множества, говорящую нам, *сколько информации необходимо для того, чтобы определить расположение множества с заданной точностью*. Построенное таким образом множество Кантора обладает свойством *масштабной инвариантности*, т. е. все множество, заключенное между 0 и 1, выглядит точно так же, как, например, его часть, заключенная между 0 и $1/3$, если последнюю рассматривать под трехкратным увеличением. Неявно в этом определении содержится требование, согласно которому число точек в множестве должно быть большим, или $N_o \rightarrow \infty$.

Точечное множество называется фрактальным, если оно имеет не целую размерность, – отсюда термин *фрактальная размерность*.

Поточечная размерность. Можно представить поведение смеси в некотором фазовом пространстве, когда одна из координат есть время, а две другие определяют состояние системы в целом. Рассмотрим какую-нибудь траекторию в фазовом пространстве (рис. 3.1.6,а) на протяжении продолжительного интервала времени. Произведем, во-первых, выборку точек с тем, чтобы получить на траектории достаточно большое число представляющих точек. Во-вторых, опишем вокруг какой-нибудь точки на траектории сферу радиуса r (или куб с ребром r) и подсчитаем число выборочных точек $N(r)$, попавших внутрь сферы. Вероятность того, что выборочная точка окажется внутри сферы, мы получим, разделив $N(r)$ на полное число выборочных точек на траектории:

$$p(r) = N(r)/N_o. \quad (3.1.6)$$

Для одномерной замкнутой периодической орбиты зависимость вероятности $p(r)$ от r линейна, при $r \rightarrow 0$ или $N_o \rightarrow \infty$ имеем $p(r) \approx br$.

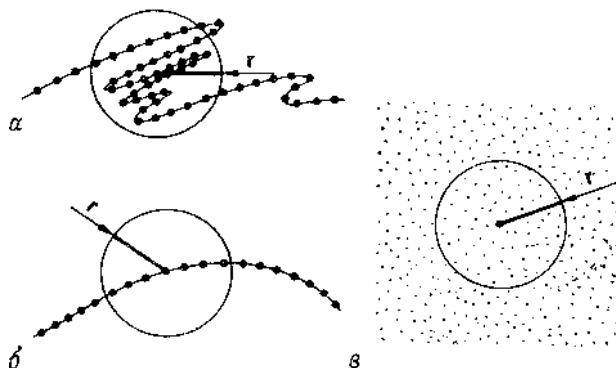


Рис. 3.1.6. Методы вычисления поточечной фрактальной размерности множества точек

Если бы траектория была квазипериодической и лежала на некоторой двумерной поверхности тора в трехмерном фазовом пространстве, то вероятность найти точку траектории в малой сфере радиусом r составляла бы величину $p(r) \approx br^2$. Поэтому логично определять размерность траектории в точке x_i путем измерения доли времени, проводимого траекторией внутри малой сферы:

$$d_p = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\log p(r; x_i)}{\log r}, \quad (3.1.7)$$

где x_i – вектор в фазовом пространстве.

Для некоторых аттракторов это определение не зависит от точки x_i . Но для многих аттракторов d_p зависит от x_i , и поэтому лучше пользоваться усредненной поточечной размерностью. Для таких множеств, как множество Кантора, в распределении точек имеются щели, или пробелы, поэтому и $p(r)$ при $r \rightarrow 0$ перестает быть непрерывной функцией от r .

Чтобы получить усредненную поточечную размерность, выбирают случайным образом множество точек $N < N_o$ и в каждой его точке вычисляют $d_p(x_i)$ (рис. 3.1.6,б). После того как это сделано, усредненная поточечная размерность вычисляется по формуле

$$d_p = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N d_p(x_i). \quad (3.1.8)$$

В качестве альтернативы можно усреднять вероятности $p(r; x_i)$. Для этого мы выбираем случайное подмножество из N точек, расположенных вокруг аттрактора ($N \dots N_o$), и предполагаем, что

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N p(r; x_i) = ar^{dp}$$

или

$$d_p = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\log(1/N) \sum p(r)}{\log r}.$$

На практике $N_o \approx 10^3 - 10^4$ точек, поэтому $N \approx 10^2 - 10^3$.

Другой метод вычисления фрактальной размерности состоит в усреднении по размерам кубов в фазовом пространстве, содержащих одно и то же число точек (рис. 3.1.6,в). Выбирая различные точки отсчета $[x_i]$ (центры сфер или кубов), вычисляют $r_i(N)$ и берут среднее по n точкам отсчета:

$$\langle r(N) \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_i(N).$$

Предполагается, что для фракталов выполняется закон подобия $N \approx r^{-d}$.

Корреляционная размерность. Этот вариант фрактальной размерности использовали экспериментаторы. Между поточечной размерностью и корреляционной размерностью существует определенная связь. Как и при определении поточечной размерности, непрерывная траектория заменяется множеством из точек $[x_i]$ в фазовом пространстве (рис. 3.1.7).

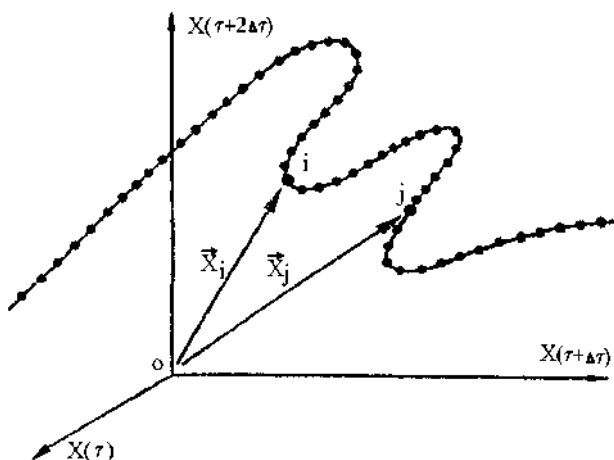


Рис. 3.1.7. К расчету корреляционной размерности

Траектория восстановлена по точкам на основании значений простой переменной $X(\tau)$, методом запаздывающего аргумента. С этой целью использовано пространство с координатами $X(\tau), X(\tau + \Delta\tau), X(\tau + 2\Delta\tau)$. Затем вычисляют расстояние между парами точек $s_{ij} = |x_i - x_j|$, используя либо обычную евклидову меру расстояния (квадратный корень из суммы квадратов компонент), либо какую-нибудь эквивалентную меру (например, сумму абсолютных компонент вектора). В хаотическом режиме положение двух точек, разделенных во времени на одной и той же траектории, не коррелировано. Так как все точки лежат на аттракторе, существует пространственная корреляция, которую можно охарактеризовать с помощью некоторой функции:

$$F_k(r) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N^2}, \quad (3.1.9)$$

где $F_k(r)$ – число пар (i, j) , для которых расстояние $s_{ij} < r$. Однако $F_k(r)$ можно вычислить более эффективно, описав в фазовом пространстве сферу (или куб) вокруг каждой точки x_i и подсчитав число точек в каждой сфере, т. е.

$$F_k(r) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \delta(r - |x_i - x_j|), \quad i \neq j, \quad (3.1.10)$$

где $\delta = 1$ при $s_{ij} > 0$ и $\delta = 0$ при $s_{ij} < 0$.

Эта величина отличается от поточечной размерности тем, что суммирование проводится вокруг каждой точки и для многих аттракторов зависит от r при $r \rightarrow 0$ по степенному закону, т. е. $\lim_{r \rightarrow 0} F_k(r) = ar^{d_k}$, поэтому фрактальную, или корреляционную, размерность можно определить по наклону прямой на графике $(\ln F_k, \ln r)$:

$$d_k = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\log F_k(r)}{\log r}. \quad (3.1.11)$$

Применимость степенного закона ограничена значением r , достаточно малым по сравнению с размерами аттрактора. При увеличении r число точек, попавших в контрольную сферу, достигает насыщения и, следовательно, $F_k(r) \rightarrow 1$. При очень малых значениях r число пар точек i, j , расстояние между которыми меньше r , становится малым, поскольку число точек на аттракторе конечно. Следовательно, на практике степенной закон выполняется только в ограниченном диапазоне значений r и может быть использован для определения корреляционной размерности аттрактора.

Информационная размерность. В свою очередь, множество точек рассматривается как равномерная дискретизация непрерывной траектории. Предполагается, что траектория выбрана достаточно длинная и что она эффективно покрывает аттрактор, размерность которого подлежит измерению. Например, если движение квазипериодическое, то траекторию следует рассматривать на достаточно продолжительном временном интервале, чтобы она успела *посетить* все области на поверхности тора аттрактора. Понятие информационной размерности тесно связано с процессом измерения. Рассмотрим измерительный прибор с равномерной шкалой и ценой деления ε (разрешающей способностью). Измерение любой из N переменных таким прибором дает одно из $1/\varepsilon$ возможных чисел. Если по одному такому измерительному прибору использовать для измерения каждой из N переменных нашей динамической системы, то дискретность шкал всех N приборов приведет к разбиению пространства состояний к некоторому набору непустых непересекающихся измерительных «гиперкубов». Область пространства состояний, содержащая аттрактор, оказывается разделенной на ε^{-N} клеток, или ячеек, каждая из которых имеет размер N . Совокупность этих ячеек образует разбиение, и каждое измеримое состояние соответствует какой-то ячейке. Пусть $n(\varepsilon)$ – число ячеек, покрывающих аттрактор с ненулевой вероятностью (т. е. содержащих, по крайней мере, одну точку аттрактора). Некоторые точки будут содержать больше точек, чем другие, так как в некоторых областях пространства состояний поток бывает чаще, чем в дру-

гих. «Естественная мера» данной области пропорциональна частоте, с которой попадает в нее поток. Определим $p_i(\epsilon)$ как *плотность вероятности* того, что аттрактор окажется в i -й ячейке. Совокупность вероятностей $\{p_i(\epsilon)\}$ называется *грубым*, или *крупнозернистым*, распределением вероятности при разрешающей способности ϵ . Для вычисления информационной размерности мы находим число точек N_i в каждой из ячеек $n(\epsilon)$ покрытия и оцениваем вероятность $p_i(\epsilon)$ найти точку в i -й ячейке:

$$p_i(\epsilon) \equiv \frac{N_i}{N_0}, \quad \sum_{i=1}^N p_i(\epsilon) = 1, \quad (3.1.12)$$

где N_0 – общее число точек в множестве. Подчеркнем, что $N_0 \neq n(\epsilon)$.

Среднее количество информации, содержащееся в одном измерении, производимом с разрешающей способностью ϵ , равно

$$I(\epsilon) = - \sum_{i=1}^{n(\epsilon)} p_i(\epsilon) \log_2 p_i(\epsilon) \text{ [бит]}. \quad (3.1.13)$$

При уменьшении ϵ (повышении разрешающей способности) число ячеек возрастает, и мы получаем последовательность более тонких, более *мелкозернистых* распределений вероятности. Информационная размерность d_I есть скорость увеличения количества информации при увеличении точности измерения:

$$d_I = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{I(\epsilon)}{\log_2(1/\epsilon)}. \quad (3.1.14)$$

Размерность d_I определяется асимптотическим значением углового коэффициента графика $I(\epsilon)$ в зависимости от $\log_2(1/\epsilon)$.

Если информационная размерность аттрактора известна, то количество информации $I(\epsilon)$, содержащееся в одном измерении состояния, производимом с разрешающей способностью ϵ , оценивается величиной

$$I(\epsilon) = d_I |\log_2 \epsilon|. \quad (3.1.15)$$

Если вероятность всех ячеек в разбиении равна, то

$$I(\epsilon) = \log_2 n(\epsilon) \quad (3.1.16)$$

и информационная размерность достигает своего максимума, когда совпадает с *фрактальной* размерностью (3.1.5):

$$d = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\log_2 [n(\epsilon)]}{\log_2(1/\epsilon)}. \quad (3.1.17)$$

Фрактальная размерность есть верхняя граница информационной размерности. Однако предел (3.1.17) может существовать далеко не всегда. В том случае, когда предел не существует, вводят понятия нижней и верхней информационной размерности.

Весьма жесткое требование масштабной инвариантности множества (объекта) существенно сужает область применения теории, ограничивая ее экзотическими объектами типа снежинок или математических абстракций, имеющих скорее эстетическую ценность. Применимость этой теории можно расширить,

определив фрактальную размерность как дробную размерность точечного множества. В частности, понятие информационной размерности (или информационной энтропии), используемое при описании поведения дисперсных систем, не имеет столь адекватной физической интерпретации.

Мы будем использовать гипотезу о том, что фрактальная размерность множества определима в том случае, если само множество либо мера, определенная соответствующим образом на данном множестве, обладают свойством масштабной инвариантности. Такое допущение позволяет применить весьма продуктивные методы теории фрактальности к традиционным объектам химической технологии.

Подведем итоги. Описание смысловой стороны модели дисперсной системы является весьма сложной задачей, не имеющей универсального решения. Не всегда вопросы моделирования в настоящее время могут быть решены с использованием только теоретических методов. Остается еще много задач, требующих лабораторных экспериментальных исследований с последующей их проверкой в условиях производства. В связи с этим широкое распространение в инженерной практике еще находят эмпирические или полуэмпирические расчетные зависимости. Можно сформулировать некоторые общие принципы построения адекватного математического описания иерархической структуры модели:

- математические модели различных уровней дисперсной системы не должны использовать взаимоисключающие теоретические или полуэмпирические допущения и методы решения, т. е. описание в рамках одной модели должно быть по возможности единообразным;
- число параметров, связывающих различные уровни модели, должно быть минимальным;
- необходимо стремиться к достижению максимальной полноты физической интерпретации математического описания.

3.1.3. Описание свойств дисперсных систем

Под дисперсной системой при анализе химико-технологических процессов подразумевается механическая смесь газа (жидкой среды) с частицами дисперсной фазы (твердой или жидкой). Частица дисперсной фазы характеризуется, с одной стороны, положением ее центра тяжести \vec{x} , поступательной \vec{w} и угловой $\vec{\omega}$ скоростями и, с другой стороны, ее размером l , объемом V , формой Ψ , плотностью ρ_d , концентрацией целевого компонента C и т. д. Для сокращения записи параметры $\vec{x}, \vec{w}, \vec{\omega}, l, V$ можно считать компонентами некоторого обобщенного вектора \vec{a} .

Область изменения многомерного вектора \vec{a} некоторой i -й частицы будет составлять многомерное пространство A_i . Очевидно, что размеры пространства A для различных значений i могут не совпадать, поскольку для отдельных частиц диспергированной фазы какие-нибудь из значений составляющих вектора \vec{a} могут быть запрещены. Совокупность компонентов всех векторов \vec{a} всех частиц дисперсной фазы составляет некоторое обобщенное фазовое про-

пространство A . Пусть в дисперсной системе находится N частиц дисперсной фазы, а вектор \vec{a} для каждой частицы состоит из N_M компонентов. Тогда пространства A_i будут N_M -мерными, а пространство A будет $N_M \times N$ -мерным.

Микрофизическое состояние дисперсной фазы определяется фиксированным набором N_M параметров для N частиц. Поэтому его можно представить в виде некоторой точки в обобщенном фазовом пространстве A . Эту точку называют изображающей. При непрерывном изменении микрофизического состояния со временем изображающие точки, соответствующие различным моментам времени, образуют в пространстве A траекторию. Дифференциальные уравнения, описывающие эту траекторию, имеют в общем случае вид

$$d\vec{a}_i / d\tau = f_{\varphi_i}(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \dots, \vec{a}_N, \tau), \quad (3.1.18)$$

где \vec{a}_i — обобщенный вектор i -й частицы.

Число уравнений (3.1.18) будет, очевидно, равно произведению числа частиц в системе на число компонентов вектора a , т. е. $N \times N_M$.

Информация о микрофизике движения ансамбля частиц в фазовом пространстве содержится в уравнении (3.1.18), а макроскопические проявления этого движения описываются непрерывными (кусочно-непрерывными) функциями обобщенных координат. Статистическая механика служит связующим звеном между двумя уровнями описания, т. е. устанавливает соответствие между любой микроскопической динамической функцией f_{φ_i} и единственной макроскопической динамической функцией f_D . Поэтому в теории дисперсных систем для получения общих физических закономерностей используют статистико-вероятностное описание.

Следуя Гиббсу, рассмотрим не саму систему частиц, описываемых уравнением (3.1.18), а выберем в начальный момент времени N_M различных дисперсных систем, в каждой из которых находится ровно N частиц дисперсной фазы. Эти системы можно представить точками в пространстве A . Пусть N_M настолько велико и системы выбраны так, что можно ввести в пространстве A непрерывную функцию ρ , равную плотности систем (плотности точек, изображающих системы). Понятие непрерывности в обобщенном фазовом пространстве не является тривиальным и требует некоторого пояснения. При анализе физических процессов всегда задаются точностью определения параметров. Значения параметров, различающиеся лишь в пределах заданной точности, считаются физически неразличимыми. Так, установив точность определения компонентов вектора \vec{a} , мы тем самым зададим размеры некоторого объема ΔA . Особенность этого объема состоит в том, что изображающие точки систем, попавшие в него, будут физически неразличимы. Непрерывность функции ρ в пространстве A означает совпадение значений этой функции на ΔA в пределах заданной точности ее определения. Объем ΔA можно считать бесконечно малым и обозначить через dA . Заметим, что набор переменных и точность их измерения определяют так называемый уровень описания системы.

Совокупность систем, для которых можно ввести непрерывную функцию ρ_N , составляет статистический ансамбль. Отдельную систему ансамбля называют его индивидуальной реализацией. Введем обозначение

$$p_N(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \dots, \vec{a}_N) = \lim_{N_M \rightarrow \infty} \frac{\rho_N(N_M)}{N_M}.$$

Функция p_N представляет собой многочастичную плотность вероятности, т. е. $p_N \cdot dA_1 \cdot dA_2 \cdot \dots \cdot dA_N$ есть вероятность того, что в заданный момент времени первая частица находится в физически бесконечно малом объеме dA_1 , вторая – в dA_2 и так далее. Эту функцию называют N -частичной функцией распределения. Она определяет коллектив частиц в целом. С помощью N -частичной функции можно осуществить полное статистико-вероятностное описание коллектива, состоящего из N частиц. Если число частиц дисперсной фазы в индивидуальных реализациях ансамбля со временем не меняется, то уравнение эволюции N -частичной функции можно записать в виде уравнения сохранения плотности изображающих точек в A , которое аналогично известному из статистической физики уравнению Лиувилля:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} p_N(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \dots, \vec{a}_N, \tau) + \sum_{i=1}^{i=N} \frac{\partial}{\partial \vec{a}_i} \left[\frac{d\vec{a}_i}{d\tau} p_N(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \dots, \vec{a}_N, \tau) \right] = 0. \quad (3.1.19)$$

Уравнение (3.1.19) является уравнением непрерывности и отражает факт постоянства числа изображающих точек. Информация о свойствах системы содержится в векторах $d\vec{a}_i/d\tau$.

В общем случае N -частичная функция содержит значительно больше информации, чем это необходимо для описания тех или иных макрофизических характеристик химико-технологических процессов. Для упрощения анализа применяют так называемое сокращенное описание. К сокращенному описанию приходят, используя вместо N -частичной функции распределения одночастичную (унарную) и двухчастичную (бинарную) функции распределения.

Унарную функцию из N -частичной можно получить следующим образом. Исходя из предположения, что пространства изменения переменных частиц совпадают, вводят обозначение

$$A_i = A_0; \quad i = 1, 2, \dots, N.$$

Путем интегрирования N -частичной функции по переменным всех частиц кроме i -й получают плотность вероятности того, что параметры i -й частицы будут находиться в физически бесконечно малой окрестности переменной точки пространства A_0 при произвольных значениях параметров других частиц. Чтобы получить аналогичную плотность вероятности не для i -й частицы, а для произвольной одной частицы коллектива, т. е. чтобы получить унарную функцию, следует дополнительно провести усреднение по всем частицам коллектива. Унарная функция определяется через N -частичную соотношением

$$\Psi(\vec{a}, \tau) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{i=N} \int p_N(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \dots, \vec{a}_N, \tau) d\vec{a}_1 \dots d\vec{a}_{i-1} d\vec{a}_{i+1} \dots d\vec{a}_N.$$

Бинарная и последующие функции находятся аналогично. Например, для бинарной плотности вероятность того, что параметры двух произвольных частиц коллектива находятся в физически бесконечно малых окрестностях некоторых двух переменных точек пространства при произвольных значениях параметров других частиц, составляет

$$f(\vec{a}, \vec{a}, \tau) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{i=N} \int p_N(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \dots, \vec{a}_N, \tau) \times d\vec{a}_1 \dots d\vec{a}_{i-1} d\vec{a}_{i+1} \dots d\vec{a}_{j-1} d\vec{a}_{j+1} \dots d\vec{a}_N.$$

Для решения довольно большого числа задач достаточно только информации об эволюции во времени унарной функции. Кинетические уравнение, описывающее эволюцию этой функции, в некоторых случаях записывают, исходя из феноменологических соображений, основанных на общих законах сохранения. Полученное таким способом кинетическое уравнение может иметь лишь эвристический характер. Строгий его вывод из уравнения Лиувилля чрезвычайно труден, к тому же предполагает усреднение по ансамблю реализации.

В момент τ среднее по ансамблю может в какой-то мере характеризовать поведение отдельной реализации, если в большинстве реализаций происходящие через промежуток времени от $\tau - \Delta\tau$ до τ события имели место за тот же конечный промежуток времени, что и в отдельной реализации. Это значит, что достаточно большое число $N_M(\Delta\tau)$ изображающих точек реализации ансамбля в момент времени τ должно группироваться в физически бесконечно малой окрестности траектории, которую описывает в промежутке времени между $\tau - \Delta\tau$ и τ изображающая точка отдельной реализации. Среднее по ансамблю в этом случае будет приближенно равно среднему по промежуткам времени порядка $\Delta\tau$ для произвольной реализации. При этом отклонение среднего по ансамблю от среднего по времени (обозначим его через δ) будет тем меньше, чем больше изображающих точек реализации ансамбля сгруппируется в окрестности $A_\delta(\tau, \Delta\tau)$. Число $N_M(\Delta\tau)$ не может быть убывающей функцией, поэтому, для того чтобы δ было достаточно мало, необходимо, чтобы $\Delta\tau$ было достаточно велико. Однако беспредельно увеличивать $\Delta\tau$ для нестационарной унарной функции нельзя: если время характерного изменения этой характеристики имеет порядок $\tilde{\tau}$, то должно выполняться условие $\Delta\tau \leq \tilde{\tau}$.

Уменьшить δ можно, не только увеличивая $\Delta\tau$, но и огрубляя условия различимости отдельных реализаций ансамбля с помощью усреднения по небольшим областям изменения всех или какой-нибудь части переменных, характеризующих коллектив частиц отдельной реализации. Такого типа усреднение называют обычно крупнозернистым. Обозначим через ΔA_δ область, по которой проводится усреднение. Для фиксированного шага по времени $\Delta\tau$ чем больше ΔA_δ , тем большее число реализаций будет группироваться в $A_\delta(\tau, \Delta\tau)$. Это происходит из-за огрубления условия различимости отдельных реализаций, т. е. из-за увеличения размеров области, определяемой как физически бесконечно малая. Увеличивая ΔA_δ , можно добиться уменьшения δ до заранее заданного достаточно малого значения даже при очень малом $\Delta\tau$. Однако беспредельно увеличивать ΔA_δ для неоднородной по \vec{a} макроскопической характеристике

нельзя. Если размер неоднородностей этой характеристики по компоненте \bar{a}_i вектора \bar{a} имеет порядок l_i , то должно выполняться условие $\Delta a_i \ll l_i$.

Аналогичные соображения по этому вопросу приведены и проанализированы в работе. При описании того или иного процесса необходимо сформулировать ограничения для компонентов \bar{a}_i вектора \bar{a} с учетом его особенностей. При изучении процессов разделения в дисперсных системах, таких как коагуляции дисперсных частиц, конденсации на дисперсных частицах, имеют дело с унарной функцией $f_d = Nf$, зависящей от пространственных переменных \bar{x} , характерного размера частиц V и времени τ . Ее нормируют так, что

$$\int f_d(\bar{x}, V, \tau) dV = n(\bar{x}, \tau); \quad \int n(\bar{x}, \tau) d\bar{x} = N(\tau),$$

где $n(\bar{x}, \tau)$ – концентрация частиц в системе; N – полное число частиц. По определению

$$N^{-1} f_d(\bar{x}, V, \tau) dV d\bar{x} = f(\bar{x}, V, \tau) dV d\bar{x}.$$

Функция $f(\bar{x}, V, \tau)$ представляет собой вероятность попадания в момент времени τ произвольной частицы, которая имеет размер в интервале от V до $V + \Delta V$, в достаточно малый объем $d\bar{x}$ с постоянным содержанием дисперсной фазы и с координатами \bar{x} . Функции $f_d(\bar{x}, V, \tau)$ и $f(\bar{x}, V, \tau)$ называются плотностью функций распределения в фазовом пространстве, а короче – функциями распределения или просто распределениями. Функция $f_d(\bar{x}, V, \tau)$ нормирована на число частиц в системе, а $f(\bar{x}, V, \tau)$ – на единицу.

Подведем итоги. Корректное описание поведения дисперсных систем возможно только на основании кинетических уравнений, отражающих эволюцию функций распределения во времени и пространстве параметров \bar{a} . Выбор параметров функции распределения зависит от стоящей перед исследователем задачи.

3.1.4. Модель дисперсной системы со случайным распределением частиц

Требуется разработать новый подход к прогнозированию возможных отклонений от средних значений содержания дисперсных частиц в некотором заданном объеме (объеме пробы) в зависимости от свойств дисперсной системы. Важно, чтобы при этом учитывался и объем самой системы. Моделирование поведения дисперсной системы на основе (3.1.19) связано с проведением сложных вычислений, которые будут зависеть от характера внешних воздействий, их пространственно-временной структуры, свойств дисперсных частиц и самой системы. В результате расчетов мы сможем описать поведение конкретной системы в равновесном состоянии, которое обязательно будет отличаться от системы со случайным распределением частиц. Состояние смеси со случайным распределением компонентов не зависит от особенностей ее образования и является инвариантной ее характеристикой. Для решения поставленной задачи более правильно использовать методы фрактальной размерности для непосредственного анализа системы со случайным распределением дисперсных частиц.

Дисперсные системы представляют собой совокупность отдельных частиц определенной плотности и размера. Примем, что частицы не взаимодействуют друг с другом и не образуют связанных пространственных структур и их совокупность можно считать дискретным объектом. Поставив в соответствие каждой частице точку в евклидовом пространстве, осуществим переход к абстрактному математическому объекту – точечному множеству. Как было показано, одним из важных (если не единственным) свойств точечных множеств является их размерность. В настоящее время для анализа точечных множеств наиболее полной в теоретическом плане является модель, основанная на использовании понятия фрактальной размерности. Теоретические достижения в разработке модели позволяют использовать ее при решении практических задач.

Мы будем использовать гипотезу о том, что фрактальная размерность множества определима в том случае, если само множество либо мера, определенная соответствующим образом на данном множестве, обладают свойством масштабной инвариантности. Такое допущение позволяет применить весьма продуктивные методы теории фрактальности к традиционным объектам химической технологии и вместо множества точек рассматривать множества объектов (дисперсных частиц), имеющих конечные размеры.

Постановка задачи. Необходимо определить возможное отклонение содержания дисперсных частиц в произвольном объеме (пробе) от его среднего значения для системы со случайным распределением частиц. Известны: объем отдельной частицы v_0 и их объемная средняя концентрация $n_0 = N_0 v_0 / V$. Внешние условия: общий объем смеси V , объем пробы V^* .

Решение. Данную задачу, как правило, пытались решить на основе уравнений статистической теории или эмпирическим путем. Более удачное решение получается, если воспользоваться подходом, базирующимся на понятии фрактальной размерности. В качестве критерия оценки состояния дисперсных систем будем использовать емкостную (информационную) размерность множества, определяемую аналогично фрактальной размерности канторова множества. Оказывается возможным оценить возможные неоднородности в системе дисперсных частиц.

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 (3.1.3), которое при условии конечности размеров частиц будет иметь следующий вид:

$$d = \ln N / \ln(1/\epsilon), \quad (3.1.20)$$

где N – число элементов множества (число частиц ключевого компонента в смеси); ϵ – размер единичных кубов (шаров), покрывающих точки множества (мера множества).

Если в качестве меры множества принять размер частицы, то число элементов системы, имеющих концентрацию c_0 и объем частиц v_0 , равно

$$N = c_0 V / v_0 = N_0. \quad (3.1.21)$$

В качестве меры множества принимаем следующее отношение, которое предполагает, что ключевой компонент состоит из частиц одного размера:

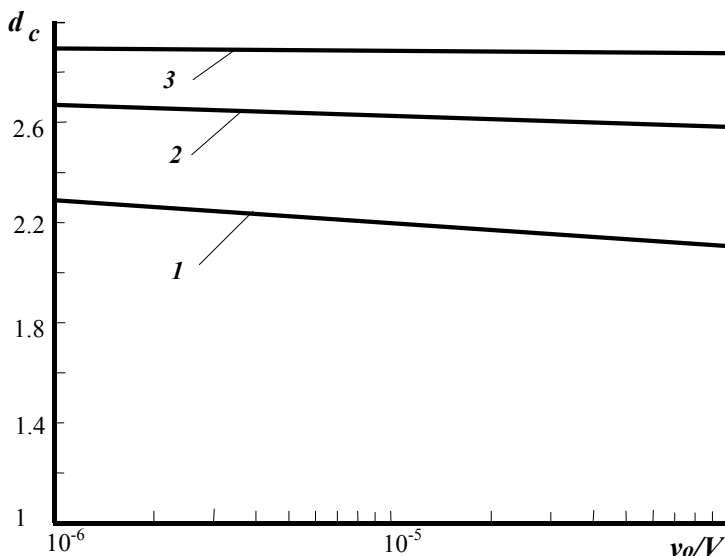
$$\varepsilon = (n_o / N)^{1/3}, \quad (3.1.22)$$

тогда получим следующее выражение для фрактальной размерности смеси:

$$d = \frac{\ln N_o}{\ln(V/v_o)^{1/3}} = 3 \frac{\ln N_o}{\ln(V/v_o)}. \quad (3.1.23)$$

При написании уравнения (3.1.23) предполагается, что точность измерения (мера множества) в нашем случае не превышает размера дисперсных частиц.

На рис. 3.1.8 показан пример расчета фрактальной размерности по формуле (3.1.23) для объема системы 10^{-3} м^3 в зависимости от объема частицы v_o .



**Рис. 3.1.8. Зависимость фрактальной размерности от отношения объема частицы к объему дисперсной системы: при объеме 1 литр;
1 - $c_o=0,01$; 2 - $c_o=0,1$; 3 - $c_o=0,5$.**

Минимальный объем частицы принят равным 1 мм^3 , максимальный – 100 мм^3 . При концентрации ключевого компонента 0,5 фрактальная размерность очень близка к трем, т. е. распределение дисперсных частиц близко к равномерному. С уменьшением концентрации равномерность уменьшается и распределение становится случайным.

При слишком малой концентрации число частиц уменьшается и уменьшается достижимая равномерность их распределения, о чем свидетельствуют малые значения величины фрактальной размерности (близкие к двум). Примерно такой же прямолинейный характер зависимости сохраняется в более широком диапазоне значений объемов частиц от 10^{-2} до 10^3 мм^3 .

Во втором примере расчета (рис. 3.1.9) увеличен объем системы, общее число частиц также возросло и возросла величина фрактальной размерности. Улучшилось распределение частиц по объему дисперсной системы.

Приведенные результаты расчетов показывают, что между степенью однородности системы и ее основными параметрами должна существовать однозначная количественная связь. Для установления этой количественной связи необходимо ввести в рассмотрение объем пробы. Только по результатам анализа содержания частиц в пробе можно судить о их распределении по объему системы. Для пробы объемом $V^* = \alpha V$ ($0 \leq \alpha \leq 1$) емкостная размерность найдется аналогично:

$$d^* = 3 \frac{\ln(\alpha N_o)}{\ln(\alpha V/v_o)}. \quad (3.1.24)$$

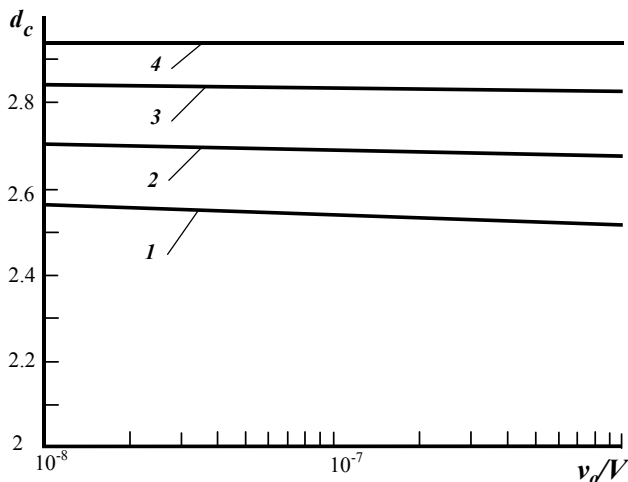


Рис. 3.1.9. Зависимость фрактальной размерности от отношения объема дисперсной частицы к объему дисперсной системы: при объеме 60 литров; 1 – $c_o=0,001$; 2 – $c_o=0,01$; 3 – $c_o=0,1$; 4 – $c_o=0,5$.

Очевидно, что для $\alpha < 1$ должно выполняться условие $d^* < d$, т. е. нарушается масштабная инвариантность пространственного распределения компонентов. Данный вывод подтверждают и проведенные выше расчеты.

Величина d характеризует предельное (однородное) состояние дисперсной системы при заданном значении концентрации и размере частиц. Под предельным понимается такое состояние системы, когда дальнейшее улучшение ее качества путем только случайного перераспределения частиц не представляется возможным.

Возникает задача, как, используя выражения для d и d^* , можно определить предельную (минимальную) дисперсию распределения частиц по отдельно взятым пробам. Необходимо выявить в явном виде зависимость между дисперсией и величиной фрактальной размерности, рассчитанной для дисперсной системы по (2.23). Будем исходить из предположения, что мерой неопределенности того, как распределены частицы по объему системы, является дисперсия, рассчитанная на основе анализа проб определенного размера. Считается, что практически достижимая минимальная дисперсия смеси соответствует случайному распре-

делению частиц. За исключением случая упорядоченного распределения частиц, когда дисперсия равна нулю.

При достаточно больших размерах системы, когда число частиц очень велико, значения ее концентрации в конкретных точках можно рассматривать как непрерывный источник информации. Оценка неопределенности выбора для непрерывного источника информации имеет определенную специфику. Во-первых, значения концентрации частиц n , реализуемые в различных точках системы, математически отображаются случайной непрерывной величиной. Во-вторых, вероятности значений этой случайной величины не могут использоваться для оценки неопределенности состояния системы, поскольку в данном случае вероятность любого конкретного значения равна нулю. В этом случае естественным является связывать неопределенность выбора значения случайной непрерывной величины с плотностью распределения вероятностей этих значений $p(n)$.

В нашем случае, если объем системы не ограничен, то выражение для энтропии $I(N)$ непрерывного источника информации имеет следующий вид:

$$I(N) = - \int_{-\infty}^{\infty} p(n) \ln p(n) dn - \lim_{\Delta n \rightarrow 0} \Delta n. \quad (3.1.25)$$

В соотношении (3.1.25) второй член в правой части стремится к бесконечности при стремлении к нулю разницы между соседними значениями случайной величины $\Delta n \rightarrow 0$, и мы заключаем, что энтропия непрерывного распределения бесконечно большая. В нашем заключении нет ничего парадоксального, более того, его следовало предвидеть заранее. Неопределенность выбора из бесконечно большого числа возможных состояний (значений ключевого компонента в конкретных точках смеси) бесконечно велика.

С точки зрения теории информации энтропия системы есть не что иное, как число вопросов, на которые необходимо ответить *да* или *нет* для того, чтобы полностью определить состояние системы. При бесконечном числе состояний однозначное задание одного из них очевидным образом требует бесконечного числа вопросов, и, в свою очередь, бесконечное число ответов *да* или *нет* порождает бесконечное число битов.

Первый член в правой части соотношения (3.1.25) имеет конечное значение, которое зависит от закона распределения случайной величины N и не зависит от точности ее определения Δn . Он имеет точно такую же структуру, как энтропия дискретного источника (3.1.8). Второй член того же соотношения, наоборот, зависит лишь от шага квантования Δn (точности определения) случайной величины N . Именно в нем кроется причина того, что величина $I(N)$ обращается в бесконечность. Для получения конечной характеристики информационных свойств непрерывного источника известны два подхода.

Первый подход состоит в том, что в качестве неопределенности принимают первый член соотношения (2.25):

$$I_n = - \int_{-\infty}^{\infty} p(n) \ln p(n) dn. \quad (3.1.26)$$

Определенную аналогичным образом энтропию, так называемую дифференциальную энтропию, можно трактовать как среднюю неопределенность выбора случайной величины N с произвольным законом распределения по сравнению со средней неопределенностью выбора случайной величины, изменяющейся в диапазоне от нуля до единицы и имеющей равномерное распределение.

Предположим, что ограничения на область значений случайной непрерывной величины N со средним значением, равным N_c , отсутствуют, но известно, что дисперсия ее ограничена. Тогда максимальной дифференциальной энтропией будет обладать нормальное распределение величины N со средним значением, равным N_c . Для смеси дисперсных материалов первое предположение вытекает из допущения о непрерывном распределении ключевого компонента по объему смеси, второе – из самой постановки задачи. При доказательстве решается задача определения функции $p(n)$, обеспечивающей максимальное значение функционала (3.1.26) при следующих ограничениях:

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(n)dn = 1 \text{ и } \int_{-\infty}^{\infty} n^2 p(n)dn = \sigma^2.$$

Искомую плотность распределения $p(n)$ можно найти, например, методом неопределенных множителей Лагранжа. Она оказывается гауссовской:

$$p(n) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(n - N_c)^2}{2\sigma^2}\right\}. \quad (3.1.27)$$

Вычислив функционал (3.1.26) для данного распределения, получим значение максимальной дифференциальной энтропии I_n^* :

$$\begin{aligned} I_n^* &= -\int p(n) \ln p(n)dn = -\int p(n) \left[-\frac{\ln(2\pi\sigma^2)}{2} - \frac{(n - N_c)^2}{2\sigma^2} \right] dn = \frac{1}{2} \ln(2\pi\sigma^2) + \frac{1}{2\sigma^2} \int (n - N_c)^2 p(n)dn = \\ &= \frac{1}{2} \ln(2\pi e\sigma^2 / N_c^2) = \ln(\sqrt{2\pi e}\sigma / N_c) \end{aligned}$$

или

$$I_n^* = \ln(\sqrt{2\pi e}\sigma / N_c). \quad (3.1.28)$$

При *втором* подходе к использованию соотношения (3.1.25) для количественного определения информации принимается во внимание невозможность практического обеспечения высокой точности различия определяемых значений непрерывного источника информации. Применительно к решаемой нами задаче значение концентрации может быть определено только при достаточно большом объеме пробы, когда вероятность найти в ней хотя бы одну частицу близка к единице. Поэтому возможное число значений N в пределах заданной точности измерений (объема пробы) следует рассматривать как одно значение. Из средней неопределенности выбора источником некоторого значения (единичной пробы) необходимо вычесть среднюю неопределенность того же источника, полученную при условии, что мы знаем результаты определения N с некоторой определенной точностью. Такая разность является мерой снятой неопределенности или количеством информации.

Можно показать, что при случайном выборе пробы из смеси среднее количество информации, содержащееся в каждой отдельной пробе, относительно количества информации, содержащегося в смеси в целом, равно разности априорной и апостериорной энтропии источника (дисперсной системы).

Вернемся к дискретной модели системы конечных размеров, образованной конечным множеством частиц. Как было показано выше, информационная энтропия зависит от точности измерения α , т. е. размера пробы. Согласно (3.1.3) и (3.1.5), выражение для оценки максимальной энтропии смеси (источника), содержащейся в одном измерении, может иметь следующий вид:

$$I(\alpha) = \sum_{i=1}^{n(\alpha)} d \log_2(\alpha) = (d - d^*) + \log_2(d - d^*). \quad (3.1.29)$$

При этом учитывалось, что масштабная инвариантность для смеси не сохраняется и фрактальная размерность зависит от объема пробы. В результате сравнения (3.1.28) и (3.1.29) имеем следующее равенство:

$$\log_2(\sqrt{2\pi e}\sigma/N_o) = (d - d^*) + \log_2(d - d^*).$$

После несложных преобразований получим искомое выражение для оценки дисперсии распределения частиц по отдельно взятым пробам (контрольным объемам) при известном контрольном объеме $\alpha = V^*/V$, числе частиц в системе N_o , их возможном максимальном числе $N = V/v_o$ и среднем содержании в анализируемом объеме $N_c = N_o\alpha$:

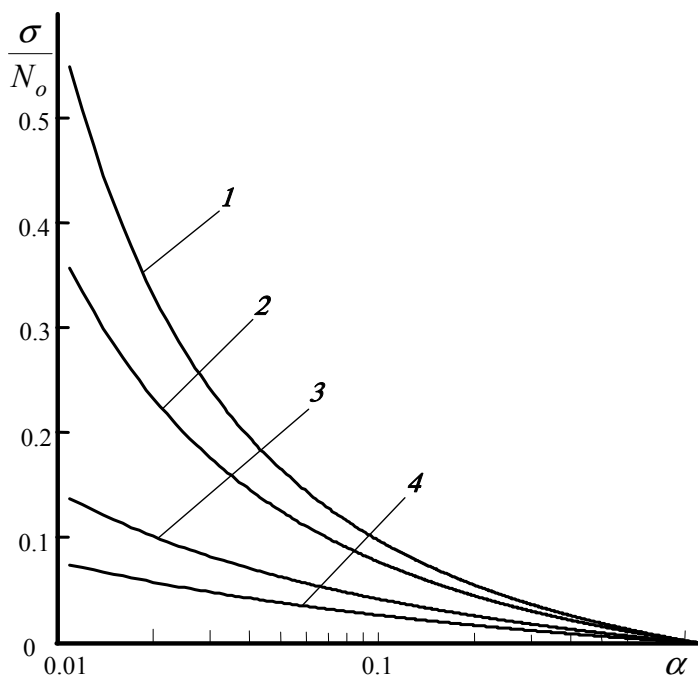
$$\sigma = \frac{N_c}{\sqrt{2\pi e}} \Delta d \exp \Delta d. \quad (3.1.30)$$

Выражение для разности фрактальных размерностей дисперсной системы d в целом и контрольного объема d^* имеет следующий вид:

$$\Delta d = d - d^* = d_o \left[\frac{\ln N_o}{\ln N} - \frac{\ln \alpha N_o}{\ln \alpha N} \right] = d_o \frac{\ln(\alpha) \ln(N_o/N)}{\ln(N) \ln(\alpha N)}. \quad (3.1.31)$$

В отдельных случаях достаточно рассчитать возможное отклонение числа частиц от среднего значения в анализируемом объеме (дисперсию). Рассмотрим влияние различных параметров на величину дисперсии, которая характеризует отклонение числа частиц в анализируемом объеме α от его среднего значения. Для удобства сравнения будем рассчитывать отношение дисперсии к средней их концентрации при заданном объеме пробы σ/N_o . При постоянном значении средней концентрации частиц дисперсия уменьшается с ростом максимально возможного числа $N = V/v_o$ частиц в системе и увеличением доли анализируемого объема (рис. 3.1.10). При значении $\alpha = 1$, т. е. когда анализируется вся смесь, дисперсия равна нулю. Поскольку все частицы сосредоточены в анализируемом объеме, их число совпадает со средним значением.

При выборе минимального значения анализируемого объема существует ограничение по числу частиц в нем. Если число частиц в анализируемом объеме становится меньше некоторого критического значения, то разница между фрактальной размерностью для системы в целом и анализируемого объема становится больше единицы, что противоречит физической сущности решаемой задачи.



**Рис. 3.1.10. Зависимость дисперсии от анализируемого объема (объема пробы) при средней концентрации частиц 10% и различном, максимально возможном, числе частиц в системе:
1 – 5000, 2 – 10000, 3 – 100000, 4 – 1000000.**

На рис. 3.1.11 показано влияние величины анализируемого объема на отклонение числа частиц в нем при постоянном их числе в системе. Общий характер зависимостей сохраняется, с увеличением средней концентрации частиц в системе их дисперсия в отдельно взятой пробе уменьшается. Причина такой зависимости та же. С увеличением средней концентрации растет число частиц, одновременно попадающих в анализируемый объем, и, следовательно, уменьшается относительная дисперсия σ/N_0 . Хотя абсолютное значение дисперсии σ при этом, несомненно, возрастает. Правильность выбора анализируемого объема зависит от характера решаемой задачи.

Однако задачу можно считать полностью решенной, если известна функция распределения, т. е. вероятность $p(n, \alpha)$ найти в некотором контрольном объеме $\alpha = V^*/V$ число частиц n при их числе в системе N_0 , их максимально возможном числе $N = V/v_0$ и среднем содержании в анализируемом объеме N_c . Выражение для вероятности $p(n, \alpha)$ имеет следующий вид:

$$p(n, \alpha) = \frac{\sqrt{e}}{N_c \Delta d \exp \Delta d} \exp \left\{ -\pi e \left[\frac{n - N_c}{N_c \Delta d \exp \Delta d} \right]^2 \right\}. \quad (3.1.32)$$

Практическое применение (3.1.31) зависит от особенностей конкретной дисперсной системы. При его написании учитывалось то, что основным параметром данной модели является анализируемый объем или, как мы его называли, объем пробы α , который в явном виде не входит в выражение (3.1.32).

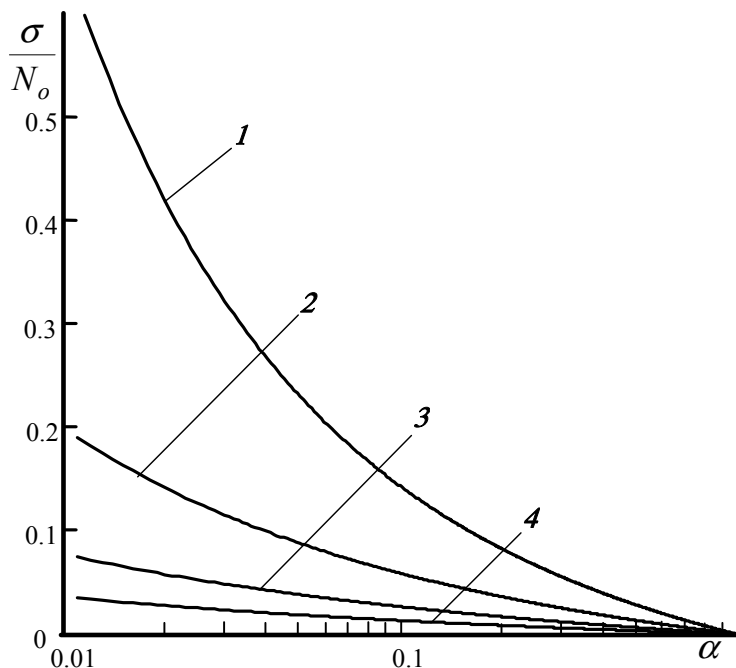


Рис. 3.1.11. Зависимость дисперсии от величины анализируемого объема при максимально возможном числе частиц в системе 1000000 и различной средней концентрации частиц: 1 – 0,0001, 2 – 0,01, 3 – 0,1, 4 – 0,3.

На рис. 3.1.12 приведен пример функций распределения, построенных при условии равенства: максимально возможного числа частиц в системе N , равного 6000, и среднего числа частиц в анализируемой пробе N_c , равного 10. Достигалось это за счет изменения числа частиц в системе N_o и объема α . При небольшом среднем числе частиц в анализируемой пробе наблюдается значительное отклонение от среднего. Отклонение уменьшается с увеличением числа частиц в системе N_o (кривая 1).

Величина возможного числа частиц в системе определяет ее объем при постоянном объеме частицы. На рис. 3.1.13 представлен пример функций распределения как для большего возможного числа частиц $N=100000$ (для большего объема, занимаемого частицами), так и для большего среднего числа частиц в анализируемой пробе $N_c=100$. Увеличение N и N_c приводит к тому, что абсолютное отклонение числа частиц в анализируемом объеме от среднего возросло (рис. 3.1.13). Однако их относительное отклонение уменьшилось. Общий ха-

рактор зависимости сохранился. Отклонение уменьшается с увеличением числа частиц в системе N_o .

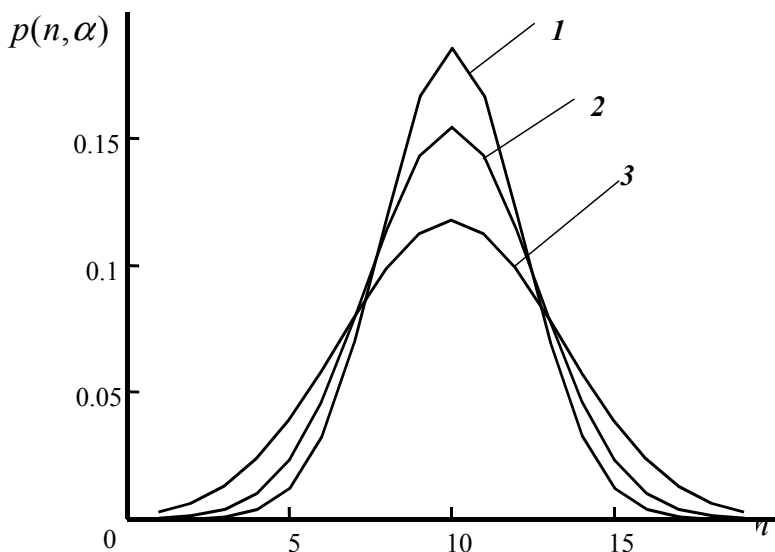


Рис. 3.1.12. Пример функций распределения:
 1 – $N_o=2500$ и $\alpha=0,004$; 2 – $N_o=2000$ и $\alpha=0,005$; 3 – $N_o=1000$ и $\alpha=0,01$.

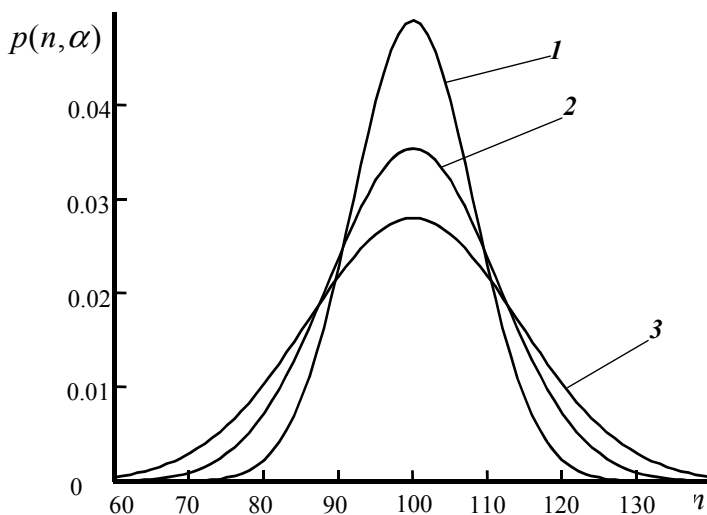


Рис. 3.1.13. Пример функций распределения: 1 – $N_o=40000$ и $\alpha=0,0025$;
 2 – $N_o=25000$ и $\alpha=0,004$; 3 – $N_o=4000$ и $\alpha=0,025$.

Представленные распределения $p(n, \alpha)$ являются нормальными распределениями Гаусса и, следовательно, обладают всеми присущими ему свойствами. Они приведены с целью показать характер возможного изменения числа частиц

в объеме пробы при изменении параметров анализируемой дисперсной системы. В этой связи возникает вопрос о подобии дисперсных систем, т. е. при каких условиях можно говорить о том, что распределение частиц в двух дисперсных системах подобно. Было показано, что при случайном выборе пробы из смеси среднее количество информации, содержащееся в каждой отдельной пробе, относительно количества информации, содержащегося в смеси, в целом равно разности априорной и апостериорной энтропии источника (дисперсной системы). В этом случае единственным критерием подобия может быть разность фрактальных размерностей смеси в целом и отдельно взятой пробы (3.1.31) при условии, что среднее число частиц в анализируемом объеме (пробе) $N_c = N_0\alpha$ сохраняется постоянным.

Подведем итоги. Поскольку полученное распределение отражает самые общие свойства дисперсных систем – отклонение числа частиц в отдельно взятой пробе (объеме) от его среднего значения, то оно может найти применение при решении самых различных задач. В нашем случае это может быть расчет скорости зародышеобразования или учет влияния концентрации аэрозольных частиц на скорость коагуляции.

3.1.5. Кинетика конденсационного роста аэрозольных частиц

Стохастические свойства конденсационного пылеулавливания наиболее полно проявляются при анализе поведения ансамбля дисперсных частиц, когда одновременно происходит их образование, дальнейший рост, агломерация и дробление. Для описания этих свойств и используется кинетическое уравнение конденсации (или уравнение баланса числа частиц по размерам). Хотя данное уравнение используется давно, вопросам его обоснования и пределам применимости стали уделять внимание только в последние годы. Необходимость в этом возникла в связи со стремлением учесть наибольшее число явлений при описании конденсационного пылеулавливания. К таким явлениям в первую очередь необходимо отнести агломерацию и дробление частиц, которые иногда весьма существенны в промышленных аппаратах. Сами по себе эти явления достаточно хорошо изучены и их учет не может быть сведен к простому переносу имеющихся результатов в теории коагуляции и измельчения дисперсных систем на изучаемый процесс.

В строгой постановке при выводе кинетического уравнения конденсации необходимо исходить из N -частичной функции распределения, переход от которой к одночастичной не столь тривиален и будет обсужден несколько позже. В рамках же одночастичной функции распределения построение уравнения баланса числа частиц по размерам возможно лишь при введении ряда допущений и предположений на основе феноменологического рассмотрения. Пусть в момент времени $\tau = 0$ в объеме с линейным размером L и с замкнутыми фиксированными границами находятся N_0 частиц объемами V_0 . Примем L настолько большим, чтобы можно было пренебречь влиянием границ. Аэрозольные частицы достаточно малы и многочисленны, так что можно считать непрерывным распределение частиц по размерам в пределах данного объема. Примем также, что расстояние между частицами много больше их собственных размеров.

Введем понятие одночастичной функции распределения. Пусть $f(\vec{x}, V, \tau) d\vec{x}, dV$ есть вероятность того, что частица (капля) из заданной совокупности имеет координаты в интервале от \vec{x} до $\vec{x} + \Delta\vec{x}$ и объем в интервале от V до $V + \Delta V$. Плотность распределения вероятности $f(\vec{x}, V, \tau)$ нормирована

$$\iiint_{L^3} \int_{V_0}^{V_m} f(\vec{x}, V, \tau) dV d\vec{x} = 1.$$

На функцию накладываются ограничения вида

$$\lim_{\substack{V \rightarrow V_0 \\ V \rightarrow V}} f(\vec{x}, V, \tau) = 0.$$

Для однородной системы, учитывая, что общее число капель меняется, можно использовать функцию $f_d(V, \tau) = f(V, \tau)$, характеризующую число частиц в единичном интервале объемов, приходящееся на единицу пространства.

Рассмотрим изменение дисперсности капель при нестационарной массовой конденсации. Это изменение может происходить за счет роста частиц, их разрушения или агломерации, а также за счет внесения капель извне.

Случай чисто конденсационного роста. Пусть для каких-то двух моментов времени τ_1 и τ_2 , разделенных интервалом $d\tau$, плотности распределения равны соответственно $f_1 = f(V_1, \tau_1)$ и $f_2 = f(V_2, \tau_2)$. Объемные скорости роста капель $[\eta(V) = dV/d\tau]$ с объемом V_1 и V_2 для момента времени τ равны соответственно $\eta_1(V) = \eta(V_1, \tau_1)$ и $\eta_2(V) = \eta(V_2, \tau_2)$. Изменение числа капель в интервале объемов $dV = V_2 - V_1$ за время $d\tau$ составит

$$[f(V_2, \tau_2) - f(V_1, \tau_1)] = \frac{\partial f(V, \tau)}{\partial \tau} d\tau dV. \quad (3.1.33)$$

Это изменение числа частиц в нашем случае вызывается, во-первых, притоком N^+ числа частиц из области объемов $V < V_1$:

$$N^+ = f(V_1, \tau_1) dV_1 = f(V_1, \tau_1) \eta(V_1, \tau_1) d\tau,$$

во-вторых, убылью N^- частиц из области V_2 в область объемов $V > V_2$:

$$N^- = f(V_2, \tau_1) dV_2 = f(V_2, \tau_1) \eta(V_2, \tau_1) d\tau.$$

Изменение числа частиц в интервале объемов dV за время $d\tau$ равно разности между притоком N^+ и убылью N^- , т. е.

$$N^+ - N^- = f(V_1, \tau_1) \eta(V_1, \tau_1) d\tau - f(V_2, \tau_1) \eta(V_2, \tau_1) d\tau = -\frac{\partial}{\partial V} [f(V, \tau) \eta(V)] dV d\tau. \quad (3.1.34)$$

Из совместного рассмотрения (3.1.33) и (3.1.34), которые выражают одно и то же изменение числа частиц, получим

$$\frac{\partial f(V, \tau)}{\partial \tau} = -\frac{\partial}{\partial V} [\eta(V) f(V, \tau)]. \quad (3.1.35)$$

Это уравнение отражает изменение дисперсности капель при периодическом процессе конденсации и впервые выведено Тодесом для периодической кристаллизации.

Учет флуктуаций скорости роста. Детерминированно-стохастическая природа конденсационного улавливания пыли проявляется в наличии флуктуаций скорости роста капель одного размера, колебание которой является следствием непостоянства скорости их осаждения (движения), различиями свойств поверхности, а также неоднородностью пересыщения по объему системы. При этом флуктуации происходят около среднего (для данного объема капли) значения объемной скорости роста $\langle \eta(V) \rangle$, что, в свою очередь, приводит к флуктуациям плотности распределения $f(V, \tau)$. Следовательно, можно записать выражение

$$\eta(V) = \langle \eta(V) \rangle + \tilde{\eta}_V, \quad (3.1.36)$$

где $\tilde{\eta}_V$ – пульсационная составляющая объемной скорости роста.

Пульсационные составляющие могут достигать значений от 5 до 50 % полной скорости роста капли. Относительно $\tilde{\eta}_V$ необходимо сделать следующие общие предположения: пульсационная составляющая не зависит от V и изменяется весьма быстро по сравнению с изменением V . Второе допущение подразумевает, что существует такой интервал времени $\Delta\tau$, в течение которого изменение V будет весьма малым, тогда как за тот же интервал времени $\tilde{\eta}_V$ может испытать несколько флуктуаций.

В результате совместного решения (2.35) и (2.36) с учетом возможных флуктуаций получим

$$\frac{\partial}{\partial \tau} [\langle f \rangle + \tilde{f}] = -\frac{\partial}{\partial V} [\langle \eta(V) \rangle \langle f \rangle + \langle \eta(V) \rangle \tilde{f} + \tilde{\eta}_V \langle f \rangle + \tilde{\eta}_V \tilde{f}]$$

или, после осреднения за некоторый конечный интервал времени:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} [\langle f \rangle] = -\frac{\partial}{\partial V} [\langle \eta(V) \rangle \langle f \rangle + \langle \tilde{\eta}_V \tilde{f} \rangle].$$

Из определения величин $\tilde{\eta}_V$ и \tilde{f} следует, что средние значения $\langle \tilde{\eta}_V \rangle$ и $\langle \tilde{f} \rangle$ равны нулю. Однако величина $\langle \tilde{\eta}_V \tilde{f} \rangle$ при этом не обязательно должна обращаться в нуль, поскольку из-за нелинейности $\eta(V)$ и $f(V, \tau)$ между локальными значениями их пульсационных составляющих в общем случае может существовать соответствующая корреляция.

Если $\langle \tilde{\eta}_V \tilde{f} \rangle$ представить в виде

$$\langle \tilde{\eta}_V \tilde{f} \rangle = -\frac{\partial}{\partial V} (D_V \langle f \rangle), \quad (3.1.37)$$

то получится уравнение для $\langle f \rangle$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} f(V, \tau) = -\frac{\partial}{\partial V} [\langle \eta(V) \rangle f(V, \tau)] + \frac{\partial^2}{\partial V^2} [D_V f(V, \tau)], \quad (3.1.38)$$

где D_V – коэффициент диффузии кристаллов в пространстве параметра V .

Учет убыли и притока аэрозольных частиц извне. Дальнейшее уточнение уравнения (3.1.35) связано с учетом убыли и притока аэрозольных частиц извне, который равен произведению их плотности распределения $f_0(V, \tau)$ на объемный расход газа, поступающий в систему извне V_n' :

$$\Delta N_0^+ = f_0(V_1, \tau) dV V_n' d\tau.$$

Убыль капель вместе аэрозольными частицами рассчитывается с учетом объемного расхода газа V'_k , покидающего аппарат:

$$\Delta N^- = f(V_1, \tau) dV V'_k d\tau.$$

Баланс притока частиц и их убыли сохраняется, что приводит к следующим выражениям:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(V, \tau)}{\partial \tau} &= -\frac{\partial}{\partial V} [\eta(V) f(V, \tau)] + f_0(V, \tau) \frac{V'_n}{V_a} - f(V, \tau) \frac{V'_k}{V_a}, \\ \frac{\partial f(V, \tau)}{\partial \tau} &= -\frac{\partial}{\partial V} [\eta(V) f(V, \tau)] + f_0(V, \tau) \frac{1}{\langle \tau_n \rangle} - f(V, \tau) \frac{1}{\langle \tau_k \rangle}, \end{aligned}$$

где V_a – объем аппарата; $\langle \tau_n \rangle \langle \tau_k \rangle$ – среднее время пребывания аэрозольных частиц (центров конденсации) и капель в аппарате соответственно.

Поскольку в рассматриваемом процессе непрерывно образуются новые частицы, их среднее время пребывания не равно среднему времени пребывания потока; для частиц различных размеров оно тоже разное. Вследствие большой дисперсности капель на выходе из аппарата может сказываться гидродинамическое отставание крупных частиц и проскок мелких. Реальное время пребывания капель в аппарате и эффективность улавливания зависит от их функции распределения по размерам.

Учет дробления дисперсных частиц. К конденсируемой системе помимо материальных потоков извне подводится также механическая энергия, которая необходима для создания определенной гидродинамической обстановки в аппарате. Часть вводимой энергии расходуется на придание скорости движения каплям относительно газа. В результате наблюдается интенсивное взаимодействие как между отдельными каплями, так и между каплями и конструктивными элементами аппарата, что приводит к дроблению дисперсных частиц. Дробление по своей природе является вероятностным процессом, и его аналитическое описание возможно при определенных физических ограничениях.

Предполагается, что любые две одинаковые частицы, взятые в некоторый момент времени, разрушаются за время $d\tau$, независимо от времени их существования в данном интервале размеров. Так, делается предположение о том, что дробление является случайным марковским процессом.

Разрушающиеся частицы дают осколки, имеющие достаточно устойчивый спектр размеров. Пусть функция $f_0(V, V_1)$ характеризует плотность распределения частиц объема V , образовавшихся в единицу времени в результате разрушения частиц объемом V_1 . Тогда среднее число частиц, появившихся в интервале объемов от V до $V + dV$ за счет дробления частиц объемом от V_1 до $V_1 + dV_1$ за время $d\tau$, равно $f(V_1, \tau) dV_1 f_0(V, V_1) dV d\tau$. В результате суммирования по частицам, объем которых больше V , получим прирост массы капель с объемом от V до $V + dV$:

$$\Delta V_d^+ = V \int_V^{V_m} f(V_1, \tau) dV_1 f_0(V, V_1) dV d\tau.$$

Среднее число частиц, покинувших интервал объемов от V до $V + dV$ в результате дробления и перешедших в интервал от V_2 до $V_2 + dV_2$ за время $d\tau$,

равно $f(V, \tau) dV f_0(V_2, V) dV_2 d\tau$. Убыль массы каплей объемом от V до $V + dV$ найдется в результате суммирования по всем осколкам размером меньше V :

$$\Delta V_d^- = f(V, \tau) dV d\tau \int_{V_0}^V V_1 f_0(V_1, V) dV_1.$$

Закон сохранения массы каплей при дроблении:

$$V[f(V, \tau + d\tau) - f(V, \tau)] = V dV d\tau \int_V^{V_m} f(V_1, \tau) f_0(V, V_1) dV_1 - f(V, \tau) dV d\tau \int_{V_0}^V V_1 f_0(V_1, V) dV_1.$$

Поделим обе части равенства на $d\tau$ и dV , затем перейдем к пределу при $d\tau$ и учтем изменение массы частиц за счет конденсации пара. В результате получим следующее интегрально-дифференциальное уравнение:

$$\frac{\partial f(V, \tau)}{\partial \tau} = -\frac{\partial}{\partial V}[\eta(V)f(V, \tau)] + \int_V^{V_m} f(V_1, \tau) f_0(V, V_1) dV_1 - f(V, \tau) \frac{1}{V} \int_{V_0}^V V_1 f_0(V_1, V) dV_1. \quad (3.1.39)$$

Уравнение (3.1.39) может быть упрощено, если представить $f_0(V, V_1) = \theta(V_1)f(V, V_1)$, где $\theta(V_1)$ есть величина, обратная времени существования частицы объемом V_1 , а $f(V, V_1)$ – функция распределения осколков по объемам, удовлетворяющим условию нормировки

$$\int_{V_0}^V V f(V, V_1) dV = V_1. \quad (3.1.40)$$

С учетом (3.1.40) уравнение (3.1.39) запишется в виде

$$\frac{\partial f(V, \tau)}{\partial \tau} = -\frac{\partial}{\partial V}[\eta(V)f(V, \tau)] + \int_V^{V_m} f(V_1, \tau) \theta(V_1) f(V, V_1) dV - \theta(V) f(V, \tau). \quad (3.1.41)$$

Необходимо отметить наличие значительных сложностей, связанных с практическим применением уравнения (3.1.41), так как в большинстве случаев не удастся априорно установить вид функций $\theta(V_1)$ и $f(V, V_1)$, требуются дополнительные экспериментальные и теоретические исследования по их определению. Окончательные расчетные зависимости могут быть получены только в результате обработки экспериментальных данных на основании данной модели.

Учет явления агломерации дисперсных частиц. Еще более сложное уравнение получается при рассмотрении агломерации, которое также можно построить из соображений баланса. С учетом целого ряда ограничивающих предположений уравнение агломерации имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(V, \tau)}{\partial \tau} = & \frac{1}{2} \int_{V_0}^V \int_{V_0}^V \beta(V_1, V_2) f(V_1, \tau) f(V_2, \tau) \delta(V - V_1 - V_2) dV_1 dV_2 - \\ & - f(V, \tau) \int_{V_0}^{V_m} \beta(V, V_1) f(V_1, \tau) dV_1, \end{aligned} \quad (3.1.42)$$

где $\beta(V, V_1)$ – величина, обратная частоте парных столкновений между дисперсными частицами в единице объема суспензии.

При конденсационном пылеулавливании явление агломерации, как правило, имеет большое значение. Для лучшего понимания возможной области применения зависимости (3.1.42) остановимся на некоторых ограничениях, принятых при ее выводе. Некоторые предположения касаются характера взаимодействия частиц. Примем за характерное время между столкновениями частиц друг с другом величину

$$\tau_0 \approx \frac{N}{dN/d\tau}.$$

Поскольку образование одной частицы из двух происходит после их контакта не мгновенно, то можно ввести в рассмотрение характерное время непосредственного взаимодействия при контакте. Если обозначить промежуток времени от момента контакта частиц до момента образования новой частицы с установленными свойствами (форма, скорость, температура) через $\tau_{\text{сз}}$, то условие, которое необходимо наложить на рассматриваемую систему, будет следующим:

$$\tau_{\text{сз}} \leq \tau_0.$$

Необходимость ввести предположение связана с тем, что при выводе (3.1.42) не учитывается возможность одновременного столкновения трех и более частиц и заранее ограничиваются случаем парных столкновений. Записанное выше неравенство следует усилить, если принять во внимание тот факт, что при сближении частиц очевидно влияние сил гидродинамического взаимодействия. Если ввести время $\tau_{\text{сб}}$, в течение которого это влияние является фактором, определяющим эффективность захвата, то вместо вышеприведенного соотношения следует записать: $\tau_{\text{сз}} + \tau_{\text{сб}} \ll \tau_0$. Это условие эквивалентно утверждению о том, что объем, занимаемый частицами, мал по сравнению с объемом пространства, в котором они находятся, т. е.

$$\varphi = \frac{1}{V} \int_{V_0}^{V_m} V f(V, \tau) dV \ll 1.$$

При выполнении последнего условия вероятность одновременного сближения трех и более частиц меньше, чем вероятность сближения двух частиц.

Второй класс ограничений связан с необходимостью использования гипотезы о хорошем перемешивании в системе. Поскольку агломерируют ближайшие друг к другу частицы, следующие акты агломерации будут затруднены, если в промежутках между ними частицы не перемешиваются до состояния, когда их распределение опять можно считать в среднем равномерным. С точки зрения математического моделирования очень важно не учитывать локальные изменения концентрации частиц, вызванные каким-либо актом агломерации при рассмотрении следующего акта. Однако следует с осторожностью относиться к гипотезе о перемешивании, поскольку в этом случае возможно проявление и второго эффекта, связанного с изменением скорости агломерации в результате изменения взаимного положения частиц. По-видимому, значение имеют характерные масштабы взаимного движения частиц. Так, учет степени перемешивания

вания на достаточно больших расстояниях между частицами и неучет его на масштабах, характерных для сил взаимодействия, может нести в себе внутреннее противоречие. С использованием предположения о том, что столкновения парные и система хорошо перемешивается, т. е. можно не учитывать предысторию процесса, и было построено уравнение агломерации (3.1.42).

Полученные выше частные случаи уравнения баланса числа частиц по размерам могут быть представлены общим кинетическим уравнением конденсационного пылеулавливания:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} f(\bar{x}, V, \tau) = & \frac{\partial}{\partial V} [\langle \eta(V) \rangle f(\bar{x}, V, \tau)] - \frac{\partial^2}{\partial V^2} [D_V f(\bar{x}, V, \tau)] + \\ & + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} [w_i(\bar{x}, V, \tau) f(\bar{x}, V, \tau)] = + f_0(V, \tau) \frac{\delta(\bar{x} - \bar{x}_1)}{\langle \tau_n \rangle} - f(\bar{x}, V, \tau) \frac{\delta(\bar{x} - \bar{x}_2)}{\langle \tau_k \rangle} + \\ & + J \delta(V - V_0) + \frac{1}{2} \int_{V_0}^V \int_{V_0}^V \beta(V_1, V_2) f(\bar{x}, V_1, \tau) f(\bar{x}, V_2, \tau) \delta(V - V_1 - V_2) dV_1 dV_2 - \\ & - f(\bar{x}, V, \tau) \int_{V_0}^{V_m} \beta(V, V_1) f(\bar{x}, V_1, \tau) dV_1, \end{aligned} \quad (3.1.43)$$

которое позволит учесть влияние довольно большого числа факторов на изучаемый процесс. Ряд упрощений и предположений, сделанных при его выводе, требует осторожного отношения к пределам его применимости, особенно при учете измельчения и агломерации.

Подведем итоги. Рецептурных методов решения интегродифференциальных уравнений нет. Задача нахождения даже стационарного решения уравнения вида (3.1.43), как правило, оказывается довольно сложной, а в большинстве случаев и вообще неразрешимой. Этим объясняется стремление различных исследователей к построению более частных моделей, которые затем используются при практических расчетах.

В связи с этим встанут две основные задачи. Необходимо строгое статистическое обоснование уравнения (3.1.43), что позволит уточнить пределы его применимости и выявить возможные неточности его написания. Такое обоснование можно получить в результате распространения статистических методов неравновесной механики и термодинамики на конденсационную систему на основании анализа уравнения Лиувилля (3.1.19).

Ввиду большой значимости кинетического уравнения конденсационного пылеулавливания для практических расчетов и серьезных математических трудностей, связанных с его решением, мы вынуждены создавать на его основе более простые модели. При составлении их необходимо исходить из конкретных практических задач, стоящих перед исследователем, учитывая влияние преобладающего фактора в каждом конкретном случае. Следует считать перспективными те методы построения частных моделей, которые позволяют решить как прямую задачу расчета аппарата, так и обратную задачу определения кинетических констант конденсации.

3.1.6. Модель конденсации как неоднородная цепь Маркова

Рассмотрим конденсационное пылеулавливание как процесс эволюции во времени большой системы капель. Возможно рассмотреть поставленную задачу, решив уравнение Лиувилля при надлежащем выборе начальных и граничных условий. Детальный анализ такого решения должен выявить особенности, наблюдаемые при конденсации в дисперсных системах. Сказанное основано на следующей фундаментальной идее: если задана некоторая система уравнений и начальное ее состояние при $\tau=0$, то ее эволюцию в последующие моменты времени можно объяснить посредством задания точных законов микрокинетики изучаемого явления. Информация о законах микрокинетики и, следовательно, о свойствах системы содержится в векторах $d\vec{a}_i/d\tau$ – см. уравнение (3.1.19). Однако подход, основанный на решении уравнения Лиувилля, требует глубоких знаний методов статистической физики и законов микрокинетики конденсации в дисперсных системах. В связи с этим воспользуемся более традиционным подходом и уже на самом первом этапе рассуждений откажемся от точных законов микрокинетики, умышленно заменим их вероятностным законом. Такая операция обладает по меньшей мере одним достоинством – ясностью.

Итак, рассмотрим аэрозольную частицу (каплю) объемом V , помещенную в переохлажденный пар. Как уже отмечалось выше, состояние каждой капли в аппарате определяется координатами ее центра массы, размером и формой. Чтобы упростить анализ, примем, что основной характеристикой капли является ее объем, что дает возможность рассматривать ее как шар, объем которого равен объему капли. Рост одиночной частицы шаровой формы из переохлажденного пара или газа, перенасыщенного парами жидкости, подчиняется общим законам гидродинамики и теплообмена в сплошных средах, которые позволяют достаточно точно предсказать ее скорость роста. Если анализировать усредненное поведение коллектива одинаковых частиц (который всегда можно выделить из множества капель в потоке), то можно говорить о среднем непрерывном изменении размера частиц на фоне флуктуаций этого изменения. Скорость изменения объема частиц в коллективе одинаковых частиц можно представить как сумму средней непрерывной скорости роста $\langle\eta(V)\rangle$ и случайной функции времени $\tilde{\eta}_V(\tau)$, отражающей колебания «мгновенной» скорости роста относительно среднего значения:

$$dV/d\tau = \langle\eta(V)\rangle + \tilde{\eta}_V(\tau). \quad (3.1.44)$$

Под влиянием каждой отдельной флуктуации, вызванной изменением условий взаимодействия отдельных частиц со средой, происходит малое отклонение скорости роста от ее среднего значения. Если мы не хотим вдаваться в детали динамики взаимодействия системы многих частиц со средой (газом), то единственное утверждение, которое можно высказать относительно флуктуаций, заключается в том, что они весьма многочисленны и чрезвычайно нерегулярны по своей величине. Это утверждение дает нам необходимую основу для применения закона больших чисел и теории вероятностей в описании процесса. Мы не можем считать величину $\tilde{\eta}_V(\tau)$ заданной функцией времени, однако можем

сделать разумные предположения о влиянии флуктуации при усреднении по большому числу одинаковых частиц (т. е. по их ансамблю). Аналогично мы не можем предсказать скорость роста или объем капли в каждый момент времени τ , но можем предсказать средний результат большого числа экспериментов, выполненных в одинаковых условиях. Следовательно, подход к решению уравнения (3.1.44) должен отличаться от традиционной детерминированной задачи роста частицы. Уравнение (3.1.44) является типичным представителем класса так называемых стохастических (или случайных) уравнений и относится к теории стохастических процессов. Поэтому остановимся на некоторых общих идеях и методах теории стохастических процессов, которые позволяют свести решение (3.1.44) к решению параболического дифференциального уравнения (3.1.37) для плотности распределения аэрозольных частиц по размерам $f(V, \tau)$.

Пусть через V обозначена интересующая нас переменная – объем капли. Если бы переменная V была детерминированной величиной, то мы могли бы построить функцию времени τ , которая определяла бы значение V в каждый момент времени τ по соответствующим начальным условиям, заданным при $\tau = 0$. Однако если V – случайная переменная, то такой функции не существует. В каждый момент времени переменная V может принимать любое значение, лежащее в области изменения этой переменной. Однако каждому возможному значению V в момент времени τ присваивается некоторая вероятность, которая может принимать любое значение, заключенное между нулем и единицей. Чтобы получить представление о случайном процессе, обратимся к рис. 3.1.14.

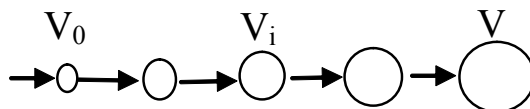


Рис. 3.1.14. Траектория случайного процесса во времени

Наиболее вероятные значения V в последовательные моменты времени τ изображены жирными точками. Через эти точки можно провести наиболее вероятную траекторию. Вместе с тем ничто не препятствует существованию двух или большего числа равновероятных траекторий.

В вопросах статистической кинетики основную роль играет понятие цепи Маркова. Под цепью Маркова (дискретной) в теории вероятности понимают следующее. Предположим, что капля может находиться в одном из состояний, которые характеризуются объемом V_1, V_2, \dots, V_n и обозначены номерами 1, 2, 3, ... и так далее. Примем, что состояние его можно наблюдать через определенные промежутки времени, например каждую минуту, в моменты $\tau = 0, 1, 2, \dots$ и так далее. С течением времени могут происходить переходы из одного состояния в другое. Ряд состояний, принимаемых системой с течением времени, представляет собой цепь Маркова, если вероятность того, что при τ -м наблюдении система находится в k -м состоянии (V_k), полностью определена заданием состояния (например, V_l) системы для одного из предшествующих наблюдений в момент $\tau_0 < \tau$. Эту вероятность можно записать в виде $p(\tau_0; V_l | \tau; V_k)$, ее можно

назвать вероятностью перехода из состояния V_l в состояние V_k за время между τ_0 и τ . Из сказанного вытекает, что вероятность перехода не зависит от того, в каких состояниях система была до момента τ_0 . Вероятность $f(V, \tau)dV$ найти значение случайной величины V в бесконечно малом интервале от V до $V + dV$ в момент времени τ нами была определена ранее.

Понятие о цепи Маркова можно распространить на случай, когда состояние системы может быть определено через сколь угодно малые промежутки времени (τ — непрерывный параметр) и когда состояние системы определяется заданием непрерывно изменяющихся параметров V_1, V_2, \dots, V_n . Ряд так определенных, следующих непрерывно друг за другом состояний, образует цепь Маркова, если можно ввести вероятность перехода $p(\tau_0; V_0 | \tau; V)$ из состояния V_0 , которое система имела в момент τ_0 , в состояния, для которых объем лежит между V и $V + dV$ к моменту τ . Причем вероятность должна быть полностью определена заданием V_0 в любой момент τ_0 . Следовательно, в случае непрерывного физического процесса на достаточно малых промежутках времени между последовательными событиями должна существовать связь. Если нам удалось установить, что в момент времени τ_0 переменная принимает значение V_0 , то это обстоятельство будет влиять на вероятность того, что объем частицы имеет значение V_1 в момент τ_1 . Для случайного процесса Маркова связь между двумя последовательными событиями устанавливается через вероятность перехода:

$$p_1(V_1; \tau_1 | V_0; \tau_0) = p_1(V_1; \tau_1 | V_0; \tau_0) f(V_0, \tau_0). \quad (3.1.45)$$

Это соотношение, определяющее p_1 , говорит о том, что совместная плотность вероятности найти значение V_0 в момент τ_0 и V_1 в момент τ_1 ; $p_1(V_1; \tau_1 | V_0; \tau_0)$ равна плотности вероятности нахождения значения V_0 в момент τ_0 , умноженной на вероятность перехода от V_0 к V_1 за промежутков времени $\tau_1 - \tau_0$. Вероятность перехода должна обладать следующими свойствами:

$$\begin{aligned} p_1(V_1; \tau_1 | V_0; \tau_0) &\geq 0; \int p_1(V_1; \tau_1 | V_0; \tau_0) dV_1 = 1, \\ f(V_1, \tau_1) &= \int p_1(V_1; \tau_1 | V_0; \tau_0) f(V_0, \tau_0) dV_0. \end{aligned} \quad (3.1.46)$$

Если переход из одного состояния V_0 в другое V_2 осуществляется, минуя некоторое промежуточное состояние V_1 , то для величины $p_2(V_2; \tau_2 | V_0; \tau_0)$ можно записать следующее выражение:

$$\begin{aligned} p_2(V_2; \tau_2 | V_0; \tau_0) &= \int p_1(V_2; \tau_2 | V_1; \tau_1) p_1(V_1; \tau_1 | V_0; \tau_0) dV_1 = \\ &= \int p_1(V_2; \tau_2 | V_1; \tau_1) p_1(V_1; \tau_1 | V_0; \tau_0) f(V_0, \tau_0) dV_1. \end{aligned}$$

Комбинируя этот результат с соотношением (3.1.46), получим

$$p_1(V_2; \tau_2 | V_0; \tau_0) = \int p_1(V_2; \tau_2 | V_1; \tau_1) p_1(V_1; \tau_1 | V_0; \tau_0) dV_1. \quad (3.1.47)$$

Физическая интерпретация этого уравнения очевидна. Можно вычислить вероятность перехода от значения V_0 в момент τ_0 к значению V_2 в момент τ_2 , если взять произведение вероятности перехода к некоторому промежуточному значению V_1 в любой промежуток времени τ_1 на вероятность перехода от этого

значения к конечному значению в момент τ_2 и просуммировать по всем промежуточным значениям. Будучи вероятностью перехода между двумя состояниями, p_1 является независимой единственной вероятностью перехода в марковском процессе, поэтому индекс «1», очевидно, излишен и в дальнейшем опускается. Интегральное уравнение (3.1.47) рассматривается как определение марковского процесса и называется уравнением Смолуховского.

Если сделать ряд предположений о вероятностном росте капель (аэрозольных частиц), то решение интегрального уравнения Смолуховского может быть сведено к решению уравнения в частных производных. Мы предположим, во-первых, что рост происходит так, что существуют конечные пределы:

$$\lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{V_1 - V}{\Delta\tau} = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\tau} \int (V_1 - V) p(V_1; \tau + \Delta\tau | V; \tau) dV_1 = \langle \eta(V, \tau) \rangle, \quad (3.1.48)$$

$$\lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{\langle (V_1 - V)^2 \rangle}{\Delta\tau} = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\tau} \int (V_1 - V)^2 p(V_1; \tau + \Delta\tau | V; \tau) dV_1 = 2D_V(V, \tau). \quad (3.1.49)$$

Величина $\langle \eta(V, \tau) \rangle$ дает среднюю скорость систематического изменения V (среднюю скорость роста), величина $D_V(V, \tau)$ – меру интенсивности флуктуаций скорости роста. Они являются характеристиками изучаемого случайного процесса. Мы предположили, что $\langle (V_1 - V)^2 \rangle = \langle \Delta V^2 \rangle$ пропорционально $\Delta\tau$ для малых $\Delta\tau$. Второе предположение должно выражать тот факт, что для малых $\Delta\tau$ вероятности сколько-нибудь значительных изменений величины V очень малы и достаточно быстро стремятся к нулю. Это требование можно выразить в виде

$$\lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{\langle (V_1 - V)^3 \rangle}{\Delta\tau} = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\tau} \int |V_1 - V|^3 p(V_1; \tau + \Delta\tau | V; \tau) dV_1 \rightarrow 0. \quad (3.1.50)$$

Условие (3.1.50) легко понять, если принять во внимание, что для малых значений $(V_1 - V)$ величина $|V_1 - V|^3$ очень мала, а для больших $(V_1 - V)$ – величина $p(V_1; \tau + \Delta\tau | V; \tau)$ должна так быстро стремиться к нулю, что соответствующее произведение (3.1.50) стремится к нулю вместе с $\Delta\tau$, но все же так, чтобы величина D_V не была равна нулю. Необходимо учитывать, что выводы, полученные с помощью этого условия, неприменимы для очень малых $\Delta\tau$, когда можно рассмотреть характер единичных флуктуаций. Для вывода дифференциального уравнения помножим (3.1.47) на произвольную функцию $\Phi(V)$, обращаящуюся в нуль вместе со своей производной на границах области изменения V , и проинтегрируем по всей области. Тогда получим

$$\int \Phi(V) p(V; \tau | V_0; \tau_0) dV = \int p(V_1; \tau | V_0; \tau_0) dV_1 \int p(V; \tau + \Delta\tau | V_1; \tau) \Phi(V) dV.$$

Разложив в правой части $\Phi(V)$ в ряд по степеням $V - V_1$, перенеся первый член в левую часть и разделив на $\Delta\tau$, получим

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta\tau} \int \Phi(V) [p(V; \tau + \Delta\tau | V_0; \tau_0) - p(V; \tau | V_0; \tau_0)] dV = \\ & = \int p(V_1; \tau | V_0; \tau_0) \left[\Phi'(V_1) \frac{\langle (V - V_1) \rangle}{\Delta\tau} + \Phi''(V_1) \frac{\langle (V - V_1)^2 \rangle}{\Delta\tau} + \Phi'''(V_1) \frac{\langle (V - V_1)^3 \rangle}{\Delta\tau} \right] dV_1, \end{aligned}$$

причем значение V_2 лежит между V_1 и V . Переходя к пределу $\Delta\tau \rightarrow 0$, с учетом (3.1.48) и (3.1.49), получим

$$\int \Phi(V) \frac{\partial p(V; \tau | V_0; \tau_0)}{\partial \tau} dV = \int p(V_1; \tau | V_0; \tau_0) [\Phi'(V_1) \langle \eta(V, \tau) \rangle + \Phi''(V_1) D_V(V, \tau)] dV_1.$$

Выполняя справа интегрирование по частям, принимая во внимание, что на границах $\Phi = \Phi' = 0$ и изменяя обозначение переменной интегрирования V на V_1 , получим

$$\int \Phi(V) \left[\frac{\partial p}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial V} (\langle \eta(V, \tau) \rangle p) - \frac{\partial^2}{\partial V^2} (D_V p) \right] dV = 0.$$

Так как это уравнение должно иметь место при произвольном $\Phi(V)$, то отсюда для плотности вероятности перехода $p(V; \tau | V_0; \tau_0)$ вытекает уравнение, известное под названием уравнения Фоккера–Планка:

$$\frac{\partial p(V; \tau | V_0; \tau_0)}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial V} [\langle \eta(V, \tau) \rangle p(V; \tau | V_0; \tau_0)] - \frac{\partial^2}{\partial V^2} [D_V(V, \tau) p(V; \tau | V_0; \tau_0)]. \quad (3.1.51)$$

Функция распределения $f(V, \tau)$ также подчиняется уравнению Фоккера–Планка. Из соотношения (3.1.46) получим $f(V, \tau) = \int p(V; \tau | V_1; \tau_1) f(V_1, \tau_0) dV_1$, где τ_0 – произвольный фиксированный момент времени $\tau > \tau_0$. Следовательно,

$$\frac{\partial}{\partial \tau} f(V, \tau) = \int \frac{\partial p(V; \tau | V_1; \tau_0)}{\partial \tau} f(V_1, \tau_0) dV_1.$$

Подставляя в последнюю зависимость правую часть уравнения (3.1.51), получим

$$\frac{\partial f(V, \tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial V} [\langle \eta(V, \tau) \rangle f(V, \tau)] - \frac{\partial^2}{\partial V^2} [D_V(V, \tau) f(V, \tau)]. \quad (3.1.52)$$

Данное уравнение совпадает с полученным ранее из феноменологических соображений уравнением (3.1.37). Оно отражает эволюцию любого начального распределения аэрозольных частиц по размерам V к равновесному состоянию. Чтобы понять физический механизм, описываемый этим уравнением, предположим, что распределение частиц по размерам V имеет острый пик при $V = V_0$ в начальный момент времени. Поскольку при конденсации имеет место систематический рост частиц, максимум этого распределения в последующие моменты времени сдвигается в сторону больших значений объема частиц. Кроме того, в результате флуктуаций скорости роста максимум постепенно смещается вниз и появляется конечная дисперсия распределения капель по размерам. Картина, описываемая уравнением Фоккера–Планка, согласуется с уравнением Ланжевена (3.1.44), рассматриваемым совместно со статистическими допущениями относительно $\tilde{\eta}_V(\tau)$. Однако в (3.1.52) информация об изучаемом процессе представлена в значительно более компактной форме. Статистическое обоснование полного кинетического уравнения конденсационного пылеулавливания (3.1.43) можно найти в работе [3].

Непосредственное решение уравнения (3.1.43) возможно только для довольно ограниченного числа частных случаев. Задача еще больше усложняется, когда речь идет о применении его для описания кинетики конденсации. В этом случае скорость регулярного роста $\langle \eta(V, \tau) \rangle$ зависит от состояния газа (среды, в которую помещена наша дисперсная система) и, в первую очередь, от его

влажности и температуры (давления). В свою очередь, состояние раствора (среды) определяется массовой скоростью конденсации и количеством выделяющейся при этом теплоты. Следовательно, в случае конденсации мы имеем дело с неоднородным во времени марковским случайным процессом роста ансамбля капель их исходных аэрозольных частиц.

При решении многих прикладных задач нет необходимости рассматривать непрерывный процесс как таковой, поскольку при некотором приближении можно интересоваться не точным объемом частицы, а, скажем, вероятностью того, что частица принадлежит заданному интервалу объемов. Такой подход оправдан тем, что, в конечном счете, решение задачи проводится с помощью ЭВМ. Необходимо разработать дискретную модель непрерывного процесса. Рассмотрим систему, имеющую конечное число возможных состояний V_1, V_2, \dots, V_k . Для системы капель в качестве случайной величины может выступать характерный размер капли – ее объем V , который принимает дискретные значения V_1, V_2, \dots, V_k . Закономерности случайного марковского процесса $\vec{V}(\tau)$ определяются совместным распределением вероятностей $p(V_1, V_2, \dots, V_k)$ его значений $\vec{V}(\tau_1), \vec{V}(\tau_2), \dots, \vec{V}(\tau_k)$ в различные моменты времени $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_k$ и могут быть описаны с помощью условных вероятностей (см. (3.1.46)):

$$f(V_1, \tau_1) = \int p_1(V_1; \tau_1 | V_0; \tau_0) f(V_0, \tau_0) dV_0. \quad (3.1.53)$$

Дискретный аналог уравнения (3.1.52) примет следующий вид:

$$\varphi_i(n+1) = \sum_{j=1}^{j=k} \varphi_j(n) p_{ji}(n); \quad i, j = 1, 2, 3, \dots, k, \quad (3.1.54)$$

где $\varphi_i(n)$ – вероятность нахождения частицы в V_i -м состоянии в момент времени τ_n ; $p_{ji}(n)$ – условная вероятность перехода частицы из состояния V_j в состояние V_i за время $\Delta\tau = \tau_{n+1} - \tau_n$. Условные вероятности не отрицательны и удовлетворяют условию нормировки $\sum_{i=1}^k p_{ji}(n) = 1$; $p_{ji}(n) \geq 0$.

При построении дискретной модели накладываются определенные ограничения на выбор состояний системы и шага по времени. Состояния системы должны выбираться так, чтобы по возможности обеспечить равенство переходных вероятностей. Шаг по времени можно выбирать таким, чтобы частица могла перейти в близлежащие состояния. В этом случае (3.1.54) запишется так:

$$\begin{aligned} \varphi_1(n+1) &= \varphi_1(n) p_{11}(n), \\ \varphi_2(n+1) &= \varphi_2(n) p_{22}(n) + \varphi_1(n) p_{12}(n), \\ \varphi_i(n+1) &= \varphi_i(n) p_{ii}(n) + \varphi_{i-1}(n) p_{i-1,i}(n) + \varphi_{i-2}(n) p_{i-2,i}(n); \quad i = 3, 4, \dots, k. \end{aligned} \quad (3.1.55)$$

Если задано начальное состояние $\varphi_i(0)$ дискретной системы, то модель (3.1.23) описывает дискретный во времени процесс ее эволюции в результате роста капель при постоянных внешних условиях (при постоянной температуре, давлении и влажности газа). В случае разрывных процессов Маркова, когда

система имеет конечное число состояний при ее эволюции во времени, для малых временных интервалов $\Delta\tau$ вероятности перехода имеют вид

$$\begin{aligned} p_{ii}(n) &= p(V_i; \tau + \Delta\tau | V_i; \tau) = 1 - \pi_{ii}(n)\Delta\tau + O(\Delta\tau), \\ p_{ji}(n) &= p(V_i; \tau + \Delta\tau | V_j; \tau) = \pi_{ji}(n)\Delta\tau + O(\Delta\tau). \end{aligned} \quad (3.1.56)$$

Символом $O(\Delta\tau)$ обозначены члены высшего порядка малости относительно $\Delta\tau$, т. е. $\lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} O(\Delta\tau)/\Delta\tau \rightarrow 0$. Судя по соотношениям (3.1.56), для малых интервалов времени $\Delta\tau$ вероятность π_{ii} неизменности состояния превышает вероятность изменения состояний.

Соотношение (3.1.56) физически выражает два факта. Во-первых, при $\Delta\tau = 0$ частица не меняет своего состояния V_i . Во-вторых, вероятность перехода из данного состояния V_i в любое другое возможное состояние зависит от рассматриваемого момента времени (процесс неоднородный). Для малого $\Delta\tau$ вероятность перехода пропорциональна величине этого интервала. Подставив (3.1.56) в правую часть уравнения (3.1.55) и перейдя к пределу при $\Delta\tau \rightarrow 0$, получим следующую систему линейных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} d\varphi_1/d\tau &= -\varphi_1(\tau)\pi_{11}, \\ d\varphi_2/d\tau &= -\varphi_2(\tau)\pi_{22} + \varphi_1(\tau)\pi_{12}, \\ d\varphi_i/d\tau &= -\varphi_i(\tau)\pi_{ii} + \varphi_{i-1}(\tau)\pi_{i-1,i} + \varphi_{i-2}(\tau)\pi_{i-2,i}, \quad i = 3, 4, \dots, k, \end{aligned} \quad (3.1.57)$$

где величины π_{ji} удовлетворяют условию нормировки

$$\sum_{i=1}^k \pi_{ji}(\tau)\Delta\tau = 1; \quad \pi_{ji}(\tau) \geq 0; \quad j, i = 1, 2, 3, \dots, k. \quad (3.1.58)$$

Уравнения (3.1.57) нужно интегрировать при начальных условиях

$$\varphi_i(\tau_0) = \varphi_i^0. \quad (3.1.59)$$

Разрывной марковский процесс (3.1.57)–(3.1.59) описывает непрерывную во времени эволюцию дискретной системы частиц в результате их роста при постоянных внешних условиях и равной нулю скорости образования новых капель. В теории доказывается, что любой непрерывный марковский процесс может рассматриваться как предельный случай разрывного марковского процесса, а решение уравнения (3.1.52) можно аппроксимировать решениями дифференциальных уравнений (3.1.57).

С целью установления связи между условными вероятностями перехода и параметрами непрерывного процесса $\langle \eta(V) \rangle$ и $D_V(V)$ полезно рассмотреть предельный переход от цепи Маркова (3.1.55) к непрерывному процессу.

Рассмотрим реализацию случайного процесса как рост некоторой частицы. Ограничимся следующей моделью характера роста. Пусть объем частицы изменяется на малую величину 0, ΔV , $2\Delta V$ вдоль оси V в течение малого интервала времени $\Delta\tau$. Если частица в момент времени τ имеет объем V , то вероятности того, что в момент времени $\tau + \Delta\tau$ она окажется в состояниях V , $V + \Delta V$, $V + 2\Delta V$, равны соответственно $1 - \alpha(V) - \beta(V)$, $\alpha(V)$, $\beta(V)$. Обозна-

чим через $\phi(V, \tau)$ вероятность нахождения частицы в интервале от V до $V + \Delta V$. По аналогии с уравнением (3.1.54) можем написать

$$\begin{aligned} \phi(V, \tau + \Delta\tau) = & \phi(V, \tau)[1 - \alpha(V) - \beta(V)] + \\ & + \phi(V - \Delta V, \tau)\alpha(V - \Delta V) + \phi(V - 2\Delta V, \tau)\beta(V - 2\Delta V). \end{aligned} \quad (3.1.60)$$

Чтобы перейти к предельному случаю, нужно положить ΔV и $\Delta\tau$ стремящимися к нулю. При этом оказывается необходимым наложить некоторые ограничения на вероятности $\alpha(V)$ и $\beta(V)$.

Введем среднее значение условного приращения (при фиксированном $V(\tau)$) объема частицы за малое время $\Delta\tau$: $\langle \Delta V \rangle = \langle [V(\tau + \Delta\tau) - V(\tau)] | V(\tau) \rangle$, а также дисперсию этого приращения: $\sigma_V^2(\Delta\tau) = \langle [V(\tau + \Delta\tau) - V(\tau)]^2 | V(\tau) \rangle - \langle \Delta V^2 \rangle$.

Предельные значения этих величин:

$$\langle \eta(V) \rangle = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta V \rangle}{\Delta\tau} \quad \text{и} \quad D_V(V) = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{\sigma_V^2(\Delta\tau)}{\Delta\tau}.$$

Если частица в момент времени τ имела объем V , то возможные изменения ее объема в течение следующего малого интервала времени составят 0, ΔV , $2\Delta V$, причем вероятности этих изменений равны $[1 - \alpha(V) - \beta(V)]$, $\alpha(V)$ и $\beta(V)$ соответственно. По известным правилам находятся среднее значение условного приращения объема частицы за время $\Delta\tau$ $\langle \Delta V \rangle = [\alpha(V) + 2\beta(V)]\Delta V$ и дисперсия приращения: $\sigma_V^2(\Delta\tau) = \{\alpha(V) + 4\beta(V) - [\alpha(V) + 2\beta(V)]^2\}\Delta V^2$. При этом

$$\langle \eta(V) \rangle = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} [\alpha(V) + 2\beta(V)](\Delta V / \Delta\tau), \quad (3.1.61)$$

$$D_V(V) = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \{\alpha(V) + 4\beta(V) - [\alpha(V) + 2\beta(V)]^2\}(\Delta V^2 / \Delta\tau). \quad (3.1.62)$$

Чтобы эти предельные значения были конечными, выражения (3.1.61) и (3.1.62) определяют допустимый вид вероятностей $\alpha(V)$ и $\beta(V)$, а также требуют, чтобы ΔV и $\Delta\tau$ стремились к нулю. С учетом этого и берется предел при одновременном стремлении ΔV и $\Delta\tau$ к нулю.

Предположим, что в интересующей нас области значений V величина $D_V(V)$ ограничена $0 < D_V(V) < B = \text{const}$. Если теперь положить

$$\beta(V) = \frac{1}{2} \frac{\Delta\tau}{\Delta V^2} D_V(V); \quad \alpha(V) = \frac{\Delta\tau}{\Delta V^2} [\langle \eta(V) \rangle \Delta V - D_V(V)], \quad (3.1.63)$$

то равенства (3.1.61) и (3.1.62) будут выполнены с точностью $O(\Delta V^2)$ порядка малости. Допустим, что входящие в уравнение (3.1.60) функции можно дважды дифференцировать и представить рядом Тейлора. Например,

$$\phi(V \pm \Delta V, \tau + \Delta\tau) \approx \phi(V, \tau) \pm \Delta V \frac{\partial \phi}{\partial V} \pm \Delta\tau \frac{\partial \phi}{\partial \tau} + \frac{1}{2} (\Delta V)^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial V^2},$$

$$\alpha(V - \Delta V) \approx \alpha(V) - \Delta V \alpha'(V) + \frac{1}{2} (\Delta V)^2 \alpha''(V).$$

Если подставить такие разложения в (3.1.60), выразить $\alpha(V)$, $\beta(V)$ и их производные через $\langle \eta(V) \rangle$ и $D_V(V)$, согласно (3.1.63) разделить результат на $\Delta\tau$ и перейти затем к пределу при $\Delta\tau \rightarrow 0$, то для непрерывного процесса получим

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = -\frac{\partial}{\partial V}[\langle \eta(V) \rangle \varphi] + \frac{\partial^2}{\partial V^2}[D_V(V) \varphi].$$

Полученное дифференциальное уравнение в частных производных совпадает с уравнением (3.1.52). Рассмотрение дискретной модели непрерывного процесса позволило установить связь между параметрами дискретного и непрерывного процессов, выявить, что приращение по объему ΔV в дискретной модели имеет порядок малости $O(\Delta V^2)$. Модель дискретного марковского процесса роста ансамбля капель (3.1.55) с учетом полученных результатов запишется:

$$\begin{aligned} \varphi_i(n+1) &= \varphi_i(n)p_{ii}(n) + \varphi_{i-1}(n)p_{i-1,i}(n) + \varphi_{i-2}(n)p_{i-2,i}(n); \\ p_{i-2,i} &= \frac{1}{2} \frac{\Delta\tau}{\Delta V^2} D_V(V_{i-2}); \quad p_{i-1,i} = \frac{\Delta\tau}{\Delta V^2} [\langle \eta(V_{i-1}) \rangle \Delta V - D_V(V_{i-1})]; \\ p_{i,i} &= 1 - \frac{\Delta\tau}{\Delta V} \langle \eta(V_{i-1}) \rangle + \frac{1}{2} \frac{\Delta\tau}{\Delta V^2} D_V(V). \end{aligned} \quad (3.1.64)$$

Согласно *физическому* определению вероятности, под величиной $\varphi_i(n)$ можно понимать в момент времени τ_n объемное содержание в потоке газа капля с размерами от V_i до $V_i + \Delta V$:

$$\varphi_i(n) = V_i / \sum_{i=1}^k V_i \equiv V_i / V_\Sigma. \quad (3.1.65)$$

Подставив (3.1.65) в уравнение (3.1.64) и умножив его обе части на плотность жидкости ρ_d , получим

$$M_i(n+1) = M_i(n)p_{ii}(n) + M_{i-1}(n)p_{i-1,i}(n) + M_{i-2}(n)p_{i-2,i}(n); \quad i=1,2,3,\dots,k, \quad (3.1.66)$$

где $p_{ij}(n)$ образуют матрицу переходных вероятностей вида

$$\mathbf{P}_0 = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & & & & & & & \\ & p_{22} & p_{23} & p_{24} & & & & & & \\ & & & & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & & & p_{ii} & p_{i,i+1} & p_{i,i+2} & & \\ & & & & & & & & & \\ & & & & & & & & & \\ & & & & & & & & & \\ & & & & & & & & p_{k-1,k-1} & p_{k-1,k} \\ & & & & & & & & & 1 \end{pmatrix}.$$

Структура матрицы задается выбранной схемой возможных переходов при конденсационном росте частиц аэрозоля (рис. 3.1.15). Предполагается, что переходы возможны как за счет роста частиц с некоторой средней скоростью, так и из-за пульсаций скорости роста, которые могут уменьшать или увеличивать среднюю скорость роста. Данное явление отражает случайный характер изменения во времени объема частицы. Отличие в скоростях роста одной и той же частицы за короткий промежуток времени может достигать 20–30%.

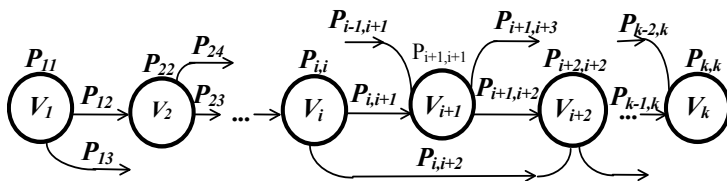


Рис. 3.1.15. Схема возможных переходов при росте дисперсных частиц

Соотношение (3.1.66) описывает изменение массы капель $M_i(n)$ различного объема во времени вследствие их роста. Состояния системы должны выбираться таким образом, чтобы по возможности обеспечить равенство переходных вероятностей p_{ji} . Однако для описания массовой конденсации одного соотношения (3.1.66) недостаточно. Связано это с изменением содержания в потоке газа влаги, следовательно, и снижением общей движущей силы конденсации.

Задача конденсационного роста ансамбля дисперсных частиц в своей общей постановке является довольно сложной и требует детального рассмотрения.

Рост ансамбля дисперсных частиц при постоянном пересыщении. Предположим, что скорость роста аэрозольных частиц зависит от их размера и величина, характеризующая флуктуации скорости роста $D_V(V)$, пропорциональна этой скорости:

$$D_V = K_V \langle \eta(V) \rangle.$$

Коэффициент K_V имеет размерность $[м^3]$. Выражение (3.1.64) может быть представлено следующим образом:

$$p_{i-1,i} = \frac{\langle \eta(V_{i-1}) \rangle}{\eta_o} \left(1 - \frac{K_V}{\Delta V}\right), \quad p_{i-2,i} = \frac{\langle \eta(V_{i-2}) \rangle}{\eta_o} \frac{K_V}{2\Delta V}.$$

Приведенные соотношения не несут дополнительной информации, но позволяют правильно задать значения входящих в них переменных. Так, коэффициент $K_V/\Delta V$ должен быть меньше единицы. В свою очередь, отношение $\eta^*(V) = \langle \eta(V)/\eta_o \rangle$ выбирается так, чтобы выполнялись условия сходимости задачи. Поскольку по условиям задачи $\eta^*(V)$ зависит от объема частицы, то его максимальная величина не должна превышать $p_\alpha = 0,01 \div 0,05$.

Согласно принятой модели, аэрозольные частицы могут иметь только определенные, заранее заданные размеры, т. е. находиться в одном из заранее заданных состояний. Выбор этих состояний (размеров) определяет как точность расчета функции распределения частиц по размерам, так и время решения задачи. Чем меньше шаг изменения объема, тем большее число итераций необходимо для достижения того же среднего размера частиц при постоянном значении p_α . Примем, что размеры аэрозольных частиц (возможные состояния) меняются по следующему закону $V_i = V_o(1 + \Delta V i)$, $i = 0, 1, 2, \dots, k$.

При этом предполагается, что V_o объем частицы минимальных размеров и может совпадать с размером зародыша. В свою очередь, ΔV задает шаг изменения объема аэрозольных частиц и k – общее число возможных состояний.

Чем меньше ΔV , тем больше состояний требуется для задания одного и того же интервала изменения размеров частиц.

Примем, что для скорости роста имеет место степенная зависимость вида

$$\eta^*(V) = p_\alpha (V_i/V_o)^b, \quad i = 0, 1, 2, \dots, k.$$

Соотношение для η^* задано так, что при $i = 0$ получим $\eta^*(V_o) = p_\alpha$, где p_α есть относительная скорость роста частицы минимального размера, которая учитывает и существующее в дисперсной системе пересыщение.

Исходя из принятой постановки задачи, шаг по времени напрямую не участвует в расчетах и p_α может быть рассчитано из условия

$$p_\alpha = \frac{\eta(V_o)}{\eta_o} = \eta(V_o) \frac{\Delta\tau}{\Delta V}.$$

Пример расчета по предложенной модели представлен на рис. 3.1.16, который проводился при следующих значениях параметров: $p_\alpha = 0,02$, $k = 600$, $\Delta V = 0,00625$, $K_V/\Delta V = 0,00$ и $0,95$.

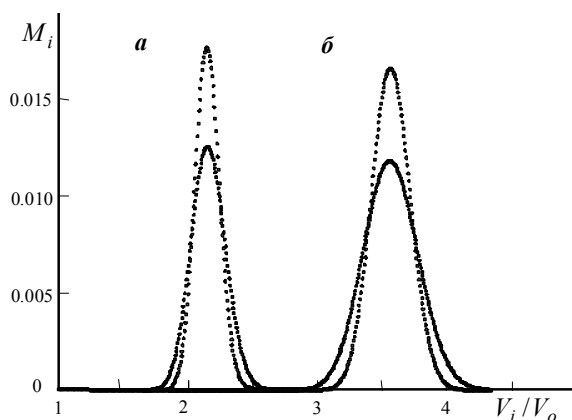


Рис. 3.1.16. Распределение аэрозольных частиц по размерам:
***a* – после 8000 шагов по времени, *б* – после 16000 шагов по времени.**

Дальнейшее уточнение рассматриваемой выше задачи направлено в первую очередь на обоснование принятых допущений.

Подведем итоги. В общем случае, как скорость роста, так и коэффициент диффузии частиц в пространстве размеров зависят от размера (объема) аэрозольной частицы и изменяются в течение времени, т. е. изучаемый процесс является неоднородным марковским процессом. Основное рекуррентное соотношение (3.1.66) должно учитывать как коагуляцию, так и дробление дисперсных частиц.

3.2. ОБРАЗОВАНИЕ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ

Первая ступень иерархии характеризуется физико-химическим взаимодействием атомов, молекул, ионов и относится к моделированию на атомно-молекулярном уровне. Именно эти взаимодействия и определяют образование

дисперсной фазы при конденсации как фазовый переход из газообразного состояния (пара) в жидкое состояние.

3.2.1. Фазовый переход из газообразного в жидкое состояние

В термодинамической теории фазовых превращений рассматривается лишь равновесие между исходной и новой фазами в предположении, что последняя достигла полного развития и поверхность раздела между обеими фазами является плоской. Под температурой перехода при заданном давлении подразумевается не та температура, при которой переход фактически начинается, а та, при которой он останавливается. Речь идет о температуре, при которой обе фазы могут оставаться в равновесии друг с другом неограниченно долгое время.

Образование и начальное развитие новой фазы с достаточной для ее обнаружения скоростью возможно только при некотором отступлении от условий равновесия. Отступления от условия равновесия могут быть гораздо более существенными, чем необходимо для роста новой образующейся фазы. Фазовый переход «пар – жидкость» возможен только в том случае, когда исходная паровая фаза оказывается в состоянии, исключаемом из рассмотрения в обычной термодинамике как термодинамически неравновесное. Оно может сохраняться в течение более или менее продолжительного времени, поскольку скорость возникновения новой фазы достаточно мала. Подобные состояния называются метастабильными.

Возникновение новой фазы в метастабильной паровой фазе происходит в форме зародышей, которые обычно рассматриваются как маленькие капельки. Принимается, что маленькие капельки или комплексы частиц отличаются от обычных макроскопических тел в жидком состоянии только своими размерами. Эта точка зрения не может считаться правильной хотя бы потому, что она не решает вопроса о возникновении новой фазы, а только переносит его с элементов больших размеров на очень малые. Однако этот шаг имеет существенное значение. В случае зародышей малых размеров в чрезвычайной степени возрастает роль поверхностной энергии и поверхностного натяжения при оценке общей и свободной энергии образуемой ими системы.

Кульер в 1875 г. и Айткен в 1880 г. обнаружили интересное явление: для образования облака путем адиабатического расширения влажного воздуха (т. е. когда между влажным воздухом и камерой, где он находится, отсутствует теплопередача) необходимо наличие маленьких частиц пыли. Если же воздух пыли не содержит, то облако не образуется. В этом случае образование облака начинается только при очень сильном расширении. Вильсон продолжил исследования, определив условия образования облака в отсутствие частиц пыли: образование капель при пересыщении в присутствии ионов либо спонтанное образование капель, но при более высоком пересыщении. Эти исследования впоследствии привели к созданию камеры Вильсона, которая используется для непосредственного наблюдения ионных треков.

Типы зародышеобразования. Было установлено, что для образования аэрозолей прежде всего требуется поверхность для конденсации. Такую поверхность

образуют маленькие кластеры молекул пара, ионы, ионные кластеры и небольшие частицы различных веществ, называемые ядрами конденсации. Если конденсация пара происходит исключительно на кластерах, образованных молекулами этого же пара, процесс называется спонтанным, или гомогенным, зародышеобразованием. Если же пар конденсируется на ядре из другого вещества, то процесс носит название гетерогенного зародышеобразования.

При гомогенном зародышеобразовании жидкость, из которой состоит капля, обычно переохлаждается до температуры ниже точки ее замерзания, так как в жидкости отсутствуют инородные тела. Капли воды можно переохладить до температуры ниже -40°C . Даже если капля содержит одно ядро конденсации, она легко переносит переохлаждение. Это говорит о том, что частица (твердая или жидкая), образовавшаяся в результате конденсации, проходит через жидкую фазу, хотя время ее нахождения в этой фазе может быть очень малым.

Гомогенное зародышеобразование проходит в три стадии. Во-первых, пар при расширении должен стать настолько пересыщенным, чтобы происходила его конденсация. Во-вторых, должны образоваться малые молекулярные кластеры, или зародыши. В-третьих, пар должен конденсироваться на зародышах, которые при этом растут, превращаясь в капли. В случае гетерогенного образования капли наблюдаются только на первой и третьей стадиях.

Степень пересыщения пара в газе можно представить в виде

$$S = P / P_{\infty}(T). \quad (3.2.1)$$

Известно, что при $S > 1$ газ вместе с паром является пересыщенным. Когда $S = 1$, газ насыщенный, а при $S < 1$ газ с паром будет ненасыщенным. При адиабатическом расширении парогазовой системы, используя первый закон термодинамики, степень пересыщения газа, являющегося насыщенным до расширения, можно представить в виде

$$S = \left(\frac{V_2}{V_1} \right)^{-n} \exp \left\{ \frac{B}{T_1} \left[\left(\frac{V_2}{V_1} \right)^{n-1} - 1 \right] \right\}, \quad (3.2.2)$$

где V_1 и V_2 – объемы газа соответственно до и после расширения; T_1 – абсолютная температура газа до расширения; n – отношение удельных теплоемкостей газа при постоянных давлении и температуре; B – коэффициент из интегрального члена уравнения Клаузиуса–Клапейрона. Для водяного пара константы n и B в интервале температур 20 – 60°C равны $1,4$ и 5367 соответственно. Постоянная B вычислена из приближенного уравнения для давления пара $\ln P_{\infty}(T) = A - B/T$ при $A = 21,18$. Зависимость степени пересыщения от переохлаждения водяного пара представлена на рис. 3.2.1. Переохлаждение рассчитывалось как разница между начальной температурой пара и его температурой после расширения $\Delta T = t_1 - t_2$. В исследуемом диапазоне температур использовалась следующая зависимость между давлением насыщенного водяного пара и температурой:

$$P(t) = (\exp\{0,0415t - 4,05\} - 0,0105)10^5.$$

Необходимо учитывать, что маленькие капли будут испаряться, даже если они находятся в насыщенном паром газе. Для поддержания же капли в равнове-

сии необходимо пересыщение газа, так как вероятность потери молекулы выпуклой поверхностью больше, чем плоской. Молекуле, покидающей маленькую сферическую каплю, гораздо труднее *найти* обратную дорогу, чем молекуле, покидающей плоскую бесконечную поверхность. Так, высокие пересыщения, необходимые при образовании капли путем спонтанной конденсации, связаны с размерами капли. Было предложено несколько теорий гомогенного зародышеобразования, и хотя ни одна из них не может объяснить все случаи, с их помощью можно предсказать параметры аэрозоля с точностью, достаточной для практического применения.

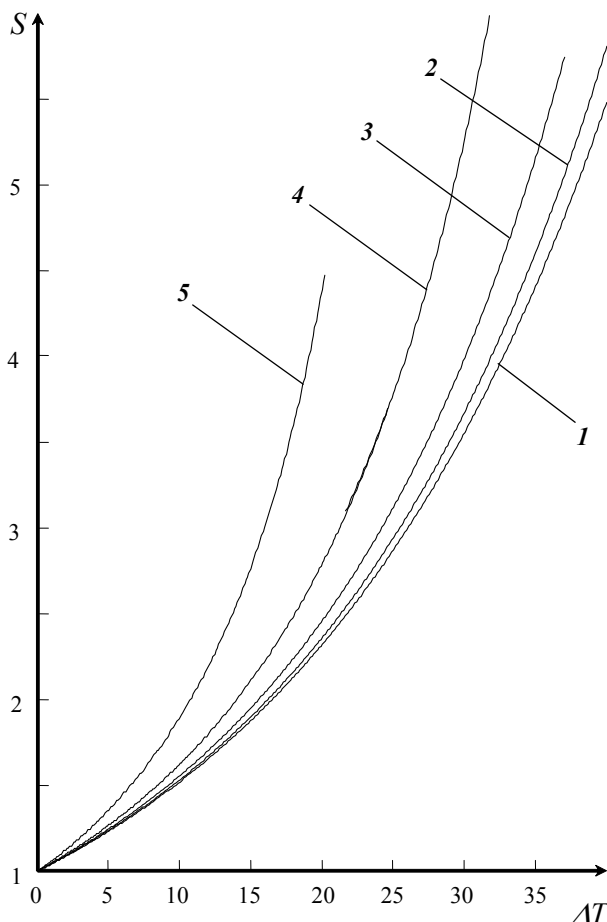


Рис. 3.2.1. Зависимость степени пересыщения от переохлаждения при различной начальной температуре (давлении) водяного пара:
1 – 100°C, 2 – 80°C, 3 – 60°C, 4 – 40°C, 5 – 20°C.

Гомогенное зародышеобразование – уравнение Кельвина. Рассмотрим энергетический баланс конденсирующейся капли. По мере образования капли (или зародыша) ее свободная поверхностная энергия изменяется от 0 до $4\pi R_d^2 \sigma$. Ес-

ли свободная энергия одной молекулы равна u_c в паровой фазе и u_d в жидкой фазе, а N – общее число молекул, находящихся в капле размером R_d , то полное изменение свободной энергии капли ΔU равно

$$\Delta U = (u_d - u_c)N + 4\pi R_d^2 \sigma. \quad (3.2.3)$$

Допустим, что парциальное давление пара около капли изменилось на малую величину dP (при этом температура осталась прежней). Это приведет к соответствующему изменению свободной энергии молекулы пара du_c и свободной энергии молекулы капли du_d . Если V_c и V_d – объемы, занимаемые молекулой в паровой и жидкой фазе соответственно, то $du_c = V_c dP$ и $du_d = V_d dP$. Так как $V_c \gg V_d$, имеем

$$du_d - du_c = V_c dP = d(u_d - u_c) \approx \frac{kT}{P} dp. \quad (3.2.4)$$

Если давление меняется от $P_\infty(T)$ до P , то интегрирование уравнения (3.2.4) дает

$$u_d - u_c = kT \ln[P/P_\infty(T)] = kTS. \quad (3.2.5)$$

Масса сферической капли равна $4\pi R_d^3 \rho_d / 3$. Следовательно, в капле содержится N молекул, причем

$$N = \frac{N_A}{M_b} \frac{4}{3} \pi R_d^3 \rho_d. \quad (3.2.6)$$

Подставляя (3.2.5) и (3.2.6) в (3.2.3), получим

$$\Delta U = 4\pi R_d^2 \sigma - [kT \ln S] \left[\frac{N_A}{M_d} \left(\frac{4\pi}{3M} R_d^3 \rho_d \right) \right]. \quad (3.2.7)$$

Полное изменение свободной энергии капли зависит как от размера капли, так и от степени пересыщения. Как видно из уравнения (3.2.7), существует энергетический барьер, препятствующий росту капель с размером, меньшим критического. Капли с размером больше критического будут расти, поскольку для них при увеличении размера свободная энергия системы уменьшается, т. е. капля отдает энергию. Если же размер капель меньше критического, то они испаряются, поскольку при испарении капель их свободная энергия уменьшается.

Критический размер капли R^* можно определить, продифференцировав ΔU по R_d , приравняв результат к нулю и решив полученное уравнение относительно R_d . Получаем

$$R^* = \frac{2\sigma M_b}{\rho R T \ln S}. \quad (3.2.8)$$

Преобразование уравнения (3.2.8) дает уравнение Кельвина:

$$\ln S = \frac{2\sigma M_b}{\rho R T R^*}. \quad (3.2.9)$$

График этого уравнения приведен на рис. 3.2.2, где кривая является равновесной линией. Если для капли радиусом R_d связанная с ним величина S лежит слева от линии, то капля будет испаряться. Если же точка, соответствующая S , расположена справа от равновесной линии, то капля будет расти. Капле, имеющей определенный размер, не обязательно соответствует значение S , рас-

положенное на равновесной линии. Приведенная кривая только показывает условия, при которых капля будет расти или испаряться. Согласно уравнению Кельвина, капля, состоящая из чистой жидкости, всегда будет испаряться при $S < 1$. Например, так ведут себя водяные капли в воздухе, когда его относительная влажность меньше 100%. Капли с размером меньше критического будут испаряться даже при пересыщении. Поэтому маленькие капли чистых жидкостей при нормальных условиях имеют небольшое время жизни. Однако в системе, состоящей из множества маленьких капель одного размера, время жизни некоторых капель может увеличиться, поскольку испарение отдельных капель ведет к возрастанию пересыщения, что способствует росту капель.

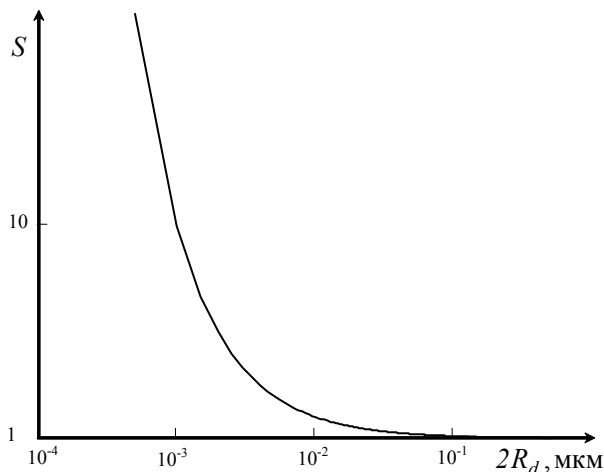


Рис. 3.2.2. График уравнения Кельвина (3.2.9)

При определении свободной энергии капли предполагалось, что поверхностное натяжение не зависит от размера капель. Если капля очень мала, то к ней трудно применить обычное определение поверхностного натяжения. Некоторые авторы считают вполне приемлемым использование для очень маленьких капель величин, полученных для плоской поверхности.

Скорость образования критических ядер. Как уже отмечалось, пока не достигнуто очень высокое пересыщение, спонтанная конденсация незначительна. Например, образование видимого тумана при адиабатическом расширении влажного воздуха, имеющего комнатную температуру, произойдет, если пересыщение влажного воздуха без пыли составит 600%. При такой степени пересыщения критический диаметр капли равен приблизительно 0,001 мкм, что соответствует кластеру из 50 молекул. При гомогенном процессе зародыши ядер конденсации представляют собой агрегаты молекул пара, которые непрерывно образуются и распадаются под действием случайных факторов. Если размер образующегося кластера превышает критический, кластер начинает расти; вероятность его образования зависит от степени пересыщения.

При формировании аэрозоля количество образовавшихся ядер и зародышей соответствует количеству присутствующих молекул пара. При росте маленьких

капель пар *истощается*, что приводит к уменьшению пересыщения и прекращению образования зародышей. Был предложен ряд моделей образования аэрозоля при расширении газа, содержащего конденсируемое вещество. Большинство из них построено с использованием упрощающих предположений. С помощью таких моделей можно предсказать число образующихся капель и их средний размер, но определить результирующее распределение по размерам не удастся. Эффектом коагуляции капель обычно пренебрегают, хотя не только конденсация, но и коагуляция приводит к различию в размерах образовавшихся частиц.

Ядра конденсации. В большинстве практических случаев пар конденсируется на мелких частицах пыли, и для протекания такого процесса не требуется такого высокого пересыщения, как при гомогенной конденсации. Этим частицам пыли дано название ядра конденсации, и они могут иметь размеры от молекулярного до 1 мкм и более. Классификация ядер конденсации, обычно используемая в физике атмосферы, выглядит следующим образом: ядра Айткена 0,001–0,4 мкм, большие ядра – 0,4–2,0 мкм, гигантские ядра – более 2,0 мкм.

Число атмосферных ядер конденсации в 1 см³ приблизительно обратно пропорционально кубу диаметра частиц, т. е. в атмосфере преобладают малые ядра конденсации. Размеры частиц и их число в 1 см³ зависят от метеорологических условий, высоты местности над уровнем моря, растительного покрова, плотности населения, наличия пыли. Кроме того, число ядер конденсации меняется в зависимости от времени суток и времени года. На их концентрацию влияют также скорость и направление ветра. Характерная концентрация атмосферных ядер – от менее 100 до более 10⁶ частиц/см³.

Источниками ядер конденсации являются многие процессы. Полагают, например, что процессы фотоокисления природных органических веществ над сельскими районами являются возможной причиной появления голубой дымки над растительным покровом. Хотя для выяснения механизмов фотохимического образования аэрозолей еще многое предстоит сделать, ясно, что этот процесс имеет важное значение и при образовании аэрозолей над промышленными районами. Основным естественным источником ядер конденсации может служить процесс фотоокисления органического вещества. К другим источникам относятся подъем частиц пыли ветром, образование ядер NaCl при распылении морской соли, а также лесные пожары, взрывы и извержения вулканов. Так, при извержении вулкана Кракатау в 1883 г. было выброшено 6,5 км³ тонкой пыли (приблизительно 10²³ частиц диаметром 0,1 мкм). Некоторые авторы рассматривают в качестве источников ядер конденсации метеориты и космическую пыль. Наконец, конденсация может происходить на таких органических материалах, как споры растений, микроорганизмы, частицы, образующиеся при разрушении перьев, шерсти, тканей животных и т. д.

Состав ядер конденсации. Ядра конденсации могут состоять как из органического, так и из неорганического вещества, могут быть растворимыми, нерастворимыми или же нерастворимыми с тонким внешним слоем, состоящим из растворимого вещества (в этом случае они называются смешанными ядрами). Из-за многообразия существующих в природе растворимых веществ химиче-

ский состав ядер конденсации не определен достаточно хорошо. Исследование смога показало, что около 60% частиц состоят из неорганических веществ или минералов, а остальные представляют собой сложную смесь органических компонентов, угля и пылицы. Такое процентное соотношение не является неизменным везде. Анализ состава ядер конденсации связан с большими трудностями, поскольку для характерного диапазона размеров концентрация анализируемого вещества составляет 10 мкг/м^3 и меньше. Частицы разных размеров могут отличаться и по химическому составу. Анализ аэрозолей показал, что большинство ядер диаметром $0,4\text{--}2 \text{ мкм}$ состоит главным образом из сульфата аммония, в то время как состав частиц с диаметром, превышающим 2 мкм , менее специфичен: иногда такие частицы содержат значительное количество хлорида или нитрата натрия.

Адсорбция атмосферных газов может изменить химический состав атмосферных ядер конденсации. Можно легко наблюдать захват радиоактивных газов мелкими частицами. Этот процесс является одной из форм адсорбции. В настоящее время о роли аэрозолей при адсорбции имеется мало данных.

Свойства ядер конденсации. В процессе конденсации участвуют не все атмосферные аэрозоли, а лишь небольшая их часть. Как следует из (3.2.9), самыми активными являются самые большие, а также самые растворимые ядра конденсации. Следовательно, участие ядер в процессе конденсации сильно зависит от степени пересыщения, которая в случае атмосферной конденсации зависит от скорости охлаждения воздуха.

Участие ядер в конденсации также зависит от их химического состава. Можно рассмотреть два общих класса ядер конденсации: растворимые и нерастворимые. Пар, конденсирующийся на растворимых ядрах, растворяет их, изменяя свойства капли-зародыша, поэтому свойства образующейся капли будут отличаться от свойств капли чистой жидкости. Для нерастворимых ядер большое значение имеют характеристики их поверхности, так как если ядро покроется жидким слоем, то оно будет вести себя так же, как капля чистой жидкости.

Различают два типа нерастворимых ядер конденсации: легко смачиваемые и несмачиваемые. Легко смачиваемые ядра быстро образуют капли. Для теоретического предсказания роста и испарения таких частиц ядро можно рассматривать как чистую каплю и непосредственно применять к нему уравнение Кельвина (но при меньшем предельном размере ядра).

Конденсация пара на частицах с несмачиваемой поверхностью более затруднена. Это вызвано тем, что конденсирующаяся жидкость на поверхности такой частицы стремится собраться в маленькие шарики и жидкий слой образуется только тогда, когда поверхность покроется шариками целиком. Конденсацию на несмачиваемой частице изучали, рассматривая угол смачивания между поверхностью частицы и шариком-зародышем, образовавшимся на поверхности. Полученные результаты соответствовали экспериментально наблюдаемому — пока не достигается высокая степень пересыщения, конденсация на несмачиваемой частице не происходит. Роль несмачиваемых ядер при конденсации не выяснена до конца. Это еще одна задача, которую предстоит решить в будущем.

Во многих случаях при конденсации на растворимых ядрах образуются капли раствора. В качестве примера можно привести конденсацию воды на ядрах хлорида натрия. Вначале образуется насыщенный раствор NaCl , при дальнейшей конденсации раствор становится все более разбавленным, пока образовавшаяся капля не будет вести себя так же, как капля чистой жидкости. Обычно равновесное давление пара растворителя над поверхностью раствора ниже, чем над поверхностью чистого растворителя на величину, зависящую от природы растворителя и от концентрации и природы растворенного вещества. Более низкое равновесное давление пара означает, что процесс конденсации идет при меньших степенях пересыщения.

Гистерезис при испарении и конденсации. Гистерезис состоит в том, что фазовый переход происходит при одном значении влажности в случае ее возрастания, при ее уменьшении – при другом значении. Вначале гигроскопичная растворимая частица в окружении паров растворителя в результате адсорбции покрывается оболочкой растворителя. При некотором минимуме относительной влажности количество осажденного растворителя станет таким, что частица растворится и образуется жидкая капля. Если для того, чтобы высушить каплю, уменьшать влажность, то оказывается, что капля остается, даже если относительная влажность меньше требуемой для первоначального растворения. Это означает, что раствор, из которого состоит капля, становится пересыщенным. При дальнейшем уменьшении относительной влажности растворенное в капле вещество внезапно кристаллизуется.

При изучении эффекта гистерезиса было найдено, что растворение различных неорганических солей происходит при относительной влажности 68–80%, в то время как кристаллизация наблюдается при значениях относительной влажности 30% и ниже. Например, раствор MgCl_2 кристаллизуется при относительной влажности 70%, а рекристаллизуется при 40%. Гистерезис отсутствует у негигроскопичных материалов. Данное явление помогает понять, почему смоги и туманы продолжают существовать, даже если относительная влажность ниже той, при которой они образовались.

Подведем итоги. Качественный анализ зарождения дисперсной фазы в условиях отклонения сплошной фазы от термодинамического равновесия показывает большое многообразие наблюдаемых при этом явлений, учесть которые в рамках единой теории пока не представляется возможным. Достигнутые в настоящее время результаты позволяют говорить о возможности предсказания скорости гомогенного и гетерогенного зародышеобразования в условиях конденсации пересыщенного пара.

3.2.2. Скорость зародышеобразования

Изучение структуры зародышей и их взаимодействий приводит к становлению теории кластеров. Широким фронтом ведутся работы по нестационарной и неизотермической теории зародышеобразования. Развиваются статистические подходы на основе математической теории случайных процессов – пуассоновских, марковских, приводящих к описанию зародышеобразования уравнениями

типа Фоккера–Планка, А. Н. Колмогорова и другими стохастическими уравнениями. Обобщение теории идет по различным направлениям. Большое число работ посвящено непосредственному решению уравнений типа Фоккера–Планка численными методами. Работы этого направления выделяются сейчас в особую ветвь науки – молекулярную динамику. В работах Цинмайстера, Л. Н. Александрова, Б. И. Кидярова и других исследователей развивается модель образования и гибели кластеров на основе теории статистической надежности, порядковых статистик и теории массового обслуживания. В работах И. М. Лифшиц и других развивается квантовая теория фазовых превращений. Существуют статистические теории конденсации, в которых не рассматривается равновесие между исходной фазой и зародышем. Л. Я. Щербаков и другие развивают теорию для кластеров, в которых нельзя, как в сферической капле, выделить объемную и поверхностную составляющие термодинамического потенциала. Теория кинетики зародышеобразования из расплава разработана Тарнбаллом, Фишером и др. Большой интерес представляет создание теории полиморфных превращений. Теория поверхностных явлений уже сформировалась как самостоятельная ветвь науки. Интенсивно развивается также направление, связанное с термодинамикой необратимых процессов.

Основное кинетическое уравнение зародышеобразования. Если сплошная фаза находится в термодинамически устойчивом состоянии, т. е. если $u_c < u_d$, то ΔU представляет собой монотонно возрастающую функцию.

Согласно принципам статистической механики, даже в термодинамически устойчивой системе должны происходить флуктуации, т. е. местные и переходящие отклонения от нормального состояния, которые приводят систему в состояния с большим термодинамическим потенциалом, т. е. менее вероятные. Пока основная фаза остается термодинамически устойчивой $u_c < u_d$, возникающие в ней зародыши новой фазы являются нежизнеспособными, т. е. они возникают, достигают незначительных размеров и снова погибают, не обнаруживая тенденции к росту. Однако когда основная фаза термодинамически неустойчива или, вернее, метастабильна $u_c > u_d$, эта тенденция оказывается преобладающей у зародышей новой фазы после достижения ими некоторых критических размеров $R = R^*$, соответствующих максимуму потенциала ΔU_{\max} . Эти зародыши способны к дальнейшему росту.

Когда u_c становится больше u_d , должен начаться фазовый переход, скорость которого ограничена необходимостью перейти через потенциальный барьер ΔU_{\max} , т. е. еще до начала обычного скачкообразного перехода сплошная фаза не вполне однородна и содержит зародыши дисперсной фазы. Рассмотрим образование капель жидкости из паровой фазы, как это было сделано Френкелем. Примем, что капли некоторого размера, слегка превышающего критический, удаляются из системы по мере своего образования и заменяются эквивалентным числом $n_m N_{n_m}$ отдельных молекул. Число капель любого размера, включая и индивидуальные молекулы, должно оставаться постоянным.

Обозначим через $\eta(n)^-$ среднее число молекул, которые испаряются в единицу времени с единицы поверхности капли, состоящей из n ($n \geq 2$) молекул. Произведение $S_n \eta(n)^- d\tau$ – вероятность того, что подобная капля с поверхностью $S_n = 4\pi R_n^2$ потеряет одну из образующих ее молекул путем испарения за время $d\tau$. Аналогичным образом $S_n \eta(n)^+ d\tau$ обозначает вероятность того, что она приобретает лишнюю молекулу путем конденсации пара за то же время $d\tau$. Введем также неравновесное распределение $f_n = f(n)$, характеризующее число капель, состоящих из n молекул в системе. Правая часть выражения

$$J(n) = f(n-1)S_{n-1}\eta(n)^+ - f(n)S_n\eta(n)^- \quad (3.2.10)$$

характеризует избыток числа капель, которые благодаря конденсации переходят в единицу времени из класса $n-1$ в класс n , над числом капель, которые в то же самое время переходят вследствие испарения из класса n в класс $n-1$.

Принимая во внимание связь между η^+ и η^- ($\eta^+ = \eta(n)/N_n$), можно переписать выражение (3.10) в следующем виде:

$$J(n) = N_{n-1}S_{n-1}\eta^+[f(n-1)/N_{n-1} - f(n)/N_n]. \quad (3.2.11)$$

Скорость изменения числа капель данного класса определяется следующим образом:

$$\frac{\partial f(n)}{\partial \tau} = J(n) - J(n+1). \quad (3.2.12)$$

Уравнение (3.2.12) представляет собой основное кинетическое уравнение решаемой задачи. Если оставить в стороне малые значения n , то величины, фигурирующие в (3.2.9) и (3.2.10), испытывают весьма малые изменения при замене n на 1. Так, при $n \gg n_0$ (где, например, $n_0 = 10$) эти величины можно трактовать как функции непрерывного аргумента n . Полагая для краткости

$$S(n-1)\eta^+ \approx S(n)\eta(n)^+ = D(n),$$

из (3.10) получим

$$J(n) = -D(n)\frac{\partial f}{\partial n} + D(n)f(n)\frac{\partial \ln(N)}{\partial n}$$

или, так как $\ln N = \text{const} - \Delta U(n)/kT$:

$$J(n) = -D(n)\frac{\partial f}{\partial n} - \frac{D(n)}{kT}f(n)\frac{\partial \Delta U(n)}{\partial n}, \quad (3.2.13)$$

где ΔU определяется уравнением (3.2.8).

Выражение (3.2.13) формально тождественно обычному выражению для потока частиц с плотностью $f(n)$, обусловленного, с одной стороны, диффузией, а с другой – действием внешней силы F , соответствующей потенциальной энергии $\Delta U(n)$. Из совместного рассмотрения (3.2.12) и (3.2.13) получим кинетическое уравнение

$$\frac{\partial f(n)}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial n}[\langle \eta(n) \rangle f(n)] - \frac{\partial}{\partial n}\left[D(n)\frac{\partial f(n)}{\partial n}\right] = 0. \quad (3.2.14)$$

Уравнение (3.2.14) совпадает с известным уравнением Фоккера–Планка при условии

$$\langle \eta(n) \rangle = -\frac{D}{kT} \frac{\partial \Delta U}{\partial n}.$$

Обобщенное многомерное уравнение Фоккера–Планка имеет вид уравнения сохранения в дивергентной форме:

$$\frac{\partial f}{\partial \tau} = -\sum_{i=1}^m \frac{\partial I_i}{\partial a_i} = -\text{div} I_i, \quad (3.2.15)$$

где поток I_i определяется выражением

$$-I_i = u(\vec{a}) \sum D_{ij}(\vec{a}) \frac{\partial}{\partial a_i} \left(\frac{f(\vec{a}, \tau)}{u(\vec{a})} \right);$$

$\vec{a} = \{a_i\}$ – набор параметров, характеризующих зародыши; D_{ij} – тензор коэффициента диффузии; $u(\vec{a})$ – равновесная функция распределения $u(\vec{a}) = \exp\{-\Delta U(\vec{a})/kT\}$.

Кинетическое уравнение (3.2.14) для функции $f(n)$, полученное исходя из статистической теории флуктуаций, позволяет трактовать образование дисперсных частиц как некоторый случайный марковский процесс их рождения и гибели. Величина $\langle \eta(n) \rangle$ при этом характеризует среднюю скорость систематического изменения числа частиц из n молекул в системе, величина $D(n)$ – меру интенсивности флуктуаций скорости их образования.

Как будет показано ниже, кинетическое уравнение (3.2.14) может быть с успехом распространено и на область больших размеров частиц при соответствующем выборе коэффициентов $\langle \eta(n) \rangle$ и $D(n)$ и является основным в теории конденсации.

Стационарное распределение, полученное в результате решения (3.2.14) при условии $\partial f(n)/\partial \tau = 0$, эквивалентно условию $J(n) = \text{const}$. С учетом принятого допущения о постоянстве в системе числа капель любого размера имеем

$$J(n) = -D(n) \frac{\partial f(n)}{\partial n} - \frac{D(n)}{kT} - f(n) \frac{\partial \Delta U(n)}{\partial n} = 0$$

или

$$\frac{\partial f(n)}{\partial n} = -\frac{1}{kT} \frac{\partial \Delta U(n)}{\partial n} f(n).$$

В результате интегрирования, получим

$$f(n) \approx K \exp\{-\Delta U(n)/kT\}$$

или приближенно (с точностью до постоянной)

$$N(n) = N \exp\{-\Delta U(n)/kT\}. \quad (3.2.16)$$

С учетом (3.2.7) выражение для числа зародышей критических размеров в системе запишется так:

$$N_{d*} = N \exp\{-\pi \sigma R^{*2}/3kT\}. \quad (3.2.17)$$

Гомогенное зародышеобразование. Согласно термодинамической теории флуктуаций, равновесная функция распределения зародышей различных размеров f_0 , через которую выражается число зародышей dn в интервале размеров dr в единице объема среды $dn = f_0 dr$, также определяется выражением вида

функции распределения Максвелла–Больцмана или канонического распределения Гиббса (3.2.16).

Это в известной мере оправдывает постулат Фольмера и Вебера, что вероятность образования зародышей новой фазы критических размеров в единицу времени определяется выражением, аналогичным (3.2.16) с учетом приращения свободной энергии Гиббса, обусловленной образованием зародыша. Величина так называемого предэкспоненциального множителя определяется спецификой конкретного типа фазового перехода (конденсация, испарение, вскипание, кристаллизация и др.) и, как ΔU , является функцией термодинамических параметров. Экспоненциальный показатель сильно зависит от σ , этим объясняется интенсивное возникновение зародышей фазовых переходов при добавлении поверхностно-активных веществ, различные поверхности также являются наиболее вероятными центрами образования зародышей. Предэкспоненциальный множитель обычно принимается пропорциональным числу молекул в единице объема исходной фазы N . Чтобы учесть неравновесность процесса, в теории Фольмера и Вебера вводится неравновесный фактор C_1 , связывающий неравновесную функцию $f(n)$ с равновесной:

$$f(n) = C_1 f_0(n). \quad (3.2.18)$$

Если через Ω^* обозначить скорость перехода капли через критический размер, а через C_2 – нормировочный множитель, то частота образования зародышей

$$N_{d*} = NB_1 \exp\left\{\frac{\pi\sigma R^*{}^2}{3kT}\right\}, \quad (3.2.19)$$

где $B_1 = \Omega^* C_1 C_2$. Райс и Катц для конденсации пара ввели поправку

$$C_1(V_c/V_d)n, \quad (3.2.20)$$

где n – число молекул в капле, а V_c и V_d – объемы на одну молекулу в паровой и жидкой фазах. Для спонтанной конденсации $C_1 = 10^2 - 10$. Б. В. Дерягин оценивает величину поправочного множителя $C_1 \approx 10^3$.

Уточнению сомножителей в формуле для потока зародышей посвящено много работ. Я. И. Френкель указал на необходимость учета внешних степеней свободы кластеров (так именуются группы молекул, комплексы). Лоте и Паунд ввели поправку в формулу (3.2.9) для учета поступательных и вращательных степеней свободы кластера и предложили выражение для множителя B_1 . Однако при неизменном экспоненциальном множителе значение B_1 , вычисленное по этому выражению, отличается от найденного по формуле (3.2.9) в 10^{17} раз, что существенно расходится с экспериментом. Поэтому указанную поправку считают не соответствующей действительности. В статье показано методами статистической физики, что вклад от поступательных и вращательных составляющих степеней свободы кластера компенсируется зависимостью поверхностного натяжения от радиуса.

М. Фольмер при расчете стационарной конденсации полагал, что капли, достигшие критического радиуса, выбывают из рассмотрения, превращаясь в новую фазу, и заменяются эквивалентным числом молекул пара. При этом ско-

рость образования зародышей определялась как произведение числа зародышей N^* , достигших критического размера, в единице объема на количество сконденсировавшихся молекул при столкновении с единицей поверхности в единицу времени и на поверхность зародыша:

$$J = N^* b 4\pi R^{*2}. \quad (3.2.21)$$

Учитывая, что

$$N^* = N_1 \exp\left\{-\frac{\Delta U}{kT}\right\}, \text{ а } R^* = \frac{3\Delta U}{4\pi\sigma},$$

получим

$$J = N_1 b \frac{3\Delta U}{\sigma} \exp\left\{-\frac{\Delta U}{kT}\right\}.$$

Согласно более поздним расчетам по кинетической теории:

$$b = k^* / \sqrt{2\pi m kT}, \quad (3.2.22)$$

где k^* – коэффициент конденсации, определяемый как отношение числа конденсирующихся молекул пара к числу падающих на рассматриваемую поверхность.

Более точное выражение для скорости зародышеобразования J было получено Р. Беккером и В. Дерингом, решившими при определенных допущениях основное кинетическое уравнение конденсации (3.2.14). Позже Я. Б. Зельдович и Я. И. Френкель уточнили формулу Р. Беккера и В. Деринга, предложив более простой ее вывод, базирующийся на принципе детального равновесия. Ниже приводится окончательный вид этой формулы для скорости образования ядер конденсации (капелек критического размера):

$$J \approx \frac{p}{kT} \sqrt{\frac{2\sigma V_d^2}{\pi m_c}} \exp\left\{-\frac{4\pi R^{*2} \sigma}{2kT}\right\}. \quad (3.2.23)$$

Формула (3.2.23) характеризует число ядер конденсации, возникающих в единицу времени в единице объема. Процесс конденсации в этом случае может трактоваться как стационарный, и скорость его будет определяться числом капелек критического размера, удаляющихся из системы в единицу времени. Формула (3.2.23) может быть представлена в более удобной для практических расчетов форме:

$$J = Z_0 p_1^2 \exp\{-Z_1^2 / \ln^2 \bar{p}\}, \quad (3.2.24)$$

где p_1 – давление пара; $\bar{p} = p / p_\infty$;

$$Z_0 = \frac{\sqrt{(2/\pi)\sigma N_1^2}}{\rho_d (R_g T)^2}; \quad Z_1 = \sqrt{\frac{16\pi\sigma^3 N_1}{3\rho_d^2 (R_g T)^3}},$$

где N_1 – число молекул пара, приходящихся на единицу его массы ($3,35 \cdot 10^{25} \text{ кг}^{-1}$). Комплексы Z_0 и Z_1 зависят в основном только от температуры.

Рассмотрим некоторые другие формы записи уравнения скорости зародышеобразования (3.2.23), раскрывающие ее зависимость от различных параметров:

$$J = K \exp \left\{ -\frac{16\pi}{3} \frac{N_A}{R_g^3} \left(\frac{\sigma}{T} \right)^3 \left(\frac{M_m}{\rho_d} \right)^2 \frac{1}{\ln^2 \bar{p}} \right\} =$$

$$= K \exp \left\{ -\frac{16\pi}{3} \left(\frac{M_m}{\rho_d} \right)^2 \frac{1}{R_g} \frac{\sigma^3}{L^2 T} \frac{1}{\ln^2 \bar{p}} \right\}. \quad (3.2.25)$$

Проводившиеся сопоставления экспериментальных исследований с расчетами спонтанной конденсации пара в соплах показали их значительное расхождение. Наиболее существенная разница наблюдалась в зоне высоких давлений пара. Прежде всего делались попытки устранить допущения, связанные с отождествлением свойств зародыша со свойствами макроскопической фазы. Однако введение более точных зависимостей плотности и поверхностного натяжения от размера зародыша не дало ожидаемого эффекта. Односторонний учет зависимости σ от кривизны поверхности без последовательного пересмотра всей теории (вычисления работы образования новой фазы, вывода кинетического уравнения конденсации, скорости зародышеобразования и других соотношений) может дать и большее отклонение результатов расчета от эксперимента. В этой связи широкое распространение получил метод, основанный на введении в (3.2.24) экспериментальных поправочных коэффициентов α и β :

$$J = \alpha Z_0 p_1^2 \exp \{ -\beta Z_1^2 / \ln^2 \bar{p} \}. \quad (3.2.26)$$

Различные исследователи рекомендуют на основании сопоставлений экспериментальных исследований с расчетами или на базе теоретического анализа разные значения поправочных коэффициентов α и β . Имеющийся значительный разброс α и β объясняется, как правило, тем, что для теоретического расчета используются разные системы уравнений двухфазных сред; сопоставления проводятся при неодинаковых условиях эксперимента по градиентам скоростей, относительным давлениям, начальным и граничным условиям. Иногда используются различные данные по термодинамическим параметрам среды. Важным является также выбор параметров, по которым производится сопоставление. Непосредственно измерить скорость зародышеобразования не представляется возможным, сопоставления обычно производятся по месту начала бурной спонтанной конденсации пара. Введение поправок α и β является в настоящее время вынужденным средством уточнения расчетов спонтанной конденсации в условиях, близких к тем, в которых определялись α и β .

Как уже отмечалось, в основу определения скорости зародышеобразования J положено предположение о квазистационарности процесса. При быстром расширении среды процесс существенно отличается от рассмотренного и полученные зависимости (3.2.23), (3.2.26) должны быть уточнены. На основании исследований, проведенных А. Кантровицем, Я. Б. Зельдовичем и другими исследователями, нестационарный процесс образования ядер конденсации можно представить в виде

$$J = J_0 \exp \left\{ -\frac{K^2}{\tau \eta(n)} \right\}, \quad (3.2.27)$$

где J_0 – значение скорости зародышеобразования в стационарных условиях (формулы (3.2.23), (3.2.26)); $\eta(n)$ – скорость роста капелек жидкости (увеличение числа молекул в единицу времени); K – константа, примерно равная числу молекул в зародыше n .

Для быстротечных процессов, когда переохлаждение (перенасыщение) создается за короткий промежуток времени, действительная скорость зародышеобразования будет ниже по сравнению со стационарной скоростью J_0 . Скорость J достигает значения $0,9J_0$, по имеющимся расчетам, за $\tau_{0,9} \approx 10^{-6} \div 10^{-5}$ с. Следует отметить, что результаты численного решения системы уравнений типа (3.2.12) отличаются от полученных по (3.2.27) почти в десять раз.

Кинетика гетерогенного зародышеобразования. Гетерогенная конденсация зарождается обычно на загрязненных участках стенок сосуда, поверхностях содержащихся в жидкостях твердых частиц и т. д. Наличие таких поверхностей снижает работу образования зародыша, поэтому обычно гетерогенная конденсация происходит легче и интенсивнее. Этот факт широко используется на практике. Кинетику гетерогенного зародышеобразования изучают наряду с гомогенной нуклеацией в течение уже продолжительного времени, ей посвящено большое число работ.

Теория кинетики гетерогенного зародышеобразования строится по аналогии с теорией гомогенной нуклеации. Полный поток зародышей складывается в стационарном случае из потоков их образования на различных участках при разных углах смачиваемости. Недостатками излагаемых теорий образования и развития новой фазы от молекулярного уровня до макроскопического зародыша является отсутствие необходимой информации о свойствах молекулярных образований, начиная с отдельных атомов, димеров, кластеров и т. д., и законах их взаимодействия. Процессы образования и роста зародышей являются сугубо неравновесными, поэтому использование равновесных распределений Гиббса и термодинамики равновесных систем с принципиальной точки зрения неправомерно, необходимо последовательное применение методов кинетической теории и неравновесной термодинамики, включая квантовые эффекты. Зародыш представляет объемное образование, однако во многих работах используется одномерная модель в фазовом пространстве размеров и полностью игнорируется движение частиц. Образование и распад зародышей являются неупругими. Неизвестны микроскопические и макроскопические сечения таких процессов, теория не учитывает кооперативных, интегральных эффектов взаимодействия многих частиц и, наконец, внешних воздействий.

Подведем итоги. Несмотря на полученные результаты в области теории зарождения новой фазы в пересыщенных системах, определение скорости зародышеобразования при конденсации остается больше предсказанием, чем инженерным расчетом (см., например, выражение (3.2.26)).

3.2.3. Вероятность образования зародышей при конденсации

Для расчета вероятности образования зародышей воспользуемся распределением, полученным в предыдущем разделе, некоторой дисперсной системы. В данном случае под дисперсной системой понимается совокупность атомов или молекул, участвующих в конденсации и занимающих определенный объем. Определим вероятность того, что в некотором контрольном объеме число частиц стало достаточным для образования зародыша, размер которого превышает критический. Согласно (3.2.32), нам необходимо знать:

- величину объема, занимаемого дисперсной системой;
- число молекул газа в объеме дисперсной системы;
- величину контрольного объема;
- объем одиночного атома или молекулы.

Остановимся подробнее на выборе каждой из перечисленных величин.

Объем, занимаемый дисперсной системой, т. е. некоторый представительный объем, в котором можно принять постоянной среднюю концентрацию конденсирующегося пара. В большинстве практически интересных случаев такой объем связан с особенностями конструкции устройства, в котором происходит конденсация. При этом необходимо учитывать гидродинамические условия в устройстве, где происходит конденсация.

Если V – объем занимаемый системой, а V_0 – объем отдельной молекулы, то максимальное число молекул, которое может поместиться в данном объеме:

$$N = V/V_0. \quad (3.2.28)$$

Молекулы (дисперсные частицы) не могут полностью заполнить объем V , поскольку их форма отлична от кубика. Существует некоторое предельное число молекул газа, которое из чисто геометрических соображений может быть случайным образом размещено в данном объеме без учета взаимодействия между частицами. N является скорее некоторым параметром, чем реальной физической величиной.

Число молекул газа в объеме дисперсной системы зависит от температуры и давления и рассчитывается без учета объема, занимаемого вновь образующимися дисперсными частицами – зародышами:

$$N_o = \frac{p_1 N_A}{RT_1} \frac{V_1}{V_2}. \quad (3.2.29)$$

Индекс 1 относится к параметрам газа до расширения, а 2 – к параметрам газа после расширения. При известном относительном пересыщении S отношение V_2/V_1 может быть рассчитано из решения уравнения (3.2.2):

$$S = \left(\frac{V_2}{V_1}\right)^{-n} \exp \left\{ \frac{B}{T_1} \left[\left(\frac{V_2}{V_1}\right)^{n-1} - 1 \right] \right\}.$$

Тогда выражение для концентрации молекул будет иметь следующий вид:

$$\bar{N} = N_o / N = N_o V_0 / V. \quad (3.2.30)$$

Величина контрольного объема может быть рассчитана исходя из числа молекул, образующих зародыш критического размера. Согласно (3.2.8), выражение для размера критического зародыша имеет следующий вид:

$$R^* = \frac{2\sigma M_m}{\rho_d R_g T_2 \ln S}.$$

Отсюда его объем найдется как

$$V^* = \pi \frac{4}{3} (R^*)^3 = \frac{4}{3} \pi (R^*)^3.$$

В капле объемом V^* содержится следующее число молекул:

$$N^* = V^* / V_0. \quad (3.2.31)$$

В момент образования зародыша эти молекулы должны быть расположены в некотором объеме V_k , который должен быть больше V^* , т. е. можно предположить, что размер контрольного объема равен

$$l_k = K_1 R^*, \quad (3.2.32)$$

где K_1 – некоторая константа больше единицы и зависит от расстояния между молекулами, на котором силы притяжения между ними преобладают над силами отталкивания и становится возможным образование зародыша. Тогда размер контрольного объема равен

$$V_k = \frac{4}{3} \pi l_k^3.$$

При этом выражение для расчета доли объема дисперсной системы, приходящейся на контрольный объем, будет иметь следующий вид:

$$\alpha = \frac{V_k}{V}. \quad (3.2.33)$$

Среднее число молекул, приходящееся на контрольный объем, равно αN_o . Из совместного рассмотрения (3.2.29) и (3.2.33) и с учетом уравнения Клапейрона–Менделеева $p / R_g T = \rho_d / M_m$:

$$N_c = \alpha N_o = \frac{V_k}{V} N_o V = N_o V_k. \quad (3.2.34)$$

Неизвестный параметр K_1 может быть определен в результате учета силового взаимодействия между молекулами газа. В ходе расчетов было получено следующее выражение для K_1 :

$$K_1 = 1 + 0,000225(100 - t_1)^2. \quad (3.2.35)$$

Применительно к решаемой задаче уравнение (3.1.31) для расчета основного параметра модели дисперсной системы Δd будет иметь следующий вид:

$$\Delta d = d_o \frac{\ln \alpha \ln(N_o / N)}{\ln N \ln \alpha N} = 3 \frac{\ln(\alpha) \ln(\bar{N})}{\ln(N) \ln(\alpha N)}. \quad (3.2.36)$$

Выражение (3.2.36) может быть представлено в виде

$$\Delta d = 3 \left[\frac{1}{\ln(N)} - \frac{1}{\ln \alpha N} \right] \ln(\bar{N}).$$

Пусть

$$n_d = \frac{3}{\ln(N)} - \frac{3}{\ln \alpha N},$$

тогда

$$\Delta d = \ln \left(\frac{N_o}{N} \right)^{n_d} = \ln \bar{N}^{n_d}. \quad (3.2.37)$$

Используя (3.2.37), можно рассчитать вероятность образования зародыша объемом V^* . Условием образования зародыша является присутствие в некоторый момент времени в контрольном объеме молекул числом N^* . Согласно (3.1.32), такая вероятность равна

$$p(N^*) = \frac{\sqrt{e}}{\Delta d \exp \Delta d} \exp \left\{ -\pi e \left[\frac{N^*/N_c - 1}{\Delta d \exp \Delta d} \right]^2 \right\}. \quad (3.2.38)$$

Выражение учитывает только вероятность образования капель критического размера R^* . Согласно (3.1.32), могут образовываться и капли больших размеров $R > R^*$ и общая вероятность образования новой фазы будет равна

$$P(N^*) = \int_{x_1}^{\infty} \frac{\sqrt{e}}{\Delta d \exp \Delta d} \exp \left\{ -\pi e \left[\frac{x-1}{\Delta d \exp \Delta d} \right]^2 \right\}, \quad (3.2.39)$$

где $x_1 = N^*/N_c$. Дальнейшее уточнение (3.2.39) требует определить произведение $\Delta d \exp \Delta d$, которое будет иметь следующий вид:

$$\Delta d \exp \Delta d = \ln \bar{N}^{n_d} \exp(\ln \bar{N}^{n_d}) = \bar{N}^{n_d} \ln \bar{N}^{n_d}. \quad (3.2.40)$$

Согласно принятой модели, дисперсная система разбита на ряд отдельных контрольных объемов, в которых могут образоваться зародыши. Число таких контрольных объемов пропорционально $1/\alpha$. Выражение (3.2.40) позволяет рассчитать вероятность того, что в некотором контрольном объеме может образоваться зародыш. Общее число зародышей, которые могут образоваться в некоторый момент времени, равно

$$J^* = P(N^*)/\alpha. \quad (3.2.41)$$

В результате образования зародышей происходит нарушение теплового равновесия в дисперсной системе, которое может установиться только через некоторое некоторое время τ^* . Можно предположить, что в течение этого времени новые зародыши образоваться не могут. Выражение для скорости зародышеобразования будет иметь следующий вид:

$$J = P(N^*)/\alpha \tau^*. \quad (3.2.42)$$

Чем больше начальная температура дисперсной системы, тем меньше время установления теплового равновесия τ^* и выше скорость зародышеобразования J . С целью анализа полученных результатов проведем некоторые численные расчеты. Предположим, что происходит конденсация паров воды при температуре от 100 до 20°C и изменение пересыщения S от 1 до 6 (см. рис. 3.2.1). При этом для паров воды имеем $\sigma=0,072$ Н/м, $\rho_d=1000$ кг/м³, $M_m=18$. Для расчетов нам нужны такие физические величины, как газовая постоянная $R_g=8,31441$

Дж/(моль К) и число Авогадро $N_A=6,02 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹. Диаметр молекул газа меняется от 2 до 5 ангстрем. При этом объем молекулы будет меняться от $4,19 \cdot 10^{-30}$ до $65,45 \cdot 10^{-30}$ м³. Для воды можно принять следующее значение объема молекулы: $V_o=30 \cdot 10^{-30}$ м³. Результаты расчетов представлены на рис. 3.2.3.

С увеличением переохлаждения растет как относительное пересыщение (см. рис. 3.2.1), так и количество образующихся одновременно зародышей J^* (рис. 3.2.3). На рис. 3.2.3 наблюдаются устойчивые колебания J^* во всем диапазоне начальных температур и переохлаждений. Хотя при малых начальных температурах они не столь заметны.

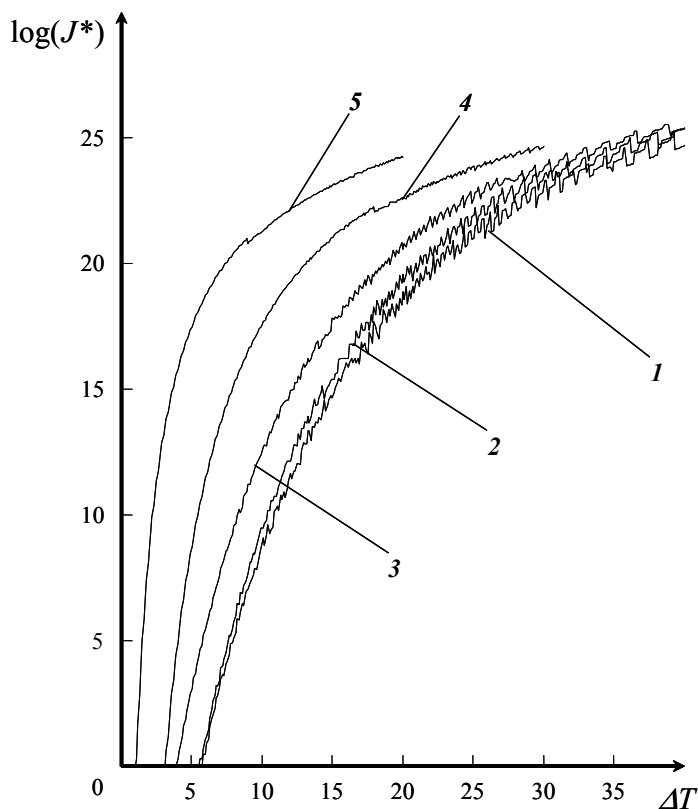


Рис. 3.2.3. Зависимость скорости зародышеобразования от переохлаждения при различной начальной температуре (давлении) водяного пара:

1 – 100°C, 2 – 80°C, 3 – 60°C, 4 – -40°C, 5 – -20°C.

Наиболее явно колебания наблюдаются при построении зависимости отношения числа молекул в зародыше N^* и их среднего значения в контрольном объеме N_c (рис. 3.2.4) от переохлаждения. При больших переохлаждениях ярко проявляется регулярность этих колебаний и с изменением начальной температуры вид их несколько меняется. С уменьшением начальной температуры амплитуда колебаний скорости зародышеобразования уменьшается.

В выбранном температурном диапазоне величина относительного пересыщения не превышала $S < 6$ (рис. 3.2.1). Расчеты согласно (3.2.8) показывают, что при $S = 6$ зародыш должен состоять из 52 молекул и иметь размер $1.4 \cdot 10^{-3}$ мкм. Столь малые размеры зародыша приводят к тому, что при больших пересыщениях наблюдаются наиболее значительные колебания скорости зародышеобразования.

Столь необычный вид зависимости скорости зародышеобразования от переохлаждения связан с изменением отношения числа молекул в зародыше N^* и их средним значением в контрольном объеме N_c (рис 3.2.4). Величины N^* и N_c могут принимать только целые значения. При проведении расчетов значения N^* и N_c округлялись до ближайшего целого, что, по всей видимости, и является причиной наблюдаемого характера изменения отношения N^*/N_c .

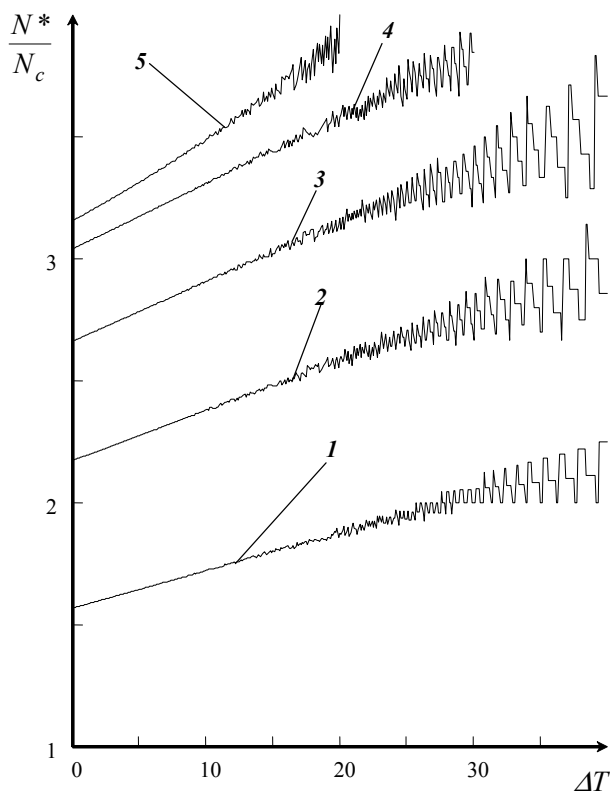


Рис. 3.2.4. Зависимость отношения числа молекул в зародыше к их среднему значению в дисперсной системе от переохлаждения при различной начальной температуре (давлении):
1 – 100°C, 2 – 80°C, 3 – 60°C, 4 – –40°C, 5 – –20°C.

Характер этих колебаний хорошо виден на рис. 3.2.5, где сужен диапазон изменения пересыщения и уменьшен шаг его изменения. С первого взгляда на-

блюдаемые колебания можно отнести к так называемому *шуму*, который всегда имеет место, как в натуральных экспериментах, так и при численном моделировании, особенно если рассматривать колебания при низких начальных температурах (кривые 4 и 5 на рис. 3.2.4).

Однако столь сильно периодический сигнал не может возникать из-за слабого шума, связанного с ошибкой округления при проведении вычислений, тем более что увеличение точности вычисления не меняет характер колебаний. При данном значении пересыщения вероятность образования зародышей принимает некоторые определенные значения (рис. 3.2.5). Наблюдаемые колебания амплитуды вероятности образования зародышей не могут служить признаком упорядоченности или периодичности поведения дисперсной системы.

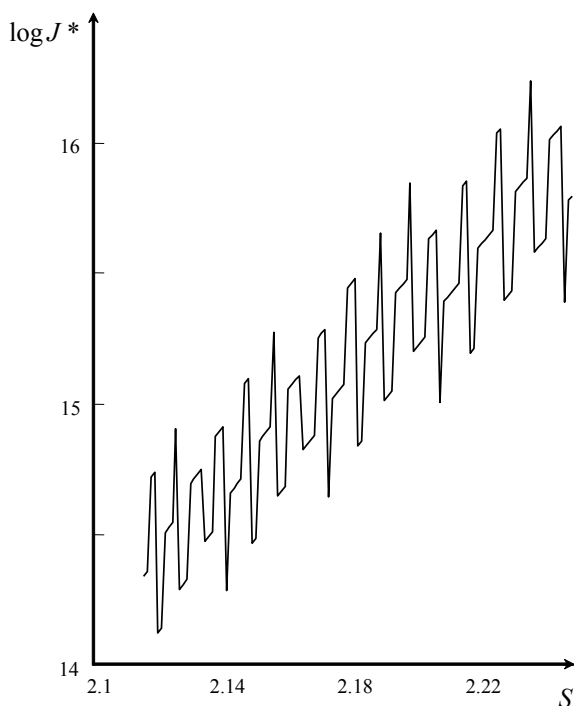


Рис. 3.2.5. Фрагмент зависимости вероятности образования зародышей от пересыщения (сужен диапазон изменения пересыщения и уменьшен шаг расчета)

С целью дальнейшего анализа задачи необходимо обратиться к некоторым вопросам теории хаотических колебаний с тем, чтобы позже сравнить их с наблюдаемыми нами. В нашем случае время в явном виде не присутствует и задача не может быть напрямую отнесена к теории динамических систем, но развитые этой теорией подходы могут быть использованы и нами. В первую очередь речь идет о построении так называемого отображения Пуанкаре.

При исследовании динамических систем отображением называют временную выборку данных $\{x(\tau_1), x(\tau_2), \dots, x(\tau_n), \dots, x(\tau_N)\}$, для которой вводят обозначение $x_n \equiv x(\tau_n)$. В простом детерминированном отображении величину x_{n+1}

можно найти по значению x_n . Это часто записывают в виде $x_{n+1} = f(x_n)$. В такой записи можно узнать разностное уравнение. Понятие отображение обобщается и на большее число переменных, в частности на две.

Предположим, например, что мы анализируем движение частицы, отображенное в фазовой плоскости $[x(\tau), \dot{x}(\tau)]$. При хаотичном движении траектория стремится заполнить некоторую область фазового пространства. Если, однако, вместо того, чтобы непрерывно следить за движением, мы будем фиксировать динамические характеристики только в отдельные моменты времени, то движение будет представлено последовательностью точек фазовой плоскости. Пусть $x_n \equiv x(\tau_n)$ и $y_n \equiv \dot{x}(\tau_n)$, тогда эта последовательность точек фазового пространства представляет собой двумерное отображение $x_{n+1} = f(x_n, y_n)$, $y_{n+1} = g(x_n, y_n)$. Если моменты выборки τ_n подчиняются определенному правилу, это отображение называют *отображением Пуанкаре*. Например, если исследуются вынужденные колебания с постоянным периодом, то, естественно, для получения отображения Пуанкаре моменты выборки должны быть кратны данному периоду.

Перейдем к анализу нашей задачи. При выборе фазовой плоскости в качестве независимой переменной примем пересыщение S , которое по определению является относительной величиной. Поскольку в нашем случае время явно не присутствует и шаг изменения пересыщения принят постоянным, то при построении фазовой плоскости скорость может быть заменена относительным приращением вероятности образования зародышей или отношения N^*/N_c :

$$\Delta \bar{J} = \frac{J_{n+1}^* - J_n^*}{J_n^*}, \quad \Delta \bar{N} = \frac{(N^*/N_c)_{n+1} - (N^*/N_c)_n}{(N^*/N_c)_n}.$$

Отображение Пуанкаре на фазовой плоскости $y_n = \Delta \bar{J}_n$ и $x_n = S_n$ или $y_n = \Delta \bar{N}_n$ и $x_n = S_n$ представлено на рис. 3.2.6.

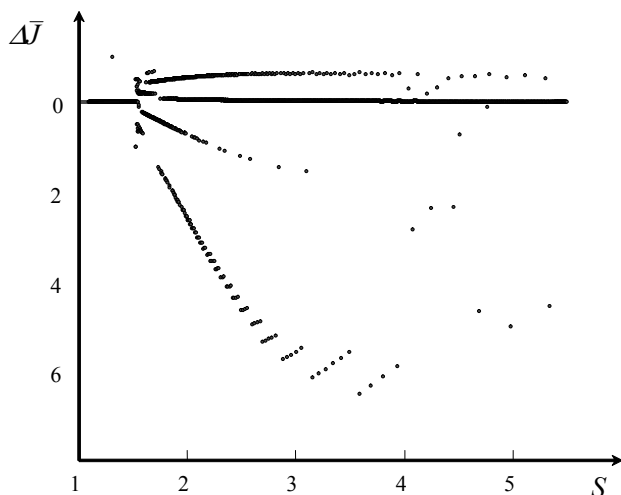


Рис. 3.2.6. Отображение Пуанкаре для расчета вероятности образования зародышей при конденсации пара

Для гармонических колебаний, синхронизированных с их периодом, отображение Пуанкаре представляется двумя точками на фазовой плоскости. При колебании на двух несоизмеримых частотах и выборке, соответствующей одной из частот, траектория станет непрерывной замкнутой фигурой или орбитой на фазовой плоскости. Такое движение не хаотично. Если отображение Пуанкаре состоит не из конечного числа точек, не из замкнутой орбиты, то соответствующие колебания могут быть хаотичными.

В колеблющихся системах без затухания или со слабым затуханием отображение Пуанкаре хаотических движений часто имеет вид неупорядоченного скопления точек на фазовой плоскости. Такое движение иногда называют стохастическим.

В системах с затуханием отображение Пуанкаре иногда представляет собой бесконечные строго упорядоченные множества точек, концентрирующихся наподобие параллельных линий. При численном моделировании можно увеличить часть отображения Пуанкаре и обнаружить более тонкую структуру, как это показано на рис. 3.2.7.

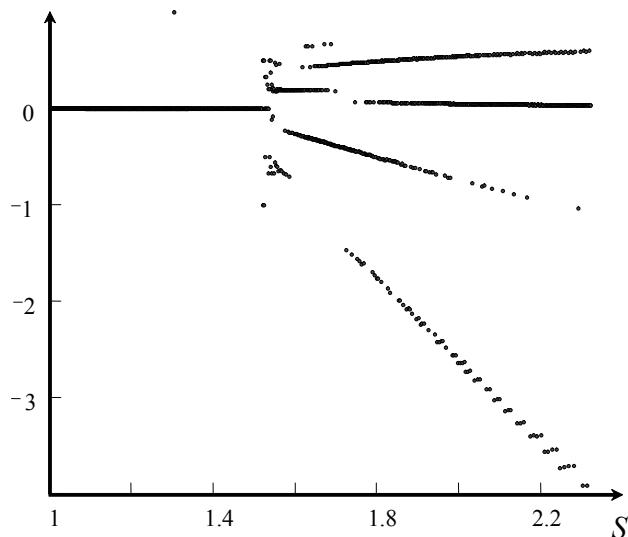


Рис. 3.2.7. Отображение Пуанкаре для расчета вероятности образования зародышей при конденсации пара после двукратного увеличения

Более тонкая структура проявляется прежде всего в фазовой плоскости $y_n = \Delta \bar{N}_n$ и $x_n = S_n$. Дальнейшее увеличение приводит к еще более тонкой структуре (рис. 3.2.8). Были увеличены именно те области, где наиболее ярко проявляется образование структуры.

Дальнейшее увеличение при сохранении шага дискретизации пересыщения должно привести к тому, что мы будем наблюдать отдельные точки, т. е. дискретные значения отображения. Это видно на рис. 3.2.8, где отображение построено в фазовой плоскости $y_n = \Delta \bar{J}_n$ и $x_n = S_n$.

Степень увеличения на рис. 3.2.8 еще не достаточна, чтобы наблюдать во всей области фазовой плоскости только отдельные точки, хотя стремление к этому наблюдается и общий характер структуры отображений Пуанкаре сохраняется. Если структура множества точек сохраняется после нескольких увеличений, то говорят, что система ведет себя как *странный аттрактор*. Множества с подобным вложением одной структуры в другую часто называют канторовыми множествами.

Появление в отображении Пуанкаре структур, которые подобны канторовым множествам, является сильным индикатором хаотических проявлений. Поскольку в нашем случае мы имеем типичный пример странного аттрактора, то можно утверждать, что наблюдаемые колебания вероятности образования зародышей являются хаотическими.

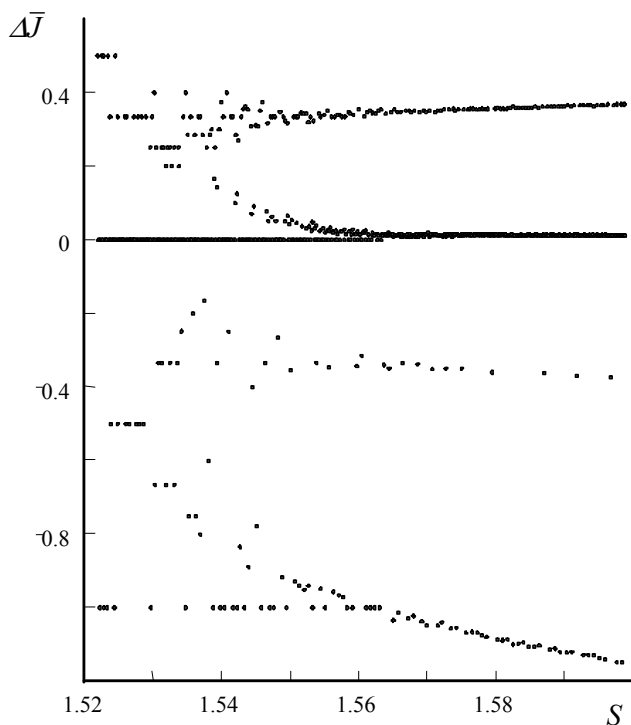


Рис. 3.2.8. Отображение Пуанкаре для расчета вероятности образования зародышей при конденсации пара после десятикратного увеличения

Приведенные на рисунках отображения относятся к одним и тем же условиям зародышеобразования при конденсации водяного пара с начальной температурой 100°C. Изменится ли вид отображения Пуанкаре при переходе к другой температуре? Расчеты показывают, что его вид не меняется, хотя полного совпадения не наблюдается (см. рис. 3.2.9).

При любой начальной температуре водяного пара после достижения некоторого критического пересыщения происходит потеря устойчивости и появляются

ся четыре основных уровня значений вероятности образования зародышей, из которых один характеризует устойчивый рост вероятности образования зародышей J^* с увеличением пересыщения.

Второй уровень характеризуется слабым ростом J^* с увеличением S . Третий уровень говорит о возможности незначительного падения J^* с ростом пересыщения. Наконец, четвертый уровень говорит о возможности падения вероятности образования зародышей с ростом S . Плотность точек на отображении Пуанкаре для четвертого уровня самая низкая.

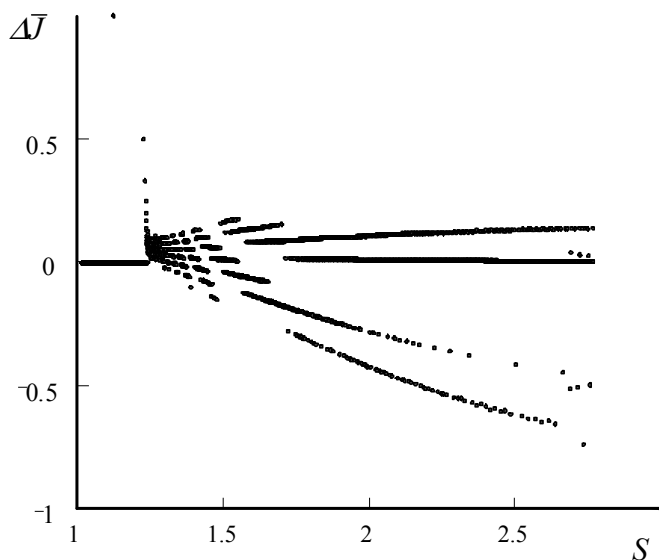


Рис. 3.2.9. Отображение Пуанкаре для расчета вероятности образования зародышей при конденсации пара с начальной температурой 60°C.

Подведем итоги. Для каждого конкретного значения пересыщения имеется только одно значение вероятности образования зародышей. Незначительное изменение пересыщения приводит к переходу с одного уровня на другой, т. е. приводит к хаотическим колебаниям вероятности образования зародышей. Чем точнее мы задаем пересыщение, тем явнее проявляется структура странного аттрактора (см. рис. 3.2.8). Наблюдается общая тенденция устойчивого роста вероятности образования зародышей с увеличением пересыщения, несмотря на возможность локального ее уменьшения за счет хаотических колебаний.

3.2.4. Стохастическая теория кинетики зародышеобразования

Г. Дж. Цинмайстер, Л. Н. Александров, Б. И. Кидяров развили теорию гомогенного и гетерогенного стохастического зародышеобразования для описания скорости образования кристаллов из жидкой фазы, эпитаксиального осаждения тонких пленок и других процессов с фазовыми превращениями на основе представления о рождении и гибели кластеров. Рассмотрим гетерогенную схему такого зародышеобразования.

При решении поставленной задачи считается, что зародышеобразование протекает по известной схеме Сцилларда, т. е. по схеме случайного процесса гибели и рождения.

Рассмотрим объем пересыщенного пара, незначительно превосходящий объем критического зародыша, содержащий $n+1$ атомов или молекул. Символом E_0 обозначим состояние этого объема, когда в нем содержится $n+1$ одиночных атомов пара, символом E_1 – состояние системы, заключающееся в образовании одного комплекса из двух атомов, E_2 – одного комплекса из трех атомов и, наконец, E_{n-1} – одного комплекса из n атомов. Этот комплекс представляет собой критический зародыш жидкой фазы, который после присоединения еще одного атома (переход в состояние E_n) способен к дальнейшему самопроизвольному росту. Обозначим через λ_0 вероятность перехода из состояния E_0 в E_1 , через λ_i – вероятность перехода из состояния E_i в E_2 и так далее, т. е. вероятности присоединения одиночных атомов к соответствующим комплексам, а через μ_1 – вероятность перехода из состояния E_1 в E_0 , через μ_2 – вероятность перехода из состояния E_2 в E_1 так далее, т. е. вероятности отрыва одиночных атомов от соответствующих комплексов. Тогда граф-схема нашего процесса будет иметь вид, представленный на рис. 1.

Вероятность перехода системы из состояния E_n в E_{n-1} мы полагаем равной нулю $\mu_n = 0$, т. е. состояние E_n для нашей схемы является поглощающим. Таким образом, математической моделью зародышеобразования является хорошо изученный процесс гибели и рождения с конечным числом состояний. Мы рассмотрим анализ этой модели применительно к однородному, *микростационарному* с физической точки зрения, процессу зародышеобразования. Вероятности переходов λ_i и μ_i будем считать постоянными, не зависящими от времени, но зависящими от размеров комплексов $\lambda_i \neq \lambda_j$ при $i \neq j$. Тогда кинетика процесса описывается однородной системой дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами (основная система дифференциальных уравнений кинетики зародышеобразования):

$$\begin{aligned} \frac{dp_0}{d\tau} &= -\lambda_0 p_0(\tau) + \mu_1 p_1(\tau), \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{dp_i}{d\tau} &= \lambda_{i-1} p_{i-1}(\tau) - (\lambda_i + \mu_i) p_i + \mu_{i+1} p_{i+1}(\tau), \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{dp_n}{d\tau} &= \lambda_{n-1} p_{n-1}(\tau), \end{aligned} \tag{3.2.43}$$

где $p_i(\tau)$ – вероятность нахождения системы в состоянии E_i ; λ_i – вероятность присоединения одиночного атома к соответствующему кластеру, а μ_i – вероятность отрыва атома от кластера. Эта система должна интегрироваться при заданных начальных условиях:

$$\text{при } \tau = 0 \quad p_i = p_i(0), \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad (3.2.44)$$

т. е. необходимо задать вероятности начальных состояний процессов, представляющих собой функции распределения кластеров по размерам в исходном состоянии. С физической точки зрения начальные состояния системы представляют собой равновесную функцию распределения частиц по размерам в исходном пересыщенном состоянии пара. Поэтому задание различных, начальных с математической точки зрения, условий системы позволяет исследовать влияние перегрева пара на кинетику зародышеобразования.

Главное затруднение в теории зарождения состоит в том, что уравнения (3.2.43) можно решить аналитически только после введения радикальных упрощений. В связи с этим исследование кинетики зародышеобразования проводится численно. Предположим, что существует внешний источник пара. Единичные атомы или молекулы переходят в пересыщенное состояние со скоростью \bar{N} (шт./с) и мгновенно передают свою энергию системе. Тепловое движение атомов в объеме обеспечивает их взаимные столкновения. Во время случайного блуждания в объеме пересыщенного пара два атома (молекулы) могут столкнуться и соединиться с образованием двухатомного агрегата. Дальнейшее присоединение атомов ведет к образованию триплетов и более крупных агрегатов (зародышей, кластеров). Концентрацию таких агрегатов, состоящих из i атомов, обозначим через n_i (шт./м³). Скорость образования их равна произведению концентрации атомов $n_i(\tau)$ (которая может изменяться во времени) на столкновительный фактор w_i (м·с⁻¹), в который входит коэффициент диффузии D (м²·с⁻¹) и геометрический множитель S_i , $w_i = S_i D$.

Агрегат с малым числом атомов неустойчив, он может терять атомы. Частота μ_i (с⁻¹) распада или диссоциации агрегатов рассчитывается по формуле Томсона для давления пара над малыми каплями. Для очень малых зародышей эта формула не выполняется, поэтому μ_i — неизвестная величина, которую наряду с λ_i необходимо определять экспериментально. Если $i \leq 6$, значение энергии связи нужно рассчитывать методами квантовой механики. Для малых агрегатов распад вероятнее роста $\mu_i > \lambda_i$, $i < i^*$, для больших справедливо обратное. Зародыш из i^* атомов такой, что $\mu_{i^*} = \lambda_{i^*}$ называется критическим.

Обычно для вычислений делаются следующие допущения: присоединяться к агрегатам и отрываться от них могут только единичные атомы, но не пары и не большие кластеры; подвижны только атомы, а не зародыши. Зародышеобразование описывается системой уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dn_1}{d\tau} &= q - \frac{n_1}{\tau_A} - \sum_{i=2}^N \lambda_i n_i + \sum \mu_i n_i; \\ \frac{dn_2}{d\tau} &= \lambda_1 n_1 - (\lambda_2 + \mu_2) n_2 + \mu_3 n_3; \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{dn_i}{d\tau} &= \lambda_{i-1} n_{i-1} - (\lambda_i + \mu_i) n_i + \mu_{i+1} n_{i+1}. \end{aligned} \right\} \quad (3.2.45)$$

Агрегаты образуются со скоростью $\lambda_{i-1}n_{i-1}$ путем захвата единичных атомов агрегатами из $i-1$ атомов; вероятность захвата в единицу времени равна i_{i-1} . Число агрегатов n_i может меняться либо за счет захвата, либо за счет потери ими одного атома, что дает член $(\lambda_i + \mu_i)n_i$. Распад зародышей n_{i+1} дает еще $\mu_{i+1}n_{i+1}$ агрегатов в секунду, состоящих из i атомов. Уравнения системы (3.2.45) для всех n_i , $i > 1$, аналогичны. Только уравнение для $i=1$ существенно отличается от прочих (n_1 – концентрация атомов).

Ясно, что уравнение для концентрации атомов n_1 зависит от конкретных условий конденсации. В случае гетерогенной конденсации считается, что единичные атомы приходят на поверхность со скоростью q (обычно $q = \text{const}$), эта величина называется скоростью напыления. Изменение концентрации атомов $dn_1/d\tau$ пропорционально q минус скорость повторного испарения атомов n_1/τ_A , минус число атомов, поглощаемых зародышами, которые образуются и растут $\sum \lambda_i n_i = n_1 \sum w_i n_i$, плюс атомы, освобождающиеся за счет распада зародышей $\sum \mu_i n_i$. Установлена связь этих уравнений с хорошо известными результатами Фаркаса, Беккера–Деринга, Френкеля–Зельдовича.

Подведем итоги. Как правило, скорость зарождения дисперсной фазы рассчитывают по термодинамической формуле. Это вполне корректно, если конденсация идет вблизи равновесия при небольших пересыщениях. Но при конденсации в расширяющихся соплах пересыщения очень велики, поскольку расширение происходит при сильном отклонении от равновесия, когда существенную роль играют нестационарные процессы (например, поглощение атомов растущими зародышами). В этом случае нужно пользоваться кинетическими уравнениями.

3.3. ИСПАРЕНИЕ И РОСТ КАПЕЛЬ

Помимо знания условий образования капли важно уметь оценивать скорость ее роста и испарения. Например, растворимые частицы, вдыхаемые в респираторный тракт, будут быстро увлажняться и могут так вырасти, что их аэродинамические свойства в легких будут сильно отличаться от свойств первоначальных частиц. Капли инсектицида, распыляемые в воздухе, могут испариться и никогда не достигнуть растений, не выполнив тем самым своей главной задачи.

3.3.1. Уравнение Максвелла для скорости испарения капли

Уравнение, описывающее испарение капли в зависимости от времени, впервые было сформулировано Максвеллом в 1877 г. Хотя его формулировка содержит ряд упрощающих предположений, уравнение Максвелла дает приемлемые результаты для достаточно крупных капель чистого вещества. Допускается, что для данной температуры парциальное давление над поверхностью капли равно давлению насыщения, т. е. $P_s = P_\infty$. Иначе говоря, концентрация пара над поверхно-

стью равна концентрации насыщенного пара. Данное предположение справедливо, если размер капли сравним со средней длиной свободного пробега молекул пара. Считая, что молекулы могут покинуть поверхность капли путем диффузии, имеем $\vec{M} = D\partial C/\partial x$, где \vec{M} – масса пара-растворителя, проходящего через единичную площадь за единицу времени; x – расстояние, отсчитываемое от центра капли; C – концентрация пара-растворителя (г/см³). Количество пара \vec{M} , уходящего или входящего через сферическую поверхность радиусом x за 1 с, равно

$$\vec{M} = 4\pi x^2 D \frac{\partial C}{\partial x}. \quad (3.3.1)$$

Интегрирование уравнения (3.3.1) дает

$$C = \vec{M}/(4\pi x D) + \text{const},$$

где значение const зависит от условий задачи. Если C_0 – концентрация пара на большом удалении от капли, то $C \approx \vec{M}/(4\pi x D) + C_0$.

Предполагая равенство концентрации пара над поверхностью капли $x = R$ и концентрации насыщения C_∞ , получим

$$\eta = \vec{M} = 4\pi D R (C_\infty - C_0). \quad (3.3.2)$$

Уравнение (3.3.2) называют уравнением Максвелла. Скорость испарения η зависит от размера капли R , коэффициента диффузии пара-растворителя D и разности между давлением пара-растворителя и парциальным давлением окружающего пара. Связь между давлением и концентрацией пара можно найти, рассматривая пар как идеальный газ:

$$C = P M_b / (R_g T).$$

Уравнение Максвелла можно представить теперь в виде

$$\eta = \frac{4\pi D M_b R}{R_g T} (P_\infty - P_0). \quad (3.3.3)$$

Уравнение Максвелла применимо только при испарении и конденсации в воздухе без учета изменения температуры капли. Если капля испаряется в вакууме, скорость ее испарения зависит от квадрата диаметра. При больших числах Кнудсена уравнение (3.3.2) не справедливо без поправки на свободный пробег молекул в газовой среде.

Увеличение массы сферической капли объемом $V_d = 4\pi R^3/3$ определяется следующим выражением:

$$\frac{dm_d}{d\tau} = \rho_d \frac{dV_d}{d\tau} = \rho_d 4\pi R^2 \frac{dR}{d\tau} = \rho_d 4\pi R^2 \eta. \quad (3.3.4)$$

Тогда

$$dm_d = 2\pi R^2 \rho_d dR. \quad (3.3.5)$$

Согласно (3.3.3) имеем

$$\frac{dm_d}{d\tau} = \frac{4\pi D M_b R}{R_g T} (P_\infty - P_0). \quad (3.3.6)$$

Из совместного рассмотрения (3.3.5) и (3.3.6) получим

$$\frac{dR}{d\tau} = \frac{2 D M_b}{R \rho R_g T} (P_\infty - P_0). \quad (3.3.7)$$

Результаты расчета скорости роста капель, начальный размер которых соответствует критическому размеру зародыша, при заданном значении пересыщения представлены на рис. 3.3.1. За начальный размер капли при данном значении пересыщения принимался соответствующий ему размер зародыша. В области малых размеров скорость роста капель имеет большие значения.

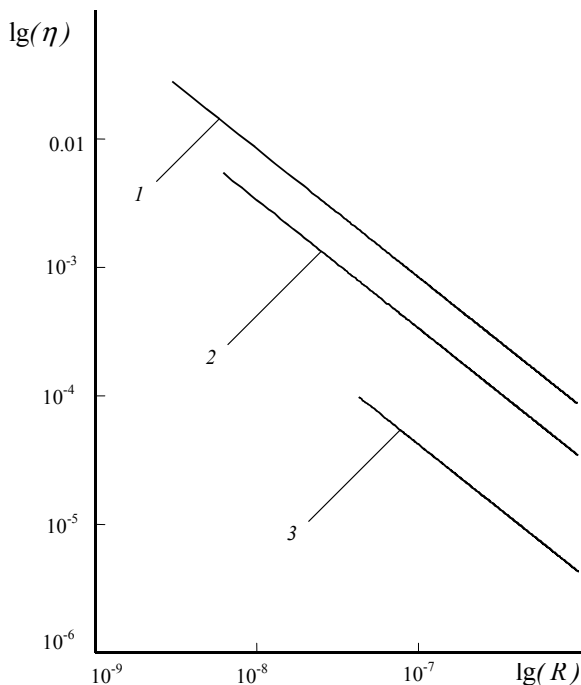


Рис. 3.3.1. Зависимость скорости конденсации от размера капли при различном пересыщении:
1 – $s=2$; 2 – $s=1,4$; 3 – $s=1,05$.

При анализе начального роста капель следует воспользоваться теорией свободномолекулярного течения, при котором длина свободного пробега молекул λ больше радиуса капли R , т. е. число Кнудсена $Kn = \lambda/R > 1$. Средняя длина свободного пробега молекул λ зависит от вязкости газа μ_c и может быть определена по формуле

$$\lambda = \frac{\mu_c}{P} \sqrt{\frac{\pi R_g T}{2 M_b}}.$$

Расчеты показывают, что при параметрах начала конденсации длина пробега молекул λ на два-три порядка больше радиуса капли R и начальный рост капель должен подсчитываться по теории свободномолекулярного движения.

Полученные прямые линии в логарифмической системе координат можно свести к одной, если выражение (3.3.7) представить в виде

$$2R \frac{dR}{d\tau} = \frac{dR^2}{d\tau} = \frac{4DM_b P_\infty}{\rho R_g T} (S-1). \quad (3.3.8)$$

Давление паров жидкости при различных температурах можно оценить по формуле

$$P_{\infty} = \exp\left(A - \frac{B}{T}\right), \quad (3.3.9)$$

где константы A и B различны для разных жидкостей. С учетом (3.3.9) получим

$$\frac{dR^2}{d\tau} = \frac{4DM_b}{\rho R_g T} \exp\left(A - \frac{B}{T}\right)(S - 1). \quad (3.3.10)$$

Согласно полученному выражению (3.3.10), скорость роста поверхности капли не зависит от ее размера.

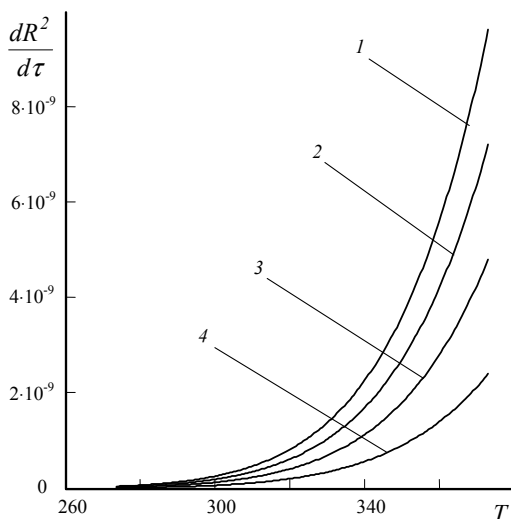


Рис. 3.3.2. Зависимость скорости роста поверхности капли от температуры при пересыщении:
1 – $s=2$; 2 – $s=1,75$; 3 – $s=1,5$; 4 – $s=1,25$.

На рис. 3.3.2 представлены результаты расчета скорости роста поверхности капли при изменении температуры и различных значениях пересыщения. При этом температура изменялась в диапазоне от 0 до 100°C. Подобные зависимости позволяют прогнозировать изменение поверхности капель в зависимости от параметров поведения процесса, а также могут быть использованы для экспериментального подтверждения уравнения Максвелла при довольно больших размерах капель не менее 10^{-5} м. Расчеты показывают, что приведенные зависимости не могут быть распространены на капли, соизмеримые с размерами зародышей.

Подведем итоги. Приведенные примеры расчетов показывают порядок скорости роста капель в зависимости от их размера и скорости изменения ее поверхности в зависимости от температуры, при которой происходит конденсация. Сложность непосредственного определения скорости роста капель в области размеров, соизмеримых с размерами зародыша, не позволяет подтвердить экспериментально результаты расчетов. Возможно только косвенное обоснование теоретических выкладок, например по времени испарения (роста) капель до

заданного размера. В связи с этим проводятся расчеты времени жизни испаряющейся капли на основании так называемого уравнения Ленгмюра.

3.3.2. Время жизни капли

В предыдущем разделе была рассмотрена скорость роста (испарения) капли определенного размера. Однако при росте капли ее диаметр увеличивается (при испарении уменьшается). Чтобы размер капли значительно изменился, требуется большое число молекул. Для грубой оценки времени роста, или *времени жизни*, капли можно принять квазистационарное условие.

Проинтегрировав (3.3.7) и переставив члены, найдем время испарения капли размером R до размера R_0 , если парциальное давление в окружающей среде равно P_0 :

$$\tau = \frac{\rho R_g T (R^2 - R_0^2)}{2 D M_b P_\infty (1 - S)}. \quad (3.3.11)$$

Уравнение (3.3.11) иногда называют уравнением Ленгмюра.

Некоторые экспериментальные результаты хорошо согласуются с уравнением (3.3.11) при учете температурных поправок. Уравнение (3.3.11) можно также применить для частиц, на которых конденсируется пар. В этом случае R_0 – окончательный размер капли. На рис. 3.3.3 представлены результаты расчета конечного размера капли в зависимости от времени при различных значениях пересыщения. Начальный размер капли принимался равным размеру зародыша, соответствующего данному пересыщению. Из рисунка видно, что размер капли стремится к некоторому конечному значению, величина которого уменьшается с уменьшением пересыщения. Чем больше пересыщение, тем зародыш имеет меньший размер, однако за то же время он успевает вырасти до капли большего размера.

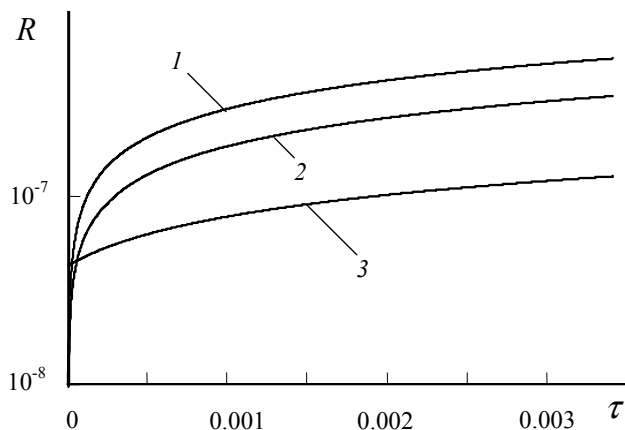


Рис. 3.3.3. Зависимость размера капли от времени при различных значениях пересыщения:
 $1 - s=2$; $2 - s=1,75$; $3 - s=1,25$.

Если рассматривать полидисперсный набор ядер конденсации (частицы диаметром больше 0,1 мкм), то, как следует из (3.3.11), скорость роста маленьких

капель будет выше, чем больших. Распределение капель, на которых происходит конденсация, по размерам стремится стать более монодисперсным, если только для конденсации достаточно пара. При высыхании полидисперсного облака капель степень полидисперсности возрастает из-за различия в скоростях высыхания для капель различных размеров из-за возрастающего влияния коагуляции.

Время испарения в насыщенной среде. Из уравнения Ленгмюра следует, что при $S = P/P_\infty = 1$ капля не будет испаряться. Но в соответствии с уравнением Кельвина мелкая капля испаряется даже при $S > 1$, и причина этого – влияние кривизны. Как можно разрешить данное противоречие? Один способ состоит в замене члена $P_\infty - P_0$ в уравнении (3.3.10) эквивалентным членом из уравнения Кельвина, учитывающим кривизну:

$$\frac{P}{P_\infty} = \exp\left(\frac{\sigma M_b}{\rho R_g T 2R}\right).$$

Представив экспоненту в виде ряда, получим

$$\frac{P}{P_\infty} = 1 + \frac{\sigma M_b}{\rho R_g T 2R} + \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma M_b}{\rho R_g T 2R} \right)^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{\sigma M_b}{\rho R_g T 2R} \right)^3 + \dots$$

Если $P/P_\infty \approx 1$, то для определения P/P_∞ достаточно двух первых членов ряда:

$$P_\infty - P = -\frac{\sigma M_b P_\infty}{\rho R_g T 2R}. \quad (3.3.12)$$

В случае полного испарения $P = 0$ с учетом (3.3.10) и (3.3.12) получим

$$\frac{dR}{d\tau} = \frac{DM_b^2 \sigma P_\infty}{(R\rho R_g T)^2}. \quad (3.3.13)$$

Проинтегрировав (3.3.13), найдем выражение для полного времени жизни капель в среде, близкой к насыщению:

$$\tau = \frac{2R^3}{3D\sigma P_\infty} \left(\frac{\rho R_g T}{M_b} \right)^2. \quad (3.3.14)$$

Выражение (3.3.14) может быть использовано при моделировании динамики зародышеобразования из пересыщенного пара.

Уточнение уравнения Ленгмюра. Расчеты по уравнению Ленгмюра показывают, что время жизни маленьких капель, образующихся в воздухе, очень мало. С другой стороны, как показывают эксперименты, расчетное время жизни больших капель имеет приблизительно правильное значение. Диапазон размеров, который описывается уравнением Ленгмюра, возможно расширить в сторону меньших значений. Фукс отметил, что для частиц с диаметром, приблизительно равным средней длине свободного пробега газовых молекул, уравнение Ленгмюра неприменимо, поскольку оно приводит к большим величинам скоростей испускания молекул, чем скорость испарения в вакууме. Для преодоления этой трудности Фукс предположил, что диффузия начинается на расстоянии, приблизительно равном длине свободного пробега от поверхности капли.

Уточнение Фукса к уравнению Ленгмюра при испарении капли в пространство, где $P_0 = 0$, дает результат

$$\tau = \frac{\rho R_g T}{DM_b P_\infty (1-S)} \left[\frac{R^2}{2} + \frac{RD}{\alpha_T \langle w \rangle} - \Delta R + \Delta^2 \ln \left(\frac{R+\Delta}{\Delta} \right) \right], \quad (3.3.15)$$

где Δ – расстояние, которое испаряющаяся молекула должна пройти до ее столкновения с газовой молекулой:

$$\Delta = \lambda \sqrt{\frac{m_c + m_p}{m_c}}. \quad (3.3.16)$$

Коэффициент аккомодации α_T для чистой воды равен 0,034 и может быть даже меньше для воды с примесями, а среднее значение скорости молекул пара равно

$$\langle w \rangle = \left(\frac{kT}{2\pi m_p} \right)^{1/2}. \quad (3.3.17)$$

Фукс применил выражение (3.3.17) для скорости, которая составляет 1/4 средней абсолютной скорости молекул пара. Для этой скорости использовали также выражение (3.3.17) без множителя $\sqrt{1/\pi}$. Наиболее вероятная скорость, получаемая из распределения Максвелла (уравнение (3.2.9)), в четыре раза превосходит $\sqrt{kT/(2m_p)}$. Поправка Фукса значительно увеличивает время жизни очень маленьких капель и влияет даже на капли диаметром 10 мкм и более.

На рис 3.3.4 представлены результаты расчета времени роста капли при температуре $T = 20^\circ\text{C}$ и с начальным размером, равным размеру зародыша, соответствующего принятому пересыщению. Время достижения капель размером в 1 мкм, оцененное по уравнению Фукса, в два раза больше времени, определенного по уравнению Ленгмюра, и при пересыщении $S = 1,25$ составляет 0,1 с. В области высоких температур $T \approx 100^\circ\text{C}$ это различие гораздо больше.

Вторая поправка необходима для учета изменения температуры внутри капли в процессе испарения и конденсации. Это изменение влияет на давление пара жидкости, так что скорость испарения уменьшается и скорость конденсации увеличивается. Предложена уточненная форма уравнения (3.3.11), учитывающая изменение давления пара капли с изменением температуры:

$$\tau = \frac{\left[\frac{L\rho}{a_t} \left(\frac{LM_b}{R_g T} - 1 \right) + \frac{\rho R_g T}{DM_b P_\infty} \right] (R_0^2 - R^2)}{2(1-S)}. \quad (3.3.18)$$

Величины L и a_t не очень сильно меняются с изменением температуры. Температура капли при конденсации и испарении сильно зависит от температуры среды, в которой она находится. При высоких температурах ее изменение сказывается сильнее, чем при низких температурах. Температура капли в стационарном состоянии (постоянная скорость испарения и неизменная температура) определяется выражением

$$T_0 - T_\infty = \frac{D_T M_b L}{R_g a_t} \left(\frac{P_\infty}{T_\infty} - \frac{P_0}{T_0} \right). \quad (3.3.19)$$

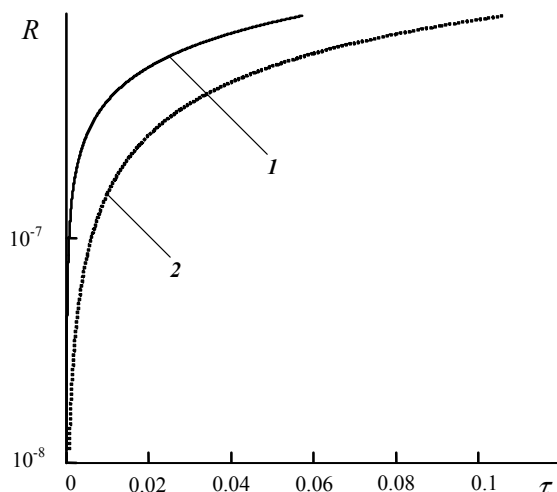


Рис. 3.3.4. Зависимость размера капли от времени при пересыщении $s=1,25$: 1 – расчет по (3.3.11); 2 – расчет по (3.3.17).

Температура капли не зависит от ее размера. Это уравнение является фундаментальным психрометрическим уравнением, позволяющим определить температуру по влажному термометру.

Подведем итоги. Поправка Фукса позволяет учесть снижение скорости роста капель в области малых размеров при $R < 10$ мкм, хотя никакого прямого экспериментального подтверждения этому в настоящее время не имеется. Для оценки температуры капли в стационарном состоянии можно использовать психрометрическую диаграмму, определяя температуру по влажному термометру, соответствующую относительной влажности и окружающей температуре. Температура по влажному термометру – это температура испаряющейся капли.

3.3.3. Рост капель из чистых паров

Предположим, что термодинамическое состояние окружающей среды не меняется во время роста капель. Вывод проводится для единичной капли. В действительности полученные результаты верны только в среднем для большого числа частиц, так как при выводе применяются статистические законы молекулярного движения.

При выводе законов роста капель необходимо знать их скорость относительно скорости окружающей среды. Для спонтанной конденсации анализ проведем в рамках односкоростной модели, т. е. предположим, что капли движутся с той же скоростью, что и окружающий газ.

При равновесной конденсации в вакуум формула Максвелла (3.3.6) может быть обоснована и кинетическими методами. В равновесном состоянии имеет место распределение Максвелла молекул пара по скоростям:

$$f(w) = N \left(\frac{m_c}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m_c w^2}{2kT} \right\}. \quad (3.3.20)$$

Поток частиц можно выразить через функцию $f(w)$ $\vec{N} = \int w f(w) dw$.

Часть молекул этого потока сконденсируется на поверхности частицы. Масса молекул, сталкивающихся с единичной площадкой капли за единицу времени, равна

$$bm_c = \frac{Pm_c}{\sqrt{2\pi m_c kT}} = P \sqrt{\frac{m_c}{k2\pi T}}. \quad (3.3.21)$$

Учитывая, что $P = \rho_c TR_g / m_\mu$, $m_c / k = m_\mu / R_g$, и используя фиктивную для двухфазной среды скорость звука $a^2 = kTR_g / M_b$, из (3.3.21) получим

$$bm_c = \rho_c a (2\pi n)^{-0.5}, \quad (3.3.22)$$

где n – показатель изэнтропийного процесса. Тогда изменение массы сферической капли

$$\frac{dm_d}{d\tau} = \alpha_k bm_c 4\pi R^2 = \alpha_k 4\pi R^2 \rho_c a (2\pi n)^{-0.5}, \quad (3.3.23)$$

где α_k – коэффициент конденсации, равный отношению числа молекул, оставшихся на капле после столкновения, к числу молекул, столкнувшихся с каплей. Из (3.3.23) нетрудно получить выражение для изменения радиуса капли:

$$\frac{dR}{d\tau} = \alpha_k a \frac{\rho_c}{\rho_d} \sqrt{\frac{1}{2\pi n}}. \quad (3.3.24)$$

Коэффициент конденсации α_k может быть определен по формулам К. Осватича или Р. Булера. В частности, для квазистационарного процесса Р. Булером предложена формула

$$\alpha_k = \frac{c_p}{L} \frac{T_s - T}{1 - 2\sigma / (R\rho_d L)}, \quad (3.3.25)$$

где T_s – температура поверхности капли, принимаемая равной температуре пара, находящегося в состоянии равновесного насыщения по отношению к капле.

Скорость изменения массы капли можно получить также путем интегрирования уравнения Герца–Кнудсена для области свободномолекулярного режима течения. По существу вопрос сводится к определению баланса молекул, конденсирующихся на поверхности капли:

$$b = 4\pi R_d^2 \alpha_k P_c (2\pi m_c k T_c)^{-0.5}$$

и испаряющихся с нее:

$$a = 4\pi R_d^2 \alpha_k P_d (2\pi m_c k T_d)^{-0.5}.$$

Сумма этих потоков b и a и будет определять направление фазовых переходов и изменение массы капли в единицу времени:

$$\frac{dm_d}{d\tau} = \frac{4\pi R^2 \alpha_k P_c}{\sqrt{2\pi m_c k T_c}} \left(1 - \frac{\alpha_c}{\alpha_d} \frac{P_d}{P_c} \sqrt{\frac{T_c}{T_d}} \right), \quad (3.3.26)$$

где α_d и α_c – соответственно коэффициенты конденсации и испарения; P_d – давление насыщения паров жидкости вокруг капли радиусом R при температуре капли T_d . Скорость изменения температуры капли конденсата значительно выше скорости изменения ее радиуса. С высокой степенью точности она может

быть принята равной температуре насыщения T_s при данном давлении P_d . Для каплей малых размеров, когда необходимо учитывать влияние кривизны поверхности:

$$P_d = P_\infty \exp \left\{ \frac{2\sigma}{\rho_d R (R_1 T_d)} \right\}. \quad (3.3.27)$$

Для каплей $R > 10^{-8}$ м отношение $P_d / P_\infty \approx 1$. Учитывая выражение для массы капли, можно перейти от скорости изменения массы (3.3.26) к скорости изменения радиуса капли:

$$\frac{dR}{d\tau} = \eta = \frac{\alpha_k P_c}{\rho_d \sqrt{2\pi R_1 T_c}} \left(1 - \frac{\alpha_c}{\alpha_d} \frac{P_d}{P_c} \sqrt{\frac{T_c}{T_d}} \right). \quad (3.3.28)$$

На рис. 3.3.5 представлены результаты расчетов скорости роста каплей в водяном паре в зависимости от переохлаждения без учета кривизны поверхности капли.

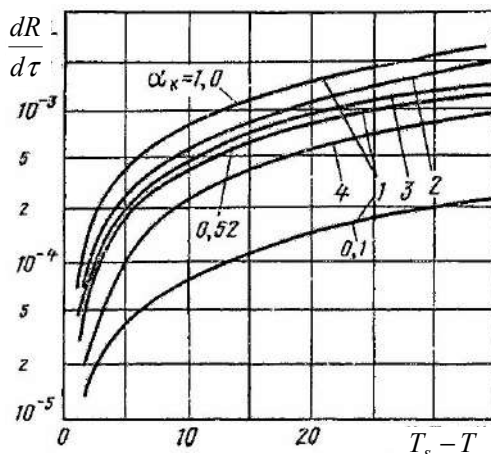


Рис. 3.3.5. Скорость роста каплей в переохлажденном водяном паре

Расчеты проводились при следующих условиях: $R_0 = 10^{-8}$ м, $P_0 = 0,05$ МПа, $T_s = 354$ К. Кривые 1 рассчитаны по уравнению (3.3.28) для разных значений α_d при условии, что $\alpha_d = \alpha_c$; 2 — по уравнению Осватича; 3, 4 — по уравнению Булера.

Скорость теплообмена \bar{q} одиночной капли с окружающим переохлажденным паром может быть подсчитана по формуле, полученной из теории разреженных газов:

$$\bar{q} = 4\pi R^2 \cdot 0,585 \rho_d \sqrt{\frac{2R_g T}{\pi}} \alpha_T R_g \frac{n+1}{n-1} (T - T_s), \quad (3.3.29)$$

где α_T — коэффициент термической аккомодации; n — показатель изоэнтропы. Если размер капли достиг примерно средней длины свободного пробега молекулы, то дальнейший рост капли определяется макроскопическими процессами. При конденсации на поверхности капли выделяется теплота парообразования и рост капли ограничивается. Уравнение баланса теплоты можно записать как

$$L \frac{dm_d}{d\tau} = -4\pi R^2 \lambda_1 \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_r,$$

где λ_1 – коэффициент теплопроводности пара; r – радиальная координата. На поверхности капли $r=1$. Если предположить, что вблизи поверхности капли температура меняется линейно, и учесть формулу (3.3.21), можно записать уравнение роста капли в следующем виде:

$$\frac{dR}{d\tau} = \frac{2\lambda_c}{\rho_d L} (T_s - T). \quad (3.3.30)$$

Это же соотношение может быть получено из уравнения баланса теплоты (уравнения конвективного теплообмена):

$$L \frac{dm_d}{d\tau} = 4\pi R^2 \alpha (T_s - T).$$

Приняв коэффициент теплоотдачи α при малых значениях $Re < 1$ и $Kn < 0,1$ равным $\alpha = \lambda_c / R$ (при $Nu = 2$), получим уравнение (3.3.30).

Подведем итоги. Уравнение (3.3.30) получено для значения критерия Нуссельта $Nu = 2$. Для двухфазных сред «пар–жидкость» с достаточно большими каплями могут иметь место самые разнообразные ситуации, когда тепло- и массообмен между каплями и паром (газом) определяются многими другими параметрами и $Nu \neq 2$. С увеличением размера капель существенным становится учет межфазового теплообмена и изменение температуры капли при ее движении.

3.3.4. Рост и испарение движущихся капель

При движении капли в среде скорость ее испарения может изменяться, поскольку молекулы пара, находящиеся около поверхности капли, уносятся средой. Рассмотрим процесс теплообмена при движении капель в потоке несущей фазы. Уравнение конвективного теплообмена для сферической капли можно представить в известной форме:

$$m_d c_{pd} \frac{dT}{d\tau} = \alpha_d 4\pi R^2 \Delta T_d,$$

где m_d , c_{pd} – масса и теплоемкость капли; α_d – коэффициент теплоотдачи; $\Delta T_d = T_{cw} - T_d$ – разность между температурой T_{cw} пара на поверхности капли и ее средней температурой T_d . Величина T_{cw} определяется по известной формуле

$$T_{cw} = T_c + \sqrt{\text{Pr}} \frac{(w_c - w_d)^2}{2c_{pc}},$$

где второй член учитывает частичное восстановление температуры в паровом слое вблизи поверхности капли; c_{pc} – теплоемкость пара. Во многих случаях поправкой, учитывающей частичное восстановление температуры торможения на поверхности капли, можно пренебречь.

Коэффициент теплоотдачи для режима континуума, когда длина свободного пробега молекул значительно меньше диаметра частицы, можно определять, используя эмпирическое соотношение

$$Nu_0 = 2 + A Re^B \text{Pr}^{1/3}. \quad (3.3.31)$$

В частности, известны формулы: Ранца–Маршала $Nu_0 = 2 + 0,6Re^{0,5}Pr^{1/3}$, а также Дрейка $Nu_0 = 2 + 0,459Re^{0,55}Pr^{1/3}$.

Подчеркнем, что в области глубоких разрежений необходимо учитывать зависимость коэффициента теплоотдачи от числа Кнудсена. Соответствующая зависимость, справедливая в широком диапазоне значений $10^{-3} < Kn < 10^2$, включающем режимы течения со скольжением и свободномолекулярного движения, получена в таком виде:

$$Nu = Nu_0(1 + 3,18Kn)^{-1}, \quad (3.3.32)$$

где, как и ранее, $Nu = 2R\alpha_d/\lambda_c$; Nu_0 – исходное число Нуссельта (3.3.31). Для режима течения со скольжением, охватывающего и переход к свободномолекулярному течению, можно использовать формулу

$$Nu = Nu_0(1 + Kn)^{-1}. \quad (3.3.33)$$

Расчетами установлено, что частицы размером $R < 10^{-7}$ м движутся с сохранением температурного равновесия. В результате подробного анализа теоретических и экспериментальных данных по этому вопросу был сделан вывод, что согласно теории в области Стокса при $Re < 1$ возрастание интенсивности испарения на передней поверхности частицы компенсируется его уменьшением на задней поверхности частицы. Таким образом, полная скорость испарения не меняется. К тому же при очень высоких числах Рейнольдса вылетающие из частицы молекулы уносятся от нее так быстро, что процесс напоминает испарение в вакууме. Этот процесс несуществен для частиц диаметром меньше 40 мкм, так как их движение относительно среды происходит при малых числах Re или они быстро замедляются до малых чисел Re . Следовательно, при оценке скорости испарения и конденсации движением капли можно пренебречь.

Подведем итоги. Создание строгой теории роста капель может базироваться на нестационарных кинетических уравнениях. При достаточно больших размерах капель по сравнению с размерами атомов, молекул и кластеров они будут иметь развитую поверхность, поэтому решение этих задач усложняется наличием поверхностей раздела. Возникают сложные проблемы формирования граничных условий и решений граничных задач для кинетического уравнения. В этом случае возможен переход к системе уравнений, аналогичной (3.2.60) для скорости зародышеобразования, когда основными параметрами модели являются вероятности присоединения и отрыва одиночного атома (молекулы) кластера от поверхности капли.

3.4. БРОУНОВСКОЕ СТОЛКНОВЕНИЕ И ДИФфуЗИЯ ЧАСТИЦ

Тепловое движение молекул среды вызывает хаотическое движение частиц дисперсной фазы – так называемое броуновское блуждание. Мельчайшие частицы могут выводиться из аэрозольной системы двумя путями. Во-первых, они способны объединяться с другими частицами и вырастать до таких размеров, что будут оседать под воздействием гравитации или аэродинамических сил, во-вторых, могут мигрировать к поверхностям, ударяться о них и оставаться связанными с ними. Процессы, вследствие которых частицы перемещаются к по-

верхности либо друг к другу, называются диффузионными, а движение частиц – броуновским. При изучении аэрозолей закономерности диффузии очень важны, поскольку во многом определяют взаимодействие мельчайших частиц ($2R < 0,1$ мкм).

Маленькие частички, взвешенные в газе, беспорядочно перемещаются из-за соударений с быстро движущимися молекулами газа. Их движение отчасти можно представить как вибрацию всего ансамбля частиц, хотя имеются и перемещения любой частицы относительно других. Это явление в 1828 г. впервые наблюдал в жидкости английский натуралист Броун, в честь которого оно получило свое наименование. В 1881 г. Бодашевский изучил броуновское движение частиц дыма и других воздушных суспензий и нашел, что оно подобно движению газовых молекул, постулированному кинетической теорией. Независимо от того, находятся ли частицы в газе или жидкости, принципы броуновского движения остаются неизменными.

3.4.1. Теория броуновского движения Эйнштейна

Физико-математическая модель броуновского блуждания частиц подробно разработана и обоснована в работах Эйнштейна и Смолуховского, а также Ланжевена и Чандрасекара. Рассмотрим цилиндр, площадь сечения которого равна единице, а диффузия частиц происходит вдоль оси цилиндра в одном направлении. В цилиндре установлены две мембраны S и S' на расстояниях соответственно x и $x + dx$ от его конца (рис. 3.4.1).

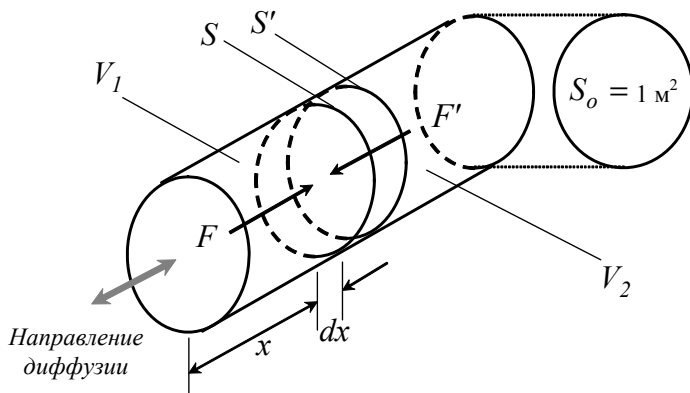


Рис. 3.4.1. К выводу выражения для осмотической силы

Диффузия частиц в цилиндре порождает силы, действующие на мембраны (осмотические силы). Силу, действующую на S , обозначим F , а силу сопротивления, действующую на S в противоположном направлении, – F' . Сумма сил, действующих на цилиндр объемом $S_0 dx$, равна $F - F'$. Поскольку площадь сечения цилиндра S_0 принята равной единице, сила, отнесенная к единице объема, составит $(F - F')dx$. Она также равна градиенту осмотического давления в этом объеме, т. е. градиенту давления между плоскостями S и S' .

Пусть $\sum F_d$ – осмотическая сила, отнесенная к единице объема, тогда получим

$$\sum F_d = \frac{(F - F')}{S_0 dx} = -\frac{dP}{dx}. \quad (3.4.1)$$

Осмотическое давление P растворенного вещества в растворителе равно $P = NR_g T$, Дифференцируя данное уравнение относительно N , получаем выражение $dP = R_g T dN$. Подставив его в уравнение (3.4.1), найдем

$$\sum F_d = R_g T \frac{dN}{dx}.$$

Это осмотическая, или диффузионная, сила, действующая на частицы в единице объема. Если в нем находится N молей частиц, то число частиц в единице объема равно NN_A (N_A – число Авогадро). Поскольку $N \cdot N_A = C$, сила F_d , действующая на каждую частицу, составляет

$$F_d = \sum F_d / (N \cdot N_A).$$

Соппротивление движению частицы в среде может быть найдено из закона Стокса при малых значениях числа Рейнольдса. Приравнявая это сопротивление F_d , получаем

$$F_d = -\frac{R_g T \frac{dN}{dx}}{N \cdot N_A} = 6\pi\mu_c R w / \zeta_\lambda.$$

Перегруппировка (3.4.1) дает

$$Cw = -\frac{R_g T}{N_A} \frac{\zeta_\lambda}{6\pi\mu_c R} \frac{dC}{dx}. \quad (3.4.2)$$

Величина Cw представляет диффузионный поток, т. е. число частиц, пересекающих единицу площади за единицу времени. Согласно первому закону Фика, он пропорционален градиенту концентрации, поэтому коэффициент диффузии аэрозольных частиц можно представить, исходя из уравнения (3.4.2), в виде

$$D_d = -\frac{R_g T}{N_A} \frac{\zeta_\lambda}{6\pi\mu_c R} = kT \frac{\zeta_\lambda}{6\pi\mu_c R}. \quad (3.4.3)$$

Введем еще один термин – *подвижность частиц* B . Это скорость, сообщаемая частице при воздействии постоянной единичной силы:

$$B = \frac{\zeta_\lambda}{6\pi\mu_c R}.$$

Подвижность сферы массой m_d равна

$$B = \tau_0 / m_d.$$

Учитывая это, коэффициент диффузии можно записать так:

$$D_d = BkT = \frac{\tau_0 kT}{m_d}.$$

При проведении моделирования блуждания одиночной частицы используют также параметр β , равный отношению коэффициент регулярного трения к массе частицы

$$\beta = \frac{6\pi\mu_c R}{m_d}. \quad (3.4.4)$$

Коэффициент диффузии в системе измеряется в единицах $\text{м}^2/\text{с}$ и при постоянной температуре зависит только от диаметра частицы и вязкости газа (если поправка Каннингема мала). При нормальных температуре и давлении частица диаметром 1 $\mu\text{м}$ имеет коэффициент диффузии $2,74 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$, т. е. примерно в 10^6 раз меньший, чем для газовых молекул.

Для сферических аэрозольных частиц формулы (3.4.3) и (3.4.4) имеют место только в предельном случае очень малых значений чисел Кнудсена. В общем случае произвольных чисел Кнудсена параметры β и D_d можно представить в виде

$$\beta = \frac{6\pi\mu_c R}{m_d} \zeta_\lambda(\text{Kn}), \quad D_d = \frac{kT}{6\pi\mu_c R} \zeta_\lambda(\text{Kn}).$$

Как уже было отмечено выше, при $\text{Kn} \rightarrow 0$ $\zeta_\lambda \rightarrow 1$. Этот результат может быть уточнен с помощью модели *молекулярного скольжения*, которая позволяет получить правильное двучленное разложение по положительным степеням Kn $\zeta_\lambda \approx 1 - 1,137 \cdot \text{Kn}$, $\text{Kn} \ll 1$.

Пусть выполняются следующие условия: скорость обтекания сферы газом значительно меньше тепловой скорости молекул в газе, и при отражении молекул газа от поверхности сферы происходит их полная термализация (теплопроводность частицы неограниченно большая), т. е. отраженные молекулы распределяются по закону Максвелла с температурой, равной температуре частицы. Тогда в предельном случае очень больших значений числа Кнудсена имеет место следующее асимптотическое соотношение:

$$\zeta_\lambda \rightarrow \frac{\pi+8}{18} \text{Kn}^{-1} \text{ при } \text{Kn} \rightarrow \infty.$$

Виллису удалось уточнить этот результат. Заменяв в уравнении Больцмана член, учитывающий столкновения, моделью Бхатнагара, Гросса и Крука, он получил, что

$$\zeta_\lambda \rightarrow \frac{\pi+8}{18} \text{Kn}^{-1} (1 - 0,366 \cdot \text{Kn}^{-1}), \quad \text{Kn} \gg 1. \quad (3.4.5)$$

Для того чтобы получить точную информацию о поведении ζ_λ при произвольных числах Кнудсена, необходимо решить кинетическую задачу о трансформации функции распределения молекул газа в окрестности сферы. Эта задача при тех же предположениях, при которых получена асимптотика (3.4.5), была решена численным путем. Результаты расчета приведены на рис. 3.4.2, где для сравнения помещены значения ζ_λ , вычисленные по полуэмпирической формуле Милликена:

$$\zeta_\lambda^{-1} \approx 1 + 1,234 \cdot \text{Kn} + 0,414 \cdot \text{Kn} \exp\left\{-\frac{0,876}{\text{Kn}}\right\}.$$

Согласование теоретических и экспериментальных данных очень хорошее. Отклонение не превышает 2% и может быть объяснено экспериментальными ошибками, ошибками счета, конечной теплопроводностью тела и, наконец, недостаточной адекватностью использованной модели для члена, учитывающего столкновения.

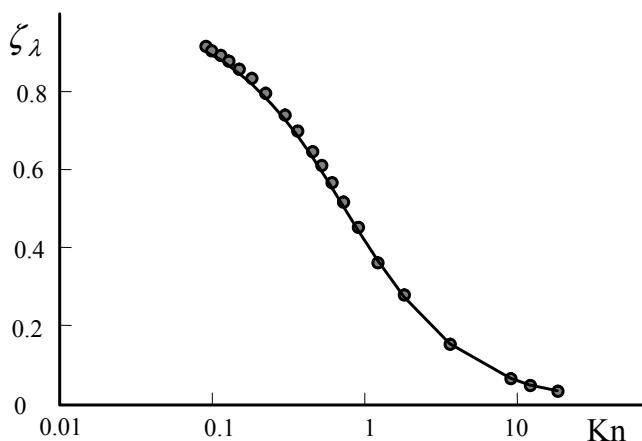


Рис. 3.4.2. Зависимость от числа Кнудсена: линия – теория, точки – эксперимент

Приведенные зависимости ζ_λ от Kn установлены для случая, когда при отражении молекул от поверхности сферы происходит их полная термализация. Для полной термализации необходимо, чтобы частица состояла из достаточно большого числа молекул. Если же частица представляет собой комплекс из нескольких молекул, то более вероятны просто упругие столкновения молекул среды с частицей.

Подведем итоги. Физико-математическая модель броуновского блуждания частиц подробно разработана и позволяет достаточно обоснованно рассчитать коэффициент броуновской диффузии частиц аэрозоля, который при постоянной температуре зависит только от диаметра частицы и вязкости газа, а также поправки Каннингема. Для расчета поправки Каннингема имеются надежные аналитические зависимости.

3.4.2. Особенности броуновского движения

Броуновское смещение. При броуновском движении вероятность возврата частицы в исходную точку чрезвычайно мала. Хотя за некоторый промежуток времени каждая частица совершает ряд перемещений, среднее смещение для всех частиц будет равно нулю. За короткий отрезок времени одна из частиц может сдвинуться на расстояние x_1 , другая – на x_2 и т. д. Некоторые из этих смещений будут положительными, другие – отрицательными, одни пройдут вверх, другие – вниз. Но в равновесных условиях сумма смещений окажется нулевой. Можно выразить перемещение какой-либо частицы через ее среднеквадратичное смещение. Примем для простоты, что рассматриваемая частица движется вперед или назад только вдоль какой-либо одной оси. Будем считать скорости частиц, движущихся вперед, положительными. Обозначим σ величину квадратного корня из среднеквадратичного смещения, которое происходило в течение времени τ . В среднем за это время через плоскость S (рис. 3.4.1) пройдут только частицы, находившиеся от нее на расстоянии σ или ближе.

Общее число частиц, прошедших через единицу поверхности S , составит $0,5C_1\sigma$, где C_1 – средняя концентрация частиц в объеме V_1 , находящемся слева от плоскости S . Из аналогичных соображений число частиц, прошедших в обратном направлении из объема V_2 (справа от плоскости S), равно $0,5C_2\sigma$. Таким образом, общий поток слева направо составит $0,5(C_1 - C_2)\sigma$. Для очень малых σ можно написать

$$C_1 - C_2 = -\sigma \frac{dC}{dx}. \quad (3.4.6)$$

Тогда общий поток можно представить в виде $0,5\sigma(dC/dx)$. За единицу времени количество вещества M_J , продиффундировавшего через единицу поверхности плоскости S , составит

$$M_J = -\frac{1}{2} \frac{\sigma^2}{\tau} \frac{dC}{dx}. \quad (3.4.7)$$

Уравнение (3.4.7) соответствует первому закону Фика, и из него можно получить выражения для коэффициента диффузии

$$D_d = \sigma^2 / (2\tau) \quad (3.4.8)$$

и среднеквадратичного смещения:

$$\sigma^2 = 2D_d\tau. \quad (3.4.9)$$

Если рассматривать движение в объеме, то смещение за любой период времени будет меньше, чем при линейном потоке, поскольку часть времени частица будет смещаться под прямым углом к интересующему нас направлению. При трехмерном движении среднеквадратичное смещение составляет

$$\sigma^2 = (4/\pi)D_d\tau. \quad (3.4.10)$$

Из (3.4.10) следует, что частицы малых размеров в результате диффузии преодолевают относительно небольшие расстояния. Диффузия важна только при рассмотрении поведения частиц, заключенных в небольших объемах, находящихся поблизости каких-либо поверхностей, или когда частицы столь малы, что величина D_d приближается к значению молекулярных коэффициентов диффузии.

Броуновское вращение. Аэрозольные частицы при броуновском движении перемещаются беспорядочно, поскольку испытывают соударения с газовыми молекулами. Этот хаотический характер *бомбардировки* частиц может вызвать их вращение. Броуновское вращение описывается следующим уравнением:

$$\bar{\theta}^2 = 2kTB_\theta\tau. \quad (3.4.11)$$

Величина $\bar{\theta}$ – среднеквадратичный угол вращения частицы относительно выбранной оси за время τ . Для сферической частицы Фукс представил вращательную подвижность B_θ как

$$B_\theta = 1/(8\pi\mu_c R^3), \quad (3.4.12)$$

и поэтому уравнения (3.4.11) можно записать в виде

$$\bar{\theta}^2 = \frac{kT}{4\pi\mu_c R^3} \tau. \quad (3.4.13)$$

Для гладких сферических частиц броуновское вращение вряд ли представляет интерес, поскольку не приводит к осязательному эффекту. В случае частиц, имеющих неправильную форму, броуновское вращение вызывает эффект мерцания, который часто наблюдается, когда пучок света пронизывает облако частиц. Хотя уравнение (3.4.13) получено для сфер, оно может быть использовано и для неизометрических частиц. Частицы диаметром менее 1 мкм вращаются столь быстро, что мерцание уже не доступно наблюдению глазом. Для частиц диаметром более 20 мкм броуновское вращение очень медленное. Таким образом, мерцание обычно можно наблюдать в облаках, состоящих только из частиц, диаметры которых равны 1–20 мкм. Но поскольку частицы меньше 10 мкм не видны невооруженным глазом, фактический интервал размеров *мерцающих частиц* чрезвычайно узок.

«Барометрическое» *распределение частиц*. В соответствии с кинетической теорией, если газ находится в равновесном состоянии, то частицы будут иметь ту же среднюю энергию поступательного движения, что и молекулы. Это позволяет рассчитать среднюю скорость частицы, совершающей броуновское движение. Обозначим ее w_0 и напомним

$$\frac{m_d w_0^2}{2} = \frac{3}{2} kT, \quad (3.4.14)$$

где m_d – масса частиц и $3kT/2$ – средняя энергия частицы в газе. Перегруппируем выражение

$$w_0 = \sqrt{2kT/m_d}, \quad (3.4.15)$$

что точно соответствует уравнению для квадратного корня из среднеквадратичной скорости газовых молекул. Хаотически движущиеся аэрозольные частицы имеют такое же распределение Максвелла–Больцмана по скоростям, как молекулы газа. Но если они ведут себя подобно газовым молекулам, то в равновесии должны распределяться по вертикали в соответствии с барометрическим или уравнением Больцмана. И это действительно наблюдается на практике. Монодисперсные аэрозоли в отсутствие коагуляции распределяются по вертикали в соответствии с выражением

$$C = C_0 \exp \left\{ -\frac{m_d g H}{kT} \right\}, \quad (3.4.16)$$

где H – высота над некоторой контрольной точкой, в которой измеряется концентрация C и C_0 – концентрация частиц в контрольной точке. Этим эффектом можно пренебречь для частиц крупнее 0,3 мкм. В случае частиц диаметром 0,1 мкм в состоянии равновесия они будут находиться над имеющейся поверхностью в слое газа толщиной 0,8 мм. Для частиц диаметром 0,01 мкм слой газа будет иметь толщину уже около 50 см. Очень мелкие частицы (диаметром менее 0,1 мкм) никогда не будут оседать из-за седиментации. Броуновское движение будет поддерживать их во взвешенном состоянии. Удаление таких частиц из воздуха может происходить только под действием других механизмов.

Влияние массы частицы на коэффициент диффузии. Из уравнения (3.4.3) следует, что коэффициент диффузии аэрозольной частицы не зависит от ее плотности и, следовательно, массы. Но так ли это? Поскольку масса частицы много больше массы газовой молекулы, следует ожидать плавных изменений направления ее движения, а не столь быстрых, как при диффузии газа. Но если это так, то импульс частицы (или ее массу) необходимо учитывать в уравнениях для расчета коэффициента диффузии.

Двумерные траектории газовой молекулы и аэрозольной частицы изображены на рис. 3.4.3. У молекулы видны резкие изменения направлений движения. Каждое происходит в результате ее соударения с другой молекулой. Среднее расстояние между двумя точками, в которых происходят последовательные изменения направлений движения, называют длиной свободного пробега молекулы. Для частицы удар одной молекулы не приводит к заметному изменению направления движения. Именно поэтому ее путь не характеризуется резкой сменой направлений. Сравнительно сглаженная траектория движения частицы является следствием суммирования ударов многих молекул.

Задачу о движении частицы можно решить, рассматривая ее среднее смещение под воздействием силы, величина и направление которой изменяются беспорядочно, а средняя величина равна нулю. Среднеквадратичное смещение частицы можно представить так:

$$\sigma^2 = \frac{2}{3} \bar{w}^2 \tau_0 \{ \tau - \tau_0 [1 - \exp(-\tau/\tau_0)] \}. \quad (3.4.17)$$

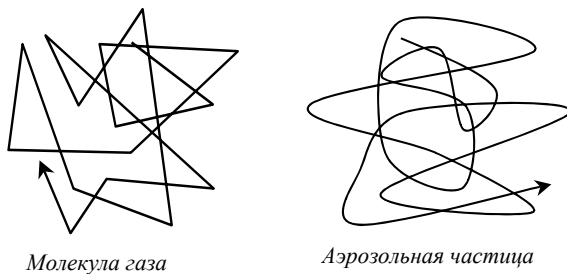


Рис. 3.4.3. Траектории молекулы газа и аэрозольной частицы

Величина \bar{w}^2 равна $3kT/m_d$ – среднеквадратичной скорости распределения Больцмана. Используя выражение для коэффициента диффузии, получим

$$\sigma^2 = 2D_d \{ \tau - \tau_0 [1 - \exp(-\tau/\tau_0)] \}. \quad (3.4.18)$$

Перейдем к безразмерной форме:

$$\tilde{\sigma} = \frac{\sigma^2}{2D_d \tau} = 1 - \frac{1 - \exp(-\tau/\tau_0)}{\tau/\tau_0}.$$

График данной зависимости представлен на рис. 3.4.4, из которого следует, что уже при $\tau \geq 10\tau_0$ эта поправка незначительна. Если $\tau \gg \tau_0$, это уравнение переходит в формулу (3.4.9), характеризующую смещение частицы при постоянной скорости.

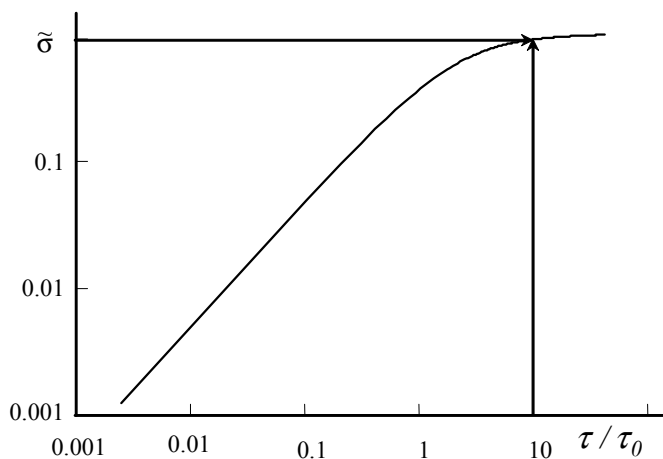


Рис. 3.4.4. Влияние массы частицы на ее диффузию (изменение относительного смещения во времени)

Здесь важно оценить численные значения времени релаксации аэрозольных частиц τ_0 . Расчеты проводились для движения аэрозольных частиц плотностью 1000 кг/м^3 при температуре 20°C . Как видно из рис. 3.4.5, это время не превышает 10^{-4} с. Поскольку время наблюдения, как правило, больше τ_0 , мы можем принять, что в большинстве случаев при рассмотрении диффузии частиц их массу можно не учитывать.

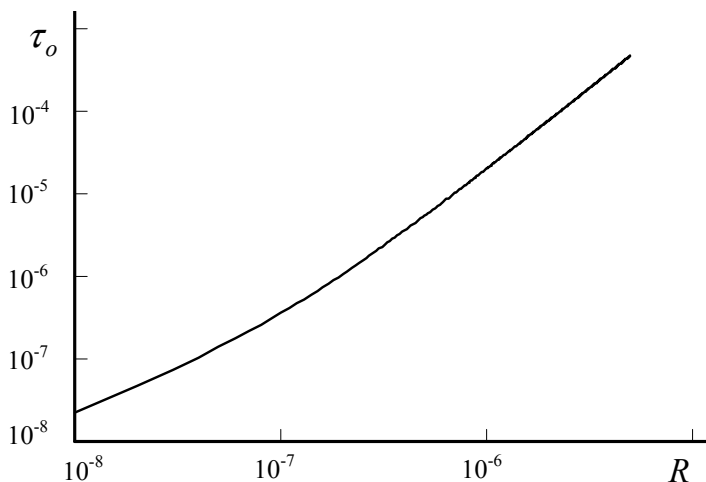


Рис. 3.4.5. Зависимость времени релаксации частицы аэрозоля от ее размера

Кажущийся свободный средний путь аэрозольных частиц. Поскольку газо-вые молекулы непрерывно бомбардируют аэрозольные частицы, траектории движения этих частиц больше похожи на сглаженные кривые, чем на отрезки прямых линий. Тем не менее можно ввести понятие о кажущемся среднем свободном пути аэрозольной частицы. Он соответствует расстоянию, которое

в среднем преодолевает частица, прежде чем ее направление движения изменится на 90° относительно первоначального. Кажущийся свободный средний путь представляет собой расстояние, которое преодолевает средняя частица в избранном направлении, пока ее скорость в данном направлении не станет равна нулю. Но это не что иное, как расстояние торможения. В любой момент частицу можно рассматривать как совершающую передвижение в некотором направлении со скоростью $w = \sqrt{8kT/(\pi m_d)}$.

Из определения расстояния торможения следует, что псевдосредний свободный путь l_B составляет

$$l_B = \tau_0 w = \tau_0 \sqrt{8kT/(\pi m_d)}. \quad (3.4.19)$$

При нормальном давлении и температуре l_B имеет место минимальное значение для аэрозольных частиц диаметром 10^{-7} м (рис. 3.4.6). Расчеты проводились для движения аэрозольных частиц плотностью 1000 кг/м^3 при температуре 20°C . Для частиц диаметром на два порядка меньше или больше l_B возрастет лишь в пять раз. Псевдосредний свободный путь остается примерно одним и тем же для некоторого интервала размеров частиц со средней точкой 10^{-7} м.

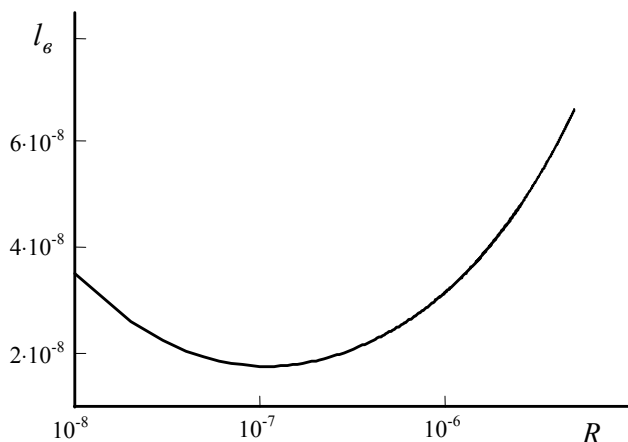


Рис. 3.4.6. Зависимость псевдосреднего свободного пути частицы аэрозоля от ее размера

Подведем итоги. Анализ особенностей броуновского блуждания в жидких средах показал, что скорость частицы равномерная. Мелкие частицы перемещаются быстрее, чем крупные, в средах с меньшей вязкостью скорость частиц выше, и при постоянной вязкости амплитуда смещения прямо пропорциональна абсолютной температуре. Эти наблюдения согласуются с теорией броуновского движения, развитой Эйнштейном в 1905–1906-е гг.

3.4.3. Блуждание не слишком малых частиц

Бесконечное иррегулярное блуждание не слишком малых частиц в газообразной среде поддерживается не просто случайным характером отдельных столкновений молекул среды с этими частицами, а молекулярными флуктуа-

циями полного импульса, передаваемого им средой в различные промежутки времени. Действительно, в нормальных условиях время взаимодействия одной молекулы газообразной среды с не слишком малой частицей существенно превышает время между двумя последовательными столкновениями отдельных молекул с этой частицей. Обозначим эти времена соответственно τ_a и τ_c . Тогда согласно кинетической теории газов:

$$\tau_a \approx l/w_t, \tau_c \approx 1/(C_c w_t R^2), \quad (3.4.20)$$

где C_c и w_t – концентрация и тепловая скорость молекул среды; l – характерный радиус взаимодействия молекулы среды с частицей. При нормальных условиях $C_c \approx 10^{19} \text{ см}^{-3}$ и $l \leq 10^{-7} \text{ см}$. Отсюда $\tau_a \gg \tau_c$, если $R \gg 10^{-8} \text{ м}$, и об отдельных столкновениях молекул газообразной среды с частицей есть смысл говорить только в случае, когда размер последней меньше 10^{-8} м .

Исходя из основного предположения модели броуновского блуждания частиц полный импульс, передаваемый частице средой, может быть записан в виде двух слагаемых (регулярного и флуктуационного). Флуктуационная часть импульса распределена по закону Гаусса и не зависит от регулярной скорости частицы. Регулярное гидродинамическое поле частицы не оказывает влияния на интенсивность молекулярных флуктуаций среды. Выполнение этого предположения может быть обеспечено слабым взаимодействием частиц с окружающей средой, т. е. условиями:

$$m_d \gg V\rho_c, m_d \ll \rho_c/n_d. \quad (3.4.21)$$

Первое неравенство обеспечивает слабость взаимодействия одной частицы с отдельными молекулярными флуктуациями среды, а второе – слабость суммарного влияния частиц на среду.

Справедливость изложенного выше предположения относительно характера броуновского блуждания коллоидных частиц была подтверждена тщательными экспериментальными измерениями. Нет причин, которые заставляли бы сомневаться в его применимости и для описания блуждания аэрозольных частиц при средних и больших числах Кнудсена. Стохастические уравнения, которые вытекают из этого предположения, и уравнение Больцмана для более тяжелой и менее многочисленной компоненты двухкомпонентной смеси газов, т. е. в случае очень больших значений числа Кнудсена, эквивалентны. Уравнение же Больцмана подвергнуто тщательной экспериментальной проверке.

Воспользовавшись указанным выше предположением, уравнение движения отдельной частицы можно представить в виде

$$m_d \frac{d\vec{w}}{d\tau} = \vec{F}_P + \vec{F}_\phi. \quad (3.4.22)$$

Здесь F_P – регулярная сила, действующая на частицу со стороны среды, а F_ϕ – флуктуационная составляющая. Уравнение (3.4.22) называют обычно уравнением Ланжевена.

Пусть τ_ϕ – время корреляции различных молекулярных флуктуаций, а $\tau_P = R^2/\nu_c$ – время релаксации регулярного гидродинамического поля частицы с радиусом R в среде с кинематической вязкостью ν_c . Пусть $\tau = \max\{\tau_\phi, \tau_P\}$.

Усредняя уравнение Ланжевена по временам порядка τ , приходим к стохастическому уравнению

$$\begin{aligned} d\tilde{w} &= -\beta\tilde{w}d\tau + d\tilde{\tilde{w}}, \quad d\tilde{r} = \tilde{w}d\tau, \\ d\tilde{\tilde{w}} &= \beta\sqrt{2D_d d\tau}\tilde{a}, \quad f(\tilde{a}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}|\tilde{a}|^2\right\}. \end{aligned} \quad (3.4.23)$$

Здесь $d\tilde{w}$ – случайное приращение скорости частицы за время $d\tau$, $f(\tilde{a})$ – плотность распределения вероятности случайной величины \tilde{a} .

Уравнения (3.4.23) моделируют броуновское движение как процесс Маркова в фазовом пространстве \tilde{r}, \tilde{w} : приращения $d\tilde{r}$ и $d\tilde{w}$ в промежутке времени $(\tau, \tau + \Delta\tau)$ зависят от значений \tilde{r} и \tilde{w} в момент времени τ , предыстория частицы никак не сказывается на значениях $d\tilde{r}$ и $d\tilde{w}$.

В обычном пространстве уравнения (3.4.23) описывают немарковский процесс. Действительно, после однократного интегрирования первого уравнения системы (3.4.23) получим

$$d\tilde{r} = -\beta\tilde{r}d\tau + \tilde{A}d\tau, \quad \tilde{A} = \int_{-\infty}^{\tau} d\tilde{w}.$$

Приращение $d\tilde{r}$ в промежутке времени $(\tau, \tau + \Delta\tau)$ зависит не только от значения \tilde{r} в момент времени τ , но и от того, что происходило с этой частицей до момента времени τ . Информация о предыстории частицы содержится в \tilde{A} .

Параметр β имеет размерность, обратную времени и $1/\beta = \tau_0$, представляет собой время релаксации скорости частицы, т. е. время, за которое частица *забывает* свою предысторию. Поэтому, усредняя первое уравнение (3.4.23) по временам порядка τ_0 , мы приходим к уравнению, описывающему броуновское блуждание как процесс Маркова в обычном пространстве:

$$d\tilde{r} = \sqrt{2D_d d\tau}\tilde{a}, \quad (3.4.24)$$

где \tilde{a} распределено по тому же самому закону.

Марковский характер в фазовом пространстве броуновское блуждание приобрело в результате усреднения по времени τ .

Предположим, что $\tau_\phi \ll \tau_P$. Тогда, усредняя уравнение Ланжевена по временам порядка τ_ϕ , получим немарковское уравнение

$$d\tilde{w} = -\frac{\beta}{1 + k_m\beta\tau_P} \left[\tilde{w} + \sqrt{\frac{\tau_P}{\pi}} \int_{-\infty}^{\tau} \frac{d\tilde{w}}{\sqrt{\tau - \tau^*}} \right] d\tau + \frac{d\tilde{\tilde{w}}}{1 + k_m\beta\tau_P}. \quad (3.4.25)$$

Появившийся интегральный член, характеризующий влияние на силу сопротивления инерционности среды, и приводит к немарковости: приращения $d\tilde{r}$ и $d\tilde{w}$ в промежутке времени $(\tau, \tau + \Delta\tau)$ определяются не только значениями характеристик частицы в момент времени τ , но и всей предысторией движения. В дальнейшем мы везде пренебрегаем возможным влиянием этого *вязкого последствия*.

Хаотическое вращение дисперсных частиц. Выше был рассмотрен случай невращающихся частиц. Естественно, что тепловое движение молекул среды

должно приводить также к хаотическому вращению дисперсных частиц. Очень важным в этом случае является то обстоятельство, что броуновское блуждание частиц соответствует очень малым числам Рейнольдса. Поэтому поступательное и вращательное броуновские блуждания в неограниченной среде будут независимы и их можно рассматривать отдельно.

При тех же условиях, при которых обсуждалось выше поступательное броуновское движение частиц, стохастические уравнения вращательного движения записываются в виде

$$\begin{aligned} d\vec{\omega}_d &= -\beta_r \vec{\omega}_d d\tau + d\vec{\tilde{w}}_r, & d\vec{\theta} &= \vec{\omega}_d d\tau, \\ d\vec{\tilde{w}}_r &= \beta_r \sqrt{2D_{Br} d\tau} \vec{a}, & D_{Br} &= \frac{kT}{I\beta_r}, & I &= \frac{2}{5} m_d R^2. \end{aligned} \quad (3.4.26)$$

Здесь $d\vec{\tilde{w}}_r$ – случайное приращение угловой скорости за время $d\tau$; \vec{a} – случайная величина, распределенная по закону (3.4.35); β_r – коэффициент регулярного трения при вращении, отнесенный к моменту инерции. Параметр D_{Br} имеет смысл коэффициента броуновской диффузии в некотором пространстве переменных θ , определяющих положение произвольной точки поверхности частицы в обычном пространстве при фиксированном положении центра частицы.

Для коллоидных частиц, размер которых существенно превышает размер молекул среды, и для аэрозольных частиц при очень малых числах Кнудсена:

$$\beta_r = \frac{20\pi\mu_c R}{m_d}. \quad (3.4.27)$$

Подведем итоги. Вращение частицы сильно усложняет анализ ее броуновского блуждания в том случае, если форма частицы несферическая либо она находится в окрестности границы. В этих ситуациях происходит взаимное влияние поступательного и вращательного броуновских блужданий.

3.4.4. Уравнение Фоккера–Планка. Гидродинамическое приближение

Решение стохастических уравнений существенным образом отличается от решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Решить обыкновенное дифференциальное уравнение – это значит по заданным начальным условиям найти значение неизвестных функций в произвольный момент времени. Решить стохастическое дифференциальное уравнение – это значит по заданным начальным условиям найти распределение значений искомых функций в произвольный момент времени. Поэтому извлечь необходимую физическую информацию из стохастических уравнений значительно труднее, чем из обыкновенных уравнений. Без особого труда это удастся сделать лишь для некоторых простейших задач. В общем же случае проще иметь дело с граничными задачами для дифференциальных уравнений в частных производных, эквивалентных стохастическим уравнениям.

Обозначим $f(\vec{r}, \vec{w}; \tau; \vec{r}_0, \vec{w}_0)$ – плотность распределения значений радиус-вектора центра \vec{r} и поступательной скорости \vec{w} сферической частицы в момент времени τ при условии, что в момент времени $\tau = 0$ они были соответственно

равны \vec{r}_0 и \vec{w}_0 . Стохастические уравнения (3.4.23) эквивалентны следующему дифференциальному уравнению в частных производных для функции распределения f :

$$\frac{\partial f}{\partial \tau} + \left(\vec{w} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right) f + \left(\left[\frac{\vec{v}}{\tau_0} + \frac{\vec{F}}{m_d} \right] \frac{\partial}{\partial \vec{w}} \right) f = \left(\frac{\partial}{\partial \vec{w}} \left[\frac{D_d}{\tau_0} \frac{\partial}{\partial \vec{w}} + \vec{w} \right] \right) f. \quad (3.4.28)$$

Здесь \vec{F} – внешняя сила, действующая на частицу (например, сила тяжести). Это уравнение называют обычно уравнением Фоккера–Планка. Мы не будем останавливаться на выводе уравнения (3.4.28) из уравнений (3.4.23), поскольку он подробно изложен в [3]. Строгий вывод такого типа уравнений из стохастических уравнений разработал А. Н. Колмогоров.

Для свободных частиц, когда среда не ограничена, \vec{v} и \vec{F} равны нулю, из (3.4.40) следует, что f имеет вид распределения Гаусса:

$$f(\vec{r}, \vec{w}, \tau; \vec{r}_0, \vec{w}_0) = \frac{1}{8\pi^3 (H_1 H_3 - H_2^2)^{3/2}} \exp \left[-\frac{H_1 |\vec{s}_1|^2 - 2H_2 (\vec{s}_1 \vec{s}_2) + H_3 |\vec{s}_2|^2}{2(H_1 H_3 - H_2^2)} \right], \quad (3.4.29)$$

где приняты следующие обозначения:

$$\vec{s}_1 = \vec{r} - \vec{r}_0 - \tau_0 \vec{w}_0 (1 - \exp\{-\tau/\tau_0\}), \quad \vec{s}_2 = \vec{w} - \vec{w}_0 \exp\{-\tau/\tau_0\},$$

$$H_1 = D_d (1 - \exp\{-2\tau/\tau_0\})/\tau_0, \quad H_2 = D_d (1 - \exp\{-\tau/\tau_0\})^2,$$

$$H_3 = D_d \tau_0 (2\tau/\tau_0 - 3 + 4\exp\{-\tau/\tau_0\} - \exp\{-2\tau/\tau_0\}).$$

Из этих соотношений следует, что характер броуновского блуждания существенно зависит от отношения времен τ и $\tau_0 = 1/\beta$. Например, для среднего квадратичного перемещения, усредненного по всем значениям \vec{w}_0 , имеем

$$\langle |\vec{r} - \langle r \rangle|^2 \rangle = \begin{cases} 3D_d \tau^2 / \tau_0 & \text{при } \tau \ll \tau_0, \\ 6D_d \tau & \text{при } \tau \gg \tau_0. \end{cases} \quad (3.4.30)$$

Так, если $\tau \gg \tau_0$, то имеет место чисто диффузионный режим в обычном пространстве с коэффициентом диффузии D_d . Заметим, что нижнее предельное соотношение в выражении (3.4.29) представляет собой известную формулу Эйнштейна для среднего квадратичного перемещения броуновской частицы.

Значения τ_0 обычно очень малы. Поэтому при анализе броуновской коагуляции и броуновской диффузии на макроскопические тела нет смысла пользоваться довольно сложным уравнением (3.4.28), в котором содержится полная информация о функции $f(\vec{r}, \vec{w}, \tau; \vec{r}_0, \vec{w}_0)$. Достаточно первых двух моментов этой функции по переменным \vec{w} , а именно:

$$C = \langle f(\vec{r}, \vec{w}, \tau) \rangle, \quad \langle \vec{w} \rangle = \langle \vec{w} f \rangle / \varphi. \quad (3.4.31)$$

Здесь угловые скобки означают интегрирование по скоростям, C – плотность вероятности в обычном пространстве, численно равная концентрации частиц. *Сокращенное* описание с помощью первых двух (или трех) такого типа моментов функции распределения называют гидродинамическим приближением. Это приближение справедливо с точностью, соответствующей первому порядку отношения времени τ_0 к характерному времени эволюции функции распределения. В гидродинамическом приближении для изотермических условий

из (3.4.28) получены следующие уравнения для C и средней скорости, которую мы в дальнейшем будем обозначать просто \vec{w} (без угловых скобок):

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial \tau} + \text{div} C \vec{w} &= 0, \quad \frac{\partial \vec{w}}{\partial \tau} + (\vec{w} \nabla) \vec{w} + \vec{w} / \tau_0 = \vec{v} / \tau_0 + \vec{F} / m_d - \frac{D_d}{C} \text{div} C \sigma, \\ \sigma_{ij} &= \delta_{ij} / \tau_0 - D_{ij}, D_{ij} = \frac{\partial w_i}{\partial x_j} + \frac{\partial w_j}{\partial x_i}. \end{aligned} \quad (3.4.32)$$

Здесь δ_{ij} – символ Кронекера, D_{ij} – тензор деформации поля \vec{w} . Дополнительные условия, при которых эти уравнения получены из уравнения Фоккера–Планка, имеют вид:

$$\tau \geq \tau'_1 \approx \tau_1 + \tau_0, \quad \xi \geq \xi_1 \approx \sqrt{D_d \tau_0}, \quad \tau^* \gg \tau_0, \quad L^* \gg \sqrt{D_d \tau_0}. \quad (3.4.33)$$

где τ^* и L^* – характерные время и размер изменения полей для \vec{v} и \vec{F} ; ξ – расстояние от границ течения или разрывов. Согласно неравенствам (3.4.33) уравнения (3.4.32), как и положено гидродинамическому приближению, не описывают правильно поведение частицы в начальный период, вблизи границ течения и разрывов.

Аналогичные уравнения, без члена, зависящего от тензора деформации поля D_{ij} , получены также в [3]. Сохранение этого члена обязательно, поскольку в общем случае он по порядку величины сравним с первыми двумя членами во втором уравнении системы (3.4.32).

Уравнения (3.4.32) допускают две эквивалентные физические трактовки. С одной стороны, их можно рассматривать как уравнения, определяющие эволюцию плотности вероятности попадания в заданный малый объем одной частицы с заданной средней скоростью. С другой – как уравнения, определяющие эволюцию концентрации ϕ и средней скорости \vec{w} совокупности невзаимодействующих аэрозольных частиц. Очевидно, что вторая интерпретация уравнений (3.4.32) имеет физический смысл, если повсюду в области течения можно выделить настолько малые объемы, чтобы характеристики C и \vec{w} можно было считать в них однородными, но настолько большие, чтобы и число частиц в них было достаточно велико и взаимодействием между частицами все еще можно было пренебречь. В дальнейшем мы, не оговаривая особо, будем все время подразумевать вторую интерпретацию этих уравнений.

Поведение совокупности невзаимодействующих аэрозольных частиц в рассматриваемом случае до некоторой степени аналогично поведению разреженного газа, состоящего из невзаимодействующих твердых сфер. При этом величины P_B и μ_B , равные соответственно:

$$P_B = \frac{D_d m_d C}{\tau_0}, \quad \mu_B = \frac{1}{2} m_d C D_d, \quad (3.4.34)$$

приобретают физический смысл осмотического давления и вязкости совокупности аэрозольных частиц. Согласно предположению рассматриваются лишь настолько разреженные дисперсные системы, когда взаимодействием частиц можно было пренебречь, и вязкость появляется в связи с переходом частиц, обладающих своими индивидуальными скоростями, отличающимися от их средней скорости, из одних элементарных макроскопических объемов в другие.

Существенное отличие от гидродинамических уравнений для разреженного газа состоит в наличии в уравнениях (3.4.32) члена \vec{w}/τ_0 . Именно существование этого члена приводит к тому, что в нулевом приближении по времени τ_0 для совокупности аэрозольных частиц мы получаем соотношения:

$$\vec{w} = \vec{v} - \frac{D_d}{C} \nabla C, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} + \operatorname{div} \left(\vec{v} + \frac{\vec{F} \tau_0}{m_d} \right) \varphi = D_d \Delta C. \quad (3.4.35)$$

Второе уравнение системы (3.4.47) называют обычно уравнением Смолуховского или уравнением конвективной диффузии частиц аэрозоля в безынерционном приближении. Оно описывает диффузионное *размывание* неоднородностей концентрации частиц с неограниченной скоростью распространения возмущения. Неограниченная скорость распространения возмущения означает, что при механическом возмущении системы частиц в какой-нибудь точке пространства информация об этом за бесконечно малый промежуток времени будет передана всем частицам совокупности. Несколько иным путем уравнение Смолуховского получил Крамерс из уравнения Фоккера–Планка.

В дальнейшем будут рассмотрены только стационарные задачи для уравнений (3.4.35). Для выделения единственного решения уравнения Смолуховского необходимо задать условия для концентрации на границах течения. При решении уравнений (3.4.32) необходимо дополнительно на границах течения задать условия для тангенциальной составляющей средней скорости частиц.

Пусть концентрация аэрозольных частиц в окрестности твердой поверхности равна C_A . Если эта поверхность полностью поглощает частицы, то $C_A = 0$. Однако при использовании уравнений движения аэрозольных частиц в гидродинамическом приближении условия для концентрации нужно задавать не на самой границе, а на некотором расстоянии ξ_0 , определяемом вторым соотношением системы (3.4.33). Если $\xi_0 \ll L$, где L – характерный размер макроскопического тела, возмущающего течение, т. е.

$$\tau_0 \ll L^2 / D_d, \quad (3.4.36)$$

то используют обычно так называемые экстраполяционные граничные условия

$$k_s \frac{\partial C}{\partial \xi} = \varphi - \varphi_A \text{ при } \xi = 0, \quad (3.4.37)$$

где неотрицательный параметр k_s подбирается так, чтобы определялся правильно поток аэрозольных частиц на поверхность $\xi = 0$. При этом концентрация частицы в слое $0 \leq \xi \leq \xi_0$ будет определяться ошибочно, но на эту жертву ради простоты рассмотрения приходится идти. К сожалению, для точного теоретического определения k_s необходимо в слое $0 \leq \xi \leq \xi_0$ решить уравнение Фоккера–Планка, затем это решение сшить с решением уравнения Смолуховского вне кинетического слоя. В такой постановке задача очень трудная и пока даже для простейших ситуаций никем не решена. Заметим, что

$$k_s \approx \sqrt{D_d \tau_0}. \quad (3.4.38)$$

Законы диффузии Фика. Когда частицы однородно распределены в газе, броуновское движение будет изменять расположение отдельных частиц, но не

ансамбля частиц в целом. Если же наблюдаются какие-либо неравномерности распределения, то броуновское движение будет способствовать выравниванию концентраций частиц в газе. Из областей с высокими концентрациями они будут перемещаться в области с низкими концентрациями. Этот процесс, который часто называют диффузией частиц, описывается теми же двумя законами, что и в случае молекулярной диффузии (законами Фика).

Согласно первому закону Фика, число частиц, пересекающих единицу поверхности в единицу времени M_j , пропорционально градиенту концентрации, нормальному к этой поверхности dC/dx . Коэффициент пропорциональности D_d называется коэффициентом диффузии. Поток частиц через поверхность, перпендикулярную оси x , может быть выражен уравнением

$$M_j = -D_d \frac{dC}{dx}. \quad (3.4.39)$$

Согласно второму закону Фика, производная концентрации аэрозоля по времени в некоторой точке пространства пропорциональна градиенту концентрации в этой точке:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = D_d \nabla^2 C. \quad (3.4.40)$$

Коэффициент пропорциональности – это коэффициент диффузии D_d . Оператор Лапласа ∇^2 может быть записан в декартовых координатах:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = D_d \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right).$$

Уравнения (3.4.39) и (3.4.40) с соответствующими граничными условиями позволяют найти решение любых аэрозольных задач, включающих диффузию.

Подведем итоги. Выполненные в данном разделе исследования показывают, что в рамках гидродинамического приближения задача броуновского блуждания частиц аэрозоля сводится к решению уравнения диффузии при соответствующих граничных условиях. В этом случае пропадают индивидуальные свойства отдельных частиц. Такое приближение может быть использовано для дисперсных систем, в которых не происходит изменение размера частиц.

3.5. КОАГУЛЯЦИЯ ЧАСТИЦ

В предыдущих главах в основном обсуждались свойства отдельных аэрозольных частиц. При этом большей частью взаимодействие между частицами не учитывалось. Теперь рассмотрим коагуляцию (слипание или слияние) частиц, когда взаимодействием между частицами пренебречь нельзя. Легко заметить, что при высоких концентрациях аэрозоля отдельные частицы соединяются в большие цепочки или хлопья, которые состоят из многих частиц. Коагуляция осуществляется исключительно за счет случайных движений и последующих столкновений частиц (часто называемых тепловой коагуляцией). Столкновения могут быть вызваны также внешними воздействиями, такими, как турбулентность или электрические силы. В общем случае эти внешние воздействия будут способствовать увеличению скорости коагуляции. Изучению коагуляции

уделялось большое внимание, особенно в случае коллоидных растворов. К сожалению, так как система неустойчива и количество частиц и их размер изменяются во времени, вычислительные модели, при помощи которых можно рассчитать эти изменения в зависимости от времени, очень сложны и, следовательно, неудобны для использования. При введении упрощений эти типовые модели не дают требуемой точности. Во многих случаях с помощью упрощенных моделей можно с достаточной точностью рассчитать скорость коагуляции аэрозоля и изменение его концентрации, хотя при этом мало что можно сказать о результирующей кривой распределения частиц по размерам.

3.5.1. Особенности коагуляции аэрозолей

Равновесное распределение по размерам. Фридлендер и Ванг предположили, что коагулирующий аэрозоль со временем достигает установившегося распределения частиц по размерам, которое не зависит от первоначального распределения. Это распределение называется равновесным или квазистационарным распределением по размерам. Когда достигается такое состояние, прирост частиц данного размера уравнивается их потерями в результате коагуляции или осаждения. Для очень мелких частиц потери при осаждении незначительны, для очень больших частиц можно пренебречь потерями при коагуляции. Отсюда следует существование трех различных функций распределения для всего интервала размеров частиц.

Если нет источника частиц, то эти функции распределения в действительности квазистационарны. В пределе из системы будут удалены все частицы, что приведет к нулевой функции распределения. Спектральные кривые действительно стремятся к асимптотическому значению с течением времени. Это значение само зависит от времени и стремится к нулю. Квазистационарный спектр полностью устанавливается за время $\tau = 9\mu / (kTC_0)$. Кларк и Витби использовали теорию равновесного спектра Фридлендера, чтобы объяснить общий вид наблюдаемого распределения размеров атмосферных аэрозолей. Хотя образование такого распределения происходит медленно, в большинстве случаев имеется небольшая вероятность существования этой формы распределения. Возможно, что для некоторых глобальных аэрозолей квазистационарный спектр Фридлендера действительно имеет место.

Коагуляция несферических частиц. Ввиду соответствия (за исключением определения величин) уравнения диффузии, применимого к аэрозольным задачам, общему уравнению для электрических полей (уравнение Лапласа) для несферических частиц Мюллер постулировал, что должна существовать аналогия между электростатическими величинами и различными характеристиками коагуляции. Например, потенциал будет аналогом концентрации частиц, а напряженность поля – скорости коагуляции частиц. Зибель указал на то, что, поскольку напряженность поля высока в областях сильного искривления поверхностей носителей заряда, скорость коагуляции частиц также должна быть высокой в подобных местах на несферических частицах. Можно продолжить аналогию, предположив, что частицы с формой, отличной от сферической, будут способ-

ствовать увеличению коагуляции по сравнению с коагуляцией на больших сферических частицах. Однако, так как подвижность частиц также должна учитываться, меньшая подвижность частиц несферической формы будет способствовать снижению коагуляции. Поэтому приближение Мюллера следует использовать только для качественных оценок влияния формы частицы на скорость коагуляции. По-видимому, верно предположение, что осаждение частиц происходит преимущественно на острых выступах поверхностей частиц.

Ряд внешних физических факторов может приводить к увеличению или уменьшению скорости коагуляции аэрозоля. Эти факторы представляют собой электрические эффекты, такие как притяжение или взаимное отталкивание заряженных частиц, эффекты поляризации, приводящие к увеличению индуцированных сил, а также действие звука, силы тяжести или турбулентности.

Электрические эффекты при коагуляции. При коагуляции в электрических полях в результате диффузии частицы могут сблизиться до такого расстояния, что между ними начнут действовать электрические силы. Тогда их движение становится упорядоченным.

Скорость коагуляции в электрическом поле может возрастать или понижаться в зависимости от знака и величин зарядов на частицах. Отношение констант коагуляции для заряженных и незаряженных частиц впервые было рассчитано Фуксом; позднее этот вопрос был детально рассмотрен Фуксом и Зибелем. Для слабо заряженного биполярного аэрозоля увеличение коагуляции вследствие притяжения компенсируется уменьшением, вызванным отталкиванием. С другой стороны, для очень сильно заряженного биполярного аэрозоля возрастание коагуляции благодаря притяжению значительно превосходит ее уменьшение вследствие отталкивания, что приводит к суммарному увеличению скорости коагуляции.

Для униполярного аэрозоля необходимо рассматривать электростатическое отталкивание, которое приводит к удалению друг от друга одноименно заряженных частиц. Это отталкивание вызывает уменьшение концентрации аэрозоля, например вследствие осаждения частиц на стенки сосуда, содержащего аэрозоль, или на ближайшие поверхности, и, таким образом, может мешать изучению влияния электрических полей на коагуляцию. Хайди и Брок использовали модель Дебая–Хюккеля для анализа электростатических эффектов при коагуляции. Они показали, что, когда электростатическое отталкивание сильное, для биполярных аэрозолей константы коагуляции будут возрастать, тогда как высоко заряженные униполярные аэрозоли будут иметь уменьшенные константы коагуляции. Хайди и Брок предостерегают, что эти оценки являются приближенными, так как поляризация в электрическом поле может значительно изменить эффект зарядки при коагуляции. Фукс указал, что коагуляция туманов увеличивается только в очень сильных электрических полях (превосходящих 200 В/см). В результате поляризации твердых частиц в электрическом поле увеличивается образование структур в виде цепочек. Частицы, которые являются постоянными диполями, также образуют структуры в виде цепочек.

Подведем итоги. Приведенные в данном разделе результаты носят скорее общий описательный характер и не направлены на получение конкретных инженерных методик расчета. Их знание позволяет правильно ориентироваться

в большом многообразии вопросов, связанных с коагуляцией аэрозолей. Для получения более обширной информации читателю следует воспользоваться специальной литературой.

3.5.2. Коагуляция монодисперсных сферических частиц. Приближение Смолуховского

Наиболее простой вид коагуляции – это тепловая коагуляция монодисперсных сферических частиц. Так как рассматриваются только первые несколько актов столкновения частиц, размер образовавшихся частиц не будет ощутимо отличаться от размера исходных частиц. Эта модель уже много лет используется для твердых частиц и может служить основой для определения константы коагуляции. В частности, она особенно подходит для описания коагуляции капель жидкости, так как размер капель после слияния возрастает пропорционально кубическому корню из количества капель, ее составляющих. Это приближение было впервые предложено Смолуховским для коагуляции в разбавленных электролитах, но оно может также использоваться для аэрозолей в пределах ограничений, рассмотренных выше. В приближении Смолуховского предполагается, что в системе сферических частиц диаметром $2R$ расстояния между частицами хаотически распределены при $\tau=0$. Если частицы перемещаются также хаотически путем тепловой диффузии, то необходимо знать вероятность их столкновения (а также вероятность смыкания) в течение некоторого времени. Смолуховский первым рассмотрел случай, когда одна частица, фиксированная в пространстве, является центром коагуляции для других частиц. Он определил скорость диффузии других частиц к этой центральной частице. Уравнение нестационарной диффузии имеет вид

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = D_d \nabla^2 C, \quad (3.5.1)$$

где C – концентрация частиц и D_d – коэффициент их диффузии. Если r – расстояние от центра фиксированной частицы, то, предполагая сферическую симметрию системы, уравнение (3.5.1) можно записать в виде

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = D_d \left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right) \quad (3.5.2)$$

или в более удобной форме:

$$\frac{\partial (Cr)}{\partial \tau} = D_d \frac{\partial^2 (Cr)}{\partial r^2}. \quad (3.5.3)$$

Так как частицы имеют один и тот же размер, можно предположить, что они будут сталкиваться с центральной частицей, когда проходят в пределах расстояния $2R$ от нее. В этой точке концентрация будет равна нулю, т. е. $C'=0$ при $r+2R$ (для $\tau>0$). Кроме того, первоначально предполагалось, что частицы равномерно распределены по всему объему с концентрацией C . Так, при $\tau=0$ $C'=C$. В этих условиях уравнение (3.5.3) можно представить как

$$C' = C \left[1 - \frac{2R}{r} + \frac{2R}{r} \operatorname{erf} \left(\frac{r-2R}{2\sqrt{D_d \tau}} \right) \right]. \quad (3.5.4)$$

Число частиц \bar{N} , которые диффундируют в пределах расстояния $2R$ от центральной фиксированной частицы в единицу времени, равно произведению диффузионного потока на площадь поверхности сферы радиусом $2R$. Диффузионный поток определяется из уравнения

$$J = -D_d(\partial C'/\partial r), \quad (3.5.5)$$

где производную $\partial C'/\partial r$ надо оценить при $r = 2R$. Отсюда

$$\bar{N} = 16\pi R^2 D_d \frac{\partial C'}{\partial r}. \quad (3.5.6)$$

При $r = 2R$ и из уравнения (3.5.4) получим

$$\frac{\partial C'}{\partial r} = \frac{C}{2R} \left[1 + \frac{2R}{\sqrt{\pi D_d \tau}} \right]. \quad (3.5.7)$$

Тогда число частиц, которые достигают поверхности, окружающей центральную частицу, за время $d\tau$, составляет

$$\bar{N} d\tau = 8\pi R D_d C \left[1 + \frac{2R}{\sqrt{\pi D_d \tau}} \right] d\tau. \quad (3.5.8)$$

Теперь предположим, что фиксированная частица может диффундировать так же, как другие частицы. Диффузию тоже следует учесть. Общий коэффициент диффузии двух частиц относительно друг друга равен сумме коэффициентов диффузии отдельных частиц, так чтодвигающаяся частица

$$16\pi R D C \left[1 + \frac{2R}{\sqrt{\pi D \tau}} \right] d\tau$$

сталкивается с частицами в интервале $d\tau$, поскольку уравнение (3.5.8) применимо для одинаковых размеров. В единице объема будет происходить $C/2$ столкновений, если C – число частиц в единице объема и в каждом столкновении участвуют две частицы. Число столкновений в единице объема, которые происходят за время $d\tau$, описывается уравнением

$$\frac{dC}{d\tau} = -\frac{16}{2} \pi R D C^2 \left[1 + \frac{2R}{\sqrt{\pi D_d \tau}} \right]. \quad (3.5.9)$$

Второй член в скобках можно не учитывать, так как он будет гораздо меньше единицы, если τ достаточно велико. Фукс показал, что $2R/\sqrt{\pi D_d} = \xi$ – вероятность того, что частица первоначально находится вблизи фиксированной частицы и стремится к нулю по мере того, как стационарная скорость увеличивается. Так как для практических условий ξ очень мало, этой величиной пренебрегают. В некоторых условиях ξ надо учитывать. Этот член приводит к увеличению скорости коагуляции. Определяя константу коагуляции K_0 как

$$K_0 = 16\pi R D_d = \frac{8}{3} \frac{kT}{\mu_c} \zeta_c, \quad (3.5.10)$$

получаем результаты, которые по крайней мере для крупных частиц не будут зависеть от размера частиц.

Используя K_0 как константу коагуляции и пренебрегая вторым членом в уравнении (3.5.9), получаем обычную форму уравнения коагуляции

$$\frac{dC}{d\tau} = -\frac{K_0}{2} C^2. \quad (3.5.11)$$

Интегрируя уравнение (3.5.11) при начальном условии $C = C_0$, когда $\tau = 0$, находим

$$1/C - 1/C_0 = K_0 \tau / 2. \quad (3.5.12)$$

Уравнение (3.5.12) показывает, что обратная величина концентрации частиц является линейной функцией времени, причем наклон прямой дает константу коагуляции. Если τ^* определяется как время, за которое концентрация уменьшается в два раза, то

$$C = C_0 / (1 + \tau / \tau^*). \quad (3.5.13)$$

Выражение (3.5.13) может быть непосредственно применено для обработки экспериментальных данных по коагуляции.

Для коагуляции частиц двух различных размеров можно использовать то же приближение, что и в случае монодисперсного аэрозоля, за исключением замены $2R$ на $R_1 + R_2$ и $2D_d$ на $D_{d1} + D_{d2}$. Тогда константа коагуляции

$$K_{12} = 4\pi(R_1 + R_2)(D_{d1} + D_{d2}). \quad (3.5.14)$$

Выражение для константы коагуляции через подвижности частиц имеет вид

$$K_{12} = 4\pi(R_1 + R_2)(B_1 + B_2)kT. \quad (3.5.15)$$

Здесь $B = D_d / (kT) = \zeta_c / (6\pi\eta R)$ – подвижность частицы. Константа коагуляции имеет минимальное значение в случае частиц равных размеров. Это можно видеть на рис. 3.5.1, где показана пространственная диаграмма матриц констант коагуляции. Долина на диаграмме соответствует константам коагуляции для частиц равных размеров.

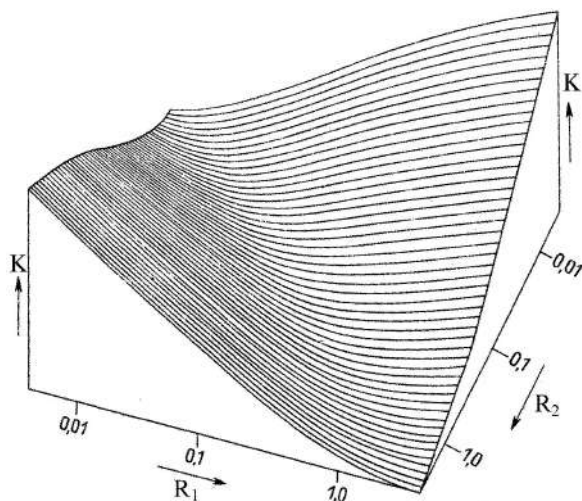


Рис. 3.5.1. Диаграмма констант коагуляции, симметричная относительно размеров частиц. Минимальное значение $4,4 \cdot 10^{-10} \text{ см}^3/\text{с}$. Максимальное значение $1,28 \cdot 10^{-5} \text{ см}^3/\text{с}$

Коагуляция полидисперсных частиц. Если надо знать изменение только концентрации частиц $dC/d\tau$, то константы коагуляции возможно объединить в одну, которая будет выражаться через средние величины $\langle R \rangle$, $\langle 1/R \rangle$ и $\langle 1/R^2 \rangle$:

$$K^* = \frac{4kT}{3\mu_c} [1 + \langle R \rangle \langle 1/R \rangle + Al_d \langle 1/R \rangle + Al_d \langle R \rangle \langle 1/R^2 \rangle]. \quad (3.5.16)$$

Здесь A – поправка Каннингема, равная 1,26, и l_d – свободный средний путь частицы в газе. Константу K^* можно использовать так же, как K_0 в уравнении (3.5.11). Если первоначально размеры частиц подчиняются логарифмически-нормальному распределению, то выражение (3.5.16) можно записать через средний геометрический диаметр $2R_g$ и стандартное геометрическое отклонение σ_g :

$$K^* = \frac{4kT}{3\mu_c} \left[1 + \exp\{\ln^2 \sigma_g\} + \frac{Al_d}{R_g} \exp\left\{\frac{1}{2} \ln^2 \sigma_g\right\} + \frac{Al_d}{R_g} \exp\left\{\frac{5}{2} \ln^2 \sigma_g\right\} \right]. \quad (3.5.17)$$

С возрастанием полидисперсности константа коагуляции K^* может стать довольно большой, поскольку предельные значения размеров частиц быстро возрастают вследствие соединения частиц, особенно меньших размеров. Очевидно, что скорость коагуляции для полидисперсного аэрозоля больше, чем для монодисперсного. Однако коагуляция монодисперсного аэрозоля вначале приводит к увеличению полидисперсности, так что для любого коагулирующего аэрозоля константа коагуляции не постоянна, а зависит от скорости коагуляции. Неудивительно, что интерпретация данных по коагуляции трудна, но поражает тот факт, что изложенная здесь простая теория коагуляции пригодна для описания многих случаев.

Уточнение константы коагуляции. Экспериментальное значение константы коагуляции может быть заметно выше теоретического. По всей видимости, это связано с тем, что приведенные рассуждения правомерны в том случае, если аэрозольные частицы равномерно распределены по объему. Как было показано во второй главе, в любой дисперсной системе имеются флуктуации распределения числа частиц по объему. При этом равномерность распределения зависит от общего числа частиц в системе N_0 , их размера V_0 , размера контрольного объема V_k и общего объема системы V , который может быть принят равным единице. Пусть N – максимально возможное число аэрозольных частиц, которое можно разместить в системе, и N_c – среднее число частиц, которое может находиться в контрольном объеме. Между N_c и средней концентрацией аэрозольных частиц $\langle C \rangle$ существует следующая связь:

$$N_c = V_k \langle C \rangle = \alpha V \langle C \rangle. \quad (3.5.18)$$

В свою очередь, локальное значение числа частиц в контрольном объеме связано с их локальной концентрацией:

$$n = V_k C = \alpha V C. \quad (3.5.19)$$

По определению $\langle C \rangle = N_0/V$, с другой стороны, $V = NV_0$, следовательно,

$$N_0/N = \langle C \rangle V_0. \quad (3.5.20)$$

Тогда применительно к задаче коагуляции можно записать следующее выражение для вероятности распределения числа частиц по отдельным элементам системы, размер которых равен контрольному объему:

$$p(C) = \frac{1}{\langle C \rangle \sigma \sqrt{2\pi}} \exp \left\{ - \left[\frac{C - \langle C \rangle}{\langle C \rangle \sqrt{2\pi}} \right]^2 \right\}, \quad (3.5.21)$$

где σ – дисперсия:

$$\sigma = \frac{1}{\sqrt{2\pi e}} (V_0 \langle C \rangle)^{n_d} \ln(V_0 \langle C \rangle)^{n_d}, \quad (3.5.22)$$

$$n_d = \frac{3}{\ln(V/V_0)} - \frac{3}{\ln(V_k/V_0)}. \quad (3.5.23)$$

Наша задача состоит в том, чтобы оценить как неравномерность распределения аэрозольных частиц по объему дисперсной системы может повлиять на суммарную скорость коагуляции. Для этого нужно рассчитать эту скорость в каждом контрольном объеме с учетом возможной в нем концентрации частиц. Всего таких контрольных объемов $N_k = V/V_k$. Из них в $N_k p(C)$ контрольном объеме концентрация аэрозольных частиц равна C , и соответствующая ей скорость коагуляции определится следующим образом:

$$\eta = \frac{dC}{d\tau} = -\frac{K_0}{2} (C)^2 = \eta_o \left(\frac{C}{\langle C \rangle} \right)^2,$$

где η_o – скорость коагуляции, соответствующая средней концентрации $\langle C \rangle$. Тогда можно рассчитать некоторый коэффициент, равный отношению средней скорости коагуляции к скорости коагуляции при средней концентрации:

$$\bar{\eta} = \frac{\eta}{\eta_o} = \int_0^\infty \left(\frac{C}{\langle C \rangle} \right)^2 p(C) dC. \quad (3.5.24)$$

Фактически $\bar{\eta}$ является поправкой константы скорости коагуляции в уравнении (3.5.11):

$$\frac{d\langle C \rangle}{d\tau} = -\frac{K_0}{2} \bar{\eta} \langle C \rangle^2. \quad (3.5.25)$$

Для того чтобы воспользоваться предложенной моделью, нужно задать величину контрольного объема или некоторый линейный масштаб. Примем в качестве такого масштаба псевдосредний свободный путь аэрозольной частицы (3.4.31) $l_B = \tau_0 w = \tau_0 \sqrt{8kT/(\pi m_d)}$, который для частицы диаметром 0,01 мкм составит 0,032 мкм. Как показали расчеты, l_B значительно меньше, чем это необходимо для получения физически правильных результатов. При проведении расчетов величина линейного масштаба была принята равной $L = 0,000775$ м, что соответствует контрольному объему $V_k \approx 2 \cdot 10^{-9}$ м³. Изучалась коагуляция аэрозольных частиц воды в воздухе при температуре 20°C. Расчеты проводились при следующих значениях физических параметров: $\rho_d = 1000$ кг/м³, $\rho_c = 1,2$ кг/м³, $\mu_c = 1,2 \cdot 10^{-5}$ н/м², для частиц размером $R = 10^{-9} - 10^{-7}$ м. При малых размерах аэрозольных частиц поправка очень мало отличается от единицы (рис. 3.5.2). Для частиц большего размера расчеты не проводились, поскольку

для них применимость рассматриваемого механизма коагуляции аэрозоля требует специального обоснования. При течении в диффузоре аэрозоля с частицами больших размеров силы инерции преобладают над диффузией Броуна и траектории движения частиц становятся упорядоченными.

Поправка константы скорости коагуляции зависит от концентрации аэрозольных частиц в воздухе (рис. 3.5.2). При концентрации аэрозольных частиц в воздухе, равной 1 г/м^3 , поправка близка к единице и с увеличением размера частиц при малых концентрациях 1 мг/м^3 становится значительной.

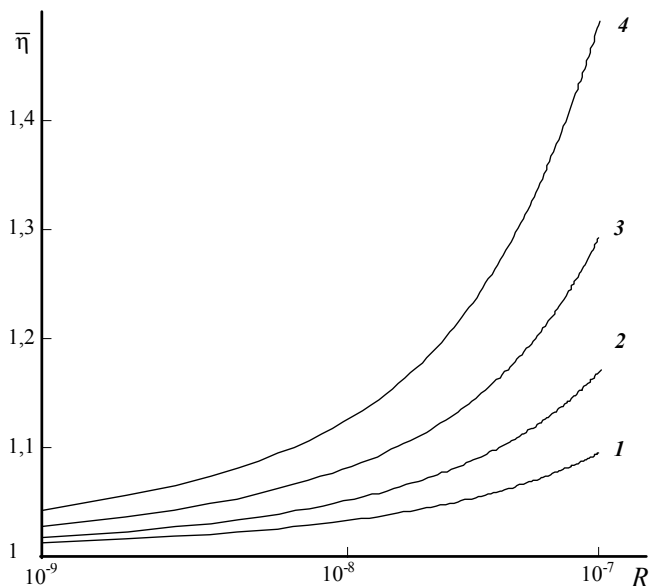


Рис. 3.5.2. Зависимость поправки константы скорости коагуляции от размера аэрозольных частиц при различной их концентрации:
1 – 1 г/м^3 ; 2 – $0,1 \text{ г/м}^3$; 3 – $0,01 \text{ г/м}^3$; 4 – 1 мг/м^3 .

Подведем итоги. Предложенная в данном разделе поправка к приближению Смолуховского учитывает наличие флуктуаций числа частиц в дисперсной системе и впервые позволяет теоретически обосновать влияние на скорость коагуляции размера и средней концентрации аэрозольных частиц. Применимость полученных результатов к коагуляции коллоидных частиц требует специального обоснования. Дальнейшие исследования должны быть направлены на обоснование выбора линейного масштаба.

3.5.3. Коагуляция в движущейся среде

Особенности коагуляции в движущейся среде. Выше рассматривалось только броуновское движение. Коагуляция может также иметь место в быстродвижущихся воздушных потоках, и следует ожидать, что при движении частиц коагуляция будет увеличиваться. Имеются два типа такого движения. Во-первых, может существовать упорядоченный поток, в котором частицы дви-

жуются в одном направлении с различными скоростями, как, например, при осаждении полидисперсного аэрозоля под действием силы тяжести при неизменных условиях течения. Во-вторых, движение может быть неупорядоченным, как, например, в случае турбулентного смешивания.

Сначала рассмотрим случай коагуляции при упорядоченном движении, когда крупная частица движется через облако гораздо более мелких частиц. Как уменьшится концентрация мелких частиц при воздействии крупной? Допуская, что скорость упорядоченного движения мелких частиц много меньше скорости крупной частицы, можно считать, что крупная частица в единицу времени захватывает все мелкие частицы, заключенные в объеме $\pi R_2^2 w_0(R_2)$. Член R_2 – размер крупной частицы и $w_0(R_2)$ – установившаяся скорость падения одиночной частицы. Однако некоторые мелкие частицы могут перемещаться с потоком в сторону от передней части крупной частицы при ее обтекании. Вследствие этого только некоторая доля находящихся в объеме частиц будет уловлена крупной частицей. При рассмотрении течения вокруг крупной частицы предполагается, что она имеет форму сферы. Зная эту долю ϵ , называемую эффективностью или коэффициентом захвата, можно найти количество мелких частиц N , уловленных крупной частицей в единицу времени $N = \pi \epsilon R_2^2 w_L C$, где C – число мелких частиц в единице объема.

Для частиц примерно равного размера прогнозирование поля течения чрезвычайно затруднено, потому что должны рассматриваться комбинированные потоки обеих частиц. Как указывалось выше, эти поля течения будут изменяться по мере сближения частиц, а также если меняются числа Рейнольдса и относительные размеры частиц. Попытка моделирования этой ситуации для вязкого потока была сделана Хокингом, который пришел к заключению, что столкновения между частицами приблизительно одинаковых размеров не надо учитывать для частиц диаметром меньше чем 36 мкм. Небольшое взаимное влияние все же существует.

Коагуляция частиц может встречаться в таком упорядоченном потоке, какой возникает в акустическом поле. Коагуляция частиц происходит вследствие различия в скоростях движения частиц разных размеров, аэродинамических сил притяжения между частицами и радиационного давления, которое перемещает частицы к пучностям волн. Полной теории акустической коагуляции до сих пор не создано.

Для коагуляции, вызванной турбулентностью потока, следует рассмотреть два случая. Во-первых, если импульс частиц аэрозоля приблизительно такой же, как у среды, они будут двигаться примерно с такой же скоростью, как и участки воздуха, окружающие их. В этом случае движение частиц можно описать с помощью коэффициента турбулентной диффузии D_T . Этот коэффициент может иметь значение в 10^4 – 10^6 раз больше, чем коэффициенты тепловой диффузии. Процессы коагуляции, вызванной турбулентностью потока, могут рассматриваться как обычная коагуляция, но с использованием больших коэффициентов диффузии.

Второй случай коагуляции частиц аэрозоля в турбулентном потоке характеризуется возникновением инерционных различий между частицами разных

размеров. Вследствие турбулентности частицы ускоряются до различных скоростей, зависящих от размера, и могут затем сталкиваться друг с другом. Для монодисперсного аэрозоля этот механизм не имеет значения. Для полидисперсного аэрозоля с известным распределением по размерам скорость коагуляции пропорциональна основной скорости турбулентного потока в степени $9/4$, т. е. скорость коагуляции возрастает очень быстро с увеличением скорости турбулентного потока. Так как очень мелкие частицы быстро ускоряются, значение этого механизма уменьшается с уменьшением размера частиц, причем он является наиболее важным для частиц, чьи диаметры составляют 10^{-5} – 10^{-4} см. Когда диаметры частиц меньше 10^{-6} см, преобладает диффузия Броуна, что подтверждают проведенные нами расчеты в предыдущей главе.

Коэффициент захвата. Пусть две сферические частицы (капли) соизмеримых размеров движутся в невозмущенной среде под действием сил тяжести. Радиусы этих частиц обозначим R_1 и R_2 и положим, что $R_1 \leq R_2$. Радиус малой частицы считаем настолько большим, чтобы можно было пренебречь ее броуновским блужданием. Если бы взаимное влияние гидродинамических полей частиц не сказывалось на их движении в среде, то с большой каплей сталкивались бы малые капли, находящиеся ниже ее в цилиндре радиусом $R_1 + R_2$. Выражение для константы коагуляции при этом имело бы следующий вид:

$$K_{1,2} = \pi(R_1 + R_2)^2[w_0(R_2) - w_0(R_1)]. \quad (3.5.26)$$

Однако взаимное влияние гидродинамических полей частиц и возможное взаимодействие между ними приводят к искривлению их траекторий в поле сил тяжести. В общем случае

$$K_{1,2} = \pi(R_1 + R_2)^2[w_0(R_2) - w_0(R_1)]\varepsilon(R_1, R_2). \quad (3.5.27)$$

Величина $\varepsilon(R_1, R_2)$, называемая коэффициентом захвата, характеризует отклонение размера сечения захвата от его геометрического значения, которое вызвано взаимным искривлением траекторий частиц.

Не каждое столкновение может привести к слиянию капель, и более логично величину ε назвать коэффициентом столкновений (соударений). В связи с широким распространением в отечественной и зарубежной литературе именно термина *коэффициент захвата* мы не считаем целесообразным его переименование. Повсюду при теоретическом анализе речь идет только о столкновениях, а не о слипании (коагуляции) частиц, что, конечно, не одно и то же. Исследования вероятности слипания частиц после их столкновения проведено пока мало, определенной ясности в этом вопросе нет. Можно только отметить, что, по-видимому, в большинстве ситуаций, реализующихся при эволюции дисперсных систем, вероятность слипания частиц близка к единице.

Предположим, что размеры капель существенно различны: $R_1 \ll R_2$. Тогда можно считать, что малая частица движется просто в гидродинамическом поле большой, причем при определении силы сопротивления среды ее движению неоднородностью этого поля можно с достаточной точностью пренебречь. Если расстояние между поверхностями капель в несколько раз больше R_1 , то можно также пренебречь силами гидродинамического взаимодействия движущейся

сферы с неподвижной плоской стенкой. Эти предположения позволяют уравнение движения малой частицы представить в виде

$$k_c \frac{d\vec{w}}{d\tau} = (\vec{v} - \vec{w})[1 + \zeta_c(\text{Re}^* |\vec{v} - \vec{w}|)], \quad \vec{w} \rightarrow \vec{e} \quad \text{при} \quad \tau \rightarrow -\infty, \quad (3.5.28)$$

$$k_c = \frac{2}{9} \frac{\rho_d R_1^2}{\mu_c R_2} w_0(R_2), \quad \text{Re}^* = \frac{R_1 \rho_c w_0(R_2)}{\mu_c}.$$

Здесь \vec{e} – единичный вектор, направленный параллельно оси абсцисс (по вертикали вверх); k_c – число Стокса (параметр инерционного столкновения); $w_0(R_2)\vec{v}$ – вектор гидродинамического поля большой частицы в системе координат, жестко связанной с ней.

Распространяя формально приведенное уравнение движения малой частицы вплоть до физического контакта обеих частиц, мы приходим к задаче чисто инерционного осаждения, подробно исследованной в [3]. Коэффициент захвата при этом вычисляется следующим образом. Выберем цилиндрическую систему координат с центром, расположенным в центре большой капли, и радиальной координатой y , перпендикулярной к направлению ее падения. Пусть $y \rightarrow y_\infty$ при $\tau \rightarrow -\infty$. Тогда существует такое y_0 , что при всех $y_\infty \leq y_0$ малая капля столкнется с большой каплей, а при $y_\infty > y_0$ обойдет ее. Определив y_0 , коэффициент захвата можно вычислить по формуле

$$\varepsilon = y_0^2 / R_2^2. \quad (3.5.29)$$

При расчете коэффициента захвата в приближении чисто инерционного осаждения возможны две модели поля скоростей среды. Для малых чисел Рейнольдса ($\text{Re} = R_2 \rho_c w_0(R_0) / \mu_c$) – ползущее поле скоростей Стокса, для больших чисел Рейнольдса – безотрывное потенциальное. Модель ползущего обтекания не может привести к правильной асимптотике при $k_c \rightarrow \infty$. Модель безотрывного потенциального обтекания приводит к несколько завышенным результатам для коэффициента захвата во всем диапазоне значений k_c .

Для расчета $\text{Re}^* \ll 1$ предложены следующие формулы, полученные путем аппроксимации:

$$\varepsilon \approx \begin{cases} \frac{k_c^2}{(k_c + 0,5)^2} & \text{при } k_c > 1/12 \text{ и } \text{Re} \gg 1, \\ \left(1 + \frac{3}{4} \frac{\ln 2k_c}{k_c - 1,214}\right)^{-2} & \text{при } k_c > 1,214 \text{ и } \text{Re} \ll 1. \end{cases} \quad (3.5.30)$$

Расхождение результатов численных расчетов получилось небольшое, поэтому при анализе инерционной коагуляции частиц разных размеров с достаточной точностью можно использовать довольно простые формулы (3.5.30), конечно, в пределах их применимости. Для средних чисел Re рекомендуется использовать интерполяционную формулу:

$$\varepsilon \approx \frac{1}{1 + \text{Re}/30} \left[\left(1 + \frac{3}{4} \frac{\ln 2k_c}{k_c - 1,214}\right)^{-2} + \frac{k_c^2}{(k_c + 0,5)^2} \frac{\text{Re}}{30} \right]. \quad (3.5.31)$$

Точность этой формулы была подвергнута тщательному анализу. Для поля скоростей были взяты данные, полученные путем численного расчета уравнений Навье–Стокса. Оказалось, что при средних значениях k_c и $1 \leq Re \leq 10$ формула (3.5.31) приводит к слишком заниженным результатам. Поэтому при практических расчетах гравитационной коагуляции капель разных размеров мы рекомендуем использовать интерполяцию по данным, приведенным на рис. 3.5.3, где расчеты проводились по следующим методикам: *I* – $Re=0$; *II* – $Re=2,5$; *III* – $Re=20$; *IV* – модель безотрывного потенциального обтекания.

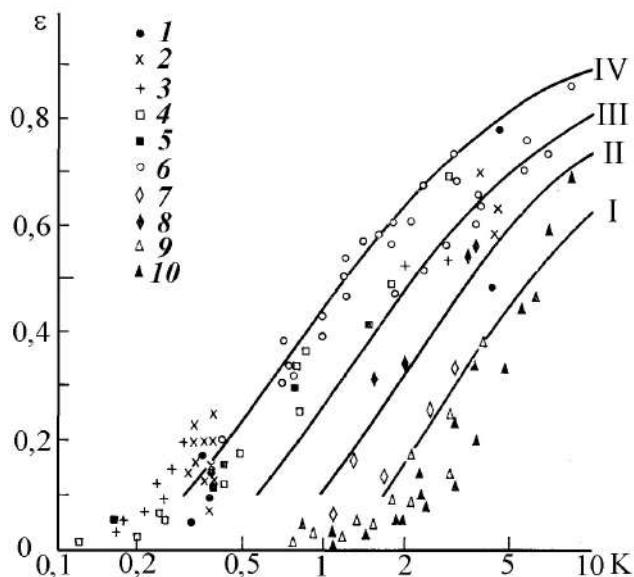


Рис. 3.5.3. Зависимость коэффициента захвата от k при различных числах Рейнольдса

Расчеты коэффициента захвата были проведены при формальном распространении уравнения движения малой частицы (3.5.28) вплоть до ее физического контакта с поверхностью большой капли (точнее, вплоть до касания центра малой частицы с поверхностью большой). Законность такой операции далеко не очевидна хотя бы по следующим соображениям. С одной стороны, само понятие физического контакта двух дисперсных частиц требует дополнительного уточнения. Более естественным было бы предположение о его существовании, когда поверхность малой частицы (а не ее центр!) коснулась поверхности большой капли. Такое определение захвата введено Н. А. Фуксом.

А еще более точным в рассматриваемой задаче было бы считать, что частицы *столкнулись*, если их поверхности сблизилась на расстояние, на котором уже становится эффективным действие молекулярных сил притяжения или любых других сил притяжения негидродинамической природы. С другой стороны, на малых расстояниях между поверхностями капель начинают действовать не учтенные в (3.5.28) силы гидродинамического взаимодействия (в гидродинами-

ческом приближении неограниченно возрастающие при уменьшении зазора между поверхностями капель). При малых числах Рейнольдса эти силы заведомо препятствуют сближению капель.

Подведем итоги. Выполненный анализ большого числа теоретических и экспериментальных исследований показывает, что наше незнание коагуляции мы стремимся свести к определению коэффициента захвата, и совсем не принимается во внимание правильность определения разности скоростей двух коагулирующих частиц, т. е. не учитывается возможность случайной пульсации этих скоростей, что может иметь большое значение для аэрозолей.

3.5.4. Дифференциальное уравнение коагуляции

Предположим, что аэрозоль вначале состоит из частиц с размерами $1, 2, \dots, m$. Изменение концентрации частиц размера i происходит не только из-за уменьшения количества частиц этой группы при соединении их с другими частицами, но и вследствие увеличения количества частиц этой группы в результате соединения более мелких. Это может быть записано как

$$\Delta N_i = \Delta N_i^+ - \Delta N_i^- ,$$

где ΔN_i – изменение количества частиц i -го размера; ΔN_i^+ – увеличение за счет меньших частиц, достигших i -го размера; ΔN_i^- – уменьшение количества частиц i -го размера вследствие соединения их с другими частицами, или, более подробно:

$$\frac{dC_i}{d\tau} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} K_{j(i-j)} C_j C_{(i-j)} - \sum_{j=1}^{\infty} K_{ij} C_i C_j . \quad (3.5.32)$$

Пусть данный аэрозоль состоит из частиц дискретных размеров R_1, R_2, \dots, R_m . Напишем уравнение, выражающее изменение концентрации частиц размера R_4 во времени, если из интервала этого размера не потеряно ни одной частицы. При наличии частиц данного размера второй член уравнения (3.5.32) равен нулю. Тогда

$$\frac{dC_4}{d\tau} = \frac{1}{2} [K_{13} C_1 C_3 + K_{22} C_2 C_2] .$$

Общее изменение частиц всех размеров равно сумме изменений количества частиц отдельных размеров, что можно записать как

$$\frac{dN}{d\tau} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} K_{ij} C_i C_j . \quad (3.5.33)$$

Правая часть (3.5.33) равна половине второго члена в правой части (3.5.32), так как увеличения общего числа частиц во время коагуляции не происходит. В уравнении (3.5.33) нет источников или стоков для коагулирующих частиц.

В уравнении (3.5.32) скорости коагуляции частиц различных размеров образуют систему обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений. Поскольку происходит коагуляция, количество уравнений, требуемых для описания распределения совокупности размеров аэрозоля, может составить 1000 и более. Например, для определения изменений в распределении размеров для

нескольких прошедших коагуляцию монодисперсных и полидисперсных аэрозолей решали систему из 600 уравнений, и даже тогда имелись примеры, когда материал был *потерян*, так как некоторое количество частиц коагулировало до размеров, больших, чем наибольший учитывавшийся размер. Эти *потери* в процессе коагуляции ограничивали скорость численных решений.

В уравнении (3.5.32) лучше использовать объем частицы, чем ее диаметр, потому что объемы аддитивны в отличие от диаметров. Иначе говоря, это уравнение аналогично системе обыкновенных дифференциальных уравнений: в одном случае используется дискретная модель, в другом – непрерывная.

Нелинейное интегрально-дифференциальное уравнение. Для того чтобы обойти проблему многих уравнений, можно представить уравнение коагуляции как нелинейное интегрально-дифференциальное уравнение:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(V, \tau)}{\partial \tau} = & \frac{1}{2} \int_0^{V_2} K(V_1, V - V_1) C(V_1, \tau) C(V - V_1, \tau) dV_1 - \\ & - \int_0^{\infty} K(V_1, V) C(V_1, \tau) C(V, \tau) dV_1. \end{aligned} \quad (3.5.34)$$

Первый член в уравнении (3.5.34) представляет увеличение числа частиц в интервале объемов $V, V + dV$ в результате комбинации частиц объемом V_1 и $V - V_1$. Член $C(V_1, \tau)$ представляет количество частиц объемом V_1 в момент времени τ , $C(V - V_1, \tau)$ – количество частиц объемом $V - V_1$ в момент времени τ ; член $K(V_1, V - V_1)$ есть константа коагуляции частиц объемом V_1 и $V - V_1$. Второй член этого уравнения представляет уменьшение числа частиц в интервале объемов $V, V + dV$ в результате коагуляции частиц объемом V и V_1 . Член $K(V_1, V)$ – комбинированная константа коагуляции для этих частиц. Таким образом, уравнение (3.5.34) описывает суммарную скорость изменения числа частиц, объемы которых лежат в интервале $V, V + dV$. Решение уравнения с соответствующими начальными условиями дает количество частиц с объемом в интервале $V, V + dV$ в момент времени τ .

Для определения общего количества частиц в единице объема необходимо проинтегрировать по всем объемам частиц:

$$N(\tau) = \int_0^{\infty} C(V, \tau) dV.$$

Тогда изменение общего количества частиц во времени равно

$$\frac{dN(\tau)}{d\tau} = -\frac{1}{2} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} K(V, V_1) C(V, \tau) C(V_1, \tau) dV dV_1.$$

В случае постоянного K и однородного по размеру аэрозоля данное уравнение сводится к (3.5.32).

Вернемся к модели коагуляции в виде системы дифференциальных уравнений (3.5.32). Примем, что число возможных значений размеров частиц конечно

и равно k и переход из одного состояния в другое система осуществляет за время $\Delta\tau$. Тогда

$$\Delta C_i = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} K_{j(i-j)} C_j C_{(i-j)} \Delta\tau - \sum_{j=1}^k K_{ij} C_i C_j \Delta\tau, \quad i=1,2,\dots,k,$$

или

$$\begin{aligned} C_i(n+1) &= C_i(n) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} K_{j(i-j)} C_j(n) C_{i-j}(n) \Delta\tau - \sum_{j=1}^k K_{ij} C_i(n) C_j(n) \Delta\tau = \\ &= C_i(n) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} p_{j(i-j)} C_j(n) - \sum_{j=1}^k p_{ij} C_i(n). \end{aligned}$$

Окончательно получим уравнение, аналогичное основному рекуррентному соотношению для процесса Маркова:

$$C_i(n+1) = C_i(n) \left[1 - \sum_{j=1}^{\infty} p_{ij} \right] + \sum_{j=1}^{i-1} p_{j(i-j)} C_j(n), \quad i=1,2,\dots,k.$$

При этом приняты следующие допущения:

– $p_{ij} = K_{ij} C_j(n) \Delta\tau$ – вероятность перехода в результате коагуляции за время $\Delta\tau$ частиц из состояния i (размером V_i) в состояние j (в частицы размером V_j);

– $p_{j(i-j)} = K_{j(i-j)} C_{i-j}(n) \Delta\tau / 2$ – вероятность перехода в результате коагуляции за время $\Delta\tau$ частиц из состояния $i-j$ (размером V_{i-j}) в состояние j (в частицы размером V_j);

– $p_{ii} = 1 - \sum_{j=1}^k p_{ij}$ – вероятность остаться в i состоянии.

Подведем итоги. Сами по себе дифференциальные уравнения коагуляции ничем не отличаются от основного кинетического уравнения для описания эволюции дисперсной системы при наличии внешних воздействий. Его запись в виде цепи Маркова при известных значениях констант коагуляции имеет простое численное разрешение.

ГЛАВА. 4. ГИДРОДИНАМИКА ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ

4.1. ДИНАМИКА ЧАСТИЦ

4.1.1. Сопротивление среды

Предположим, что требуется представить течение среды вокруг сферы диаметром 1 мкм путем изучения течения вокруг сферы диаметром 1 см. Возникает вопрос: при каких условиях сфера диаметром 1 мкм, двигаясь в непрерывной среде, будет вести себя подобно сфере диаметром 1 см, движущейся в той же самой среде? При каких условиях геометрически подобная текущая среда существует вокруг геометрически подобных тел? Ответ, определяющий основной механизм движения среды, состоит в том, что в сходных участках текущей среды силы, действующие на элемент любого тела, должны находиться в определенном отношении друг к другу в любой момент времени.

Если считать среду несжимаемой и пренебречь силой тяжести, то основными силами, действующими в системе, будут инерционные силы, связанные с ускорением или замедлением небольших масс текущей среды вблизи тела, а также силы трения, возникающие благодаря вязкости среды. Эти силы подобны, если в любой момент находятся в одном и том же отношении:

$$\frac{\rho_c \frac{\bar{w}^2}{2R}}{\mu_c \frac{\bar{w}}{R^2}} = \frac{\rho_c \bar{w} 2R}{\mu_c}.$$

Это отношение дает число Рейнольдса (Re) – безразмерную величину, которая описывает характер течения вокруг тела. Число Рейнольдса можно также вывести из анализа размерностей, который представляет собой скорее аналитическое, чем интуитивное, приближение к определению условий подобия для потока текущей среды. В этом анализе практически не учитывается форма частицы. Путем комбинирования переменных в уравнении Навье–Стокса (относительная скорость частицы и среды, характерный размер частицы, плотность и вязкость текущей среды) получают безразмерное выражение.

Число Рейнольдса используется для описания типа изучаемого потока. При больших числах Рейнольдса инерционные силы будут гораздо больше, чем силы вязкости; при малых числах Рейнольдса ламинарный, или плавный, поток является результатом преобладания сил вязкости. В этом случае линии тока остаются непрерывными на больших расстояниях от движущегося тела, хотя возможно и слабое перемешивание потока. Когда инерционные силы преобладают, линейная структура потока нарушается. Такой поток называется турбулентным. При турбулентном потоке происходит быстрое случайное перемешивание слоев за движущимся телом, которое распространяется почти до его поверхности. При значениях числа Рейнольдса, промежуточных между значениями, соответствующими ламинарному и турбулентному потокам, в любой момент поток может быть ламинарным или турбулентным (промежуточный поток). Ламинар-

ный поток также известен как поток Стокса, или вязкий поток, а турбулентный поток иногда называют потенциальным.

Число Рейнольдса может использоваться, когда жидкость обтекает тело или течет внутри трубы. Переход от ламинарного течения к турбулентному происходит при различных числах Рейнольдса в этих двух случаях. Так как \bar{w} – относительная скорость среды и тела, число Рейнольдса описывает условия, когда либо тело движется через неподвижную среду, либо жидкость обтекает неподвижное тело. Различные типы течения представлены на рис. 4.1.1.

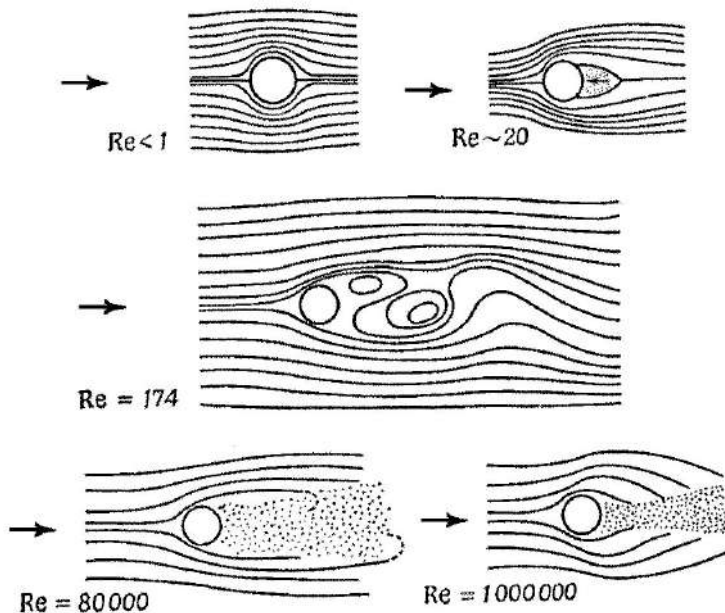


Рис. 4.1.1. Различные типы течения около шара

При числе Рейнольдса менее 1 имеет место ламинарный режим течения, когда поток газа плавно обтекает частицу без отрыва пограничного слоя. При числе Рейнольдса более 1 происходит отрыв пограничного потока и за тыльной стороной шара образуются два слабых вихря. Вследствие отрыва потока меняется характер течения – оно относится к переходной области.

При числах Рейнольдса более 100 картина течения становится нестационарной и вихри срываются поочередно. Область следа вытягивается, увеличиваясь в размерах, и формируется вихревая дорожка Кармана.

В интервале чисел Рейнольдса 10^3 – 10^5 при общем турбулентном режиме течения отрыв потока имеет ламинарный характер, хотя след является турбулентным. При числах Рейнольдса больше 10^5 течение в пограничном слое становится турбулентным, область следа значительно сокращается по сравнению со случаем отрыва ламинарного потока.

С изменением формы тела общая картина течения практически не меняется, хотя граничные значения чисел Рейнольдса меняются. Для плохо обтекаемых

тел турбулентный режим течения наступает быстрее, чем для хорошо обтекаемых тел. При движении газа в длинной трубе его поток будет турбулентным, если число Рейнольдса превышает значения, приведенные в табл. 4.1.1.

Таблица 4.1.1

Значения числа Рейнольдса для различных типов течения

Тип потока	Сфера, движущаяся в неподвижной жидкости	Жидкость, текущая в трубе
Ламинарный	$Re < 1$	$Re < 2100$
Переходный	$1 < Re < 1000$	$2100 < Re < 4000$
Турбулентный	$Re > 1000$	$Re > 4000$

Число Рейнольдса является фундаментальным параметром, характеризующим свойства текучей среды, в которой находятся аэрозоли. Уравнение, описывающее сопротивление среды движению частиц, зависит от типа потока (ламинарный, переходный или турбулентный) и от числа Рейнольдса.

Рассмотрим сопротивление, оказываемое средой движению частиц аэрозоля. Интерес к движению тела в среде возник давно, когда возникла необходимость знать траекторию полета пушечного ядра.

В этом случае можно использовать подход Ньютона. Предположим, что среда состоит из большого числа частиц, которые рассматриваются как материальные точки. Эти частицы покоятся и не связаны между собой. Движущееся в среде тело будет испытывать столкновения с заполняющими ее частицами и передавать им часть своего импульса. Масса частиц, действующих на тело за 1 с, есть $\rho_c w S_m$, где ρ_c – масса частиц в единице объема (плотность среды); S_m – площадь проекции тела на плоскость (миделево сечение), перпендикулярную вектору его скорости; w – скорость тела. При каждом столкновении частицы с телом ему сообщается некоторая скорость w_d , пропорциональная w . Так, изменение импульса тела за 1 с составляет $\rho_c w w_d S_m$. Скорость изменения импульса тела равна силе сопротивления (или просто сопротивлению) среды F_c :

$$F_c = \rho_c w w_d S_m = k \rho_c w^2 S_m, \quad (4.1.1)$$

где k – постоянная величина. Импульс, переданный среде, зависит от того, являются ли столкновения тела с газовыми молекулами упругими или неупругими. Характер столкновений учитывается постоянной k . Сделанные ранее оценки k не верны, так как учитывалась только площадь поперечного сечения тела, а не вся площадь поверхности. В зависимости от типа потока молекулы могут получать импульс от тела или сообщать импульс телу с его задней части. Края тела могут испытывать такое же воздействие молекул, и следует учитывать не только площадь проекции тела, а всю его поверхность.

Существуют три вида сопротивления среды, которые зависят от характера движения тела через среду. Деформационное, или вязкостное, сопротивление – сила, необходимая для деформации среды, чтобы тело могло проходить в ней. Эта деформация может происходить на больших расстояниях от тела впереди и сзади него. Второй вид сопротивления – сопротивление трения на поверхности тела. Третий вид сопротивления – сопротивление давления, обусловленное

сжатием среды. Два последних вида представляют так называемое *приповерхностное трение* тела. При малых числах Рейнольдса преобладает деформационное сопротивление. В этом случае сопротивление среды в первую очередь связано с площадью проекции тела на плоскость, перпендикулярную потоку жидкости. При больших числах Рейнольдса результаты подхода Ньютона согласуются с экспериментальными данными, даже если предположение о постоянстве параметра k неверно.

Обычно уравнение для сопротивления среды записывают как (4.1.1). Если используется сомножитель $w^2/2$ (подобный скоростному напору в уравнении Бернулли), то

$$F_c = \zeta_c \rho_c w^2 S_m / 2,$$

где постоянная ζ_c называется коэффициентом сопротивления среды. Для сферы радиусом R имеем $S_m = \pi R^2$. Тогда

$$F_c = \zeta_c \rho_c \pi R^2 w^2 / 2. \quad (4.1.2)$$

Первоначально считали, что для данных формы тела, его положения и относительной скорости ζ_c будет иметь постоянное значение. Однако коэффициент ζ_c не постоянен, и существуют случаи возникновения сопротивления течению, зависящего от числа Рейнольдса. Коэффициент сопротивления среды постоянен для данной формы и положения тела в потоке в тех случаях, когда полное сопротивление среды является преимущественно сопротивлением давления (большое число Рейнольдса). И этот коэффициент не постоянен, когда преобладает деформационное сопротивление (малое число Рейнольдса).

Если имеется сходство потоков вокруг тел сходной формы для случаев, когда сходно отношение сил у поверхности тел, то можно сказать, что это эквивалентно существованию подобия сил сопротивления, когда числа Рейнольдса двух тел тождественны. Тогда коэффициенты сопротивления среды для этих двух случаев тождественны, т. е. $\zeta_c(Re)$ (рис. 4.1.2). Данное утверждение верно для любых формы и положения тела.

Для оценки силы гидромеханического сопротивления частицы следует воспользоваться известными опытными зависимостями коэффициентов сопротивления тел различной формы $\zeta_c(Re)$, где Re рассчитывается по скорости набегающего потока. Так, на рис. 4.1.2 представлены графики коэффициентов сопротивления сферы продольно и поперечно обтекаемого цилиндра в зависимости от чисел Рейнольдса. При $Re < 10^2$ коэффициент ζ_c с ростом Re уменьшается весьма интенсивно (область I). В области II ($10^2 \leq Re \leq 3 \cdot 10^3$) темп снижения ζ_c замедляется, и на участке $3 \cdot 10^3 \div 2 \cdot 10^4$ коэффициент сопротивления сохраняется практически постоянным (область III). В конце этого участка ζ_c несколько возрастает и затем остается постоянным в интервале $2 \cdot 10^4 \leq Re \leq 2 \cdot 10^5$. Области III и IV могут быть объединены. Они характеризуют локальную автомодельность по числу Re . В узком интервале значений $Re = 2 \cdot 10^5 \div 4 \cdot 10^5$ ζ_c кризисным образом уменьшается (область V). При $Re > 4,5 \cdot 10^5$ отмечается некоторое возрастание ζ_c , после чего ζ_c меняется слабо.

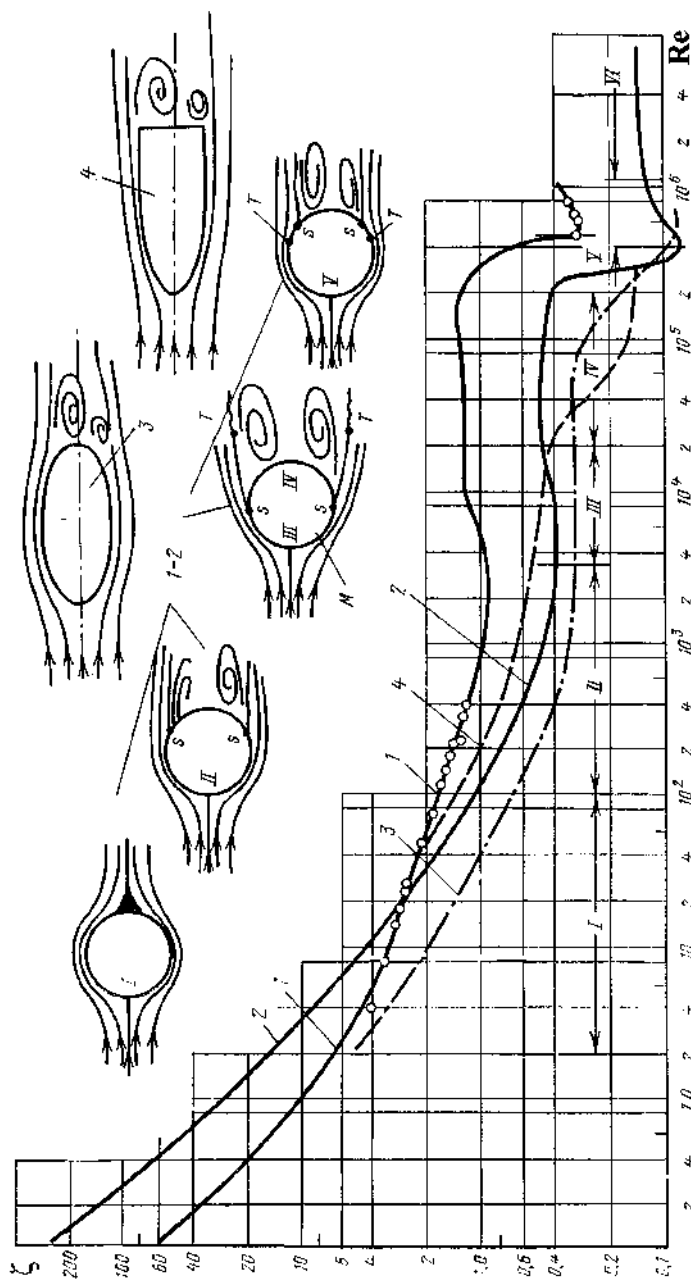


Рис. 4.1.2. Схемы обтекания и коэффициенты сопротивления шара, поперечного обтекания цилиндра и некоторых других тел в зависимости от числа Рейнольдса: 1, 2 – шара, 3 – эллипсоидного тела, 4 – продольно обтекаемого цилиндра.

Опыты показывают, что переход из одной области в другую сопровождается постепенным изменением спектра обтекания. При малых $Re < 10^2$ основную

роль играет сопротивление трения. Его влияние простирается на всю область течения, и на поверхности тела нельзя выделить пограничный слой. С увеличением Re формируется пограничный слой и в кормовой части возникает отрыв, что приводит к более медленному падению ζ_c с ростом Re . В областях III и IV сопротивление трения в пограничном слое невелико. Основную роль играет сопротивление давления. Здесь, как и в области II , на линии отрыва слой ламинарный, и ее положение не зависит от Re .

При достижении критического числа Рейнольдса, равного $Re_{кр} = 2 \div 2,5 \cdot 10^5$, линия перехода ламинарного слоя в турбулентный T совпадает с линией отрыва S . В результате линия S перемещается по потоку и обтекание шара улучшается кризисным образом: коэффициент сопротивления уменьшается в 3-5 раз (область V). Это явление резкого снижения ζ_c называют кризисом сопротивления плохообтекаемых тел.

Положение линии перехода T при $Re < Re_{кр}$, а следовательно, и значение $Re_{кр}$ зависят от степени турбулентности набегающего потока и шероховатости поверхности обтекаемого тела. Так, на поверхности шара (цилиндра) имеются три характерные линии: минимума давления M , отрыва S и перехода T , в которой происходит турбулизация слоя. Взаимное расположение линий M , S , T оказывает решающее влияние на механизм обтекания и сопротивление плохообтекаемого тела, так как определяет протяженность участка расширения (между линиями M и S или M и T) и режим слоя вблизи отрыва.

В соответствии с кривой ζ_c для сферической твердой частицы (см. рис. 4.1.1) в зоне весьма малых чисел $Re = 10^{-4} \div 1,0$ применима формула Стокса

$$\zeta_c = 24/Re,$$

при выводе которой инерционные члены в уравнениях Навье–Стокса не учитывались. Приближение Озеена, учитывающее инерционные члены вдали от сферы, имеет вид

$$\zeta_c = \frac{24}{Re} \left[1 + \frac{3}{16} Re \right].$$

Для более точных расчетов предложена модификация формулы Озеена:

$$\zeta_c = \frac{24}{Re} \left[1 + \frac{3}{16} Re + \frac{9}{40} \left(\frac{Re}{2} \right)^2 \ln \left(\frac{Re}{2} \right) \right].$$

При $Re = 10 \div 10^3$ применима эмпирическая формула

$$\zeta_c = \frac{12}{\sqrt{Re}}.$$

В зоне локальной автомодельности можно принять $\zeta_c = 0,4 \div 0,45$. Кривые $\zeta_c(Re)$ часто аппроксимируются более сложными зависимостями, пригодными для широкого диапазона чисел Re . В частности, достаточно точным в интервале $1 < Re \leq 2 \cdot 10^4$ следует считать уравнение

$$\zeta_c = \exp[3,271 - 0,8893 \ln Re + 0,03417 (\ln Re)^2 + 0,01443 (\ln Re)^3].$$

Значения коэффициентов сопротивления твердых несферических частиц в газовых потоках при условиях, отличных от условий определения *стандартной* кривой, количественно не соответствуют данной зависимости, которая не учитывает: влияния градиентов давления и скорости; объемной концентрации дисперсной фазы; несферичность частиц; турбулентность потока.

Классическая картина обтекания сферы сохраняется качественно неизменной и для некоторых других форм плохообтекаемых тел. Для поперечно обтекаемого цилиндра, эллипсоидного тела, обтекаемого вдоль длинной или короткой оси. Пусть частица радиусом R и плотностью ρ_d оседает под действием силы тяжести. Найти ее скорость оседания. При постоянной скорости оседания сила сопротивления среды равна силе тяжести. Имеем $F_c = \zeta_c \rho_c \pi R^2 w^2 / 2 = m_d g$.

Для сфер

$$\pi \frac{4}{3} R^3 (\rho_d - \rho_c) g = \zeta_c \rho_c \pi R^2 \frac{w_0^2}{2} \quad \text{или} \quad w_0^2 = \frac{8R(\rho_d - \rho_c)g}{3\zeta_c \rho_c}.$$

Некоторые трудности вызываются зависимостью коэффициента сопротивления ζ_c от числа Re , от которого, в свою очередь, зависит скорость осаждения w_0 . Существует несколько способов разрешения этого противоречия.

Подведем итоги. В настоящее время имеются достаточно универсальные зависимости, позволяющие рассчитать коэффициент сопротивления в широком диапазоне чисел Рейнольдса. При непосредственном расчете скорости осаждения дисперсной частицы могут возникнуть определенные трудности, поскольку в общем случае явной зависимости для ее расчета не существует. Для маленьких частиц, оседающих в области Стокса, такие трудности не возникают.

4.1.2. Движение в вязкой среде

При рассмотрении потока с малым числом Рейнольдса (вязкий поток) можно получить выражение для силы сопротивления движению сферы в текущей среде, используя чисто математические аргументы. Эта проблема впервые была решена Стоксом, и выражение для силы с тех пор стало называться законом Стокса. Для решения уравнения Стокса необходимо исходить из условий *непрерывности, несжимаемости, вязкости и бесконечности среды с твердыми частицами сферической формы*. Используя эти предположения, Стокс нашел, что сила сопротивления, оказываемая воздухом движению частицы, соответствует силе, действующей на неподвижную частицу при движении воздуха:

$$F_c = 6\pi\mu_c \bar{w}R.$$

Закон Стокса дает приемлемое приближение сил сопротивления для сферы во многих ситуациях при единственном условии соблюдения предположений, указанных выше. В некоторых случаях можно ввести поправочные коэффициенты для расширения границ применимости этого закона. С другой стороны, если ввести общие предположения для решения различных задач с помощью закона Стокса, то введение поправок уже не дает правильного решения. В любом случае полезно детально проверить каждое предположение для определения его обоснованности.

Непрерывная среда. В случае, когда диаметр частицы очень мал и близок к средней длине свободного пробега молекул среды, Каннингем и Милликен показали, что сила сопротивления движению частицы должна быть меньше, чем предсказываемая законом Стокса. Различие в зависимостях силы сопротивления от размера частицы соответствует различию условий, в которых происходит движение частиц, сильно различающихся по размерам. Для больших частиц основным источником сопротивления является вязкость среды, тогда как для маленьких частиц или при очень низкой вязкости среды преобладающим механизмом сопротивления уже не может служить вязкость среды вследствие роли инерции молекул газа при столкновении их с частицами. Когда размеры частиц приближаются к молекулярным размерам, сила сопротивления среды становится функцией сечения частицы в соответствии с моделью Ньютона для лобового сопротивления. Для учета этого эффекта в уравнение Стокса надо ввести коэффициент ζ_λ , называемый поправкой Каннингема или коэффициентом сопротивления Милликена:

$$F_c = 6\pi\eta\bar{w}R/\zeta_\lambda,$$

где

$$\zeta_\lambda = 1 + \frac{\lambda}{R} \left[A + Q \exp \left\{ -\frac{bR}{\lambda} \right\} \right]. \quad (4.1.3)$$

Здесь $A=1,257$, $Q=0,400$, $b=1,10$ и λ – средняя длина свободного пробега молекул газа.

Поправка Каннингема ζ_λ всегда равна или больше единицы. Когда $R > \lambda$, ζ_λ можно аппроксимировать выражением

$$\zeta_\lambda = 1 + \frac{\lambda}{R}(1,257).$$

Когда $R < \lambda$, поправка ζ_λ становится приблизительно равной

$$\zeta_\lambda \cong 1 + \frac{\lambda}{R}(1,657).$$

Поправку Каннингема к закону Стокса следует использовать, когда диаметр частицы меньше 1 мкм. Значения ζ_λ для различных диаметров частиц выглядят следующим образом: размер частицы 10 мкм, $\zeta_\lambda = 1,018$; размер частицы 0,01 мкм, $\zeta_\lambda = 23,775$. Поправка Каннингема учитывает переход от вязкого течения к молекулярному. Результаты расчетов по (4.1.3) показывают, что для больших значений R величина F_c пропорциональна R – закон Стокса. Тогда как для малых размеров R сила F_c пропорциональна квадрату R .

Несжимаемая среда. Воздух сжимаем, но это не имеет значения для движения частиц в области Стокса. Такое предположение всегда может рассматриваться как обоснованное.

Вязкая среда. При выводе закона Стокса предположение об абсолютной вязкости среды означает отсутствие силы инерции. Такое предположение было сделано для получения линейного уравнения Навье–Стокса. Если при этом используется приближение первого порядка, то закон Стокса можно применять при значениях числа Рейнольдса до 5. Тогда сила сопротивления может быть

выражена как $F_c = 6\pi\eta\bar{w}R(1 + 3\text{Re}/16)$. При $\text{Re} > 5$ закон Стокса даже с этой поправкой неприменим.

Бесконечная среда. При перемещении частицы в вязком потоке на большое расстояние возникают возмущения среды. Присутствие других близко движущихся частиц приводит к эффекту ослабления сопротивления среды из-за уплотнения ее около движущейся частицы. Поэтому группа частиц будет оседать быстрее, чем отдельные изолированные частицы. С увеличением концентрации в потоке частиц их коэффициент сопротивления изменяется, во многом меняется и характер движения двухфазной среды. Если ϕ – объемное содержание дисперсной фазы, то его влияние на коэффициент сопротивления можно аппроксимировать выражением

$$\zeta_c = 200 \frac{1-\phi}{\phi} \frac{1}{\text{Re}} + \frac{7}{3\phi}.$$

Известен и другой подход к исследованию эффектов, связанных с множеством частиц. Было выполнено много исследований стесненного осаждения в равномерно распределенных дисперсных системах. Предложен ряд соотношений, связывающих скорость осаждения w_0 , рассчитанную по закону Стокса, с наблюдаемой скоростью осаждения w_ϕ в стесненных условиях. Наибольшее распространение имеет зависимость

$$\frac{w_\phi}{w_0} = (1 - \phi)^n,$$

где $4,2 < n < 4,6$ при $\text{Re} < 1$ и n является также функцией формы частиц и распределения их по размерам.

К сожалению, многочисленные исследования в этой области не имеют, по-видимому, непосредственного отношения к потокам взвешенных частиц. Эффект облака частиц особенно важен в турбулентных потоках взвесей из-за существенных пульсаций содержания частиц в потоке.

Когда две частицы одного размера падают вдоль одной оси, то верхняя частица движется быстрее, чем нижняя, и возможно их столкновение. Если частицы имеют разные диаметры, то результатом аэродинамического взаимодействия между двумя частицами будет возрастание скорости оседания обеих частиц. Когда нижняя частица меньше верхней, возрастание скорости первой частицы будет больше, чем для второй. Взаимодействием между частицами обычно пренебрегают при оценке скорости оседания, поскольку расстояние между ними, за исключением чрезвычайно редких случаев, относительно велико.

Когда частицы движутся параллельно поверхности, сопротивление возрастает благодаря сопротивлению, оказываемому поверхностью. Это возрастание так мало и происходит в столь тонком слое (максимум – несколько диаметров частиц), что им без значительной ошибки можно пренебречь.

Для аэрозолей в ограниченном пространстве возможны другие эффекты взаимодействия. Например, облако оседающих частиц может целиком заполнить ограниченный объем. Тогда при оседании каждой отдельной частицы создается область нисходящего потока, в которую втягиваются соседние частицы.

Но в ограниченном объеме этот поток сбалансирован восходящим воздушным потоком, который стремится поднять все облако. В результате скорость оседания облака в замкнутом объеме будет меньше, чем в бесконечной среде.

Влияние жесткости частиц. Хотя и предполагается, что частицы твердые, закон Стокса часто используется для нежестких частиц (капель жидкости). Если капли большие, их деформирует движение воздуха, и они утрачивают сферическую форму. В результате их сплющивания возрастает сила сопротивления среды, и они имеют более низкую конечную скорость, чем сферические частицы. Этим эффектом можно пренебречь для свободно падающих частиц с диаметрами меньше $\sim 10^2$ мкм.

Для капель жидкости существенное значение может иметь циркуляция жидкости при движении их в среде. Эта циркуляция ослабляет трение на поверхности капли, так что уменьшается сопротивление, оказываемое средой движению частицы. Сила сопротивления становится равной

$$F_c = 6\pi\mu_c \bar{\omega} R \left[\frac{1 + 2\mu_c / (3\mu_d)}{1 + \mu_c / \mu_d} \right].$$

Для капель воды в воздухе поправка для всех практических целей равна единице, так как вязкость воды гораздо больше вязкости воздуха. Для жидкостей в воздухе этим эффектом обычно можно пренебречь. Если вязкость среды значительно превышает вязкость капли, то поправка стремится к предельному значению $2/3$. В этом случае сила сопротивления равна $F_c = 4\pi\mu_c \bar{\omega} R$ и является силой сопротивления жидкости поднимающемуся в ней пузырьку. Когда вязкость среды и частицы одинаковая, поправка равна $5/6$ и сила сопротивления Стокса составляет $F_c = 5\pi\mu_c \bar{\omega} R$.

Облако частиц можно рассматривать как единичную частицу с такой же вязкостью, как у воздуха. В этом случае R – радиус облака.

Сферическая форма частицы. Сферическая форма частиц – одно из предположений, сделанных при выводе закона Стокса. Во многих случаях это не так. Частицы могут иметь различные формы, зависящие от условий их образования. Аэрозоли жидкости всегда имеют сферическую форму. Для изометрических частиц это предположение также может быть использовано с небольшой ошибкой. Для частиц в виде длинных цепочек или хлопьевидных возможны большие отклонения от закона Стокса.

В формулу для закона Стокса в случае цепочек или волокон входит поправочный динамический коэффициент формы ψ :

$$F_c = 6\pi\mu_c \bar{\omega} \psi R_e, \quad (4.1.4)$$

где R_e – радиус сферы, имеющей такой же объем, как цепочка или волокно. Этот радиус находится из формулы $V_e = 4\pi R_e^3 / 3$.

Для группы частиц из n сфер радиусом R имеем $R_e = \sqrt[3]{n}R$. Когда размер агрегатов частиц мал, следует учитывать поправку Каннингема. Хорошая оценка числового значения ψ была получена экспериментально, для кластеров с плотной упаковкой максимальное значение ψ составляет около 1,25.

Деформация пузырьков и каплей при движении существенно меняет их сопротивление. При малых числах Вебера, когда силы поверхностного натяжения значительны, капля или пузырек имеют обычно сферическую форму. При малых отклонениях формы от сферы асимптотические выражения для коэффициентов сопротивления капли были получены Тейлором и Активосом:

$$\zeta'_c - \zeta_c = A \frac{3\mu^{*2} - \mu^* + 8}{5(\mu^* + 1)^2} \frac{\text{Re}^2}{4} \frac{\rho_c \bar{w}^2}{R\sigma},$$

где $\mu^* = \mu_c / \mu_d$;

$$A = \frac{1}{4(\mu^* - 1)^2} \left\{ \left[\frac{81}{80} \mu^{*3} + \frac{57}{20} \mu^{*2} + \frac{103}{40} \mu^* + \frac{3}{4} \right] - \frac{\rho_d / \rho_c - 1}{12} (\mu^* + 1) \right\};$$

$$\zeta_c = \frac{8}{\text{Re}} \left\{ \frac{3\mu^* + 2}{\mu^* + 1} + \frac{\text{Re} \left(\frac{3\mu^* + 2}{\mu^* + 1} \right)}{16} + \frac{1}{40} \left(\frac{3\mu^* + 2}{\mu^* + 1} \right) \left(\frac{\text{Re}}{2} \right)^2 \ln \frac{\text{Re}}{2} \right\}.$$

Существуют более обобщенные зависимости, учитывающие влияние формы частицы на коэффициент сопротивления.

Подведем итоги. На практике расчеты проводят с использованием коэффициента формы по выражению (4.1.4). Относительно этого выражения следует сделать следующее замечание. Коэффициенты формы частиц, которые, например, используются в технологии порошковых материалов, могут относиться ко многим свойствам дисперсных систем. Нас интересуют лишь коэффициенты, которые определяют зависимости сопротивления жидкости от относительной скорости частиц различной формы. Даже в этом частном случае наиболее подходящее определение коэффициента формы остается предметом дискуссии.

4.1.3. Силы, действующие на частицу в потоке газа

Рассмотрим плоское движение газа, несущего недеформируемые частицы. Определим силы, действующие на частицу в двух противоположных случаях: скорость газовой фазы v больше скорости частицы w , и наоборот. Соответствующие схемы сил представлены на рис. 4.1.3, а, б. Радиус кривизны линии тока несущей фазы, на которой расположен центр тяжести частицы, обозначим r , относительную скорость частицы — $\vec{w} = \vec{v} - \vec{w}$; скорости w и \bar{w} обозначены штриховыми, а распределение скоростей в несущем потоке штрихпунктирными линиями.

На схемах жирными линиями показаны основные силы, действующие на частицу. Сила аэродинамического сопротивления частицы \vec{F}_c , вектор которой параллелен вектору относительной скорости \vec{w} , в обоих случаях ($w < v$ и $w > v$) направлена к началу координат, в сторону точки O , которая является центром кривизны линии тока несущей фазы. При этом сила F_c в первом случае (рис. 4.1.3, а) увеличивает, а во втором (рис. 4.1.3, б) уменьшает скорость движения капли w . В обоих случаях сила сопротивления способствует выравниванию скоростей непрерывной и дискретной фаз. Следовательно, скорость относительного движения \vec{w} под воздействием сопротивления газовой фазы уменьшается.

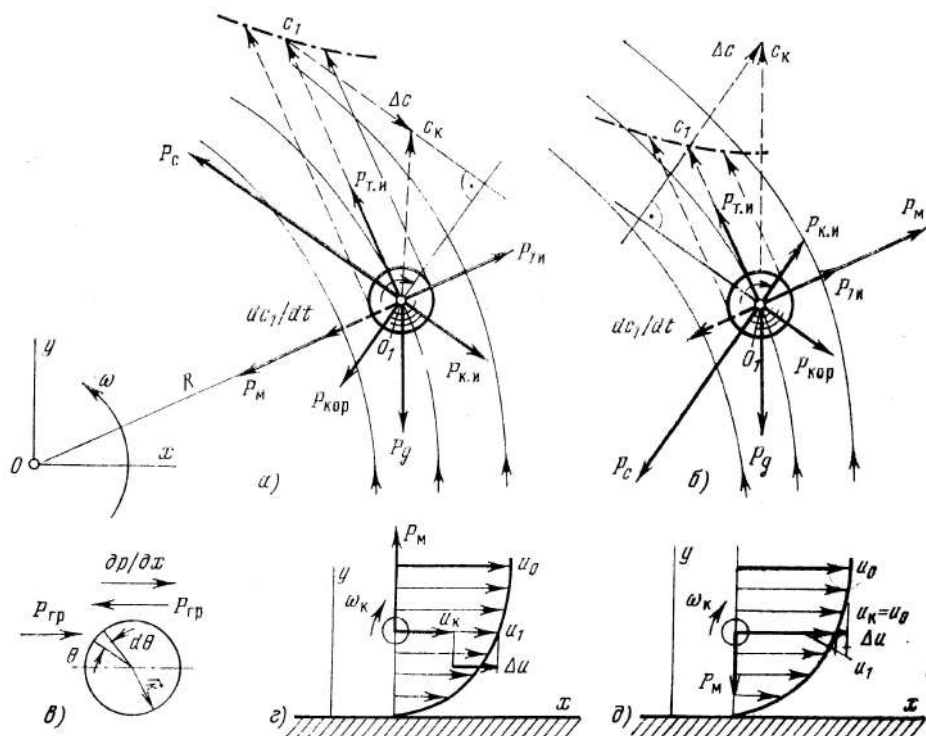


Рис. 4.1.3. Силы, действующие на сферическую твердую частицу в случае неустановившегося, плоского движения (а–в); сила Магнуса, действующая на сферическую частицу в пограничных слоях (г, д).

Силы инерции, обусловленные реакцией частицы на изменение скорости газовой среды:

$$F_{uc} = m_d \frac{dv}{d\tau}, \quad F_{ud} = -m_d \frac{d\bar{w}}{d\tau}.$$

Сила инерции капли F_{ud} всегда направлена в сторону, противоположную направлению силы аэродинамического сопротивления F_c , т. е. во внешнюю часть потока газа.

Один из важнейших результатов взаимодействия пылевых частиц с увлекающими их воздушными потоками – это проявление сил инерции. На инерционной сепарации пыли из воздушных потоков основано устройство циклонов. Еще сравнительно недавно природа и существо сил инерции являлись предметом дискуссии. Классическая механика была склонна трактовать силы инерции как фиктивные силы, которые вводятся формально, чтобы можно было применять законы Ньютона при рассмотрении некоторых движений тел.

В свете современных физических представлений различают два класса сил инерции:

силы инерции Ньютона, действующие в инерциальных системах отсчета, т. е. в системах неподвижных или движущихся по отношению к неподвижным системам прямолинейно и равномерно;

силы инерции, действующие в неинерциальных системах отсчета, т. е. в системах, движущихся по отношению к неподвижным с ускорением.

Рассмотрим силы инерции Ньютона. Согласно первому закону Ньютона (закон инерции), в инерциальной системе координат отдельное тело, на которое не действуют силы со стороны других тел, может двигаться только прямолинейно и равномерно. Таким можно представить движение пылевой частицы в вакууме, если отвлечься от сил тяготения или допустить, что масса частицы достаточно мала, чтобы можно было на некоторый промежуток времени пренебречь влиянием этих сил, например на искривление ее траектории.

Частица, движущаяся в воздушной среде, испытывает ее воздействие. Согласно второму закону Ньютона, в результате этого воздействия у частицы возникает ускорение относительно неподвижной системы координат, и скорость ее движения начинает уменьшаться. Ускорение пропорционально действующей на частицу силе сопротивления среды и совпадает с направлением этой силы.

Если абсолютная скорость частицы относительно неподвижной системы координат равна \vec{w} , а скорость воздушной среды (потока) \vec{v} , то сила инерции

$$m \frac{d\vec{w}}{d\tau} = -3\pi\mu d(\vec{v} - \vec{w}), \text{ или } \frac{d\vec{w}}{d\tau} = \frac{1}{\tau_0}(\vec{v} - \vec{w}).$$

В данном случае ускоряющее действие оказывает на частицу воздушная среда. Ускоряющая сила приложена к частице.

Согласно третьему закону Ньютона, каждое действие вызывает равное ему и противоположное по направлению противодействие. Сила инерции Ньютона представляет собой силу противодействия ускоряемой частицы и как сила реакции приложена к ускоряющей воздушной среде. Действующая сила аэродинамического сопротивления и противодействующая ей сила инерции, характеризующие взаимодействие частицы с воздушным потоком, имеют одну и ту же природу. Для исследования сил инерции второго класса рассмотрим поведение частицы в потоке, протекающем, например, в сужающейся части трубы пылеуловителя Вентури, в неподвижной системе координат. По мере сужения сечения конфузора скорость потока \vec{v} быстро возрастает. Скорость же движения частицы \vec{w} , равная в момент входа в конфузор $\vec{v}_0 = \vec{w}_0$, изменяется медленнее, и поэтому всегда существует значение $\vec{w} = \vec{v} - \vec{w}$, отличное от нуля.

Введем подвижную систему координат, движущуюся вместе с потоком, т. е. движущуюся ускоренно с переменной скоростью \vec{v} по отношению к неподвижной системе координат. Абсолютная скорость частицы $\vec{w} = \vec{v} + \vec{w}$ при этом \vec{v} может быть названа *скоростью переносного движения*, а \vec{w} — *скоростью относительного движения*. Соответственно ускорение составит

$$\frac{d\vec{w}}{d\tau} = \frac{d\vec{v}}{d\tau} + \frac{d\vec{w}}{d\tau}.$$

Наблюдатель, связанный с подвижной системой координат и поэтому не замечающий ее ускорения $d\vec{v}/d\tau$, должен будет отметить, что пылевая частица движется с ускорением, равным $d\vec{w}/d\tau - d\vec{v}/d\tau$, которое он не смог бы объяснить действием каких-либо конкретных сил. Для объяснения этого явления необходимо ввести в рассмотрение силу инерции $-m d\vec{v}/d\tau$, направленную в сто-

рону, противоположную направлению потока. Уравнение движения частицы относительно подвижной системы координат примет вид

$$\frac{d\vec{v}}{d\tau} + \frac{d\vec{w}}{d\tau} = -\frac{1}{\tau_0} \vec{w}.$$

Вследствие произвольности выбора скорости подвижной системы координат \vec{v} может произвольно изменяться и значение силы $-m d\vec{v}/d\tau$. Очевидно, однако, что эта сила также является силой реакции частиц. Рассмотрение движения частиц в подвижных системах координат часто упрощает исследование.

Сила, обусловленная эффектом присоединения массы. Возникает при искажении внешнего газового течения при обтекании частицы, она необходима для ускорения присоединенной массы:

$$F_{pm} = k_m \frac{\rho_c}{\rho_d} m_d \frac{d(v-w)}{d\tau},$$

где k_m – коэффициент присоединенной массы: для твердой сферической частицы $k_m = 0,5$, для плоского диска $k_m = 10$.

Влияние этой силы на движение частицы становится существенным при отношении плотности несущей среды к плотности частиц более единицы, т. е. для системы «жидкость – твердое тело». Во всех других случаях, в том числе и для аэрозолей, эта сила незначительна.

Сила Кориолиса:

$$F_k = -m_d 2\omega_c \vec{w},$$

и тангенциальная сила инерции, записанная с учетом угловой скорости газа ω_c относительно точки O :

$$F_{uT} = -2m_d \omega_c \vec{v}.$$

Линия действия силы Кориолиса расположена под прямым углом к вектору относительной скорости \vec{w} , причем если $w < v$, эта сила направлена к центру кривизны линии тока O , если $w > v$ – от центра. Равнодействующая двух инерционных сил F_k и F_{uT} (силы Кориолиса и тангенциальной) в первом случае направлена к центру кривизны O и совпадает с направлением центростремительной силы, а во втором – от центра и совпадает с центробежной силой, вызванной криволинейностью потока несущей фазы.

Сила гравитационного поля:

$$F_g = -m_d g.$$

Сила Магнуса F_M обусловлена вращательным движением частицы с угловой скоростью ω_d . В потоке с неравномерным распределением скорости по нормали к линиям тока частица совершает вращательное движение относительно собственных осей (точки O_1) и на нее действует сила Магнуса F_M (рис. 4.1.3, 2, 3), которая стремится переместить частицу в поперечном направлении. Особенно велика эта сила в пограничных слоях. Направление силы F_M определяется знаком поперечного градиента скорости газового потока и соотношением скоростей газа и частицы. В рассмотренных случаях показано изменение направления F_M при изменении соотношения скоростей частицы и несущей среды при одинаковом знаке градиента скорости $\partial v/\partial y$. Если частица имеет не-

сферическую форму, не совершает вращения и обтекается несимметрично, то на нее действует подъемная сила Жуковского. При определенных условиях несферичность частицы служит причиной, вызывающей ее вращение.

Угловая скорость в произвольной точке потока газа определяется как

$$\omega_c = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial y} \right).$$

Для определения угловой скорости частицы воспользуемся уравнением момента количества движения:

$$I \frac{d\omega_d}{d\tau} = \Omega(\omega_d - \omega_c),$$

где $I = 16/3 \pi \rho_d R^5$ – момент инерции частицы; $\Omega = -8 \pi \mu_c R^3 \omega_c$ – вращающий момент.

Для пограничного слоя $\omega_c \approx -0,5 dv_x/dy$ при начальных условиях $\tau = 0$, $\omega_d = 0$ и $\tau = \infty$, $\omega_d = \omega_c$. После интегрирования уравнения момента количества движения найдем

$$\omega_d = \omega_c [1 - \exp(-15 \mu_c \tau / R^2 \rho_c)].$$

Отсюда следует, что угловая скорость твердой частицы практически не отличается от угловой скорости газовой частицы. Можно показать, что этот вывод справедлив и для внешнего потока. Проекция силы Магнуса на оси координат можно найти по формулам:

$$F_{Mx} = -\rho_d \pi^2 R^3 (w_x - v_x) \omega_d, \quad F_{My} = -\rho_d \pi^2 R^3 (v_y - w_y) \omega_d.$$

Как показывают результаты расчетов, угловая скорость вращения ω_d может достигать значений $10^5 \div 10^7 \text{ с}^{-1}$ в зависимости от R . Поперечное смещение за счет эффекта Магнуса при движении мелких частиц ($2R < 100 \text{ мкм}$) в низкоскоростных потоках невелико, оно возрастает лишь при $2R \geq 100 \text{ мкм}$.

Сила Сафмена возникает при движении свободно вращающейся частицы в жидкости со сдвигом, она действует на частицу в поперечном направлении:

$$F_S = 1,61 \rho_c R^2 (v - w) \sqrt{w \frac{dv_x}{dy}}.$$

Рассмотренные выше поперечные силы заметно влияют только на движение крупных частиц в потоке газа. При высоких градиентах dv_x/dy , характерных для течений в пограничных слоях, траектории частиц, в том числе и мелких, будут в значительной мере определяться силой Сафмена. Этот вывод подтверждается результатами численных исследований.

Другую группу составляют гидромеханические силы, обусловленные изменением давления в потоке газа. Продольные градиенты давления в несущей фазе создают силу, определяемую в соответствии с рис. 4.1.3,в по формуле

$$F_{\Delta px} = -\frac{\partial p}{\partial x} \pi \frac{R}{2} \int \cos^2 \theta \sin^2 \theta d\theta = -\frac{\partial p}{\partial x} \pi \frac{4R^3}{3}.$$

Аналогично рассчитывается сила, создаваемая поперечными градиентами давления:

$$F_{\Delta p} = \pm \frac{\partial p}{\partial y} \pi \frac{4R^3}{3}.$$

Направление этой силы определяется знаком поперечного градиента давления несущей фазы.

Сила сопротивления выражается очевидным уравнением (4.1.2), которое представляется в виде

$$F_c = -\frac{1}{2} \zeta_c \rho_c S_m (w - v) |w - v|.$$

Сила турбофореза – эта поперечная сила вызывается неоднородностью поля пульсационных скоростей газа. Неравномерность профиля скоростей газа приводит к направленному смещению частицы в сторону уменьшения интенсивности пульсаций. Возникает эффект турбулентной миграции, или эффект турбофореза:

$$F_\Phi = -0,5m_d \partial \langle w' \rangle^2 / \partial y,$$

где $\langle w' \rangle$ – осредненная пульсационная составляющая скорости частицы.

При $w' = v'$ максимальное ускорение частиц под действием силы турбофореза может достигать $3 \cdot 10^3 g$. Результаты этого расчета показывают важность турбулентной миграции и необходимость ее учета в исследованиях движения частицы.

Сила Бассе возникает при медленном относительном движении частицы в газовом потоке:

$$F_B = 6R^2 \sqrt{\pi \rho_c \mu_c} \int_0^{\tau_0} \frac{d(v-w)}{d\tau} \frac{d\tau}{\sqrt{\tau_0 - \tau}}.$$

Сила Бассе учитывает отклонение течения от установившегося состояния и выражает мгновенное гидродинамическое сопротивление. Ее влияние при отношении плотности несущей среды к плотности частицы значительно меньше единицы, не существенно. Она начинает играть важную роль, когда частица приобретает большое ускорение, при этом наблюдаемая сила сопротивления становится во много раз больше силы, определяемой через коэффициент сопротивления для установившегося состояния. Показано, что при отсутствии силы Бассе в уравнениях движения (в том числе и в уравнении Чена) данные по расчету почти совпадают с данными, полученными при учете силы Бассе.

Приведенный анализ уравнений движения частиц показывает, что для системы «газ – твердые частицы» с размером частиц до 100 мкм следует учитывать: силу аэродинамического сопротивления, центробежную силу, силы турбофореза, Кориолиса, инерции и силу тяжести.

Дифференциальное уравнение количества движения частицы в общем случае представляет собой сумму сил, расчет которых осуществляется по уравнениям, представленным выше. В зависимости от решаемой задачи в сумму входят те силы, которые являются определяющими в рассматриваемом случае.

Подведем итоги. Оценка влияния турбулентности на характер движения частиц и их влияние на спектр и масштаб турбулентности представляют большой интерес. Достаточно крупные частицы при значительном скольжении яв-

ляются дополнительными источниками турбулентности: вихревые следы за частицами генерируют повышенную турбулентность. Кроме того, при вращении частиц возникают присоединенные вихри, происхождение которых связано с циркуляционным (несимметричным) обтеканием частицы. Сила гидромеханического сопротивления увеличивается с ростом угловой скорости вращения частицы и, следовательно, интенсивности присоединенного вихря. Под влиянием сил Магнуса частицы совершают поперечные перемещения, влияющие на интенсивность турбулентности. По-видимому, это влияние особенно велико в пограничном слое (пристенная турбулентность).

4.2. ОСОБЕННОСТИ ДВИЖЕНИЯ ГАЗОВЗВЕСЕЙ

4.2.1. Турбулентность, ее свойства и характеристики

Турбулентным течением или просто турбулентностью в гидромеханике имеется особая форма движения газов и жидкостей, которая устанавливается в результате потери ими гидродинамической устойчивости движения, наступающей при высоких, сверхкритических значениях безразмерного комплекса – числа Рейнольдса:

$$Re_L = v_m L / \nu_c,$$

где v_m – средняя скорость течения газа или жидкости; ν_c – их кинематическая вязкость; L – характерный размер потока (для труб – внутренний диаметр D , каналов – эквивалентный диаметр D_e , пластин и оснований – толщина пограничного слоя δ_x , или расстояние от начальной кромки x).

Для турбулентного течения характерно:

- наличие беспорядочных хаотических пульсаций (изменений) скорости в продольном и других направлениях и соответствующих им пульсаций давления в потоке, придающих явлению стохастический характер (рис. 4.2.1);
- беспорядочное перемешивание пульсационных объемов («молей», «вихрей») газа между собой и, как следствие, появление специфической турбулентной диффузии газа, превосходящей по своей интенсивности обычную молекулярную диффузию на несколько порядков;
- наличие особой вихревой или турбулентной вязкости газа, которая в отличие от обычной молекулярной вязкости является функцией турбулентного состояния газа в рассматриваемой точке потока;
- более равномерное, чем при ламинарном течении, распределение осредненной скорости по поперечному сечению потока в его центральной части и, наоборот, очень резкое ее падение в пристеночной области;
- изменение закона гидродинамического сопротивления потока движению вдоль граничных поверхностей. Переход от свойственной ламинарному течению линейной зависимости сопротивления от относительной скорости газа к квадратичной и, как результат, резкое увеличение гидродинамических потерь давления на трение.

Причиной возникновения турбулентных пульсаций являются периодически повторяющиеся локальные бурные выбросы массы газа из гидродинамически неустойчивых замедленных участков пристеночной области потока, где газ испытывает сильное торможение и имеет место весьма значительный градиент (сдвиг) скорости течения. Выбросы газа порождают подковообразные вихри, уходящие вглубь потока и стимулирующие появление новых локальных отрывов потока. Масштаб первичных вихрей, называемый внешним или основным, сравним с масштабом потока, а скорость – со скоростью течения; частота же соответствующих им пульсаций скорости сравнительно невелика. При больших числах Re_D движение этих наиболее крупных вихрей оказывается неустойчивым и порождает более мелкие вихри и т. д. вплоть до мельчайших вихрей, для которых $Re_D < 1$.

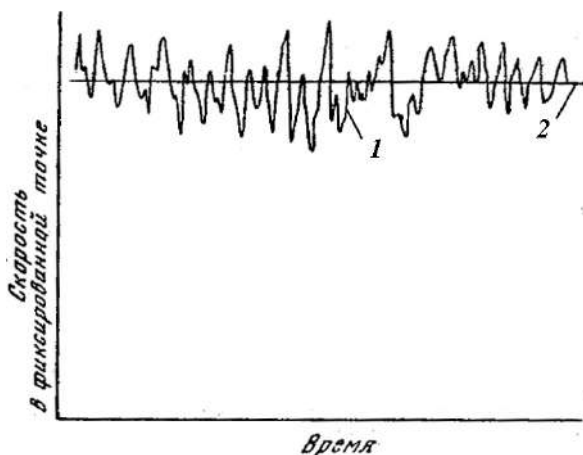


Рис. 4.2.1. Пульсации скорости в турбулентном потоке:
1 – мгновенное значение скорости в рассматриваемой точке;
2 – среднее по времени значение скорости.

Движение внутри таких собственно турбулентных вихрей носит ламинарный характер и уже существенно зависит от молекулярной вязкости; вся энергия, передающаяся вдоль цепочки вихрей, здесь диссипирует (переходит в тепло). На движении мелкомасштабных вихрей не сказывается ориентирующее действие поступательного движения потока, все направления равновероятны, пульсации изотропны. Вихри этого масштаба, называемого внутренним масштабом или просто масштабом, движутся как одно целое, частота пульсаций постоянна и равна наивысшему значению.

При математическом описании турбулентного движения мгновенная скорость потока в рассматриваемой точке для каждой из трех ее составляющих – продольной (ось x), поперечной (ось y) и тангенциальной (ось z) – представляется в виде суммы осредненной скорости (v_x, v_y, v_z) и скорости пульсаций (v'_x, v'_y, v'_z): $v_x(\tau) = \langle v_x \rangle + v'_x$, $v_y(\tau) = \langle v_y \rangle + v'_y$, $v_z(\tau) = \langle v_z \rangle + v'_z$. При прямолиней-

ном течении вдоль оси x $v_x(\tau) = \langle v_x \rangle + v'_x$, $v_y(\tau) = v'_y$, $v_z(\tau) = v'_z$. Для давления, не зависящего от направления, принимаем $p(\tau) = \langle p \rangle + p'$.

Подстановка этих выражений в дифференциальные уравнения движения вязкой несжимаемой жидкости – уравнения Навье–Стокса – и усреднение по времени и пространству приводит к дифференциальным уравнениям осредненного движения, называемым уравнениями Рейнольдса. Эти уравнения отличаются от уравнений Навье–Стокса наличием добавочных (рейнольдсовых) касательных напряжений, определяемых при поступательном движении газа вдоль оси x выражениями $\tau_{xx} = -\langle \rho_c (v'_x)^2 \rangle$, $\tau_{xy} = -\langle \rho_c v'_x v'_y \rangle$, $\tau_{xz} = -\langle \rho_c v'_x v'_z \rangle$, где ρ_c – плотность газа. Повышение вязкости газа и соответственно гидродинамического сопротивления в турбулентном потоке как раз и обусловлено появлением этих напряжений.

Система уравнений Рейнольдса является незамкнутой, поскольку число неизвестных величин в ней превышает число уравнений. Для компенсации недостающих связей широко используются аналогия между турбулентными и молекулярными напряжениями и экспериментальные данные о статистических связях между пульсациями в пространстве и времени.

Появление дополнительных касательных напряжений в турбулентном потоке неизбежно связано с появлением в нем определенных градиентов скорости, поэтому по аналогии можно предполагать, что здесь, как и в случае молекулярной вязкости, справедлива зависимость типа закона Ньютона:

$$\tau_{xy} = \nu_t \rho \frac{dv_x}{dy},$$

где ν_t – кинематический коэффициент турбулентной (вихревой) вязкости. Порядок величины скорости турбулентных пульсаций характеризует так называемая динамическая скорость (скорость трения), представляющая собой усредненное значение продольной и поперечной составляющих скорости пульсаций $\langle v'_x v'_y \rangle^{1/2}$ и определяемая соотношением $u^* = \sqrt{\tau_{xy}^w / \rho}$, где τ_{xy}^w – касательное напряжение на стенке, определяемое аналитически или экспериментально (по потере давления).

Количественной мерой степени статистической связи или, по терминологии теории вероятностей, корреляции между пульсациями скоростей в пространстве является коэффициент пространственной корреляции, определяемый для параллельного течения вдоль оси x соотношением

$$R(y) = \frac{\langle v'_{y1} v'_{y2} \rangle}{\langle (v'^2_{y1})^{1/2} (v'^2_{y2})^{1/2} \rangle},$$

где v'_{y1} и v'_{y2} – пульсационные скорости, измеренные одновременно в точках 1 и 2, разделенных расстоянием $y_1 - y_2$. С увеличением $y_1 - y_2$ величина коэффициента корреляции $R(y)$ понижается от 1 до 0, как на рис. 4.2.2 ($x_{12} = y$).

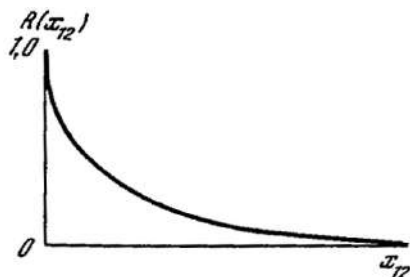


Рис. 4.2.2. Изменение коэффициента корреляции $R(y)$ с расстоянием между рассматриваемыми точками y

Основными параметрами, характеризующими турбулентное течение, помимо числа Рейнольдса и динамической скорости, являются интенсивность или степень турбулентности, масштаб турбулентности и частота турбулентных пульсаций, их распределение и характерные значения.

Интенсивность турбулентности является мерой величины пульсационной составляющей скорости течения и определяется для каждой составляющей отношением средней квадратичной скорости пульсаций к средней скорости течения:

$$I_x = \frac{\langle (v'_x)^2 \rangle^{1/2}}{\langle v_x \rangle}, \quad I_y = \frac{\langle (v'_y)^2 \rangle^{1/2}}{\langle v_x \rangle}, \quad I_z = \frac{\langle (v'_z)^2 \rangle^{1/2}}{\langle v_x \rangle}, \quad I = \frac{[(\langle v'_x \rangle^2 + \langle v'_y \rangle^2 + \langle v'_z \rangle^2)/3]^{1/2}}{\langle v_x \rangle},$$

где в $\langle v'_x \rangle^2$, $\langle v'_y \rangle^2$, $\langle v'_z \rangle^2$ представлены все частотные составляющие скорости пульсаций. В тихой атмосфере $I \approx 0,2\%$, в центральной части внутритрубного потока – $3\text{--}5\%$, в турбулентном пограничном слое – до $30\text{--}40\%$.

Масштаб турбулентности характеризует средний размер пульсационных объемов (молей, вихрей), обладающих одинаковой скоростью и ведущих себя некоторое время как одно целое. Как следует из рис. 4.2.2, определенной границы, очерчивающей эти объемы, не существует, поэтому масштаб турбулентности часто определяют по $R(y) l = \int_0^\infty R(y) dy$.

Поперечное расстояние, на котором данный пульсационный объем теряет целостность, получило название пути перемешивания (или смешения). Оно лежит в основе так называемой полуэмпирической теории турбулентности.

В пристеночной области потока длина пути перемешивания принимается прямо пропорциональной расстоянию до граничной поверхности $l_m = ky$, где k – коэффициент Кармана, равный $0,4$.

В статистической теории турбулентности вместо указанного выше эйлера коэффициента корреляции $R(y)$ используется лагранжев временной коэффициент корреляции:

$$R_L(\theta) = \frac{v'_x(\tau)v'(\tau+\theta)}{v'^2_x(\tau)},$$

характеризующий степень связанности между пульсационными скоростями движущейся частицы среды в смежные моменты времени τ и $\tau + \theta$. Изменение $R(\theta)$ с изменением θ обычно описывают экспоненциальной кривой:

$$R_L(\theta) = R_L(0)\exp(-\alpha\theta),$$

где α – константа с размерностью частоты пульсаций. Коэффициенту корреляции Лагранжа $R_L(\theta)$ отвечает масштаб времени Лагранжа:

$$\theta_L = \int_0^{\infty} R_L(\theta) d\theta,$$

характеризующий интервал времени, по истечении которого пульсационное движение частицы среды становится независимым от начального движения.

Частота пульсаций характеризует число изменений амплитудных значений пульсационной скорости в секунду. Численное значение ее зависит от масштаба вихря, и поскольку в турбулентном потоке присутствуют вихри всех масштабов, существует не одна, а целый спектр частот пульсаций. Учитывая связь частоты пульсаций с масштабом вихрей, а следовательно, с амплитудой скорости пульсаций и их кинетической энергией, в теории турбулентности часто используется более обширная характеристика, а именно частотно-энергетический или кратко частотный спектр пульсаций, показывающий распределение пульсационной энергии по частотам, а тем самым и по масштабам турбулентных вихрей. вместо частоты по оси абсцисс часто откладывается волновое число $k_\omega = \omega/\nu_x$. В примере типичного частотного спектра приведен на рис. 4.2.3.

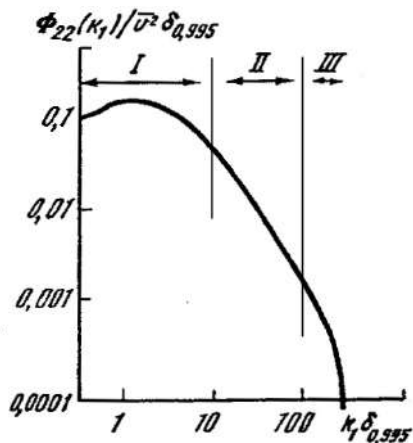


Рис. 4.2.3. Типичный спектр по волновым числам (или частотам):
I – интервал низких частот (энергоемких вихрей); **II** – интервал средних частот (инерционный интервал); **III** – интервал высоких частот (интервал диссипации турбулентной энергии).

Изучение частотного спектра дает ключ к пониманию механизма передачи энергии от осредненного движения газа к пульсационному движению различных масштабов. При этом наблюдаемый спектр пульсаций разбивается на интервалы (рис. 4.2.3):

- **первый интервал** низких частот или крупных энергоемких вихрей, в котором совершается отбор энергии от осредненного движения газа, т. е. «производство турбулентности»;
- **второй интервал** средних частот или инерционный интервал, в котором происходит передача энергии вдоль по спектру – от низких частот к высоким;
- **третий интервал** высоких частот или интервал диссипации турбулентной энергии, где происходит рассеяние механической энергии в тепло.

Закономерности турбулентного движения в интервалах средних и высоких частот при очень больших числах Рейнольдса помогают понять две гипотезы подобия А. Н. Колмогорова.

Согласно первой из них, все статистические характеристики высокочастотной турбулентности полностью определяются тремя величинами: плотностью среды ρ , ее вязкостью μ и скоростью диссипации турбулентной энергии ε , выражаемой соотношением $\varepsilon \approx v_m^3 / D$. Соответствующие характеристики получаются при этом путем использования теории размерностей.

Согласно второй гипотезе подобия, статистические характеристики средне-частотной турбулентности, в первую очередь ее неоднородность, не зависят от плотности и вязкости среды. Полностью определяются величиной скорости диссипации энергии ε с помощью «закона двух третей» $[\Delta v_{xi}(\tau)]^2 \approx (\langle \varepsilon \rangle \Delta x_i)^{2/3}$, где $\Delta v_x(\tau)$ – разность мгновенных скоростей в двух точках потока, разделенных расстоянием Δx_i , малым по сравнению с внешним масштабом турбулентности, но большим по сравнению с ее внутренним масштабом.

В случае изотропной турбулентности, локальные характеристики которой не зависят от координат и направления. Такая турбулентность формируется при очень больших числах Рейнольдса в ядре потока, вдали от его границ. Первая гипотеза подобия А. Н. Колмогорова позволяет с помощью метода размерностей получить ряд полезных теоретических зависимостей.

Для внутреннего масштаба турбулентности метод размерностей дает: $\lambda \equiv (v^3 / \varepsilon)^{1/4}$. Максимальная скорость мелкомасштабных пульсаций при этом определяется выражением $v_\lambda \equiv (\varepsilon / v)^{1/2} / 4$, $\lambda \equiv (\varepsilon v)^{1/4} / 4$, а интенсивность турбулентности соотношением $I = v_\lambda / v_x = \text{Re}^{-1/4} / 4$.

Нижний предел частоты турбулентных пульсаций, принадлежащий наиболее крупномасштабным вихрям с масштабом D , дается соотношением

$$\omega_0 \approx v_m / D, \quad (4.2.1)$$

а верхний предел частоты, свойственный мелкомасштабным пульсациям с масштабом λ , соотношением $\omega_\lambda = v_\lambda / \lambda \equiv (\varepsilon / v)^{1/2} / 4$.

Для иллюстрации порядка численных значений локальных характеристик изотропной турбулентности приводим результаты их расчета для воздушного потока в круглых трубах с диаметрами $D=1, 10$ и 100 см при скоростях течения $v_m = 1, 10$ и 100 м/с (табл. 4.2.1).

Экспериментальные измерения, получаемые с помощью термоанемометра, дают представление об эйлеровых частотах, регистрируемых в неподвижной точке пространства. При переходе к системе координат, движущейся со средней скоростью потока, получается лагранжев спектр частот, необходимый при расчетах степени увлечения аэрозольных частиц турбулентными пульсациями.

Таблица 4.2.1

Характеристика турбулентного потока	Внешний масштаб турбулентности D , см	Численное значение характеристики турбулентного потока		
		Скорость v_m , м/с		
		1	10	100
Число Рейнольдса Re_D	1	670	6700	67000
	10	6700	67000	670000
	100	67000	670000	6700000
Диссипация энергии ε , эрг/г с	1	—	10^9	10^{12}
	10	10^5	10^8	10^{11}
	100	10^4	10^7	10^{10}
Внутренний масштаб турбулентности λ , см	1	—	$13 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$
	10	$135 \cdot 10^{-4}$	$24 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-4}$
	100	$240 \cdot 10^{-4}$	$43 \cdot 10^{-4}$	$7 \cdot 10^{-4}$
Максимальная скорость мелкомасштабных пульсации v_λ , см/с	1	—	28,0	155,5
	10	2,8	15,5	87,5
	100	1,5	8,75	27,6
Интенсивность турбулентности I , %	1	—	2,76	1,55
	10	2,76	1,55	0,87
	100	1,55	0,87	0,27
Нижний предел частоты пульсаций ω_0 , с ⁻¹	1	—	1000	10000
	10	10	100	1000
	100	1	10	100
Частота мелкомасштабных пульсаций ω_λ , с ⁻¹	1	—	20500	647000
	10	205	6470	205000
	100	64,8	2050	64700

Подведем итоги. Частота пульсаций Лагранжа f_f ниже частоты Эйлера f_E , приближенно в пропорции $f_L / f_E = 0,7V' / \langle v \rangle$, где V' – амплитуда скорости рассматриваемых пульсаций, а $\langle v \rangle$ – осредненная скорость течения. К этому соотношению нетрудно прийти, представляя турбулентный поток равномерно заполненным вихрями со средним расстоянием $\Delta x = \lambda$ между ними. Подвижная точка, движущаяся со скоростью, равной осредненной скорости течения, обте-

кается вихрями со средней скоростью $V'/\sqrt{2}$ и «касается» их $V'/\lambda\sqrt{2}$ раз в секунду; неподвижная точка обтекается вихрями со средней скоростью и $\langle v \rangle$ «касается» их $\langle v \rangle/\lambda$ раз в секунду. Отношение частот «касания» вихрями подвижной и неподвижной точек или, что то же, отношение частот пульсаций Лагранжа и Эйлера и дает указанное равенство.

4.2.2. Турбулентный поток в трубах и каналах

Характерной особенностью течения газов в трубах и каналах является наличие твердых замкнутых границ – стенок, приводящих к сдвигу осредненной и пульсационных составляющих скорости течения. Аналитическое решение этой гидродинамической задачи в случае турбулентного режима течения невозможно, поэтому она решается полуэмпирическими или чисто эмпирическими методами с использованием закономерностей, установленных экспериментально в естественных условиях или на моделях.

В качестве масштаба потока, величина которого входит в характерное для него число Рейнольдса Re_D , при круглом поперечном сечении принимается внутренний диаметр трубы D , а при некруглом – так называемый эквивалентный диаметр D_e , равный учетверенному гидравлическому радиусу, определяемому отношением $r_g = F/H$, где F – площадь поперечного сечения, а H – омываемый потоком периметр. Например, для прямоугольного канала со сторонами b и h эквивалентный диаметр определяется формулой $D_e = 2bh/(b+h)$, а для кольцевого канала с диаметрами $D_{нар}$ и $D_{вн}$ – формулой $D_e = D_{нар} - D_{вн}$.

Нижнее критическое значение числа Рейнольдса $Re_D^{кр}$, при котором ламинарное течение уже невозможно, составляет для прямых гладких труб около 2000 (по другим источникам – 2320), для щелевых каналов – 1200. Устойчивое (развитое) турбулентное течение получается в первом случае при $Re_D \geq 10000$ –12000, во втором – при $Re_D \geq 4800$. В шахтных выработках, где крепи периодически сужают поперечное сечение потока, $Re_D = 1000$ –1500.

Стабилизированный, т. е. устоявшийся с неизменным профилем скорости, турбулентный поток устанавливается в трубах и каналах не сразу, а лишь на довольно значительном расстоянии от входа (рис. 4.2.4).

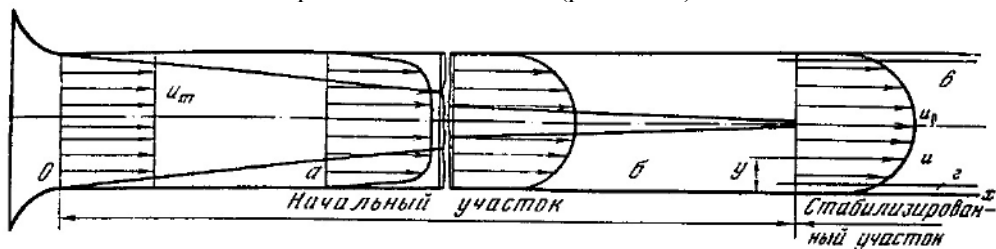


Рис. 4.2.4. Схема формирования стабилизированного турбулентного потока в трубе: а – ламинарный пограничный слой; б – переходная область течения; в – стабилизированный турбулентный поток; г – вязкий подслой.

Газ вступает в трубу или канал обычно с более или менее равномерным распределением скорости по поперечному сечению, но, соприкасаясь со стенкой, притормаживается силами вязкостного трения, а на самой стенке даже «прилипает», т. е. имеет нулевую скорость. По мере продвижения вдоль трубы или канала заторможенный слой газа все более и более утолщается, образуя ламинарный пограничный слой с толщиной $\delta_L \cong 5\sqrt{x(v/\nu_m)}$.

Поскольку количество притекающего газа остается неизменным, торможение газа приводит к определенному повышению скорости в ядре потока, «вытягиванию» профиля скорости. При сверхкритических значениях Re_D это вытягивание, однако, не успевает привести к характерному для ламинарного течения параболическому профилю скорости, так как ламинарный пограничный слой вскоре теряет гидродинамическую устойчивость и преобразуется в турбулентный пограничный слой. Это происходит после того, как характеризующее течение в пограничном слое число Рейнольдса $Re_\delta = \nu_\delta \delta / \nu$ (или $Re_x = \nu_x x / \nu$) превысит критическое значение $Re_\delta^{kp} = 2000$ (или $Re_x^{kp} = 2 \cdot 10^5 - 3 \cdot 10^6$). Толщина турбулентного пограничного слоя растет быстрее, чем ламинарного ($\approx x$, а не $x^{1/2}$), поэтому он сравнительно быстро заполняет все сечение трубы или канала, образуя логарифмический профиль скорости.

Исключением является примыкающий непосредственно к стенке очень тонкий слой, где течение сильно заторможено силами вязкости ($Re_\delta < 1$) и сохраняется линейный профиль осредненной скорости, свойственный ламинарному течению в пристеночной области. Эта часть турбулентного пограничного слоя носит название вязкого подслоя; остальная часть слоя, где силы вязкости постепенно уступают место силам инерции и скорость возрастает до скорости в центральной части потока, называется переходным или буферным слоем.

Как следует из приводимых далее формул (4.2.4) и (4.2.5), толщина вязкого подслоя

$$\delta_v = \frac{5\nu}{u_*} = \frac{25D}{Re_D^{7/8}},$$

из чего явствует, что в диапазоне $Re_D = 4 \cdot 10^3 - 10^5$ она составляет от 1,8 до 0,1% диаметра трубы, что в абсолютном выражении дает 180–10 мкм при $D=10$ мм, 1800–100 мкм при $D=100$ мм и 18–1,0 мм при $D=1000$ мм.

Процесс формирования стабилизированного турбулентного потока носит неустойчивый, перемежающийся характер, особенно при числах Рейнольдса Re_D , лишь слегка превышающих критическое значение. Время от времени на некоторой длине трубы или канала появляются и затем уносятся потоком турбулентные возмущения, именуемые турбулентными пробками. Из-за этого в трубе или канале происходит нерегулярная смена ламинарного и турбулентного профилей скоростей и, как следствие, нерегулярное падение скорости по оси трубы или канала и, наоборот, возрастание ее на периферии в моменты турбулизации течения. Доля времени, в течение которого существует турбулентное течение, носит название коэффициента перемежаемости.

Расстояние, на котором завершается переход к турбулентному течению, называемое длиной начального участка, зависит не только от числа Рейнольдса, но также от формы входа и относительной шероховатости стенок. Для круглых гладких и шероховатых труб с плавным входом это расстояние может быть определено по формуле Филиппова:

$$L_{нач} = \frac{2,45}{\sqrt{\xi_\lambda}} D,$$

где ξ_λ – коэффициент сопротивления трения. В гладких трубах длина начального участка $L_{нач}$ достигает многих десятков D .

Для гладких труб ξ_λ является функцией числа Рейнольдса и определяется в диапазоне $Re_D = 4 \cdot 10^3 - 10^5$ эмпирической формулой Блазиуса:

$$\xi_\lambda = 0,3164 Re_D^{-1/4}, \quad (4.2.2)$$

а в общем случае – формулой Филоненко–Альтшуля:

$$\xi_\lambda = (1,8 \lg Re_D - 1,64)^{-2}.$$

Существенное значение имеет наличие турбулентности в поступающем в трубу или канал потоке; пограничный слой в этом случае турбулизуется скорее, а это сокращает длину начального участка.

Многообразие профилей осредненной скорости стабилизированного турбулентного течения в трубах и каналах аналитически можно описать универсальными уравнениями и соответственно единой универсальной кривой, если в качестве функции и аргумента избрать безразмерную скорость

$$u_+ = v_x / u^* \quad (4.2.3)$$

и безразмерное расстояние до стенки

$$y_+ = y u^* / \nu, \quad (4.2.4)$$

где значение динамической скорости u^* определяется в общем случае формулой $u^* = v_m \sqrt{\xi_\lambda / 8}$, принимающей для гладких труб с $Re_D = 4 \cdot 10^3 - 10^5$, когда ξ_λ определяется формулой (4.2.2), вид $u^* = 0,2 v_m / Re_D^{1/8}$.

Безразмерная осредненная скорость u_+ является однозначной функцией безразмерного расстояния до стенки y_+ («закон стенки»): $u_+ = f(y_+)$.

Классическое решение для круглых гладких труб, полученное еще Прандтлем и Тейлором и дополненное Карманом, включает три уравнения, соответствующих трем областям турбулентного течения – вязкому подслою ($y_+ \leq 5$), буферному слою ($5 < y_+ < 30$) и ядру потока ($y_+ > 30$). В первом из них имеет место линейная зависимость:

$$u_+ = y_+, \quad (y_+ \leq 5), \quad (4.2.5)$$

во втором и третьем – логарифмические зависимости:

$$u_+ = 5,0 \ln y_+ - 3,05, \quad (5 < y_+ \leq 30), \quad (4.2.6)$$

$$u_+ = 2,5 \ln y_+ + 5,5, \quad (y_+ > 30). \quad (4.2.7)$$

На рис. 4.2.5 в полулогарифмических координатах представлен полученный по экспериментальным данным универсальный профиль осредненной скорости турбулентного потока в гладких трубах, на котором нанесены границы трех об-

ластей течения: вязкого подслоя, буферного слоя и ядра потока и асимптотические кривые a и b , соответствующие формулам (4.2.5)–(4.2.7).

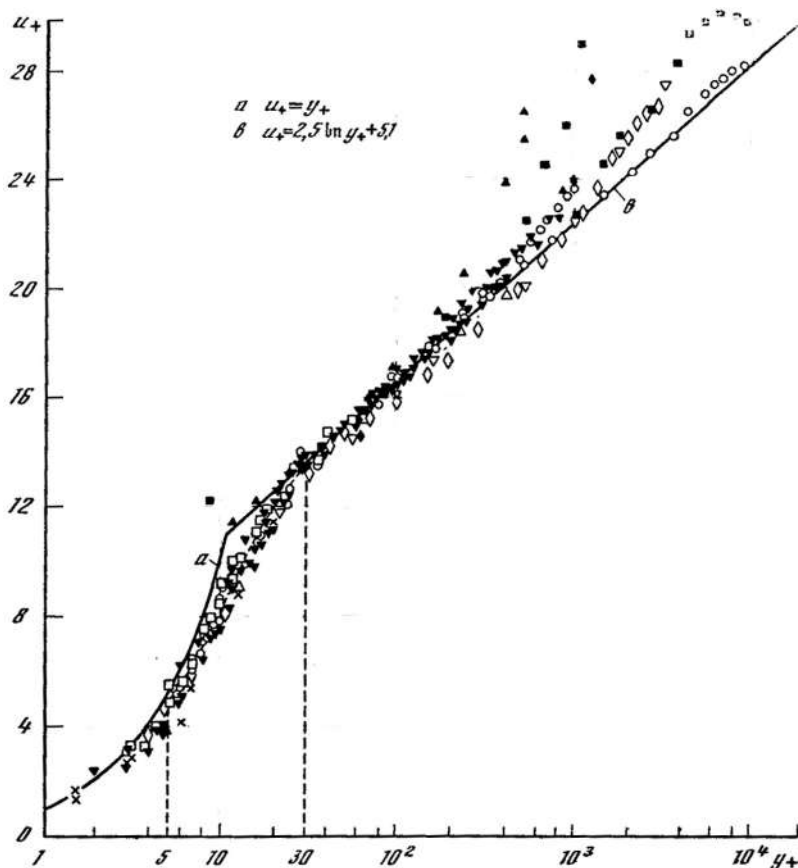


Рис. 4.2.5. Универсальный безразмерный профиль осредненной скорости турбулентного течения в трубах, каналах в пограничном слое пластин

Позже найдены новые аналитические формы выражения распределения осредненной скорости турбулентного потока по поперечному сечению труб. Часть их приведена в обзоре Кестина и Ричардсона. Большинство из них отличаются громоздкостью и другими неудобствами, поэтому в литературе получила широкое распространение простая степенная формула вида

$$\frac{v_x}{v_{x0}} = \left(\frac{y}{R} \right)^{1/n}, \quad (4.2.8)$$

где v_{x0} – скорость газа на оси трубы или канала. Для n берутся следующие значения: 6 при $Re_D = 4 \cdot 10^3$; 7 при $Re_D = 1,1 \cdot 10^5$; 8,8 при $Re_D = 1,1 \cdot 10^6$; 9,8 при $Re_D = 2 \cdot 10^6$; 10 при $Re_D = 3,2 \cdot 10^6$.

Трејвис, Бур и Сесонске предложили определять значение с помощью весьма точных, но громоздких полиномов.

Более просто, чем по (4.2.8), но не так точно, распределение скоростей определяется по формуле Альтшуля:

$$\frac{v_x}{v_{x0}} = \left(\frac{y}{R} \right)^{0,69\sqrt{\xi_\lambda}}.$$

Недостатком степенных формул является непригодность их для малых значений y_+ (менее 30–40).

В соответствии с выражением (4.2.8) максимальная осредненная скорость, располагающаяся на оси труб и каналов (см. рис. 4.2.6), больше средней скорости течения (располагающейся во всех случаях на расстоянии $y = 0,22R$) при $Re_D = 4 \cdot 10^3$ на 26,4%, при $Re_D = 1,1 \cdot 10^5$ на 22,4%, при $Re_D = 1,1 \cdot 10^6$ на 17,7% и т. д. Для сравнения укажем, что при ламинарном течении максимальная скорость газа выше средней на 100%.

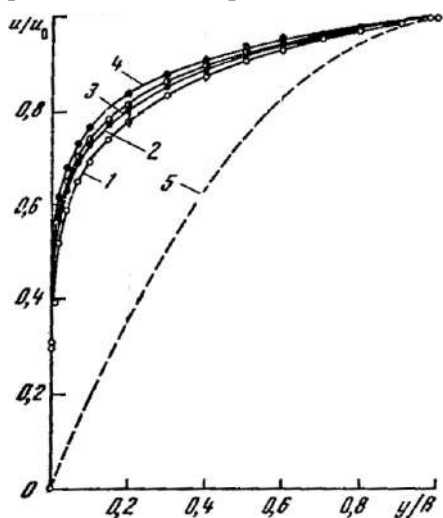


Рис. 4.2.6. Распределение осредненной скорости стабилизированного турбулентного потока в трубах (опыты Никурадзе): 1 – $Re_D = 4000$; 2 – 23 300; 3 – 105 000; 4 – 111 000; 5 – параболический профиль ламинарного течения.

Для прямоугольных труб и каналов профиль осредненной скорости описывается аналогичными уравнениями, но с другими числовыми коэффициентами. При этом наблюдается различие профилей скорости по короткой и длинной сторонам. Обращает на себя внимание факт сравнительно высоких значений скорости в углах. Это объясняется возникновением в них так называемых вторичных течений, направленных по биссектрисе в угол, откуда они растекаются в обе стороны сечения.

Турбулентные пульсации скорости и их распределение по поперечному сечению потока. При математическом описании турбулентности изменение скорости пульсационного движения среды во времени в течение $\tau < T$ (T – период наблюдаемых пульсаций) представляется часто простой гармонической функцией, т. е. $v'_x(\tau) = V'_x \sin \omega \tau$, $v'_y(\tau) = V'_y \sin \omega \tau$, $v'_z(\tau) = V'_z \sin \omega \tau$, где V'_x , V'_y и V'_z – амплитудные значения продольной, поперечной и касательной составляющих скорости пульсаций; ω – их угловая частота. Скорость пульсационного движения среды можно представить интегралом Фурье:

$$\left. \begin{matrix} v'_x(\tau) \\ v'_y(\tau) \\ v'_z(\tau) \end{matrix} \right\} = \int (A \cos \omega \tau + B \sin \omega \tau) d\omega,$$

где A та B – коэффициенты:

$$A = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left. \begin{matrix} v'_x(\tau) \\ v'_y(\tau) \\ v'_z(\tau) \end{matrix} \right\} \times \cos \omega \tau d\tau, \quad B = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left. \begin{matrix} v'_x(\tau) \\ v'_y(\tau) \\ v'_z(\tau) \end{matrix} \right\} \times \sin \omega \tau d\tau.$$

Среднеквадратичные значения продольной, поперечной и касательной составляющих пульсационной скорости распределяются по поперечному сечению труб и каналов, как и осредненные скорости, неравномерно, но закономерности их изменения с удалением от стенок иные. Характер этих изменений и их численные значения иллюстрирует рис. 4.2.7, на котором приведены результаты измерений составляющих пульсационной скорости, отнесенных к осредненной скорости на оси трубы.

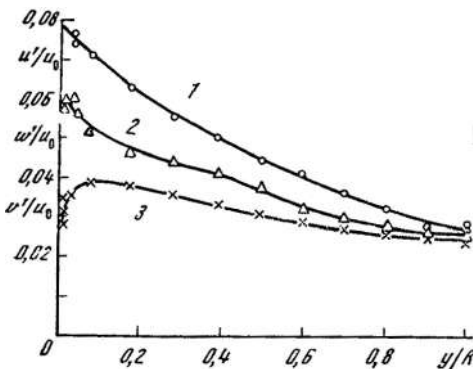


Рис. 4.2.7. Распределение среднеквадратичных значений пульсационных составляющих скорости турбулентного потока по поперечному сечению трубы: 1, 2, 3 – для продольной, тангенциальной, радиальной составляющих скорости соответственно.

Рассматривая эти данные с учетом результатов, полученных в других исследованиях, можно констатировать следующее.

Во-первых, наибольшая неравномерность распределения пульсационной скорости наблюдается вблизи стенок, наименьшая – в центральной части потока; градиент скорости здесь очень невелик, а на оси равен нулю.

Во-вторых, составляющие пульсационной скорости v'_x , v'_y и v'_z не одинаковы по величине повсюду. Исключением является центральная часть потока, где наблюдается изотропия пульсаций; амплитуда составляющих пульсационной скорости достигает здесь 72–75% динамической скорости u^* .

В-третьих, наиболее значительны по величине продольные пульсации скорости с пиком $v'_{x\text{пик}} \cong 2,6u^*$ вблизи стенки при $y_+ \cong 15$, независимым от значения числа Рейнольдса. Наименее значительны поперечные пульсации скорости с пиком $v'_{y\text{пик}} = u^*$ поодаль от стенки при $y \cong (0,05 - 0,15)R$ в зависимости от значения числа Рейнольдса (рис. 4.2.8).

В-четвертых, относительная амплитуда поперечных пульсаций скорости вблизи стенки не зависит от значения числа Рейнольдса, при этом наблюдается перегиб кривой.

В-пятых, интенсивность турбулентности для каждой составляющей пульсационной скорости, т. е. ее отношение к осредненной скорости, вблизи стенки не зависит от значения числа Рейнольдса, как и следовало ожидать, исходя из равенства (4.2.7).

В-шестых, в вязком подслое имеет место повышенная интенсивность продольной турбулентности (30–32%), превосходящая почти на порядок значение интенсивности турбулентности в ядре потока.

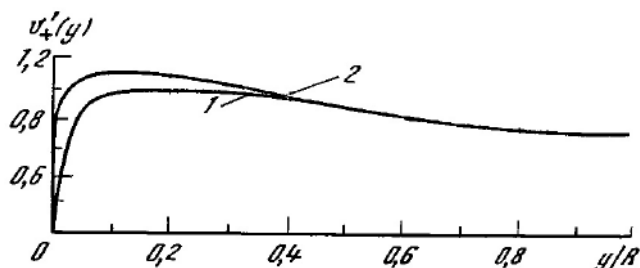


Рис. 4.2.8. Влияние числа Рейнольдса на распределение значений поперечной составляющей скорости пульсаций в ядре турбулентного потока (опыты Лауфера): 1 – кривая при $Re_D = 5 \cdot 10^4$; 2 – то же, при $Re_D = 5 \cdot 10^5$.

Это свидетельствует о том, что течение в вязком подслое отнюдь не ламинарное, как предполагал вначале Прандтль, а, наоборот, имеет весьма резко выраженный пульсационный характер. Более того, течение в этом подслое носит перемежающийся характер; в нем происходит непрерывная смена квазиламинарного и турбулентного режимов течения, сопровождающаяся периодическим вторжением в подслой турбулентных вихрей из смежных областей потока и массопереносом. По наблюдениям, свойственный ламинарному течению линейный профиль скорости даже при умеренных значениях Re_D появляется менее чем в 50% фиксированных профилей и сохраняется лишь до расстояния $y_+ = 1,6 \pm 0,4$, причем угол его наклона к стенке во всех случаях различен. Толщина вязкого подслоя непрерывно меняется во времени. Принимаемые постоянными ее значения $y_+ = 5 \div 8$ являются наиболее вероятными.

Теоретически обоснованного аналитического описания закономерностей распределения составляющих пульсационной скорости по поперечному сечению турбулентного потока не существует. Предложены некоторые более или менее удачные эмпирические формулы для распределения продольной и поперечной составляющих пульсационной скорости в трубах и каналах.

Для продольной составляющей пульсационной скорости Е. М. Минский и Ю. Г. Захаров предложили в свое время формулу

$$v'_x/u^* = 0,368[1 + 1,72(y/R)^{1,8}],$$

которая, однако, неточна, ибо дает на оси $v'_x = u^*$ вместо $v'_{x+} 0,75u^*$. Кроме того, она не охватывает пристеночную область потока, где имеет место простая линейная зависимость $v'_x/u^* = 0,3y_+$, $y_+ \leq 8$.

Для поперечной составляющей пульсационной скорости предложен ряд эмпирических формул.

Дейвис, 1966:

$$v'_+(y_+) = y_+ / (10 + y_+). \quad (4.2.9)$$

Бахарев, 1968:

$$v'_+(y_+) = kn \frac{v_0}{u_*} \left(\frac{y_+}{R_+} \right)^n \exp \left(-\frac{y_+}{R_+} \right); \quad k = 0, 4; \quad n \equiv 1/7. \quad (4.2.10)$$

Бил, 1970:

$$v'_+(y_+) = 0,05 y_+; \quad y_+ \leq 10 \quad v'_+(y_+) = 0,5 + 0,0125(y_+ - 10); \quad 10 < y_+ \leq 30; \\ v'_+(y_+) = 0,75; \quad y_+ > 30.$$

Горбис и Спокойный, 1977:

$$v'_+(y_+) = y_+^2 / (6 + y_+)^2. \quad (4.2.11)$$

Медников, 1975:

$$v'_+(y_+) = \frac{y_+}{(0,62/R_+)y_+^2 + 0,85y_+ + 15}.$$

Медников, 1978:

$$v'_+(y_+) = Ay_+^{3/2} \exp(-0,05y_+); \quad y_+ \leq y_{i+}; \quad (4.2.12)$$

$$v'_+(y_+) = \frac{y_+}{(0,53/R_+)y_+^2 + 0,85y_+ + 14}; \quad y_+ > y_{i+}. \quad (4.2.13)$$

$$A = f(R_+); \quad y_{i+} = f(R_+).$$

Результаты расчета скорости по каждой из формул для различных расстояний от стенки графически проиллюстрированы на рис. 4.2.9.

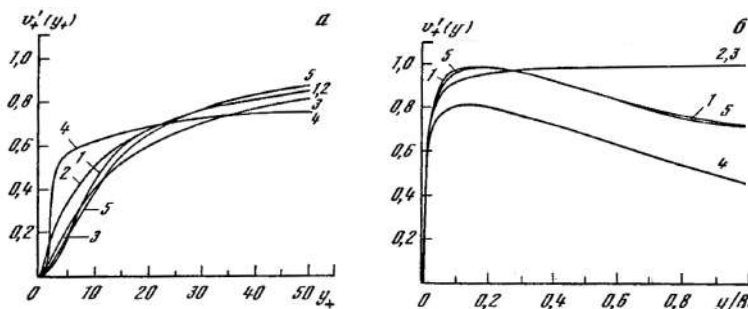


Рис. 4.2.9. Кривые распределения средних квадратичных значений поперечной составляющей скорости пульсаций по поперечному сечению трубы в зависимости от безразмерного расстояния до стенки в пристеночной области (а) и от относительного радиуса трубы (б): 1 – по экспериментальным данным Лауфера при $Re_D = 5 \cdot 10^4$; 2, 3, 4 – по формулам (4.2.9), (4.2.10), (4.2.11) соответственно; 5 – по формулам (4.2.12) и (4.2.13).

Наилучшее согласие с экспериментальными данными Лауфера дают две последние формулы (4.2.12) и (4.2.13). Первая из них получена полуэмпирически, исходя из двух положений:

– коэффициент турбулентной вязкости вблизи стенки равен $D_t \approx v'l \approx v'^2 T \approx y_+^3$, откуда следует $v' \approx y_+^{3/2}$;

– перегиб кривой при $y_+ \approx 5$ обеспечивает зависимость вида $v'_+(y_+) = Ay_+^{3/2} \exp(-\alpha y_+)$.

Вторая формула (4.2.13) отличается от остальных тем, что дает пик скорости при $y/R = y_+/R_+ = 5,13956R_+^{-1/2}$ и минимум на оси $v'_+ = 0,72$, хорошо согласующиеся с экспериментами Лауфера по величине и местонахождению. Ее недостаток – некоторый наклон кривой на оси вместо плавного стыка с зеркальным отображением – легко устраним при составлении программы на ЭВМ (на подступах к оси наклонный участок заменяется прямым).

Переходная координата y_{i+} и коэффициент пропорциональности A для этих формул находятся из уравнений

$$y_{i+}^3 + (1,60377R_+ - 50)y_{i+}^2 - 21,69811R_+y_{i+} - 264,15094R_+ = 0,$$

$$A = \frac{y_{i+}^{-1/2} \exp(0,05y_+)}{(0,53/R_+)y_{i+}^2 + 0,85y_{i+} + 14}.$$

Эти уравнения получены приравниванием формул (4.2.12) и (4.2.13) и их производных в точке сопряжения обеих ветвей кривой и решения полученной системы двух уравнений.

Для условий, имевших место в опытах Лауфера при $Re_D = 5 \cdot 10^4$, когда $R_+ = 1135$, $y_{i+} = 21,51980$ и $A = 1,94485 \cdot 10^{-2}$, а при $Re_D = 5 \cdot 10^5$, когда $R_+ = 8750$, $y_{i+} = 21,30414$ и $A = 1,95609 \cdot 10^{-2}$.

Расчет значений y_{i+} и A несколько громоздок, зато обеспечивает точное сопряжение обеих ветвей по координате и углу наклона касательной. Остальные формулы дают градиент скорости у стенки, а это означает наличие давления на стенку, что физически невероятно. В силу этого остальные формулы пригодны лишь для приближенной оценки значений V'_+ вдали от стенки.

Распределение амплитудных значений пульсационной скорости $V'_+(y_+)$ следует распределению среднеквадратичных значений $v'_+(y_+)$ с множителем $\sqrt{2}$.

Частотный спектр турбулентных пульсаций в трубах и каналах весьма широк и простирается на три-четыре порядка и более. Подробную информацию о частотном спектре в реальных турбулентных потоках дают экспериментальные исследования. Анализ измерений спектральной плотности энергии и продольных Φ_{11} и поперечных Φ_{22} пульсаций позволяет сделать следующие выводы.

Во-первых, наиболее энергоемкими являются низкочастотные пульсации, принадлежащие крупномасштабным вихрям; их частота определяется отношением: $\omega_E = u^*/l_E \cong u^*/0,1R$, где l_E – масштаб энергоемких пульсаций, принимаемый, по Таунсенду, равным $0,1R$. С нижним пределом частоты пульсаций ω_0 значение ω_E связано простым соотношением $\omega_E = 4\omega_0 Re_D^{-1/8}$ и в силу близости часто подменяется выражением (4.2.1).

Для широких труб и каналов ω_E исчисляется обычно десятками и сотнями рад/с, а для узких – сотнями и тысячами рад/с.

Во-вторых, инерционный интервал частот, свойственный наиболее мелким пульсациям (с масштабом λ), выражен только для продольных пульсаций в буферном слое, т. е. в узком диапазоне частот. Интервал вязкой диссипации, в котором происходит непосредственный переход кинетической энергии в тепло, ни в одном спектре не выражен четко.

В-третьих, приближением к стенке частотный спектр несколько изменяется, а именно расширяется за счет более высокочастотных пульсаций, что обусловлено уменьшением масштаба турбулентных вихрей вблизи стенки. При этом основная часть энергии приходится примерно на те же низкочастотные пульсации.

В-четвертых, частотный спектр поперечных пульсаций отличается от спектра продольных пульсаций относительно меньшим содержанием низкочастотных составляющих и большим содержанием высокочастотных составляющих. Это имеет место и в центральной части потока, где наблюдается изотропия пульсаций по амплитуде скорости.

В-пятых, с увеличением числа Рейнольдса кривая спектра, сохраняя сходство, поднимается вверх и, таким образом, захватывает дополнительную область высокочастотных пульсаций.

В-шестых, частотный спектр для круглых труб и прямоугольных каналов в принципе идентичен, однако в каналах содержание низкочастотных пульсаций в ядре потока несколько выше.

Средняя частота пульсаций, определяемая подсчетом отклонений мгновенной скорости потока от осредненной скорости в единицу времени, не зависит от расстояния до стенки. Ее значение прямо пропорционально средней скорости потока $f = kv_m$, где для прямоугольного канала 30×30 см коэффициент $k = 0,1 \text{ см}^{-1}$, а для угольного штрека $k = 0,0625 \text{ см}^{-1}$.

4.2.3. Движение мелких частиц в турбулентном потоке

Рассматриваются силы, действующие на твердые частицы в турбулентном восходящем потоке газа в цилиндрическом канале. Оценивается вклад пульсационных составляющих движения частиц в осредненные значения этих сил. Получены уравнения движения частиц и проведено обсуждение способов задания граничных условий и характеристик движения газов.

Турбулентные потоки газа, несущего твердые частицы, используются в самых различных энергетических и технологических установках. Разнообразные процессы переноса во многом определяются условиями продольного и радиального движения частиц.

Изучение движения частиц в газовом потоке, ограниченном стенками канала, включает рассмотрение трех взаимосвязанных задач – исследования поля скоростей, поля концентраций и взаимодействия частиц со стенкой. Самостоятельный научный и практический интерес представляет и рассмотрение каждой из них в отдельности. Данный раздел посвящен изучению осредненного движе-

ния стоксовых дисперсных частиц ($Re < 0,2$) в продольном и поперечном направлениях.

Для определенности рассматриваются вертикальные восходящие турбулентные потоки газовзвеси с осевой симметрией. Частицы монодисперсные, их концентрация невелика ($\varphi < 10^{-4}$), возможная коагуляция и химические реакции не учитываются. Рассматривается участок стабилизированного течения, когда производными по продольной координате x можно пренебречь. Поле течения рассматривается лишь до $\bar{r} \leq 1 - 2R/D$. Такие потоки во многих случаях принято считать гомогенными. Причем относительные скорости частиц принимаются равными нулю как в продольном, так и в радиальном направлениях, а распределение частиц по сечению считается равномерным.

Такая физическая модель пригодна лишь для приближенного анализа ряда интегральных эффектов, например потерь давления, средней интенсивности конвективного теплообмена со стенкой и т. д. При рассмотрении осаждения частиц на стенках, формирования концентрационного поля, межкомпонентного переноса и других необходимы сведения об относительных скоростях осредненного движения частиц.

Первым приближением в этом направлении является представление о том, что продольное скольжение в вертикальных потоках постоянно по сечению и обусловлено лишь гравитационным сдвигом, а поперечное скольжение пренебрежимо мало. Вблизи стенки эквидистантность профилей \bar{v}_x и \bar{w}_x обычно нарушается. Даже очень малое отличие w_r от нуля оказывает существенное влияние на поведение частиц.

Достоверные физические представления могут быть получены лишь при возможно более полном учете силовых факторов, действующих на частицы. Даже качественный характер их влияния остается невыясненным. Известны попытки количественного сопоставления величин сил, но многие из этих оценок некорректны в связи с неполным и недостаточно обоснованным выбором ряда исходных зависимостей и параметров. В большинстве других работ учитываются лишь один-два из возможных механизмов силового воздействия на частицы. При этом не приводится оценка возможности пренебречь остальными факторами. Рассматривая по существу аналогичные условия течения, разные авторы выбирают в качестве определяющих механизмы различной природы.

Силы, действующие на частицы в потоке газовзвеси. В рассматриваемых условиях сила тяжести действует по направлению течения

$$F_{gx} = -g(\rho_d - \rho_c); \quad F_{gr} = 0.$$

В данном разделе размерные величины сил F_i отнесены к единице объема твердого компонента. Для горизонтальных или наклонных труб условие осевой симметрии не выполняется, и задача может быть сформулирована только в частных производных. В отличие от систем «пузыри газа в жидкости» $\rho_d \geq \rho_c$, и силой Архимеда можно пренебречь. По этой же причине при оценке сил инерции частиц не учитывается влияние нестационарности (силы Бассэ), а также эффект присоединенных масс $\rho_c[d(v-w)/d\tau]$ и инерции газа $\rho_c dv/d\tau$. Сила сопротивления может быть определена по обычной зависимости

$F_c = 3\zeta_c \rho_c w^2 / 8R$. Сложная в общем случае задача определения величины ζ_c упрощается, так как далее предполагается допустимость закона Стокса:

$$F_{cx} = k_2 \rho_d (v_x - w_x) / \tau_0; \quad F_{cx} = k_2 \rho_d (v_r - w_r) / \tau_0. \quad (4.2.14)$$

Величина поправочного коэффициента $k_2 = \zeta_c \text{Re} / 24$ может включать влияние формы частиц стесненности их движения, поправку типа Канингема на режим течения со скольжением и другие эффекты (см. раздел 4.1).

Использование выражения (4.2.14) для $2R > 30$ мкм неправомерно, так как при этом нарушается линейный характер зависимости силы сопротивления от относительной скорости. Время релаксации частиц

$$\tau_0 = 4R^2[(\rho_d / \rho_c) + 1/2] / 18\nu \cong 4R^2 \rho_d / 18\nu \rho_c$$

зависит только от размера частиц, свойств компонентов и определяет как осредненное, так и пульсационное движения частиц

$$\langle w_r'^2 \rangle = \frac{\langle v_r'^2 \rangle}{1 + \omega^2 \tau_0^2}; \quad \frac{\langle (v_r - w_r)^2 \rangle}{\langle v_r'^2 \rangle} = \frac{\omega^2 \tau_0^2}{1 + \omega^2 \tau_0^2}. \quad (4.2.15)$$

В отличие от F_c , сила инерции частиц F_u в большинстве работ не учитывается без достаточного обоснования. Так, например, неправомерно полагают, что инерционными членами можно пренебречь лишь потому, что абсолютное значение расходной концентрации слабо влияет на профиль скорости частиц. Стремление пренебречь силой инерции объясняется еще, по-видимому, и тем, что без нее уравнения движения частиц становятся алгебраическими и существенно легче поддаются анализу. С увеличением размера частиц свыше 1 мкм сила инерции может стать даже определяющей. Аналогичный эффект проявляется в пристенном слое и при движении мелких частиц. Поэтому в теориях осаждения широко используется гипотеза инерционного пробега аэрозольных частиц к стенке. При этом справедливо отмеченное Оуэном противоречие: до начала длины торможения частица считается без инерции, а затем ее движение определяется только инерцией. Очевидна необходимость обязательной оценки инерции частиц во всем поле течения. В рассматриваемой постановке, когда задача, по сути, одномерна и стационарна в осредненном смысле

$$F_{ux} = -\rho_d w_r \frac{dw_x}{dr}; \quad F_{ur} = -\rho_d w_r \frac{dw_r}{dr}.$$

Следующим важным фактором, определяющим поведение диспергента, является возникновение поперечной силы F_s , обусловленной градиентом осредненной скорости жидкости при движении частиц в поле течения со сдвигом (так называемый TPE – tubular pinch effect).

Этот эффект детально исследовался экспериментально и теоретически. В зависимости от величин сил, действующих на частицу, и их моментов выражение для F_s приобретает различный вид. Для рассматриваемых условий наиболее приемлемым представляется выражение Сафмена. Оно получено для свободно вращающегося шара, находящегося в течении с линейным сдвигом при значениях $\text{Re} < 1$:

$$F_s = k_4 \rho_c v^{1/2} (v_x - w_x - \Delta v_x) 4R^2 [(dv_x / dr) / |dv_x / dr|^{1/2}]. \quad (4.2.16)$$

Вклад этой силы по сравнению с силой сопротивления пропорционален отношению $(v_x - w_x)/(v_r - w_r)$, которое вблизи стенки неизбежно становится большим. Поэтому сила Сафмена (4.2.16) в значительной мере определяет траекторию частиц в пограничном слое. Этот вывод требует проверки, так как он сделан на основе расчетов, в которых величина k_4 в (4.2.16) была ошибочно завышена в 4π раз. Выражение (4.2.16) привлекалось для расчета распределения концентрации частиц. Полученное качественное согласие с экспериментальными данными не может служить подтверждением теоретического анализа, поскольку проведенная замена выражения в квадратных скобках в (4.2.16) на $|dv_x/dr|^{1/2}$ приводит к изменению знака величины F_s , что полностью меняет результат в качественном и количественном отношениях. В условиях рассматриваемой задачи величина F_s с учетом знака градиента скорости может быть представлена в виде

$$F_{sx} = 0; \quad F_{sr} = \frac{3}{4} \frac{6,46}{\pi} \rho_c v^{1/2} R^{-1} \left(w_x - v_x - R \frac{dv_x}{dr} \right) \left| \frac{dv_x}{dr} \right|^{1/2}. \quad (4.2.17)$$

Для потоков газовых суспензий характерна естественная или искусственная электризация дисперсных частиц. Наложение внешних электрических полей – один из эффективных методов повышения интенсивности тепломассопереноса в потоках газозвеси. Рассматриваемые системы изучались применительно к электрогидродинамическим устройствам и генераторам. Считается, что внешнее поле отсутствует и стенка трубы проводящая. Напряженность электрического поля определяется уравнением Пуассона, записанным с учетом одномерности задачи ($E_x = 0$)

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} (rE_r) = \frac{3\phi}{4\pi R^3} \frac{q}{\epsilon_0}.$$

Здесь q – средний заряд частицы. Экспериментально показано, что для частиц с $2R \cong 80$ мкм величина заряда колеблется между 10^{-14} и $2,3 \cdot 10^{-13}$ к/кг в зависимости от механизма зарядки. Так как $q_1 \equiv q/m_d \propto R^{-1}$, то для рассматриваемых частиц можно полагать $q \cong 10^{-5} - 10^{-4}$ к/кг, и силу, действующую на единицу объема частиц, можно представить в виде

$$F_{qx} = 0; \quad F_{qr} = \rho_d q_1 E_r = \frac{\rho_d^2 q_1^2}{\epsilon_0 r} \int_0^r \phi r dr. \quad (4.2.18)$$

В условиях конвективного или радиационного теплообмена поток газозвеси нельзя считать изотермическим. Возникающие при этом силы термо- и фотофореза имеют радиометрическую природу, а их корректный расчет требует использования принципов термодинамики необратимых процессов. При этом получено

$$F_t = -9k_6 \frac{v^2 \rho_c}{2R^2 T} \text{grad} T.$$

В этом выражении $k_6 = [4\lambda + (0,5 + c_t \text{Kn})\lambda_d] / [2\lambda + (1 + 2c_t \text{Kn})\lambda_d]$. Так как $\lambda_d \gg \lambda$, можно полагать $k_6 \approx 1/2$.

Пренебрегая осевой составляющей температурного градиента по сравнению с радиальной и используя уравнение состояния для изобарического процесса ($\rho T = \text{const}$), получим

$$F_{ix} = 0; \quad F_{ir} = -\frac{9\mu^2}{4\rho_0 T_0 R^2} \frac{dT}{dr}.$$

Явление фотофореза изучено значительно слабее. В настоящее время возможна лишь ориентировочная оценка величины силы положительного фотофореза

$$F_{\Phi} = k_7 \frac{9\nu^2 \rho_c}{2\lambda_d T R^2} q_R; \quad k_7 \cong \frac{\lambda_d}{4(\lambda + \lambda_d)}; \quad F_{\Phi x} = 0; \quad F_{\Phi r} = \frac{9\mu^2}{8\lambda_d \rho_0 T_0 R^2} q_R. \quad (4.2.19)$$

Принято, что $\lambda_d \gg \lambda$, а изменение температуры потока по длине считается несущественным.

Для расчета величины F_{Φ} необходимо иметь сведения о полях температур и лучистых потоков, что требует решения задачи о радиационно-конвективном теплообмене с потоком газовой среды. В условиях, характерных для потоков аэрозольных частиц, концентрация частиц является достаточно малой для того, чтобы частицы не оказывали влияния на температурное поле газа. В этом случае можно воспользоваться условием подобия температурных и скоростных полей

$$dT/dr = [(T_0 - T_D)/v_{x0}](dv_x/dr). \quad (4.2.20)$$

Радиационный поток в системе с цилиндрической геометрией, даже при столь серьезных допущениях, как отсутствие рассеяния излучения на частицах, абсолютно черные стенки канала, равномерное распределение частиц по сечению, записывается в достаточно сложном виде. В большинстве случаев, когда $q_R \leq q$, для оценки радиационного потока можно использовать экспоненциальный закон Бугера без учета специфики цилиндрической геометрии. Применение же сложных зависимостей во многих случаях не оправдывает себя в связи с недостаточной точностью выражения (4.2.19) и тем обстоятельством, что при близости величин конвективного и радиационного потоков сила термофореза значительно превышает силу фотофореза.

Неизотермичность потока вызывает изменение плотности газа по сечению канала, которое приводит к появлению вторичных течений. В связи с малостью температурных перепадов в рассматриваемой задаче влиянием этих течений можно пренебречь. Кроме того, газовый компонент потока считается однородным, так что явление диффузиофореза можно не рассматривать.

Выражения для действующих на частицы сил записаны без специального учета пульсирующего характера ряда входящих в них физических величин.

Влияние пульсаций на движение частиц. Пользуясь методом Рейнольдса, представим в выражениях для F_i величины, имеющие турбулентную природу в виде суммы осредненной и пульсационной составляющих. После статистического осреднения члены, содержащие осредненные составляющие величин, будут полностью соответствовать выражениям, приведенным в предыдущем разделе. Сохранившиеся после осреднения члены пульсационной природы, отме-

чаемые в дальнейшем индексом $*$, должны учитываться в уравнении осредненного движения частиц.

Сила тяжести F_g не зависит от величин, имеющих пульсационный характер. Поэтому ее актуальное значение совпадает со средним, т. е. $F_g^* = 0$.

Анализ силы сопротивления также приводит к выводу, что $F_c^* = 0$, так как величина F_c согласно (4.2.14) линейна относительно пульсационных скоростей. Для инерционной составляющей $F_{ix}^* = -\rho_d \langle w_r' dw_x' / dr \rangle$.

В цилиндрических координатах с учетом уравнения баланса массы и одномерности течения полученную величину можно представить в виде

$$F_{ix}^* \approx \frac{\rho_d}{r} \frac{d}{dr} \left(r D_d \frac{dw_x}{dr} \right). \quad (4.2.21)$$

Выражение (4.2.21) отражает турбулентную диффузию продольного импульса частицы в радиальном направлении. При использовании (4.2.21) главную сложность представляет корректное определение эффективного коэффициента переноса D_d . В рассматриваемых условиях основным механизмом, определяющим природу этого коэффициента, является вовлечение частиц в пульсационное движение несущей среды. Выражение (4.2.21) справедливо для более крупных частиц, случайные радиальные перемещения которых определяются другим механизмом: соударением частиц со стенкой и между собой. При этом детальные качественные рассуждения о последовательном увеличении и уменьшении w_x при движении крупных частиц поперек течения можно с успехом заменить простым анализом выражения (4.2.21). Предположение о постоянстве w_r соответствует простейшему случаю $D_d = \text{const}$, что имеет место лишь для очень крупных частиц. Пользуясь аналогичным методом, для радиальной составляющей силы F_u легко получить

$$F_{ur}^* = -\frac{\rho_d}{2} \frac{d \langle w_r'^2 \rangle}{dr}. \quad (4.2.22)$$

Величина F_{ur}^* отражает влияние неоднородности поля поперечных пульсационных скоростей частиц. Имеются сообщения об «открытии нового механизма миграции частиц», связанного именно с непостоянством $\langle w_r'^2 \rangle$. При этом выражение для скоростей миграции получено весьма сложным и искусственным методом при учете из всего набора сил лишь осредненного сопротивления F_{cr} и инерции пульсационного движения частиц. Оно непосредственно следует из равенства $F_{cr} + F_{ur}^* = 0$ при учете соотношения (4.2.15) и зависимости для пульсационной скорости газа

$$\langle v_r'^2 \rangle / v_{xt}^2 = [y / (10 + y)]^2. \quad (4.2.23)$$

Тогда из (4.2.14) и (4.2.22) следует

$$w_r = -\frac{\tau_0}{2} \frac{d \langle v_r'^2 \rangle}{dr} = \frac{10 y \tau_0 v_{xt}^3}{(10 + y)^3 (1 + \omega^2 \tau_0^2) v}.$$

Подобный произвольный выбор двух составляющих из всего комплекса действующих на частицу сил может представить интерес лишь для весьма частных

условий течения. Однако и в этом случае результаты (в частности, вывод о максимуме миграционной скорости при $y=1$) некорректны в связи с использованием зависимости (4.2.23), дающей неверные значения $\langle v_r'^2 \rangle$ именно в области малых y .

Иной подход к учету влияния неоднородности поля $\langle v_r'^2 \rangle$ предлагает, что осредненное поперечное движение частиц отсутствует, а среднеквадратичная скорость их пульсационного движения $\langle w_r'^2 \rangle^{1/2}$ с некоторым запаздыванием следует за изменением $\langle v_r'^2 \rangle^{1/2}$ при приближении к стенке. Для определения этого запаздывания в уравнение поперечного движения частиц вместо мгновенных значений пульсационных скоростей подставляются их среднеквадратичные значения. В такой постановке полностью игнорируется пульсационный характер величин v_r' и w_r' , и миграция частиц не может быть установлена. Такие модели особенно неправомерны в пограничном слое, поскольку именно пристенная турбулентность богата высокочастотными вихрями.

Корректный учет миграционного эффекта может быть проведен лишь на основе решения уравнений движения диспергента, включающих вклад пульсационного движения в силу инерции частиц F_u^* . Неоднородность поля пульсационных скоростей должна учитываться и при расчете соответствующих коэффициентов скольжения, поскольку зависимости вида (4.2.15) могут служить лишь первым приближением.

Анализ выражения для силы Сафмена (4.2.17) показывает, что $F_s^* \approx 0$. Этот результат, однако, не свидетельствует об отсутствии влияния пульсационного характера движения на величину поперечной силы Сафмена. Он является лишь следствием того, что выражение (4.2.16) получено для неп пульсирующего течения Куэтта. В результате специального анализа этого вопроса получено следующее выражение:

$$F_{sr}^* = \frac{7C_L R^3 \rho_c j_0 v_x}{40} \tau_0^2 \omega^2 \left(1 - \frac{\rho_c}{\rho_d} \right),$$

где C_L – коэффициент поперечной силы; j_0 – величина сдвига в жидкости.

Сопоставительный анализ величин F_{sr} и F_{sr}^* показывает, что влияние пульсирующего характера течения становится определяющим, начиная с размера частиц порядка десятков микрон. Для частиц с $2R \leq 10$ мкм, рассматриваемых в данной работе, выполняется неравенство $F_{sr} \gg F_{sr}^*$ и вкладом пульсаций можно пренебречь.

Рассмотрим пульсации величины электростатической силы F_q , обусловленные случайной природой функции распределения частиц в окрестности рассматриваемой частицы. При этом осреднение силы приводит к выводу $F_q^* = 0$, что может быть непосредственно получено и из выражения (4.2.18). Величина же пульсаций F_q' может оказаться значительной и привести к существенному

увеличению пульсационной скорости частиц. Для оценки среднеквадратичного значения $\langle F_q'^2 \rangle$ можно пользоваться зависимостью

$$\langle F_q'^2 \rangle \approx \frac{3}{4\pi} \frac{q^4 \Phi}{\epsilon_0^2 R^4}.$$

Однако оценки показывают, что вклад электростатических эффектов, так же, как и соударений со стенкой, в пульсационное движение частиц значителен лишь при $2R \gg 10$ мкм. Для мелких частиц характеристики их пульсационного движения полностью определяются турбулентностью несущей среды.

Что касается сил тепловой природы, то принятая гипотеза об отсутствии влияния частиц на температурное поле потока позволяет установить, что $F_t^* = 0$. К аналогичному выводу о вкладе пульсаций в величину силы фотофореза ($F_\Phi^* = 0$) можно прийти на основе анализа соотношения (4.2.19) зависимостей для лучистого потока.

Выражения, полученные для действующих на частицы сил F_i и F_i^* , позволяют перейти к уравнениям движения для осевого и радиального направлений.

Математическая формулировка задачи движения мелких частиц. Уравнение движения частиц

$$\sum_{i=1}^7 (F_i + F_i^*) = 0.$$

Выберем в качестве масштабов длины и скорости радиус канала r_0 и скорость газа на оси потока v_0 . Представим проекции этого уравнения на осевую и радиальную координаты в следующем безразмерном виде:

$$-\frac{\text{Fr}}{2} \left(1 - \frac{\rho_c}{\rho_d} \right) - \frac{\bar{w}_x - \bar{v}_x}{2\text{Stk}} - \bar{w}_r \frac{d\bar{w}_x}{d\bar{r}} + \frac{2}{\text{Re}\bar{r}} \frac{d}{d\bar{r}} \left(\bar{r} \text{Sc}^{-1} \frac{d\bar{w}_x}{d\bar{r}} \right) = 0, \quad (4.2.24)$$

$$-\frac{\bar{w}_r}{2\text{Stk}} - \bar{w}_r \frac{d\bar{w}_r}{d\bar{r}} + \frac{3,09}{\sqrt{2}\text{Re}} \frac{\rho_c}{\rho_d} \frac{D}{2R} \left(\bar{w}_x - \bar{v}_x - \frac{2R}{D} \frac{d\bar{v}_x}{d\bar{r}} \right) \left| \frac{d\bar{v}_x}{d\bar{r}} \right|^{1/2} +$$

$$+ k_E \frac{1}{\bar{r}} \int_0^{\bar{r}} \Phi_r \bar{r} d\bar{r} - 9 \frac{\rho_c}{\rho_d} \left(\frac{D}{2R\text{Re}} \right)^2 \left(1 - \frac{T_{cm}}{T} \right) \frac{d\bar{v}_x}{d\bar{r}} + \quad (4.2.25)$$

$$+ 2,25 \frac{\rho_c}{\rho_d} \left(\frac{D}{2R} \right)^3 \frac{\text{Bi}_{\bar{r}}}{\text{Re}} \left[1 - \left(\frac{T_{cm}}{T_0} \right)^4 \right] f_{\bar{r}}(\text{Bu}, \Phi_r) - \frac{1}{2} \frac{d\langle \bar{w}_r'^2 \rangle}{d\bar{r}} = 0.$$

Здесь $\bar{v}_x = v_x/v_0$; $\bar{w}_x = w_x/v_0$; $\bar{w}_r = w_r/v_0$; $\bar{r} = r/r_0$; $\text{Fr} = gD/v_0^2$ – критерий Фруда; $\text{Stk} \equiv v_0 \tau_0/D = (\text{Re}/18)(\rho_d/\rho_c)(2R/D)^2$ – критерий Стокса; $\text{Re} = v_0 D/\nu$ – критерий Рейнольдса; $\text{Sc} = \nu/D_d$ – критерий Шмидта; $\text{Bi}_{\bar{r}} = \sigma T_0^3 2R/\lambda_d$ – радиационный критерий Био; $\text{Bu} = 3/4 k_f \Phi_0 (D/2R)$ – критерий Бугера; комплекс $k_E \equiv q_l^2 r_{\Phi}^2 \rho_d \Phi_0 / \epsilon_0 v_0^2$. Член, соответствующий силе термофореза, записан с учетом выражения (4.2.20), а неравномерность радиационных потоков $f_{\bar{r}}$ определяется по закону Бугера с учетом осевой симметрии потока. Значения концентрации, входящие в уравнение (4.2.25), отнесены к величине концентрации час-

тиц на оси $\varphi_r \equiv \varphi/\varphi_0$. Система (4.2.24) и (4.2.25) справедлива при произвольном распределении концентрации $\varphi(r)$. При записи (4.2.25) учтено также, что $\langle v_r(r) \rangle = 0$. Если оценить характерную частоту пульсации как $\omega \propto v_0/D$, то на основе соотношения (4.2.13) можно записать

$$\langle \bar{w}_r'^2 \rangle \cong \frac{\langle \bar{v}_r'^2 \rangle}{1 + \text{Stk}^2},$$

что упрощает вычисление последнего члена в уравнении (4.2.25). Зависимости для скоростных полей частиц могут быть представлены в следующем критериальном виде:

$$\begin{aligned} \bar{w}_x &= f(\text{Fr}, \text{Stk}, \text{Re}, \bar{w}_r, \bar{r}), \\ \bar{w}_r &= \Phi(\text{Stk}, \text{Re}, k_E, \text{Bi}_{\bar{r}}, T_{cm}/T_0, \text{Bu}, \bar{w}_x, \bar{r}). \end{aligned}$$

Граничные условия для системы (4.2.24) и (4.2.25) имеют вид

$$\bar{w}_r = 0; \quad d\bar{w}_x/d\bar{r} = 0; \quad \bar{w}_x = 1 - \text{FrStk}[1 - (\rho_c/\rho_d)] - 4\psi\text{Stk}\bar{v}_x^2. \quad (4.2.26)$$

Последнее слагаемое в этом выражении отражает влияние радиального переноса импульса частицами вблизи оси трубы и записывается по аналогии с соответствующим выражением для несущей среды. Коэффициент ψ учитывает различие между турбулентной вязкостью газа ν^* и величиной D_d .

Уравнения (4.2.24) и (4.2.25) с граничными условиями (4.2.26) представляют полную краевую задачу и полностью определяют гидродинамику осесимметричного потока газозвеси тонкодисперсных материалов. Однако для решения задачи необходимы: сведения о радиальном распределении средней $\bar{v}_x(\bar{r})$ и пульсационной $\langle \bar{v}_r'^2(\bar{r}) \rangle$ скоростей газа, а также коэффициента диффузии частиц $D_d(\bar{r})$ и их концентрации $\varphi(\bar{r})$.

Рассмотрим вначале первый из этих вопросов. Обычно анализируется лишь одна зона течения – или турбулентное ядро, или вязкий пристенный слой. Применимость первого подхода ограничена диапазоном крупных частиц ($2R \geq 100$ мкм), инерционность которых столь велика, что они не испытывают влияния тонкого вязкого подслоя, толщина которого может быть соизмерима с диаметром частиц. Второй подход приемлем лишь для частиц исчезающе малых размеров, поведение которых в ядре течения может считаться диффузионным, а гетерогенность (в частности, в виде скольжения скоростей) проявляется лишь в пристенной зоне. Для частиц промежуточных размеров необходимо совместное рассмотрение движения их в каждой из зон течения.

В общем случае скоростная структура несущей среды зависит от влияния частиц. Известно, что частицы могут существенно изменять как осредненные, так и пульсационные скорости несущей среды. На основании полученных зависимостей и экспериментальных данных о потерях давления в потоках газозвеси можно полагать, что при $\varphi \leq 10^{-4}$ влияние частиц пренебрежимо мало. Аналогичный вывод получен при использовании критерия, вытекающего из теории Баренблатта, ряд положений которой в последнее время открывают вторично. Указанный диапазон концентраций соответствует области слабо запыленных потоков и включает большинство аэрозольных систем. Для рассматриваемых в

настоящей постановке размеров и концентраций частиц их можно считать пассивной примесью. Поэтому для задания полей $\bar{v}_x(\bar{r})$ и $\langle \bar{v}_r'^2(\bar{r}) \rangle$ далее рассматриваются результаты, полученные для однородных потоков. При выборе формулы для $\bar{v}_x(\bar{r})$ приходится руководствоваться степенью удобства той или иной формулы для решения конкретной задачи. Рассматриваемая система уравнений требует задания непрерывных функций $\bar{v}_x(\bar{r})$ и $d\bar{v}_x/d\bar{r}$. Поэтому большинство схем течения, использующих для различных зон разные законы изменения турбулентной вязкости, при решении данной задачи непригодны – на границах зон производная скорости претерпевает разрывы. Так как

$$d\bar{v}_x/d\bar{r} = -\frac{\text{Re}\bar{v}_\tau^2\bar{r}}{2[1+(v^*/v)]}, \quad (4.2.27)$$

то для обеспечения непрерывности $d\bar{v}_x/d\bar{r}$ необходимо, чтобы значения v^* на границах раздела зон стыковались. Поскольку молекулярная составляющая числа Шмидта для аэрозольных частиц (определяемая интенсивностью броуновского движения) $\text{Sc}_m \equiv \nu/D_{dm} = 6\pi R_p c v^2/2kT$ очень велика, структура пристенной турбулентности при рассмотрении процессов в таких потоках является очень важной. Сопоставление многочисленных зависимостей, предложенных для v^* , позволяет воспользоваться формулой

$$\alpha = v^*/v \equiv 0,0006y^3, \quad (4.2.28)$$

полученной на основе разложения Мерфи и подтвержденной многочисленными экспериментальными данными. Здесь y – безразмерное расстояние от стенки:

$$y \equiv (r_\infty - r)\frac{v_\tau}{\nu} = \frac{1}{2}\bar{v}_\tau \text{Re}(1 - \bar{r}). \quad (4.2.29)$$

Интегрируя (4.2.27) с учетом (4.2.28), получим распределение скорости в пределах вязкого подслоя:

$$\bar{v}_x = \bar{v}_\tau \left[1,98 \ln \left(1 + \frac{36,6y}{141 - 11,85y + y^2} \right) + 6,85 \arctg \frac{y - 5,93}{10,3} + 3,58 \right]. \quad (4.2.30)$$

Численно эта зависимость весьма слабо отличается от обычной зависимости $\bar{v}_x = v_\tau y$. Величина $d\bar{v}_x/d\bar{r}$ при этом меняется более существенно. Зависимости (4.2.27)–(4.2.30) полностью определяют поле скоростей газа в пристенной зоне, границы которой выбираются согласно рекомендациям: $0 \leq y \leq 7,8$. Для расчета значений скорости при $y > 7,8$ обычные зависимости, основанные на универсальном логарифмическом законе, не могут быть использованы. Поскольку результаты расчетов \bar{v}_x отличаются вблизи центра трубы от экспериментальных данных. На оси потока получается $\alpha = 0$ и $d\bar{v}_x/d\bar{r} \neq 0$, что не имеет физического смысла. При устранении этого недостатка можно получить

$$\bar{v}_x = \bar{v}_\tau \{ (1/0,39) \ln[1 + 0,39(y - 7,07)] + 6,68 + [1/12,6] \ln(0,3 + 0,97\bar{r}) \}, \quad (4.2.31)$$

$$\alpha = 0,39(y - 7,07)(0,03 + 0,97\bar{r}). \quad (4.2.32)$$

Значения констант в (4.2.31), (4.2.32) несколько отличаются от полученных при предположении, что $\alpha = 0$ при $y < 7,8$. Зависимости (4.2.31), (4.2.32) получены с учетом более реалистичных соотношений (4.2.28), (4.2.30). В (4.2.32) так

же, как и в законе центра, имеются два сомножителя, зависимость которых от \bar{r} противоположна. Последнее слагаемое в (4.2.31) – аналог поправочной функции Милликена.

Для использования полученных зависимостей в расчетах следует оговорить метод определения безразмерной динамической скорости v_τ . Если для определенности воспользоваться законом Блазиуса $\zeta = 0,316/(\langle v \rangle D/v)^{0,25}$, то

$$v_\tau = \langle v \rangle \sqrt{\zeta/8} = \frac{0,2\langle v \rangle}{(\langle v \rangle D/v)^{1/8}} = \frac{0,2v_0}{\text{Re}^{1/8}} \left(\frac{\langle v \rangle}{v_0} \right)^{7/8}. \quad (4.2.33)$$

Отношение средней скорости потока к значению ее на оси не зависит от числа Рейнольдса турбулентного потока лишь в простейшем случае, когда профиль скорости задается законом $1/7$. В этом случае $\langle v \rangle = 0,817v_0$ и

$$\bar{v}_\tau \cong 0,168 \text{Re}^{-1/8}. \quad (4.2.34)$$

Это приближенное выражение может уточняться следующим образом: v_τ определяется по (4.2.34), затем интегрируется профиль скорости (4.2.30), (4.2.31) и уточненное значение $\langle v \rangle/v_0$ подставляется в зависимость (4.2.33). После этого по новому значению v_τ рассчитывается функция $\bar{v}_x(\bar{r})$. В связи с указанными особенностями расчета и принятой для α зависимостью (4.2.32) условия $\bar{v}_x = 1$ и $d\bar{v}_x/d\bar{r} = 0$ на оси потока будут выполняться лишь приближенно. Проведенные расчеты показали, что эти отклонения достаточны, чтобы схема расчета \bar{w}_x , опирающаяся на граничные условия (4.2.26), оказалась неустойчивой. Поэтому далее используются иные, но тождественные (4.2.26) по физическому смыслу, граничные условия при $\bar{r} = 0$:

$$\bar{w}_r = 0; \quad d\bar{w}_x/d\bar{r} - d\bar{v}_x/d\bar{r} = 0; \quad \bar{w}_x = \bar{v}_x(0) - \text{FrStk}[1 - (\rho_c/\rho_d)] - 4\psi\text{Stk}\bar{v}_\tau^2.$$

Пример расчета радиального распределения величин v_x , $d\bar{v}_x/d\bar{r}$, α для $\text{Re} = 6,2 \cdot 10^4$ представлен на рис. 4.2.10. Граница, отделяющая пристенную зону от ядра течения, обозначена через $R_1 = 1 - 15,6\bar{v}_\tau^{-1} \text{Re}^{-1}$.

Надежные сведения об интенсивности пульсационного движения газа получены во взаимно дополняющих друг друга экспериментальных исследованиях. По этим данным в непосредственной близости от стенки $\langle v_r'^2 \rangle \cong 0,85 \cdot 10^{-4} y^4 \bar{v}_\tau^2$.

При $y > 7$ зависимости такого вида дают существенно завышенные результаты. В этой области y данная аппроксимация существенно отличается как от (4.2.23), так и от результатов экспериментов Лауфера. Анализ имеющихся данных (рис. 4.2.11) позволил подобрать формулу

$$\langle v_r'^2 \rangle \cong \bar{v}_\tau^2 [y/(6+y)]^4, \quad (4.2.35)$$

которая при $y \rightarrow 0$ удовлетворяет разложению $\langle v_r'^2 \rangle \propto y^4$, при больших значениях y асимптотически приближается к \bar{v}_τ^2 , а во всем диапазоне достаточно хорошо согласуется с экспериментальными данными.

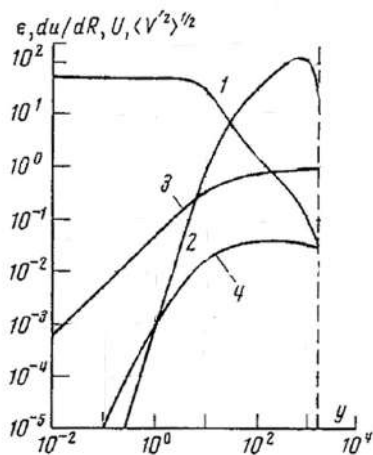


Рис. 4.2.10. Пример расчета характеристик несущей среды: 1 – α , 2 – (dU/dR) ; 3 – U ; 4 – $(y^2)^1$.

В центральной зоне течения $\langle v_r'^2 \rangle$ плавно снижается от \bar{v}_τ^2 при $\bar{r} = 0,8$ до $(0,75\bar{v}_\tau)^2$ при $\bar{r} = 0$. Здесь не может быть использована линейная аппроксимация, поскольку приводит к $d\langle v_r'^2 \rangle d\bar{r} \neq 0$ при $\bar{r} = 0$ и $\bar{r} = 0,8$. Она нарушает условия осевой симметрии и непрерывности производной. Поэтому для описания опытных данных предлагается зависимость $\langle v_r'^2 \rangle = \bar{v}_\tau^2 [0,78 + 0,22 \cos \pi(1 - 1,25\bar{r})]$, удовлетворяющая этим условиям.

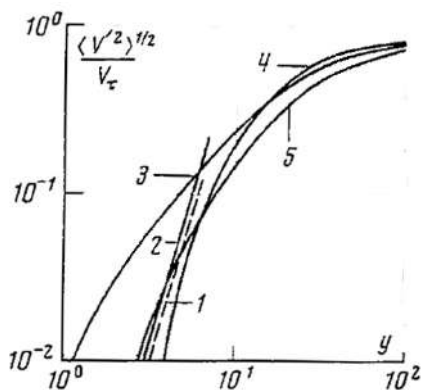


Рис. 4.2.11. Сопоставление различных зависимостей для интенсивности радиальных пульсаций газа в пристенной области: 1, 2, 3, 4 – опытные данные; 5 – зависимость (4.2.35).

Существенно более сложной задачей является корректная оценка коэффициента турбулентного переноса твердых частиц D_d . Обычно в литературе используется одна из двух зависимостей: $D_d = v^*(y)$ или $D_d = \text{const}$. Первая справедлива для очень мелких частиц ($2R \leq 1$ мкм), а вторая соответствует другому крайнему случаю ($2R \geq 100$ мкм). Вопрос определения функции $D_d(y)$ для про-

промежуточных размеров частиц представляется весьма сложным. Этот вопрос является ключевым при изучении осаждения частиц, формирования концентрационного поля и т. д. Можно лишь отметить три основных фактора, которые необходимо учитывать при определении величины D_d . Первый из них, наиболее изученный в настоящее время, состоит в неполноте увлечения частиц пульсационным движением газа. Теории, развитые Ченом и Чао, позволяют проводить пересчет энергетического спектра пульсаций газа для частиц. Спектральные данные дают возможность рассчитывать кривую дисперсии частиц и по ней определять коэффициент турбулентного переноса. Принятая для расчета отношения D_d/ν^* зависимость правомерна лишь при очень малых временах диффузии, поскольку она соответствует отношению $\langle w_r'^2 \rangle / \langle v_r'^2 \rangle$. Расчеты определяют нижнюю границу для D_d/ν^* . Верхняя граница $D_d/\nu^* = 1$ определяется теоремой Чена. При известном времени диффузии этот процесс может быть рассчитан достаточно строго.

Вторым фактором является переход частицы между элементами жидкости, в которых пульсационные скорости могут быть коррелированы весьма слабо. Анализ этого процесса был проведен на основе нелинейного стохастического интегрального уравнения. Результаты решений указывают на возможность существенного уменьшения величины D_d/ν^* за счет этого механизма.

Третьим и наиболее сложным фактором является влияние на величину D_d , инерции частиц в пристенной зоне потока, где характеристики турбулентного переноса несущей среды резко изменяются. Соу полагает, что изменения компенсируются и D_d остается постоянным. Результаты обработки многочисленных данных по осаждению частиц из турбулентных потоков свидетельствуют о том, что в пристенной зоне D_d изменяется (хотя и не так круто, как ν^*) и выполняется соотношение $D_d > \nu^*$.

Перечисленные факторы выходят за рамки рассматриваемой задачи. Здесь в качестве приближения (ввиду отсутствия надежных решений) можно полагать $Sc^{-1} = Sc_m^{-1} + \psi\alpha$, где поправочный множитель ψ учитывает инерционность частиц и является функцией свойств частиц, характеристик турбулентности несущей среды и радиальной координаты. С приближением к стенке величина ψ растет, причем с увеличением времени релаксации частиц τ_0 темп этого роста увеличивается, а значение ψ в ядре потока падает.

Вопрос о влиянии распределения $\phi(\vec{r})$ может в общем случае решаться на основе уравнения переноса при известных функциях $\bar{w}_x(\vec{r})$ и $\bar{w}_r(\vec{r})$. В дальнейшем возможно итерационное уточнение скоростных полей частиц с учетом распределения $\phi(\vec{r})$ в уравнениях (4.2.24), (4.2.25).

Подведем итоги. Проведенный анализ, а также полученное математическое описание движения дисперсных частиц позволяют перейти к качественному и количественному анализу их полей продольной и поперечной скоростей. При этом возникает возможность совместного анализа влияния основных эффектов, проявляющихся в рассматриваемых турбулентных потоках газовзвеси.

4.3. ГИДРОДИНАМИКА АППАРАТОВ

4.3.1. Гидродинамические режимы работы аппаратов

Термин «режимы псевдоожижения» можно рассматривать в узком и широком аспектах. Оба они тесно связаны, поэтому их различие для серьезного исследователя весьма проблематично. Инженер подразумевает под этим термином плотности и скорости движения смесей оживающего агента и твердых частиц в аппарате в целом. Для химиков, рассчитывающих химические реакторы, рассматриваемый термин имеет более глубокий и широкий смысл: механизм движения газа и твердых частиц внутри псевдоожиженного слоя, т. е. в пределах отдельных его зон. Оба аспекта получили подробную теоретическую и экспериментальную трактовку. Нами проблема трактуется в широком аспекте, при этом демонстрируется, что макроскопически рассматриваемое физическое явление может быть описано на основе известных принципов гидромеханики.

Режимы работы аппаратов. Для большей наглядности и качественного отображения разнообразия и сложности состояний системы «газ (жидкость) — дисперсные частицы» было разработано общее графическое представление в виде так называемой фазовой диаграммы. Последняя не является оригинальной с математической точки зрения, но позволяет весьма просто очертить различные области системы, что особенно полезно для практики. Для некоторых процессов диаграмма может быть использована при определении давлений и составлении материальных балансов, аналогично энтальпийным диаграммам в тепловых расчетах. На рис. 4.3.1 представлены три основных типа вертикальных потоков рассматриваемой дисперсной системы: (а) восходящий прямоток газа и твердых частиц; (б) нисходящий прямоток; (в) противоток газа (восходящего потока) и твердых частиц.

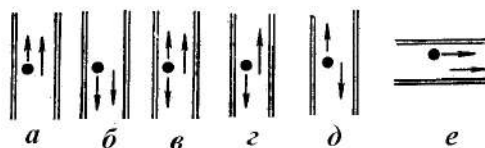


Рис. 4.3.1. Направление потоков в системах «газ – дисперсные частицы»:

а – восходящий прямоток; б – нисходящий прямоток; в – отсутствие результирующего потока дисперсных частиц (псевдоожижение); г – противоток; д – противоток при плотности газа больше плотности частиц; е – горизонтальный транспорт.

Вертикальные потоки трех указанных типов при различных концентрациях твердой фазы схематически изображены на рис. 4.3.2. Однородные системы, например «газ – катализатор», могут находиться в области концентраций, характерных для плотной фазы (по существу, обычная, т. е. свободная, рыхлая упаковка слоя) или разбавленной фазы (0–10% плотности упаковки неподвижного зернистого слоя). Для промежуточных концентраций характерны неоднородные системы – либо поршни газа и твердых частиц, либо газовые пузыри в

псевдооживленном слое. Псевдооживление капельными жидкостями обычно происходит без образования пузырей или поршней. В этом случае системы приближаются к идеальным, допускающим изменение концентрации твердых частиц от нулевой до соответствующей насыпной плотности. Неоднородные системы будем называть неидеальными, а однородные – в полном диапазоне концентраций – идеальными. Рассмотрим фазовую диаграмму неидеальных систем, более важных для практики.

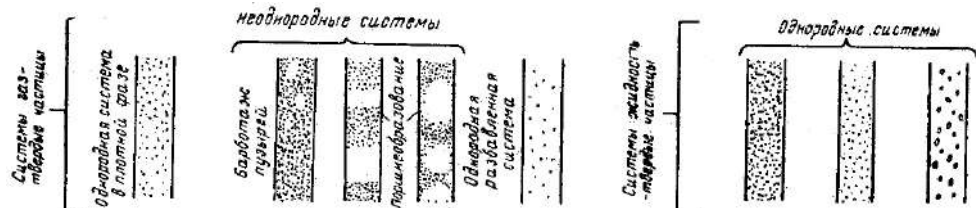


Рис. 4.3.2. Концентрации твердого материала при псевдооживлении

Обобщенная фазовая диаграмма. По оси ординат обобщенной фазовой диаграммы отложен перепад давления на единицу высоты зернистого слоя. По оси абсцисс – скорость газа относительно стенок аппарата, рассчитанная на полное его сечение. В качестве параметра приняты линии постоянной массовой скорости твердых частиц. На рис. 4.3.3 схематически представлена полная фазовая диаграмма для неидеальной системы типа «газ – дисперсные частицы».

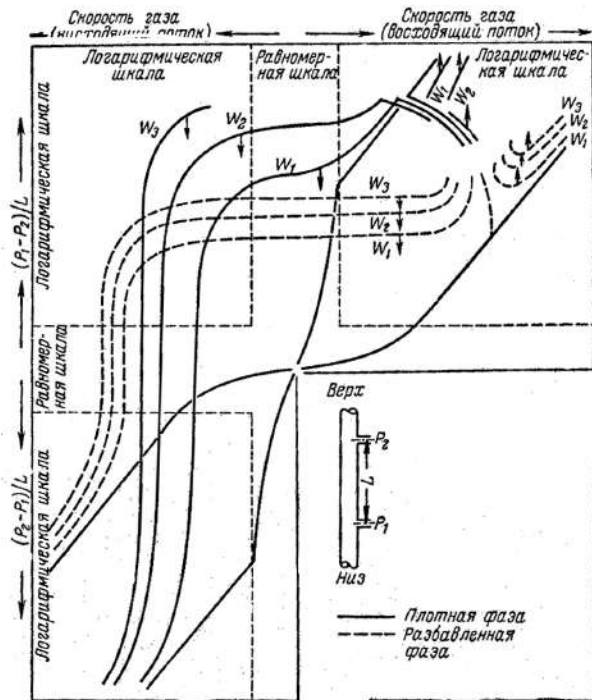


Рис. 4.3.3. Схематическая фазовая диаграмма для двухфазной системы «газ – дисперсные частицы» в вертикальном аппарате

Перемещение вдоль оси абсцисс от точки начала отсчета (где скорость равна нулю) соответствует увеличению скорости газа: вправо – восходящего потока, влево – нисходящего. Перемещение вдоль оси ординат вверх от начала отсчета соответствует увеличению перепада давлений $(P_1 - P_2)/L$, вниз – росту отрицательного его значения. Символами W_1, W_2, W_3 обозначены линии постоянной массовой скорости (масса, прошедшая в единицу времени через единицу площади поперечного сечения аппарата). Стрелки на кривых показывают направление движения твердых частиц (вверх или вниз).

Диаграмму удобно представить в логарифмической анаморфозе, но тогда нельзя пройти через нулевые значения скорости или перепада давления без разрыва координатной сетки. На рис. 4.3.3 эта область ограничена вертикальным и горизонтальным пунктиром. Здесь при низких скоростях восходящего или нисходящего газового потока и при нулевой скорости может быть использована равномерная шкала. Типы шкал указаны на рис. 4.3.3, где диаграмма занимает, по существу, три квадранта. Верхний правый из них характеризует области восходящего прямотока и противотока газа и твердых частиц; верхний и нижний левые квадранты соответствуют областям нисходящего прямотока.

Неподвижные и псевдоожигенные слои, нулевой суммарный поток твердых частиц (восходящий поток сжижающего агента). Верхний правый квадрант (рис. 4.3.3), более подробно изображенный на рис. 4.3.4, соответствует восходящему газовому потоку.

При этом линиям, проведенным внутри квадранта, отвечают различные условия. Последние изображены на небольшой схеме справа, где они снабжены буквами, обозначающими соответствующие отрезки линий основной диаграммы. В вертикальный аппарат с неподвижным зернистым слоем газовый поток может быть подан снизу под поддерживающую решетку. Он движется вверх через слой твердых частиц. Где-то внутри слоя расположены точки измерения давлений P_1 и P_2 , и перепад давлений регистрируется в зависимости от скорости газа. Кривая OAB на рис. 4.3.4 может быть заранее рассчитана по уравнениям сопротивления неподвижного зернистого слоя. Вдоль кривой OAB нет суммарного потока твердых частиц между точками измерения давлений P_1 и P_2 , поэтому кривая имеет надпись $W = 0$.

В точке B перепад давлений, обусловленный газовым потоком, достигает значения, равного весу твердых частиц, приходящемуся на единицу площади поперечного сечения аппарата. С этого момента дисперсные частицы поддерживаются во взвешенном состоянии газовым потоком и не должны были бы нуждаться в поддерживающей решетке. Такое положение соответствует средним условиям. Однако скорости в разных точках поперечного сечения аппарата могут различаться, поэтому частицы будут падать в тех точках сечения, где скорость наименьшая. Точка B , соответствующая этим условиям, называется точкой начала псевдоожигения.

При последующем возрастании скорости газа (за пределы точки B) число твердых частиц между точками измерения давлений P_1 и P_2 уменьшается. Соответственно по кривой BD понижается перепад давлений на единицу высоты

слоя, хотя полный перепад давлений (по всей высоте слоя) остается неизменным. В этих условиях избыток газа, сверх необходимого для начала псевдоожижения, движется через зернистый слой в виде газовых пузырей. Число и средний размер последних возрастают по мере приближения к точке D . В результате создаются благоприятные условия для слияния восходящих пузырей.

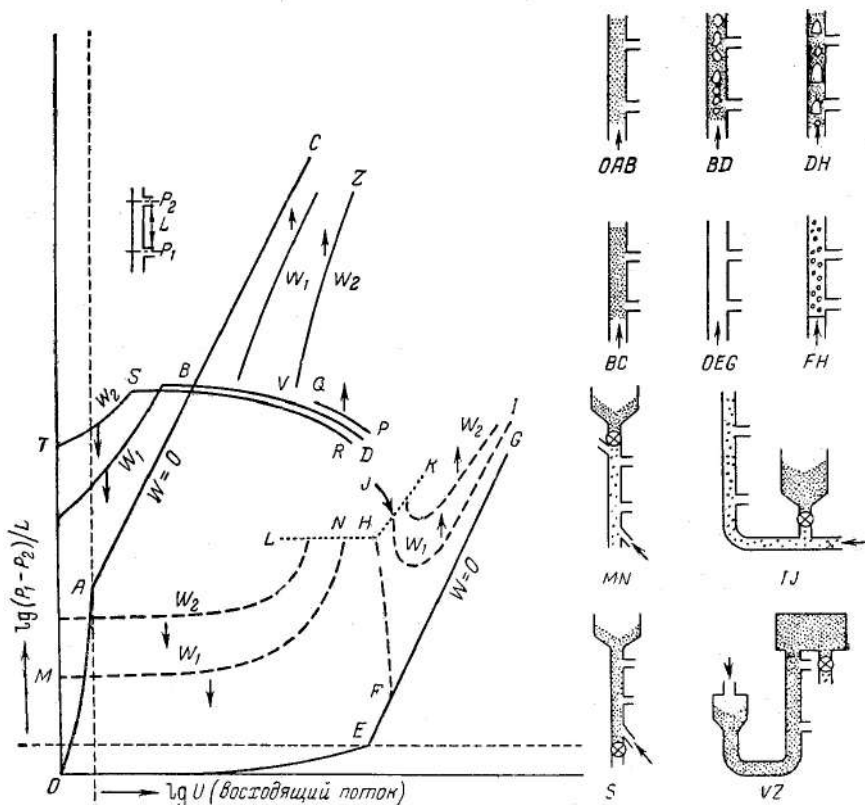


Рис. 4.3.4. Схематическая фазовая диаграмма для области восходящего потока газа

В точке D увеличивающиеся в размерах пузыри еще до выхода из слоя могут достигать диаметра аппарата, образуя газовые пробки (или поршни), которые перемещают вверх прослойки, или поршни твердых частиц. Скопления твердых частиц на периферии аппарата могут проскальзывать вниз мимо поднимающихся пузырей. Каждый несколько секунд газовый пузырь разрушается на выходе из слоя, но пока еще не происходит транспорта (восходящего или нисходящего) твердых частиц.

При дальнейшем возрастании скорости газового потока за пределы точки D нарушается непрерывное движение поршней твердых частиц вслед за газовыми пузырями; твердый материал начинает выноситься вверх из слоя, пока небольшое оставшееся его количество не образует газовзвеси, равномерно распределенной по высоте аппарата. Это состояние соответствует точке H на рис. 4.3.4. Последующее повышение скорости газа сопровождается дальнейшим пониже-

нием концентрации твердых частиц и образованием более разбавленной псевдооживленной системы, пока (в точке F) не останется единичная частица. Точка F соответствует равновесной скорости единичной частицы, практически равной скорости свободного падения (витания) частицы наибольших размеров среди имеющихся в смеси дисперсного материала.

В точке F перепад давления на единицу высоты слоя, по существу, определяется трением газа о стенки аппарата; ролью веса единичной частицы в суммарном сопротивлении можно пренебречь. Следовательно, точка F располагается на кривой $O EFG$, соответствующей сопротивлению пустого аппарата.

При некотором уменьшении скорости газа от значения в точке F возможно увеличение концентрации взвешенных твердых частиц при сохранении однородной разбавленной фазы. В результате резко возрастет перепад давления, необходимый для поддержания твердых частиц во взвешенном состоянии – в соответствии с кривой FH на рис. 4.3.4.

Если концентрация частиц возрастет до значения в точке H , то дальнейшее ее повышение приведет к кризису: из однородной разбавленной взвеси образуется поршневой слой. Концентрация твердых частиц в точке H , соответствующая однородной разбавленной псевдооживленной системе, обычно не превышает 160 кг/м^3 . В диапазоне концентраций, ограниченном точками D и H , наблюдается поршневой режим псевдооживления.

Если неподвижный зернистый слой зажать сверху сеткой, проницаемой только для газа, то перепад давления на единицу высоты слоя с повышением скорости восходящего газового потока будет непрерывно возрастать вдоль кривой BC . Для выбранного зернистого материала, например для катализатора крекинга нефти с частицами размером от 10 до 100 мкм, может быть получено несколько эквидистантных кривых применительно к неподвижному слою – в зависимости от плотности упаковки частиц. Для подобных зернистых материалов с малым средним размером частиц и широким гранулометрическим составом насыпная плотность может находиться в пределах от 480 до 640 кг/м^3 . На фазовой диаграмме (рис. 4.3.4) кривая OAB соответствует неподвижному слою с наиболее рыхлой упаковкой частиц.

Восходящий прямоток газа и твердых частиц. Если при постоянной скорости газа вблизи точки G дисперсные частицы вводятся в газовый поток, то дополнительная сила, необходимая для взвешивания частиц и их восходящего движения, будет отражаться повышением перепада давления, т. е. перемещением вверх – в точку 7. Если при постоянном массовом расходе твердого материала уменьшить поток транспортирующего газа, то скорость твердых частиц также понизится, а количество движущихся частиц на единицу высоты слоя возрастет. Следовательно, перепад давления будет сначала уменьшаться (из-за уменьшения трения газового потока о стенки аппарата или трубы), а затем снова повышаться (кривая IJ) вследствие возрастания количества твердых частиц (основная составляющая сопротивления газовому потоку). В точке J потери на трение газа о стенки невелики и перепад давлений, обусловленный в основном твердыми частицами, соответствует их максимально возможной концентрации в разбавленной фазе. Дальнейшее понижение скорости газа вызывает разруше-

ние однородной разбавленной фазы и снова приводит к поршневому режиму. Для данной дисперсной системы пунктирная линия $LNHJK$ представляет геометрическое место точек постоянных концентраций.

Транспорт в разбавленной фазе, характеризуемый кривой IJ , широко исследован; для расчета полного перепада давления предложены многочисленные формулы. Линия IJ – одна из семейства кривых, обозначаемых W_1, W_2, W_3 соответственно возрастанию массовой скорости взвешиваемых твердых частиц.

Рассмотрение формы кривых, подобных линии IJ , и их взаимного расположения позволяет выявить причины некоторых расхождений и кажущихся противоречий в опубликованных работах. В последних отмечается как падение, так и возрастание перепада давления в транспортных трубопроводах при повышении скорости газа и постоянном массовом расходе транспортируемого твердого материала. Аналогично, при постоянном перепаде давления и изменении скорости газа пропускная способность транспортных линий может как возрастать, так и уменьшаться.

Противоток в разбавленной фазе. Такие системы могут быть реализованы в вертикальной трубе, снабженной устройствами для подачи снизу газа, а сверху – твердых частиц. В отсутствие газового потока в трубе и при постоянном потоке твердого материала W_1 перепад давления $P_1 - P_2$ между двумя точками возникает в результате пульсирующего сжимающего действия падающих в трубе частиц, образующих разбавленную фазу. Этому перепаду давления отвечает ордината точки M на рис. 4.3.4. Ему соответствует потеря напора в случае псевдооживления в разбавленной фазе при той же концентрации твердых частиц (или чуть выше).

Если в нижнее основание трубы вводится небольшой поток газа, противодействующий нисходящему движению твердых частиц без изменения их расхода, то отмечается некоторое повышение перепада давления. При увеличении скорости восходящего газового потока понижается скорость нисходящего движения твердых частиц. В результате увеличения количества падающих частиц в трубе будет зарегистрировано возрастание перепада давления ($P_1 - P_2$) вдоль кривой MN .

Наконец, если скорость газа возрастет до значения, соответствующего точке N , то число твердых частиц достигнет значения, соответствующего точке H , т. е. минимально возможному расстоянию между частицами (в аспекте наложения полей обтекания индивидуальных частиц). Геометрическим местом точек таких состояний является линия $LNHJK$ на рис. 4.3.4. При пересечении ее с кривой типа MN однородная взвесь опять приобретает поршневой режим движения. Точка N соответствует моменту «захлебывания». Линия MN является представителем семейства кривых постоянного массового расхода твердых частиц.

Транспорт твердого материала в плотной фазе. Твердый материал можно вводить с помощью транспортной линии или стояка в основание псевдооживленного слоя и выводить такое же его количество через сливной порог у свободной поверхности слоя. Аналогично, можно вводить дисперсные частицы в трубу сверху и выводить снизу. Оба случая представляют собой в чистом виде

восходящий и нисходящий потоки твердого материала в плотной фазе. Они изображены несколько утрированно кривыми PQ и RS на рис. 4.3.4. Нисходящий поток твердых частиц в плотной фазе навстречу восходящим газовым пузырям, применяемый при использовании аэрируемых стояков или пневматических подъемных линий, также изображается линией RS .

Восходящий и нисходящий потоки в плотной фазе могут быть также осуше-
ствлены в компактном (неподвижном) слое. Если поддерживать скорость восходящего газового потока ниже величины, отвечающей точке B (скорость начала псевдоожижения), то твердый материал может перемещаться вниз компактным слоем – соответственно кривой типа ST на рис. 4.3.4. Точка S отображает состояние системы, когда восходящий газовый поток не может далее двигаться через просветы между частицами нисходящего слоя без образования пузырей, так что слой твердых частиц в трубе должен перейти в псевдоожиженное состояние. Восходящий поток твердых частиц в компактном (непсевдоожиженном) состоянии может быть получен при скоростях, превышающих скорость начала псевдоожижения (точка B на рис. 4.3.4), путем торможения движения частиц с помощью диафрагмы, клапана или расширительной секции с непсевдоожиженными твердыми частицами на выходном (верхнем) конусе трубы. Такое состояние изображено линией VZ , опять-таки являющейся одной из линий семейства кривых, соответствующих постоянному расходу твердых частиц. Подъемная система типа гиперфлоу является практическим примером состояния системы, отвечающего кривой VZ на фазовой диаграмме.

Нисходящий прямоток газа и твердых частиц. Верхний и нижний левые квадранты обобщенной фазовой диаграммы более детально изображены на рис. 4.3.5. Кривые OEG и OAB представляют собой перевернутые зеркальные изображения кривых сопротивления газового потока в пустой трубе и в неподвижном слое (ср. с соответствующими кривыми на рис. 4.3.4). Предполагается, что вес газа пренебрежимо мал (может не учитываться при расчете потерь давления в пустой трубе). Следовательно, перепад давления не зависит от направления газового потока. При переходе от восходящего потока к нисходящему меняется только его знак.

Кривые ST , UV , ZX изображают нисходящий прямоток газа и компактного слоя твердых частиц. Линия ST на рис. 4.3.5 является продолжением соответствующей кривой на рис. 4.3.4. При перемещении от точки T к точке S (рис. 4.3.5) скорость газа в промежутках между частицами сначала достигает, а затем превышает скорость движения последних. Начиная с этого момента возникает трение газового потока о дисперсные частицы и давление P_2 (вверху) становится больше P_1 (внизу). Кривые KL и MN изображают нисходящий прямоток в разбавленной фазе. При увеличении скорости газа возрастает скорость нисходящего движения частиц, так что понижается число частиц на единицу длины трубы и уменьшается разность $P_1 - P_2$.

Когда скорость нисходящего газового потока станет достаточно высокой, а трение его о стенки трубы – весьма ощутимым, перепад давления опять поменяет знак: P_2 будет больше, чем P_1 .

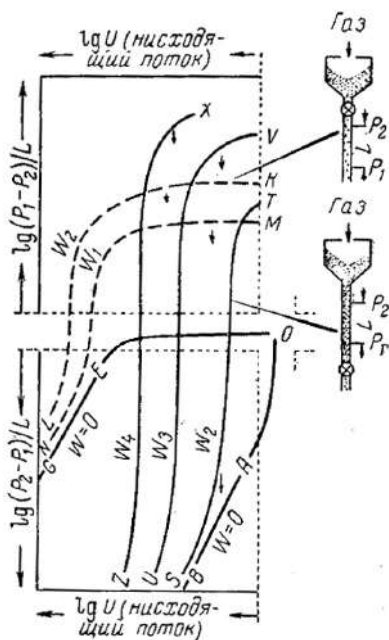


Рис. 4.3.5. Схематичная фазовая диаграмма для области нисходящего потока газа и твердых частиц

Подведем итог. Фазовая диаграмма, представленная на рис. 4.3.3, построена применительно к постоянному значению размера и плотности частиц, вязкости и плотности газа.

В случае значительного изменения полного давления в системе необходимо иметь несколько подобных диаграмм, расположенных в порядке изменения давления (трехмерные диаграммы).

4.3.2. Псевдооживленный слой

Слой дисперсных частиц при малых скоростях восходящего газового потока остается неподвижным. При достаточно больших скоростях потока дисперсные частицы, свободно взвешенные в нем, образуют псевдооживленный слой. При очень высоких скоростях газового потока дисперсные частицы уносятся им из системы.

Если скорость потока газа превышает минимальную величину, необходимую для возникновения псевдооживленного слоя, то либо последний продолжает расширяться за счет увеличения среднего расстояния между твердыми частицами, либо избыток газа проходит через слой в виде пузырей, образуя двухфазную систему. Эти два вида псевдооживления можно соответственно рассматривать как однородное и неоднородное. Однородное псевдооживление наблюдается, как правило, в системах «жидкость – твердое тело», а также «газ – твердое тело» – при очень малых размерах дисперсных частиц и в ограниченном интервале скоростей. Неоднородное псевдооживление характерно для всех других систем «газ – твердое тело», а иногда – в случае высокой плотности дисперсных частиц – и для жидкостного псевдооживления.

Теоретические исследования устойчивости малых возмущений концентрации дисперсных частиц в однородном псевдоожигенном слое показали, что скорость роста малых пузырей при газовом псевдоожигении обычно больше, чем при жидкостном псевдоожигении.

Полагают, что вид псевдоожигения зависит от максимально возможного размера стабильного газового пузыря в псевдоожигенном слое. Если скорость циркуляции газа внутри пузыря (обычно приблизительно равная скорости его подъема) превышает скорость витания дисперсных частиц v_0 , то последние «всасываются» в пузырь через его основание и пузырь разрушается. Так как скорость подъема пузыря возрастает с увеличением его объема и практически не зависит от свойств псевдоожигенного слоя, то максимальный размер стабильного пузыря растет с увеличением скорости витания дисперсных частиц. Если размер пузыря превышает диаметр частиц, например в 10 раз, то пузырь становится видимым и псевдоожигение будет неоднородным. Если же размеры пузыря соизмеримы с диаметром дисперсных частиц, то псевдоожигение можно считать однородным. Для характеристики вида псевдоожигения предложено использовать число Фруда (v_{mf}^2 / gd). Обычно при неоднородном псевдоожигении $Fr > 1$, а при однородном – $Fr < 1$.

Для определения вида псевдоожигения необходимо знать скорость ожимающего агента, при которой начинается псевдоожигение слоя (скорость начала псевдоожигения v_{mf}), и минимальную скорость, при которой в слое появляются пузыри (скорость возникновения пузырей). Последняя определяет верхний предел однородного псевдоожигения.

Псевдоожигенный слой образуется при увеличении скорости восходящего потока газа через неподвижный слой. Следовательно, можно предположить, что при скорости начала псевдоожигения к псевдоожигенному слою применимы закономерности, справедливые для неподвижного. Если же слой расширился до порозности, близкой к единице, и состоит преимущественно из одиночных изолированных частиц, взвешенных в потоке газа, то любая зависимость для псевдоожигенного слоя при экстраполивании должна оказаться применимой к одиночной частице. В промежуточных условиях однородный псевдоожигенный слой по своим гидродинамическим свойствам в известной степени подобен отстаивающейся суспензии. В однородном псевдоожигенном слое частицы в целом не перемещаются относительно стенок аппарата, они поддерживаются восходящим потоком газа.

Кривые псевдоожигения. *Идеальное псевдоожигение.* При восходящем движении газа через слой дисперсных частиц перепад давления ΔP_B с увеличением скорости потока v первоначально растет (рис. 4.3.6,а). Зависимость между перепадом давления и скоростью потока остается такая же, как для неподвижного слоя, причем в случае мелких частиц сохраняется линейная зависимость Кармана–Козени. Пусть скорость потока достигла величины, при которой гидравлическое сопротивление слоя становится равным весу дисперсных частиц, приходящихся на единицу площади поперечного сечения ΔP_{eq} . Дальнейшее повышение скорости вызовет слабое перемещение частиц слоя вверх.

Частицы перестраиваются таким образом, чтобы сопротивление потоку уменьшалось. Порозность слоя увеличивается, и в идеальной системе перепад давления ΔP_{eq} остается постоянным. Дальнейшее увеличение скорости сопровождается расширением слоя, пока наконец не станет возможным физическое отделение частиц друг от друга и свободное их перемещение в потоке газа. В этот момент слой становится псевдооживленным, т. е. он находится в точке начала псевдооживления. Скорость газа равна скорости начала псевдооживления v_{mf} . При дальнейшем увеличении скорости газа сопротивление слоя сохраняется неизменным.

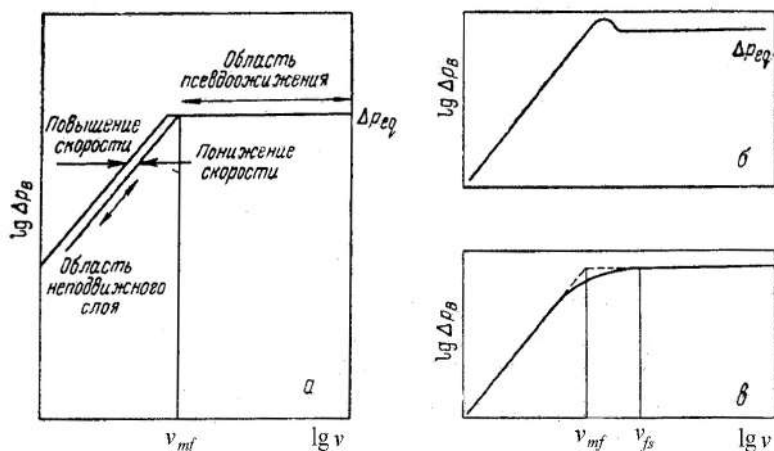


Рис. 4.3.6. Характерные кривые псевдооживления: а — идеальная; б — отражающая влияние сцепления дисперсных частиц на перепад давления; в — при наличии застойных зон в слое.

Если теперь скорость газа постепенно снижать, то перепад давления останется постоянным до точки «начала псевдооживления». Последующее уменьшение скорости потока сопровождается постепенным снижением перепада давления, но в этом случае кривая псевдооживления (линия обратного хода) обычно располагается ниже кривой, полученной при увеличении скорости (линия прямого хода). Это объясняется тем, что в отсутствие вибрации порозность слоя остается приблизительно равной величине ε_{mf} , соответствующей началу псевдооживления.

Отклонение от идеального псевдооживления. Описанные выше явления относятся к идеальной системе и никогда не наблюдаются на практике. Отклонения от идеальности дают представление о факторах, влияющих на поведение слоя. Рассмотрим основные отклонения.

1. Когда скорость газа близка к скорости начала псевдооживления, обычно происходит некоторое расширение слоя еще до того, как перепад давления достигнет величины, равной весу дисперсных частиц, приходящихся на единицу площади поперечного сечения слоя. Этот эффект особенно заметен, если слой вначале сильно уплотнен. Из-за неравномерной упаковки частиц в исходном

слое переход от восходящего участка кривой псевдоожижения к горизонтальному происходит обычно плавно.

2. Из-за склонности дисперсных частиц к взаимному сцеплению возникают расклинивающие усилия, особенно в слоях малого диаметра, где стенки аппарата оказывают воздействие на слой. По этой причине перепад давления превышает теоретическое значение, и кривая проходит через точку максимального перепада давления, образуя небольшой характерный пик (рис. 4.3.6,б). Пик давления, разумеется, характерен и для систем с малым влиянием стенок аппарата. Просто преодоление сцепления частиц требует дополнительной затраты энергии по сравнению с величиной ΔP_{eq} : трение покоя превышает трение движения.

3. Неоднородность структуры слоя приводит к движению газа преимущественно в отдельных областях. В слое возникают зоны неподвижного и псевдоожиженного дисперсного материала. Внешне слой может казаться хорошо ожиженным, но в действительности часть дисперсных частиц остается в неподвижном состоянии на распределительном устройстве, и перепад давления получается меньше теоретического. Это явление чаще наблюдается в системах «газ – дисперсные частицы». Полностью в псевдоожиженное состояние слой переходит при скорости v_{fs} , как показано на рис. 4.3.6,в.

4. Циркуляционные потоки внутри слоя приводят к возникновению сил трения о стенки аппарата, направленных против движения слоя у стенок. Этот эффект может привести к аномалиям в перепаде давления.

5. Внутри слоя могут возникнуть широкие каналы, через которые будет проходить значительная доля сжижающего агента. Остальная часть слоя может оставаться неожиженной.

6. При постепенном уменьшении скорости потока ниже величины, соответствующей началу псевдоожижения, слой не всегда сохраняет порозность, которую он имел первоначально.

7. Если распределительное устройство в основании слоя не обеспечивает равномерного распределения сжижающего агента, то это способствует образованию каналов.

Форма кривой псевдоожижения на участках неподвижного и псевдоожиженного слоев дает представление об их структуре. Идеальные системы образуются редко, и большинство отклонений обусловлено силами взаимодействия между твердыми частицами и неравномерным распределением сжижающего агента в слое.

На практике скорость начала псевдоожижения определяется, как показано на рис. 4.3.6, в точке пересечения линий перепада давления псевдоожиженного и неподвижного слоев (определение предпочтительно производить при плавном уменьшении скорости).

Влияние опорно-распределительных устройств. Распределители сжижающего агента в основании слоя оказывают весьма существенное влияние на его структуру в целом. В идеальном случае распределительные устройства должны иметь пористую структуру, чтобы сжижающий агент поступал через множество

мелких отверстий. Распределительные устройства с малым числом крупных отверстий характеризуются высокими скоростями в отдельных точках основания слоя, что приводит к значительному образованию каналов в слое. В этом случае более равномерное псевдоожигание достигается при использовании распределительных устройств с высоким сопротивлением газовому потоку, при котором газ почти равномерно вводится в нижнюю часть слоя, независимо от каких-либо нарушений равномерности структуры самого слоя. Для мелкодисперсного слоя перепад давления в распределительном устройстве должен иметь тот же порядок, что и перепад давления в слое. Наилучшее воспроизведение скорости начала псевдоожигания достигается при использовании плоских пористых распределительных устройств. Расширение слоя в этом случае также происходит более равномерно.

Сопротивление распределительного устройства связано с сопротивлением слоя. При возникновении каналов слой будет обладать меньшим сопротивлением потоку сжижающего агента. По мере возрастания скорости сжижающего агента наблюдается тенденция к более развитому образованию каналов. Растет и сопротивление потоку в отверстии распределительного устройства. Повышение скорости газа приводит не только к увеличению протяженности канала, но одновременно способствует разрушению его стенок и более равномерному псевдоожиганию. Чтобы не создавалось устойчивых каналов, уменьшение перепада давления при увеличении скорости потока в слое должно быть по меньшей мере компенсировано повышением перепада давления в отверстиях распределительного устройства. Для слоев больших размеров нецелесообразно использовать пористые распределительные устройства из-за их дороговизны и низкой механической прочности. Для хорошего газораспределения часто используют либо систему сопел, либо решетки с колпачками. Для достижения приемлемой равномерности потока должна быть обеспечена возможность регулировать размер отверстий.

Условия хорошего псевдоожигания. Под хорошим псевдоожиганием понимается достаточно равномерное и полное псевдоожигание без застойных зон, но не обязательно однородное. Не всегда возможно точно предсказать поведение псевдоожиганной системы, исходя только из физических свойств дисперсных частиц, газа и рабочих условий процесса. Часто возникают трудности при определении начала псевдоожигания именно таких материалов, которые способны образовать однородный, хорошо псевдоожиганный слой.

Образованию хорошо псевдоожиганных систем благоприятствуют следующие свойства дисперсных частиц и газа:

- низкая плотность и малые размеры дисперсных частиц;
- узкий гранулометрический состав смеси дисперсных частиц;
- близость формы частиц к сферической;
- высокая плотность газа.

Те самые свойства дисперсных частиц, которые способствуют образованию хорошо псевдоожиганного слоя, обуславливают трудности в начале псевдоожигания. При уменьшении размеров частиц силы взаимодействия между ними возрастают, поскольку увеличивается их удельная поверхность. Если части-

цы имеют низкую плотность, то сила тяжести, стремящаяся отделить их друг от друга, мала, а это способствует образованию каналов, хотя во взвешенном состоянии такие частицы легко образуют хорошо псевдооживленный слой.

Переход от неподвижного слоя к псевдооживленному. Резкий переход от неподвижного слоя к псевдооживленному наблюдается редко, и кривые псевдооживления реальных систем обычно не соответствуют идеальной. При низких скоростях потока газа дисперсные частицы сохраняют фиксированную взаимную ориентацию. При скоростях, еще значительно уступающих скорости начала псевдооживления, наблюдается перемещение неплотно упакованных частиц, и поток газа уже не движется просто в режиме идеального вытеснения, он осложнен осевым перемешиванием. При увеличении его псевдооживление начинается в небольших локализованных зонах. Затем в очень малом интервале скоростей почти весь слой переходит в псевдооживленное состояние. Даже при скоростях, значительно превышающих значения, соответствующие внешне хорошему псевдооживлению, слой может содержать пакеты дисперсных частиц. В идеальной системе при скорости начала псевдооживления v_{mf} слой мгновенно переходит из неподвижного состояния в псевдооживленное. На практике же существует большая переходная область и скорость начала псевдооживления не имеет фиксированного значения. Проблема определения скорости начала псевдооживления наиболее сложна для полидисперсной смеси дисперсных частиц.

Определение скорости начала псевдооживления. Скорость начала псевдооживления не имеет строго фиксированного значения. Целесообразно условиться о стандартном методе ее определения для сопоставления характеристик различных систем; наиболее удобно сделать это с помощью кривой псевдооживления. Если провести прямые через экспериментальные точки для неподвижного (линия обратного хода) и псевдооживленного слоев, то абсцисса точки пересечения прямых дает воспроизводимое значение скорости начала псевдооживления (рис. 4.3.7).

Слой в целом нельзя считать псевдооживленным до тех пор, пока частицы не будут взвешены газом, а перепад давления не станет равным их весу (с учетом силы Архимеда), отнесенному к единице площади поперечного сечения слоя ΔP_{eq} . Минимальная скорость потока газа, при которой происходит оживление, называется скоростью полного псевдооживления v_{fs} . Эту величину трудно точно определить, так как перепад давления очень медленно достигает предельной величины ΔP_{eq} . Кроме того, на величину v_{fs} значительно влияют первоначальная упаковка дисперсных частиц и характеристика распределительного устройства, поэтому рассматриваемая скорость плохо воспроизводится даже для конкретной системы.

По экспериментальным данным, представленным на рис. 4.3.7, величина v_{fs} превосходит v_{mf} более чем на 50%. Измерения особенно усложняются в слоях малого диаметра, вследствие трения дисперсных частиц о стенки аппарата.

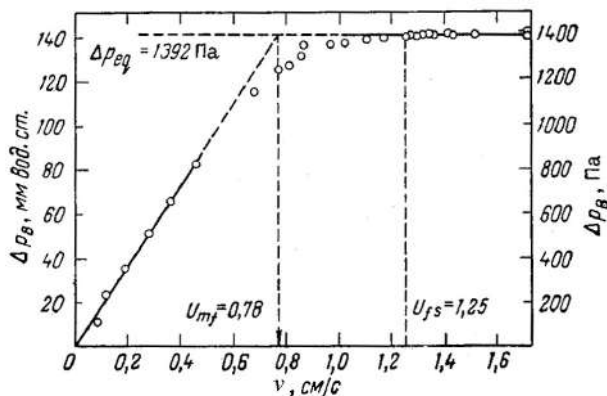


Рис. 4.3.7. Экспериментальное определение скорости начала псевдоожижения и скорости полного псевдоожижения слоя

Расчет скорости начала псевдоожижения. При отсутствии экспериментальных данных скорость начала псевдоожижения можно вычислить, пользуясь зависимостью между перепадом давления и скоростью потока газа в свободном сечении аппарата. Перепад давления в слое равен весу содержащихся в нем дисперсных частиц (с учетом силы Архимеда). Для этого необходимо знать порозность слоя ϵ_0 при минимальной скорости псевдоожижения, которая зависит от формы и размера дисперсных частиц. Для частиц сферической формы может быть принято $\epsilon_0 = 0,4$. Попытки связать величину ϵ_0 с фактором формы частиц оказались неудачными.

Для аппарата постоянного поперечного сечения перепад давления в псевдоожиженном слое можно выразить уравнением

$$\Delta P_B = (\rho_d - \rho_c)(1 - \epsilon)Hg.$$

При расширении слоя произведение $(1 - \epsilon)H$ остается постоянным. В точке начала псевдоожижения перепад давления выразится:

$$\Delta P_B = (\rho_d - \rho_c)(1 - \epsilon_0)Hg.$$

Зависимость между перепадом давления и скоростью начала псевдоожижения для мелких частиц, выражаемая уравнением Кармана–Козени, имеет вид

$$v_{mf} = \frac{\epsilon_0^3}{5(1 - \epsilon_0)^2} \frac{\Delta P_B}{S^2 \mu H_0}.$$

С учетом выражения для ΔP_B получим

$$v_{mf} = \frac{\epsilon_0^3}{5(1 - \epsilon_0)^2} \frac{(\rho_d - \rho_c)g}{S^2 \mu}.$$

В случае более крупных частиц для определения перепада давления в неподвижном слое может быть использовано более общее уравнение Эргана:

$$\frac{\Delta P_B}{H_0} = 150 \frac{(1 - \epsilon_0)^2}{\epsilon_0^3} \frac{\mu v_{mf}}{d^2} + 1,75 \frac{(1 - \epsilon_0)}{\epsilon_0^3} \frac{\rho_c v_{mf}^2}{d}.$$

При переходе к безразмерной форме с использованием числа Рейнольдса и Архимеда получим

$$Ar = 150 \frac{1-\varepsilon_0}{\varepsilon_0^3} Re_{mf} + 1,75 \frac{1}{\varepsilon_0^3} Re_{mf}^2, \quad Ar = \frac{\rho_c(\rho_d - \rho_c)gd^3}{\mu^2}, \quad Re_{mf} = \frac{v_{mf}d\rho_c}{\mu}. \quad (4.3.1)$$

Из уравнения (4.3.1) для турбулентного режима получается

$$Re_{mf} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0^3}{1,75}} Ar,$$

откуда

$$Ar = 150 \frac{1-\varepsilon_0}{\varepsilon_0^3} Re_{mf} + 1,75 \frac{1}{\varepsilon_0^3} Re_{mf} \sqrt{\frac{\varepsilon_0^3}{1,75}}.$$

Тогда в общем виде

$$Re_{mf} = \frac{Ar}{150 \frac{1-\varepsilon_0}{\varepsilon_0^3} + \sqrt{\frac{1,75}{\varepsilon_0^3}} Ar},$$

а при $\varepsilon_0 = 0,4$

$$Re_{mf} = \frac{Ar}{1400 + 5,22\sqrt{Ar}}.$$

Полученные решения корректны относительно исходного уравнения (4.3.1), совпадают с точным решением

$$Re_{mf} = 25,7(\sqrt{1 + 5,53 \cdot 10^{-5} Ar} - 1)$$

в случае ламинарного и турбулентного режимов и дают погрешность до 15–20% в случае переходного. Эта погрешность не выходит за пределы точности уравнения Эргана. Уравнение может быть использовано в случае частиц несферической формы, если в расчет вводить диаметр сферы равновеликой поверхности.

Если перепад давления в слое составляет значительную долю полного давления, а газ сжимаем, то его скорость при движении через слой возрастает. Следовательно, верхняя часть слоя будет ожигаться при более низком объемном расходе сжижающего агента, чем нижняя. Некоторые исследователи рекомендуют придавать слою форму конуса, расширяющегося кверху, чтобы слой в целом псевдоожижался при одинаковом объемном расходе газа.

Однородный псевдоожиженный слой В большинстве систем «газ – дисперсные частицы» при скорости газа, значительно превышающей необходимую для начала псевдоожижения, наблюдается образование газовых пузырей. Избыток газа, сверх необходимого для начала псевдоожижения, проходит через слой в виде пузырей, причем непрерывная фаза сохраняет ту же порозность ε_0 что и в точке начала псевдоожижения. Достоверность такого фактора трудно установить, так как это связано с точным определением скорости начала псевдоожижения. В ряде систем «газ – дисперсные частицы» равномерное расширение слоя может происходить в достаточно широком интервале скоростей газа.

Скорость начала псевдоожижения v_{mf} и скорость, при которой возникают пузыри v_{mb} , являются соответственно нижним и верхним пределами существования однородного псевдоожиженного слоя. Точное определение величины v_{mb} вызывает значительные трудности, так как она сильно зависит от свойств слоя,

конструкции газораспределительной решетки и даже от незначительных препятствий внутри слоя. Нестабильный псевдооживленный слой может осесть при пропускании через него мелких пузырей. Отношение v_{mb}/v_{mf} , определяющее возможную степень расширения слоя, больше для частиц малой и для газов высокой плотности.

Существует стабильный минимальный размер пузыря, который может находиться в однородной фазе. Более мелкие пузыри разрушаются и ассимилируются с непрерывной фазой, а крупные – растут за счет газа, проходящего в этой фазе. Если в псевдооживленный слой ввести газовый пузырь размером больше критического, то вначале произойдет соответствующее увеличение объема слоя. После выхода пузыря через свободную поверхность слоя его высота понижается и становится меньше, чем до ввода пузыря. Обмен газом между непрерывной и дискретной фазами внутри слоя является важным фактором, требующим обязательного учета при расчете реакторов с псевдооживленным слоем.

Частицы очень малых размеров и низкой плотности трудно перевести в псевдооживленное состояние; однако, будучи псевдооживленными, они могут однородно расширяться в широком диапазоне скоростей, прежде чем начнется образование пузырей. Например, к таким материалам относится фенольная смола. В слое этого материала образуются устойчивые каналы, через которые проходит почти весь газ, а дисперсные частицы остаются практически неподвижными при скоростях, значительно превышающих скорость начала псевдооживления. Для разрушения каналов можно использовать мешалки, вращающиеся с небольшим числом оборотов и не требующие существенных затрат энергии.

Если рабочий орган мешалки постепенно опускать по высоте слоя, то эффект обнаруживается лишь на расстоянии 1 см от газораспределительной решетки. На этом уровне лопасти мешалки разрушают каналы, причем расширяющийся слой приобретает высокую однородность. После удаления мешалки качество псевдооживления не ухудшается, если порозность слоя выше критического значения (0,64 для фенольной смолы). При большом расстоянии от решетки мешалка неэффективна, так как каналы уже хорошо сформированы. Ряд весьма эффективных опытов был проведен с мелкодисперсным порошком двуокиси кремния. Удалось получить высокую степень расширения слоя, а отношение v_{mb}/v_{mf} достигало 18,4.

Образование больших газовых пузырей в псевдооживленном слое можно предотвратить путем размещения в нем стандартных насадок. В этих случаях говорят о псевдооживлении в слое насадки. Псевдооживлению в слое проволочных колец Рашига размером 6,4 и 12,7 мм подвергали частицы никеля, свинца, стекла, песка и пластмассы (0,5–1,5 мм). Опыты вели с воздухом, двуокисью углерода и гелием в колоннах диаметром от 5,1 до 30,5 см. Было установлено, что здесь нет полной аналогии с однородными псевдооживленными системами, так как проволочная насадка не предотвращает, а может даже способствовать образованию мелких пузырей.

Сравнение свойств неподвижного и псевдооживленного слоя. В псевдооживленном слое газ проходит в просветах между частицами примерно так же,

как и в неподвижном слое. Отличие заключается лишь в том, что в слое частицы не фиксированы относительно друг друга. В связи с этим можно предположить, что движение газа в неподвижном и псевдооживленном слоях описывается одними и теми же уравнениями, по крайней мере при сравнительно низкой порозности. Поскольку отстаивающаяся суспензия также имеет сходные характеристики, то уравнения, выведенные применительно к зернистым материалам, можно использовать и для определения скорости отстаивания.

Такой подход был распространен на псевдооживленные системы в виде зависимости безразмерного коэффициента трения от модифицированного числа Рейнольдса. Пусть в критерии Рейнольдса Re_1 фигурирует скорость газа относительно частиц v/ϵ , а линейный размер соответствует среднему гидравлическому диаметру порового канала, вычисляемому как отношение объема пустот к поверхности частиц $\epsilon/(1-\epsilon)S$, где S – удельная поверхность частиц. Тогда

$$Re_1 = \frac{v\rho_c}{S\mu(1-\epsilon)}.$$

Коэффициент трения $\psi = R'/\rho_c(v/\epsilon)^2$ является функцией силы трения, приходящейся на единицу поверхности частиц R' , и скорости газа относительно частиц v/ϵ . При стационарном режиме сила трения, действующая на частицы, уравнивается эффективной силой тяжести. Для единицы объема частиц сила трения равна $R'S$. Истинная сила тяжести равна весу дисперсных частиц за вычетом выталкивающей силы. Выталкивающая сила в большей степени зависит от плотности взвеси газа ρ_ϵ , чем от плотности газа ρ_c , так как вертикальный градиент гидростатического давления во взвеси определяется ее плотностью. Это положение получило экспериментальное подтверждение. Истинная сила тяжести на единицу объема частиц равна

$$(\rho_d - \rho_\epsilon)g = \{\rho_d - [\epsilon\rho_c + (1-\epsilon)\rho_d]\}g = \epsilon(\rho_d - \rho_c)g.$$

Тогда

$$R' = \frac{\epsilon(\rho_d - \rho_c)}{S}g.$$

Отсюда легко получить коэффициент трения:

$$\psi = R'/\rho_c(v/\epsilon)^2 = \frac{\epsilon^3(\rho_d - \rho_c)g}{S\rho_c v^2}.$$

На рис. 4.3.8 представлен график зависимости ψ от Re для отстаивания и псевдооживления при порозностях ниже 0,78. В случае больших отношений d/D в расчет вносили соответствующие поправки. При $Re < 1$ полученная зависимость параллельна прямой, построенной для потока через неподвижный слой. Для псевдооживления и седиментации в этом случае $\psi = 3,36Re_1^{-1}$.

Для неподвижного слоя высотой H сила лобового сопротивления, действующая на единицу площади поперечного сечения, равна $R'S(1-\epsilon)H = \Delta P\epsilon$, откуда

$$R' = \frac{\Delta P}{SH} \frac{\epsilon}{1-\epsilon}.$$

Используя уравнение Кармана–Козени для вычисления перепада давления ΔP в слое высотой H и принимая значение константы равным 5, получим

$$\psi = 5 \text{Re}_1^{-1}.$$

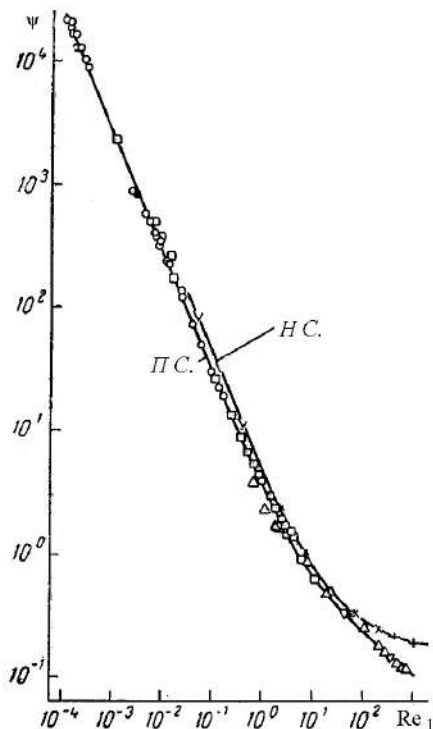


Рис. 4.3.8. Зависимость коэффициента трения от числа Рейнольдса. Для псевдооживленного слоя (П. С.) и неподвижного слоя (Н. С.)

Этому уравнению соответствуют данные, представленные на рис. 4.3.9 для неподвижного слоя. Более низкое значение коэффициента, полученное по экспериментальным данным, объясняется свободной ориентацией дисперсных частиц относительно газа при псевдооживлении. Значение эмпирической константы в уравнении Кармана–Козени для неподвижного слоя колеблется в широком диапазоне, и величина, равная 3,36, не выходит за пределы этого диапазона.

Зависимость расширения слоя от скорости сжижающего агента. Если пренебречь влиянием стенки, то зависимость между порозностью и скоростью сжижающего агента выражается уравнением $v/v_0 = \epsilon^n$ или

$$n = \frac{\lg \frac{v}{v_0}}{\lg \epsilon}.$$

Величину n можно определить, если известны сопряженные значения v и ϵ (при $\epsilon \neq 1$). Для точки начала псевдооживления

$$n = -\lg \frac{\text{Re}_0}{\text{Re}_{mf}} / \lg \epsilon_0.$$

Следовательно, величину n можно выразить как функцию от ε_0 и числа Архимеда. Расчетная зависимость показателя степени n от Ar для $\varepsilon_0 = 0,38; 0,40$ и $0,42$ представлена графически на рис. 4.3.9. Можно видеть, что экспериментальные значения n всегда несколько ниже расчетных. Это объясняется большим коэффициентом трения для неподвижного слоя, чем для псевдооживленного в условиях начала псевдооживления, и согласуется с данными, описанными уравнением (4.3.9). Меньшее сопротивление псевдооживленного слоя объясняется взаимным перемещением частиц. Рассматриваемый эффект может быть также связан с медленной циркуляцией внутри слоя. Трудно объяснить, почему этот фактор может оказывать существенное влияние.

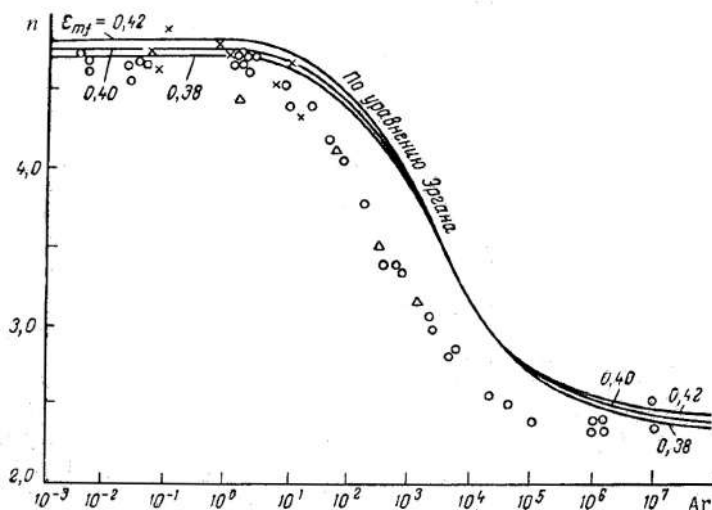


Рис. 4.3.9. Зависимость показателя степени n от числа Архимеда

Вычисленные значения n зависят от порозности слоя в точке начала псевдооживления (рис. 4.3.9) и увеличиваются при возрастании ε_0 . Значения n при псевдооживлении несферических частиц выше, чем для сфер, и получается больше для смеси более широкого гранулометрического состава. Разнообразие свойств материалов приводит к разбросу значений константы в уравнении (4.3.1) и к значительным колебаниям вычисленных значений n .

Были сделаны попытки найти теоретическую зависимость порозности от скорости газа либо на основании приближенных математических моделей, либо по экспериментальным данным для потоков, обтекающих неподвижные частицы. Полученные результаты представляют ограниченную ценность для сопоставления свойств неподвижного и псевдооживленного слоев.

При измерении лобового сопротивления частиц различного размера и ориентации, находящихся в жидкости, было найдено, что для данных скорости потока и общей порозности слоя сила лобового сопротивления уменьшается при агрегировании частиц. В псевдооживленном слое это приводит к возникновению агрегатов и каналов при низкой порозности и при низких скоростях газа, когда турбулентность в системе недостаточна для разрушения этих агрегатов.

Неоднородный псевдооживленный слой. В одной из ранних работ для качественной характеристики физического состояния системы были введены термины «однородное» и «неоднородное псевдооживление». Пусть при повышении скорости газа агента слой может непрерывно расширяться за счет равномерного увеличения промежутков между частицами до тех пор, пока в аппарате не останется единичная частица; в этом случае говорят об однородном псевдооживлении. Если, наоборот, при скоростях, превышающих скорость начала псевдооживления, сжижающий агент движется через слой в виде пузырей (примерно так же, как газ через слой жидкости), то псевдооживление называют неоднородным. Различие между неоднородным и однородным псевдооживлением легко продемонстрировать, сравнивая поведение слоя стеклянных шариков размером около 0,5 мм, псевдооживляя их воздухом или водой. В первом случае псевдооживление будет неоднородным, во втором – однородным. Различие между однородными и неоднородными системами обусловлено разницей в свойствах капельных жидкостей и газов.

Изучение этих качественно различных систем идет по трем направлениям. Первое заключается в подробном математическом анализе, рассматривающем слой в целом как однородную массу безотносительно к деталям физики явления. Второе направление состоит в отыскании эмпирических корреляций по тепло- и массопереносу, расширению слоя и другим его свойствам применительно к запросам практики. Третье направление сводится к изучению наиболее широко распространенных неоднородных (псевдооживленных газом) систем, т. е. к фундаментальному исследованию (экспериментальному и теоретическому) поведения пузырей в псевдооживленном слое.

Первое из этих направлений устанавливает различия между жидкостным и газовым псевдооживлением; второе обеспечивает получение данных, необходимых для создания промышленных аппаратов; наконец, третье позволяет осмыслить физическую сущность явления. Исследования привели к накоплению сведений о форме и скорости подъема пузырей, их влиянии на перемешивание твердых частиц и сопутствующие явления; эти исследования лишь воспроизвели то, что было ранее известно из существовавших корреляций. Наиболее полное представление о явлении может дать анализ акта зарождения пузырей у распределительной решетки аппарата с псевдооживленным слоем.

Устойчивость пузырей. Какова бы ни была конструкция распределительной решетки, газовый поток входит в нижнюю зону слоя одной или несколькими струями.

При малых расходах газ фильтруется через слой в промежутках между твердыми частицами. Если расход газа достаточен для создания перепада давления, соответствующего весу слоя, то дальнейшее повышение расхода приведет к взвешиванию слоя. Скорость потока, при превышении которой происходит взвешивание слоя, называется скоростью начала псевдооживления v_{mf} . В зависимости от свойств твердых частиц (их плотности, размера, формы) скорость v_{mf} может колебаться в значительных пределах. Скорость, предшествующая образованию пузырей (после того, как упаковка частиц в еще неподвижном

слое стала наиболее рыхлой), называется скоростью возникновения пузырей. Однако в пределах данной главы мы не будем делать различия между скоростями начала псевдооживления и возникновения пузырей. Можно с уверенностью считать, что избыток газа сверх соответствующего скорости v_{mf} проходит через слой в виде пузырей.

Чтобы понять причину образования и подъема пузырей, необходим количественный анализ:

- режимов движения газа и твердых частиц в непосредственной близости от отверстий распределительной решетки;
- связи скорости v_{mf} с силами взаимодействия частиц и потока газа.

В этом отношении показателен следующий простой опыт.

Скорость начала псевдооживления для данной системы «газ – дисперсные частицы» экспериментально определяется (рис. 4.3.10, *а, б*) как скорость, при которой перепад давления соответствует весу слоя или – проще – при которой через свободную поверхность слоя начинают прорываться пузыри.

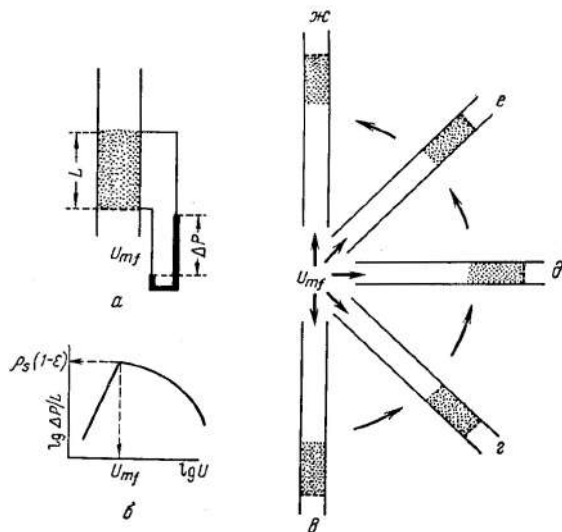


Рис. 4.3.10. Опыт, иллюстрирующий зависимость слоя при скорости начала псевдооживления

Если сохранить эту скорость газа и повернуть сосуд со слоем на 180° из положения (б) на рис. 4.3.10 в положение (ж), то слой не разрушится. Если скорость газа уменьшить до величин ниже v_{mf} , то в положениях (з) и (д) поверхность слоя расположится соответственно углу естественного откоса, а в положениях (е) и (ж) слой просто упадет (не всегда).

Измерения силы воздействия потока на дисперсные частицы, показали, что слой (а значит, и пузырь) должен быть устойчив к разрушению. Опыт на рис. 4.3.10 еще раз подтверждает, что при скоростях $v \geq v_{mf}$ поверхность слоя

устойчива в случае любой его ориентации. Режимы движения формируются вблизи отверстий распределительной решетки.

Образование пузырей у распределительной решетки. Рисунок 4.3.11, *а–г* иллюстрирует рост типичного пузыря (полости) над отверстием опорно-распределительной решетки слоя. Часто рабочая скорость v на порядок превышает v_{mf} , а скорость в отверстиях решетки значительно больше v . Скорость на границе раздела «газ – слой» (рис. 4.3.11, *а*) велика по сравнению с v_{mf} , так что граница раздела устойчива в положении, показанном на рис. 4.3.11, *б*, и способна подниматься. В соответствии с рисунком средняя скорость на границе раздела уменьшается с ростом отношения: сечение отверстия – поверхность раздела «газ – слой твердых частиц».

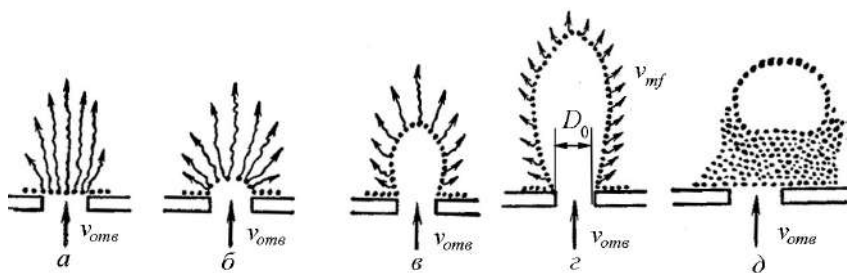


Рис. 4.3.11. Профиль полости (струи) над отверстием решетки

Если произведение этого отношения на скорость газа в отверстии превышает v_{mf} , то граница раздела остается устойчивой. Размеры полости увеличиваются, как показано на рис. 4.3.11, *в*. В итоге полость над отверстием вырастает настолько, что скорость газа на границе раздела падает до величины v_{mf} . При дальнейшем росте полости ее граница перестанет быть устойчивой. Размеры полости или образующегося пузыря в первом приближении определяются объемным расходом газа через отверстие и характерной для данной системы скоростью v_{mf} . При трансформации по схемам *а–г* на рис. 4.3.11 полость должна иметь вертикальные стенки и «крышу». Как было показано на рис. 4.3.10, *в–ж*, эти стенки устойчивы, пока поверхность раздела пронизывается потоком газа со скоростью, по крайней мере, равной v_{mf} .

Образующаяся полость по форме больше напоминает пламя горелки, нежели сферу. Это объясняется различием и перепадах давления и длинах траекторий потока при движении газа из полости к поверхности слоя. Расстояние до поверхности слоя наименьшее от «крыши» полости и наибольшее от основания слоя (от отверстия). Первоначально нет этого различия в расстояниях, по мере роста полости оно возникает и увеличивается. Можно аналитически показать, что в большинстве практических случаев полость по форме приближается к параболоиду с отношением осей 4:1 к моменту, когда скорость на границе раздела упадет до критического значения v_{mf} .

После того как полость над отверстием решетки достигнет своего предельного размера, граница ее раздела с окружающим слоем становится неустойчивой и может разрушиться. Так как слой, окружающий полость, пронизывается потоком со скоростью v_{mf} , достаточной как раз для поддержания частиц, образующих стенки и «крышу» полости, то последняя сжата со всех сторон, как в случае капельной жидкости. «Напор» этой псевдожидкости в основании полости больше, чем в ее верхней точке (соответственно расстоянию до поверхности слоя). Поэтому основание полости представляет собой наиболее напряженное место поверхности раздела. В эти зоны и устремляются, подобно жидкости, дисперсные частицы, занимая нижнюю часть параболлоида, т. е. придавая ей более устойчивую сферическую форму. Одновременно этот поток дисперсных частиц отсекает полость от отверстия решетки, и образуется новая граница раздела с газовым потоком, после чего процесс повторится вновь.

Теоретическое и экспериментальное изучение явления образования пузырей при истечении из единичного отверстия в жидкостях и псевдооживленных системах показало, что в исследованном диапазоне объемы пузырей, образующихся в псевдооживленном слое мелких частиц и в жидкости, близко совпадают при одинаковых диаметрах отверстия и расходах газа. Эти данные относятся к скоростям в отверстиях, на порядок меньшим, чем необходимо для обеспечения нормального газораспределения в решетках с множеством отверстий.

Вход газа в псевдооживленный слой при интересных для практики скоростях следует совершенно иным закономерностям. Если их представить в координатах рис. 4.3.12, то они укладываются на кривую в диапазонах ординат примерно от 1 до 2 и абсцисс от 0,2 до 1,5. Практически решетки псевдооживленных систем работают в диапазоне изменения абсцисс по рис. 4.3.12 от 20 до 200.

Протяженность струй и размеры пузырей. Аппроксимируя поверхность и объем параболической струи над отверстием решетки двумя прямыми конусами, сложенными своими основаниями, можно показать, что диаметр образующегося пузыря составит примерно

$$D_B = 0,435 D_0 \sqrt{v_{ome} / v_{mf}} \approx 0,36 L_j.$$

Поскольку объем параболоида несколько больше принятого, то для практических вычислений множитель 0,36 рекомендуется увеличить до 0,5. Это значение ближе к получаемому из эмпирических формул, чем из идеализированной модели, базирующейся на предельной скорости v_{mf} на границе раздела.

Стенки полости менее устойчивы, чем ее «крыша». Если скорость газа через «крышу» полости будет недостаточно высока и единичные частицы начнут падать вниз, то частицы над ними определенно потеряют устойчивость и произойдет обрушение «крыши». Такое подобное поршню обрушение вызовет уменьшение объема полости, что приведет к восстановлению скорости v_{mf} на поверхности раздела, несмотря на отделение полости от струи газа из отверстия решетки. Частицы, обтекающие полость и движущиеся к ее основанию, также стремятся сжать газ и, замещая его, вытеснить через «крышу» полости. Это легко может быть продемонстрировано, если внести пузырь в слой непод-

вижного зернистого материала. По мере подъема пузыря наблюдается сокращение его объема. В псевдооживленном слое, где частицы в непрерывной фазе, входящие в основание полости, сами пронизываются потоком со скоростью v_{mf} , сокращения объема пузыря не происходит. Из пузыря уходит то же количество газа.

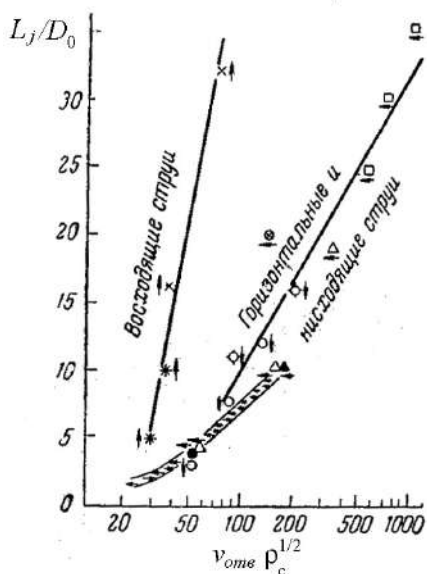


Рис. 4.3.12. Протяженность струи в псевдооживленном слое. Стрелки у точек показывают исходное направление струи

Движение пузырей в слое. При движении отделившегося от решетки пузыря дисперсные частицы образуют вокруг него концентричную оболочку толщиной примерно в $1/4$ диаметра пузыря ($D_S/D_B = 1,5$).

Будем рассматривать эту кольцевую оболочку как область, через которую дисперсные частицы вокруг пузыря движутся вниз под действием «гидростатического» напора, равного высоте полости (полость и кольцевое пространство уподоблены двум коленам дифференциального манометра), как это изображено на рис. 4.3.13. Тогда нисходящий поток массы твердых частиц можно приравнять к замещаемому объему полости или к объему образующегося пузыря:

$$\frac{\pi}{4}(\alpha D_B)^2 v_B = 1,97 A_m [(1 - W_H) D_B]^{1/2}, \quad (4.3.2)$$

откуда

$$v_B = \frac{1,97(1 - W_H)^{1/2}}{\alpha^2} \left[\left(\frac{D_S}{D_B} \right)^2 - 1 \right] D_B^{1/2}.$$

После подстановки $D_S/D_B = 1,5$ и средних значений W_B и α получим

$$v_B = 2,22 \sqrt{D_B}.$$

Это выражение не является единственным и неожиданным. Оно заимствовано из опубликованных работ, где скорость подъема газовых пузырей в жидкостях представлена в виде зависимости коэффициента сопротивления от числа

Рейнольдса, обычно используемой для твердых частиц. Практически пузыри имеют диаметр порядка нескольких сантиметров, что соответствует диапазону высоких чисел Рейнольдса, когда коэффициент сопротивления можно считать постоянным и равным 2:

$$2 = \frac{g D_B (\rho_d - \rho_c)}{\rho_d v_B^2}.$$

Плотность слоя ρ_B эквивалентна плотности жидкости, а величина ρ_c пренебрежимо мала в сравнении с ρ_B , тогда $2v_B^2 = 9,8 D_B$ или $v_B = 2,22 \sqrt{D_B}$.

Движение пузырей в системах «газ – жидкость» и «газ – псевдооживленный слой» происходит по одинаковым законам. Это с очевидностью следует из того факта, что зависимость скорости нисходящего движения твердых частиц в кольцевом слое вокруг пузыря была получена из эксперимента по истечению псевдооживленных твердых частиц из отверстий. Для корреляции данных было использовано обычное для жидкостей выражение $v = C_\xi \sqrt{2g\Delta H}$.

Для псевдооживленных систем $C_\xi = 0,445$, так что $W_S = 1,97 A_m [(1 - W_H) D_B]^{1/2}$ или

$$v_{bs} A_m = 1,97 A_m \sqrt{(1 - W_H) D_B}, \quad (4.3.3)$$

что согласуется с выражением (4.3.2).

Зная свойства твердых частиц и располагая уравнениями для расчета гидравлического сопротивления, можно вычислить скорость начала псевдооживления и, хотя бы в первом приближении, размер пузыря, возникающего над отверстием распределительной решетки. Можно также рассчитать скорость подъема пузыря, а значит, и предполагаемые размеры областей нисходящего и восходящего движения масс твердого материала. Как только полость отделится от отверстия решетки, ее траектория будет определяться относительной локальной текучестью в слое; последняя может беспорядочно изменяться по объему хорошо перемешанного слоя.

Из-за беспорядочных возмущений траекторий два пузыря могут сблизиться так, что их оболочки, занятые нисходящим потоком твердого материала, коснутся и даже перекроют друг друга; в результате приток частиц окажется недостаточным для двух пузырей. Вследствие нехватки частиц в перекрывающихся областях наблюдается слияние пузырей. Так называемый след твердых частиц в основании пузыря (рис. 4.3.13), отчетливо видный на фотографиях многих исследователей, также может восприниматься как результат притока твердых частиц из окружающей пузырь оболочки. Фактически пузырь представляет собой просто бывшую полость, которую могут обтекать частицы, изменяя свое положение и перемешиваясь в слое. В первом приближении локальное перемещение объемов твердых частиц в слое прямо пропорционально объемному расходу газа с поднимающимися пузырями.

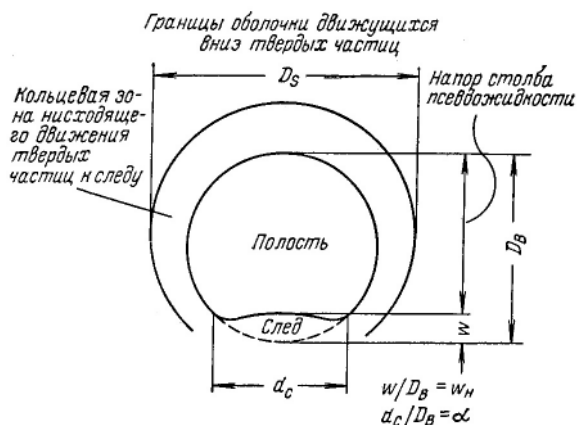


Рис. 4.3.13. Подъем пузырей в псевдооживленном слое: модель «увлечения твердых частиц»

Перемешивание и осаждение. Однородное и неоднородное псевдооживление. В первом приближении соотношение скоростей потока массы частиц в полость пузыря и осаждения частиц в газе позволяет оценить вероятность сохранения пузырей; иначе говоря, можно предсказать характер псевдооживления (однородное или неоднородное). Скорость притока массы твердых частиц аналогична скорости перемешивания. Очевидно, достаточно интенсивное перемешивание (подавляющее эффект осаждения) может привести к увеличению расстояний между отдельными частицами, так что большее количество газа пойдет через слой этим путем.

Для движения псевдооживленных твердых частиц в кольцевом сечении около пузыря уравнение (4.3.3) приводится к виду

$$v_{bs} = 1,97 \sqrt{(1 - W_H) D_B} \frac{(1 - \epsilon)(\rho_d - \rho_c)}{(1 - \epsilon)\rho_d + \epsilon\rho_c}. \quad (4.3.4)$$

Так как вещество пузыря перемещается вверх примерно с той же скоростью v_{bc} , что и нисходящий поток частиц, то скорость частиц относительно стенок пузыря составляет $2v_{bc}$.

Возникает вопрос, достаточно ли высока эта скорость (или при каких условиях она будет достаточно высока), чтобы подхватить частицы из потока твердого материала и внести их в полость пузыря.

Скорость, при которой частицы различных размеров и плотностей подхватываются потоком газа, может быть рассчитана на основе данных раздела 4.1. Приравняв половину этой скорости правой части выражения (4.3.4), получим минимальный размер пузыря, необходимый для увлечения твердых частиц потоком газа, а значит, для предотвращения появления пузырей.

Некоторые другие подходы к проблеме однородного и неоднородного псевдооживления базируются на определении максимального размера устойчивого пузыря в противоположность концепции о том, будут ли вообще в системе существовать различные пузыри.

Интенсивность циркуляции газа внутри пузыря может быть пропорциональна скорости подъема последнего. В крупном пузыре высока скорость внутренней циркуляции, и циркулирующий газ может увлечь частицы из следа пузыря, что делает возможным заполнение твердыми частицами некоторой доли пузыря. Решение совместно уравнения для скоростей подъема пузыря и витания частицы позволяет получить аналитическое выражение для максимального размера пузыря. Это выражение хорошо отражает тенденции явления, но приводит к слишком малым абсолютным значениям, в особенности для частиц размером менее 0,25 мм.

Возможен подход с использованием кривых для горизонтальной составляющей пульсационной скорости единичной частицы. Размер пузыря вычисляется в предположении, что газ циркулирует в горизонтальном направлении и его количества достаточно для поддержания частиц во взвешенном состоянии. Получаемый размер пузыря ближе согласуется с опытом, но в предельных случаях получаются преувеличенные его максимальные размеры даже там, где они вообще не наблюдаются.

Предположение о том, что относительная скорость между газом в пузыре и нисходящим потоком твердых частиц должна быть равна скорости увлечения частиц, привело к простому критерию однородности псевдооживления. Подчеркнем, что имеется в виду диаметр пузыря, достигаемый перед тем, как увлечение частиц начнет лимитировать его рост. Здесь не обязательно подразумевается максимальный размер пузыря в данной системе.

Можно вычислить максимальный размер устойчивого пузыря, приравняв скорость его подъема и экспериментально измеренные скорости витания частиц, выявить зависимость отношения диаметров пузыря и частицы от размера частиц, разности плотностей дисперсного материала и оживляющего агента и его вязкости. Если в данной системе отношение диаметров пузыря и частицы менее 1, то псевдооживление следует считать однородным; в диапазоне 1–10 псевдооживление носит переходный характер от однородного к неоднородному. Если указанное отношение превышает 10, можно ожидать интенсивного образования пузырей. Данный подход обоснован и согласуется с экспериментом. Однако рассчитанные размеры пузырей оказываются меньше обычно наблюдаемых в неоднородных псевдооживленных системах.

Подведем итоги. В системах «газ – дисперсные частицы» однородные системы существуют только в сравнительно узком интервале скоростей сжижающего агента. Зависимость между порозностью слоя и скоростью во всех случаях однородного псевдооживления имеет простую степенную форму. При использовании газов для создания однородного псевдооживления очень легких и мелких частиц часто необходимо механическое перемешивание.

Поскольку в слое могут одновременно существовать оживленные и неживые участки, скорость начала псевдооживления четко зафиксировать не представляется возможным. Эта величина с достаточной точностью может быть определена по экспериментальным данным. Скорость начала псевдооживления может быть приближенно рассчитана по уравнениям для потока сжижающего агента через неподвижный слой, если перепад давления в нем при

стабильной порозности приравнять весу частиц (с учетом архимедовой силы) на единицу площади поперечного сечения слоя. Значения перепада давления, вычисленные по уравнениям для потока через неподвижный слой, для псевдоожиженного слоя оказываются завышенными. Удобнее выражать скорость начала псевдоожижения исходя из скорости свободного падения частиц, так как отношение этих скоростей непосредственно связано с критерием Архимеда.

4.3.3. Фонтанирующий слой

Фонтанирование является одной из разновидностей псевдоожижения, позволяющей перемешивать плохо псевдоожижаемые зернистые материалы: слишком крупные частицы или одинаковые по размеру. Фонтанирование достигается подачей газа через небольшое отверстие в центре основания расширяющегося конического аппарата вместо равномерного его распределения по всему сечению слоя. В рассматриваемом случае гидродинамическая обстановка существенно отличается от существующей в обычном псевдоожиженном слое. Твердому материалу сообщается направленное циркуляционное движение, он в виде разбавленной фазы поднимается в ядре слоя и в виде плотной фазы опускается в кольцевой периферийной зоне.

Рассмотрим основные особенности фонтанирующего слоя и условия, необходимые для обеспечения его устойчивости. Изучаются такие гидродинамические характеристики, как перепад давления, скорость начала фонтанирования, предельная высота фонтанирующего слоя, структуры потоков оживающего агента и частиц, порозность и диаметр фонтана. Для более глубокого понимания структуры фонтанирующего слоя привлекаются результаты исследований по тепло- и массообмену. Везде, где возможно, даны расчетные уравнения.

Фонтанирование впервые было использовано при сушке зернистых материалов. Оно также представляет интерес для перемешивания полимерной крошки, покрытия таблеток, гранулирования удобрений и других материалов, коксования угля и пиролиза сланцев. Ниже приведено описание этих процессов, а также рассмотрены потенциальные возможности фонтанирующих слоев и налагаемые на них ограничения.

Общая характеристика. Фонтанирующий слой образуется при движении струи газа через зернистый слой (рис. 4.3.14). Циркуляция твердых частиц обусловлена их ускорением под действием газовой струи. Основная особенность системы состоит в восходящем движении твердых частиц в зоне фонтана (в ядре слоя) и последующем нисходящем их движении в периферийной кольцевой зоне. Газ из ядра слоя проникает в окружающую плотную фазу вследствие осевого градиента давления, обусловленного относительным движением газа и твердых частиц внутри фонтана.

Существует четкая поверхность раздела между фонтаном и кольцевой периферийной зоной; положение этой поверхности определяется равновесием действующих на нее сил. Средняя скорость подъема частиц в фонтане на один-два порядка выше скорости их нисходящего движения в периферийной кольцевой зоне. Поднимающиеся в ядре слоя дисперсные частицы сталкиваются со спол-

зающими в плотной фазе и увлекают их в струю восходящего газового потока. Основная часть зернистого материала в периферийной кольцевой зоне сползает вдоль стенок конической части аппарата к месту входа газа, где снова попадает в восходящую газовую струю. С увеличением расстояния от входа газа уменьшаются его скорость (и радиальный поток твердых частиц из кольцевой зоны). В результате концентрация частиц в фонтане возрастает, а их скорость постепенно уменьшается.

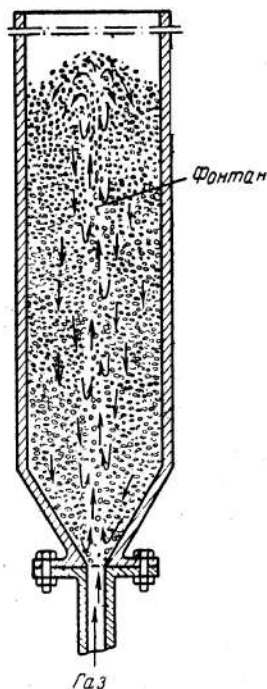


Рис. 4.3.14. Схема фонтанирующего слоя

Гидравлические характеристики. В отличие от обычного псевдоожижения, при фонтанировании градиент давления dP/dx непостоянен по высоте слоя. Он мал у основания и достигает максимума на свободной поверхности слоя. Перепад давления обусловлен двумя параллельными сопротивлениями: фонтана с частицами, транспортируемыми в разбавленной фазе, и кольцевой зоны с нисходящим плотным слоем навстречу потоку газа. Соответствующие градиенты перепада давления на различных уровнях слоя практически одинаковы, за исключением области, примыкающей к отверстию для входа газа. В верхней части высокого слоя градиент давления приближается к значению, необходимому для взвешивания твердого материала, т. е. псевдоожижения. Если скорость газа в кольцевой зоне становится равной скорости начала псевдоожижения, то фонтанирующий слой достигает предела устойчивости; это условие соответствует максимальной высоте фонтанирующего слоя.

Полное сопротивление фонтанирующего слоя максимальной высоты эквивалентно примерно двум третям его веса (или перепада давления при псевдоожи-

жении). У более низких слоев оно меньше. Перепад давления, необходимый для создания фонтанирующего слоя, значительно выше, чем для его поддержания, из-за дополнительной энергии, расходуемой на движение газовой струи через плотный слой зернистого материала. По этой же причине скорость газа, ниже которой фонтан разрушается (она называется скоростью начала фонтанирования), несколько ниже той, при которой неподвижный слой переходит в фонтанирующий.

Уменьшение перепада давления в слое ниже уровня, соответствующего однородному псевдоожигению, наблюдается также в псевдоожигенном слое с образованием каналов. Сходство между фонтанированием и образованием каналов представляется недостаточно правомерным. Образование каналов при движении газа через слой не сопровождается перемещением частиц и представляет собой нежелательное явление в псевдоожигенных системах. При фонтанировании, напротив, газовая струя обеспечивает перемешивание всего слоя и одновременно тесный контакт между твердыми частицами и газом. Образование каналов возникает в псевдоожигенных слоях очень мелких частиц, фонтанирование же возможно при использовании крупных частиц.

Условия фонтанирования. Устойчивость фонтанирования определяется рядом условий, при отсутствии которых движение твердой фазы становится неустойчивым, способствуя возникновению неоднородного псевдоожигения, а при увеличении скорости газа – образованию поршней из дисперсного материала.

Основными параметрами являются:

- размер твердых частиц или их гранулометрический состав;
- диаметр отверстия для ввода газа;
- поперечные размеры аппарата и угол его конусности;
- расход газа;
- высота слоя.

Эти факторы взаимосвязаны. Например, слой частиц песка размером 0,6 мм в аппарате диаметром 152 мм при диаметре отверстия для входа газа 16 мм будет переходить из неподвижного состояния в псевдоожигенное, не образуя фонтанирующего слоя, независимо от высоты неподвижного слоя и скорости газа. В то же время при диаметре отверстия 12,5 мм можно достичь устойчивого фонтанирования, но только в узком диапазоне скоростей газа и в случае слоев не выше 700 мм (рис. 4.3.15).

Условия устойчивого фонтанирования менее жестки для более крупных твердых частиц и аппаратов большего диаметра. Минимальный диаметр частиц, для которых пределы устойчивости становятся достаточно широкими в практическом аспекте, составляет 1–2 мм; максимальный размер частиц, хорошо поддающихся фонтанированию, не превышает 3 мм (древесные опилки, частицы ацетата целлюлозы). Монодисперсные системы в большей мере склонны к устойчивому фонтанированию. Полидисперсные – отличаются более низкой газопроницаемостью. Поэтому газовая струя в них обычно стремится распределиться более равномерно по сечению слоя. При увеличении среднего размера частиц возможно использование зернистого материала более широкого гранулометри-

ческого состава. Например, в случае наиболее крупных из упомянутых выше частиц наблюдается удовлетворительное фонтанирование слоя, составленного из частиц с восьмикратным диапазоном их размеров. Для более мелких частиц практически приемлемый диапазон их размеров значительно уже.

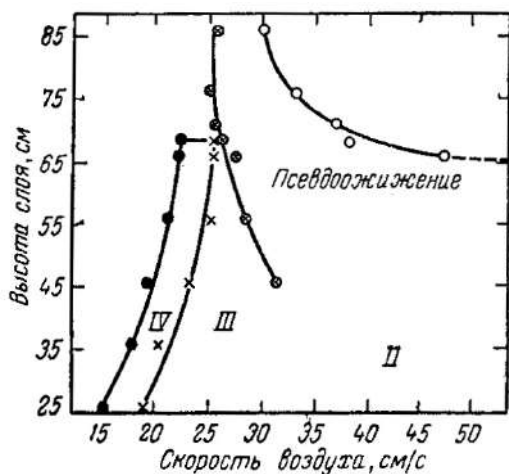


Рис. 4.3.15. Фазовая диаграмма для песка: I – поршневой режим (правый верхний угол); II – беспорядочные всплески над слоем, устойчивое нисходящее движение частиц вдоль стенок; III – неустойчивое фонтанирование (нарушение формы фонтана); IV – неподвижный слой.

При высоких слоях материала для фонтанирования требуются более широкие колонны или меньшие размеры входного отверстия. Зависимость между размерами частиц и предельной высотой слоя, однако, более сложная. В колонне диаметром 152 мм максимальная высота фонтанирующего слоя с ростом размера частиц сначала увеличивается, а затем уменьшается. Для определенного диаметра аппарата и заданного размера частиц существует максимум размера входного отверстия, при превышении которого нельзя получить устойчивого фонтанирования. В частности, при фонтанировании зерен пшеницы в аппаратах диаметром от 102 до 305 мм максимум отношения D_i/D составляет 0,35.

Аппарат для фонтанирования может быть цилиндрической или конической формы. Предпочтительным, хотя и необязательным, представляется аппарат с коротким коническим основанием, сужающимся вниз к отверстию для входа газа, дабы дисперсные частицы из периферийной кольцевой зоны могли легко попадать в область газовой струи, не образуя при этом застойных зон в основании слоя. Предпочтительный угол конусности зависит в известной степени от сил внутреннего трения зернистого материала; однако при слишком малых углах в вершине конуса фонтанирование становится неустойчивым, поскольку воздушная струя стремится поднять весь слой. Предельный угол конусности для большинства материалов близок к 40° , как для цилиндрических аппаратов с коническим основанием, так и для собственно конических аппаратов.

Конструкция входного устройства для ввода газа также может оказывать существенное влияние на устойчивость фонтанирования. Последняя была выше, когда подводящая газ трубка слегка выступала в коническую часть, и ниже – при соединении заподлицо, как это показано на рис. 4.3.15. Сужающееся

сопло (тоже выступающее) работает лучше прямой трубки. Наконец, небольшой плоский диск между срезом сопла и нижним основанием конуса дает дополнительный стабилизирующий эффект.

Перепад давления. Зависимость перепада давления от скорости газового потока. Характер зависимости сопротивления слоя $\Delta P_{\text{полн}}$ от расхода газа показан на рис. 4.3.16 (кривая 1). Высокий пик давления перед стабильным фонтанированием не является специфической особенностью фонтанирующего слоя, как считалось ранее. Он вызван вводом высокоскоростной газовой струи в слой сыпучего материала. Аналогичный пик наблюдается и в случае псевдоожижения в коническом аппарате. Он отсутствует в цилиндрическом, где газ распределен равномерно.

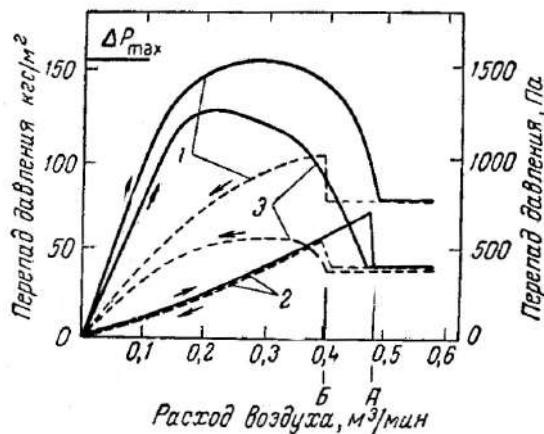


Рис. 4.3.16. Зависимость сопротивления фонтанирующего слоя от расхода воздуха при его увеличении (сплошные линии) и уменьшении (штриховые линии)

На рис. 4.3.16 кривая 2 показывает перепад давления $\Delta P_{\text{верх}}$, измеренный отдельно в верхней части того же слоя над конусом, а кривая 3 — перепад давления $\Delta P_{\text{низ}}$ в самом конусе. При увеличении расхода воздуха зависимость для $\Delta P_{\text{верх}}$ остается линейной до тех пор, пока фонтан не прорвется через слой (точка А). Кривая для $\Delta P_{\text{низ}}$ возрастает намного круче вследствие высокой скорости газа около входного отверстия и проходит через максимум в тот момент, когда внутри слоя в этой области образуется фонтан. При уменьшении расхода газа, начиная с момента фонтанирования и до тех пор, пока не исчезнет (погрузится внутрь слоя) внешний фонтан (точка Б), $\Delta P_{\text{верх}}$ изменяется по той же самой кривой, что и прежде. Кривая для $\Delta P_{\text{низ}}$ в этом случае проходит ниже, чем раньше, поскольку энергия воздушной струи уже не расходуется на разрыхление сыпучего материала и перепад давления полностью обуславливается сопротивлением трению.

Пик давления. Оценка пика давления имеет практическое значение при конструировании дутьевых устройств для установок с фонтанирующим слоем. ΔP_{\max} складывается из двух сопротивлений – разрыхлению слоя и газовому потоку, и предложена следующая расчетная формула:

$$\Delta P = \left[\frac{6,8}{\operatorname{tg} \alpha} \left(\frac{D_i}{D} \right) + 0,8 \right] H \rho_n - 34,4 d \rho_n.$$

Угол внутреннего трения, измеренный общепринятым методом, привел к значениям $\operatorname{tg} \alpha$ для использованных материалов в диапазоне от 1,25 до 2,95. Угол конусности (если только он не очень мал) не должен оказывать какого-либо влияния на характер движения струи непосредственно над входным отверстием.

Перепад давления при фонтанировании. Вследствие распространения газа в периферийном кольцевом сечении по мере его восходящего движения продольный градиент давления в фонтанирующем слое возрастает от нуля в его основании до максимума у свободной поверхности слоя. Изменение давления с высотой слоя обычно следует косинусоиде

$$P = \Delta P \cos(\pi x / 2H). \quad (4.3.5)$$

При максимальной высоте слоя, способного фонтанировать H_{ms} , градиент давления в верхней части слоя достаточен для псевдооживления сыпучего материала, находящегося в кольцевой зоне. Следовательно, в верхней части слоя

$$dP/dx = -\rho_d(1 - \varepsilon_0). \quad (4.3.6)$$

Дифференцируя выражение (4.3.5) по x и подставляя результат в уравнение (4.3.6), получим после подстановки $x = H = H_{ms}$

$$\Delta P = 2H_{ms}\rho_d(1 - \varepsilon_0)/\pi.$$

Соотношение общего перепада давления фонтанирующего слоя высотой H_{ms} и псевдооживленного слоя такой же высоты составляет $2/\pi = 0,64$. Более обстоятельный теоретический анализ привел к значению 0,75. Наибольшее число опубликованных экспериментальных значений указанного соотношения лежит в интервале 0,7–0,8. Учитывая, что эксперименты проводили в широком диапазоне свойств материалов, размеров аппарата (от 100 до 810 мм) и входных отверстий для газа, приведенное теоретическое значение соотношения общих перепадов давления является исключительно точным.

Обстановка в слоях, работающих при высотах ниже H_{ms} , намного сложнее. Перепад давления при фонтанировании будет зависеть не только от высоты слоя, но также и от конфигурации аппарата и свойств твердых частиц.

Скорость начала фонтанирования. Минимальная скорость газа, при которой слой будет оставаться в состоянии фонтанирования, зависит, с одной стороны, от свойств твердой фазы и сжижающего агента и, с другой – от геометрии слоя. В отличие от скорости начала псевдооживления скорость начала фонтанирования v_{ms} для данного материала понижается с уменьшением высоты слоя и увеличением диаметра аппарата. Кроме того, на величину v_{ms} влияет размер входного отверстия, хотя и незначительно. Сравнение v_{ms} со скоростью

начала псевдооживления затруднительно. В случае высоты слоя, близкой к максимально возможной при фонтанировании, скорости фонтанирования и начала псевдооживления примерно равны. Поскольку максимальная высота слоя, способного фонтанировать, в аппаратах большого диаметра намного больше рабочих, то практическая потребность газа для фонтанирования в больших аппаратах часто бывает как выше, так и ниже, чем для псевдооживления.

Известны многочисленные экспериментальные данные по скорости начала фонтанирования, охватывающие широкий круг дисперсных материалов в аппаратах малого диаметра (от 75 до 230 мм) цилиндрической и конической формы. Кроме того, в опытах с пшеницей было изучено влияние диаметров аппарата вплоть до 610 мм. Вследствие сложности системы был использован эмпирический подход к обобщению опытных данных. Для цилиндрических аппаратов с коротким коническим основанием первоначально была предложена следующая зависимость:

$$v_{ms} = \left(\frac{d}{D} \right) \left(\frac{D_i}{D} \right)^{1/3} \sqrt{\frac{2gH(\rho_d - \rho_c)}{\rho_c}}. \quad (4.3.7)$$

Значения среднего диаметра частиц, используемые для расчета по уравнению (4.3.7), требуют следующих пояснений:

1. Для пшеницы во всех случаях брали наименьший размер.
2. Для других материалов близкого гранулометрического состава использована среднеарифметическая величина из диаметров отверстий сита.
3. Для полидисперсных материалов можно использовать средний объемно-поверхностный диаметр ($d = 1/\sum d_i/x_i$), заменяя диаметр несферической частицы диаметром равновеликой сферы.

Первоначально в уравнении (4.3.7) для конусов с углами 45° и 85° были предложены различные значения показателя степени при D_i/D . Влияние угла конуса не настолько велико, чтобы оправдывать такое усложнение формулы. Более серьезный недостаток рассматриваемого уравнения был выявлен при работе с материалами широкого гранулометрического состава (до шестикратной разницы в размерах частиц). В этом случае влияние высоты слоя и диаметра отверстия на v_{ms} , независимо от используемого метода расчета характеристического диаметра частиц смеси, намного сложнее, чем следует из формулы (4.3.7). Для конических аппаратов известно более простое безразмерное уравнение следующего вида:

$$Re_{ms} = K(Ar)^a (tg\theta)^b (H/D_i)^c, \quad (4.3.8)$$

где Ar – число Архимеда; θ – половина угла в вершине конуса.

Число Рейнольдса базируется на диаметре частицы и скорости воздуха во входном отверстии в момент начала фонтанирования. Значения постоянной и показателей степени в уравнении (4.3.8) существенно различаются для разных диапазонов изучаемых переменных.

Максимальная высота фонтанирующего слоя. Если высота слоя превысит максимально возможную в условиях фонтанирования, то фонтанирующий слой перейдет в псевдооживленный (рис. 4.3.15). Следовательно, если известна скорость начала псевдооживления зернистого материала, то максимальная высота

фонтанирующего слоя в данном аппарате может быть рассчитана по уравнению для скорости начала фонтанирования при замене значения v_{ms} на v_{mf} . Величина v_{mf} была найдена при помощи уравнения Эргана для неподвижного слоя и равенства $\Delta P/H = \rho_d(1 - \varepsilon_0)$:

$$1,75\rho_c dv_{mf}^2 + 150\mu_c(1 - \varepsilon_0)v_{mf} - d^2\varepsilon_0^3\rho_d g = 0.$$

Значения H_{ms} , полученные подстановкой в формулу (4.3.7) скоростей v_{mf} хорошо совпали с экспериментальными результатами для ряда узких фракций зернистых материалов.

Была предпринята попытка связать H_{ms} с переменными параметрами системы, исходя из теоретических предпосылок. При этом постулировали:

- равновесие сил, действующих на частицы в пределах элементарного участка границы раздела «фонтан – кольцевая зона»;
- сохранение количества движения зернистого материала и газа в фонтанирующем ядре;
- определенную модель столкновений при переносе частиц из кольцевой зоны в ядро потока (фонтан);
- обмен количеством движения у входного отверстия.

В ходе анализа были сделаны некоторые упрощающие допущения и приближения, основанные на экспериментальных наблюдениях. Конечные уравнения являются полуэмпирическими и применимы только в ограниченном диапазоне рабочих условий. Тем не менее такой фундаментальный подход к проблеме является прогрессивным, поскольку дальнейшее его развитие может способствовать более полному пониманию природы фонтанирующих слоев.

Характер движения газа. Распределение газа между фонтаном и периферийной кольцевой зоной является важным фактором при оценке эффективности контакта между газом и твердыми частицами. Характер газового потока определяли экспериментально двумя методами:

- по градиенту давления – в предположении, что в периферийной кольцевой зоне слой имеет наиболее рыхлую упаковку, а давление в каждом поперечном сечении слоя постоянно;
- непосредственным измерением профилей локальной скорости газа с помощью трубки Пито.

Результаты, полученные по первому методу, показали, что непосредственно у основания слоя значительная доля воздушного потока поступает в кольцевую зону (рис. 4.3.17), причем эта доля возрастает с увеличением диаметра колонны. Эксперименты проводили со слоями пшеницы в аппарате диаметром 610 мм с различными углами в вершине конуса (45–85°), диаметрами входного отверстия (50,8–101,6 мм) и расходами воздуха (вплоть до превышающих v_{ms} на 20%). Доля газа, проходящего через кольцевую зону, достигает максимума при малом угле конусности, большом диаметре входного отверстия и малых скоростях газового потока. При повышении расхода газа дополнительные его количества проходят через зону фонтана, не проникая в кольцевую зону.

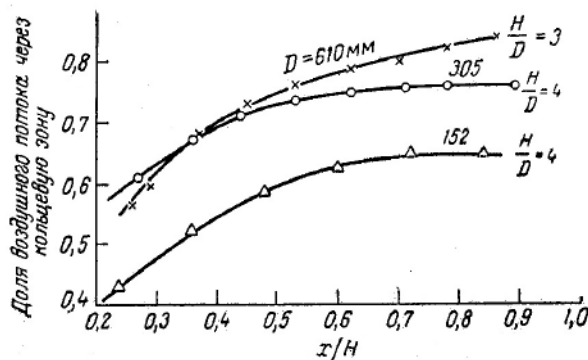


Рис. 4.3.17. Распределение воздуха в фонтанирующих слоях пшеницы (угол конуса $\theta = 85^\circ$; $D/D_i = 6$)

Точность измерения локальных скоростей газа в кольцевой зоне вызывает определенные сомнения из-за их низких значений и возможности нарушения локальной порозности при вводе в систему трубки Пито. В то же время измерения в зоне фонтана должны быть в значительной мере свободны от таких погрешностей. Профили скоростей на различных уровнях в аппарате диаметром 150 мм при высоте слоя пшеницы 33 см ($D_i = 14$ мм, угол в вершине конуса 60°) приведены на рис. 4.3.18.

Для интерпретации характера распределения газового потока между фонтаном и кольцевой зоной была привлечена теоретическая модель, рассматривающая равновесие сил на границе между этими зонами. Для слоя высотой H_{ms} теоретический анализ приводит к следующему уравнению:

$$\frac{v_A(x)}{v_{mc}} = 1 - \left(1 - \left(\frac{x}{H_{ms}} \right) \right)^3.$$

где $v_A(x)$ — скорость подъема газа в кольцевом пространстве на расстоянии x от входного отверстия. Для слоев малой высоты приведенное выше уравнение запишется в виде:

$$\frac{v_A(x)}{v_A(H)} = 1 - \left(1 - \left(\frac{x}{H} \right) \right)^3.$$

Характер распределения газа не зависит ни от природы твердых частиц, ни от диаметра цилиндрических аппаратов. Первый вывод, если он достоверен, создает большие удобства в расчетном аспекте, но требует дополнительного экспериментального подтверждения на различных материалах. Второй вывод не подтверждается результатами опытов с большими аппаратами, где высота слоя была значительно меньше максимально возможной при фонтанировании. Теоретический анализ является строго обоснованным только для H_{ms} . В случае слоев меньшей высоты задача является более сложной, поскольку граничное условие $v_A(H) = v_{mf}$, необходимое для интегрирования дифференциального уравнения равновесия сил, в этом случае неприменимо.

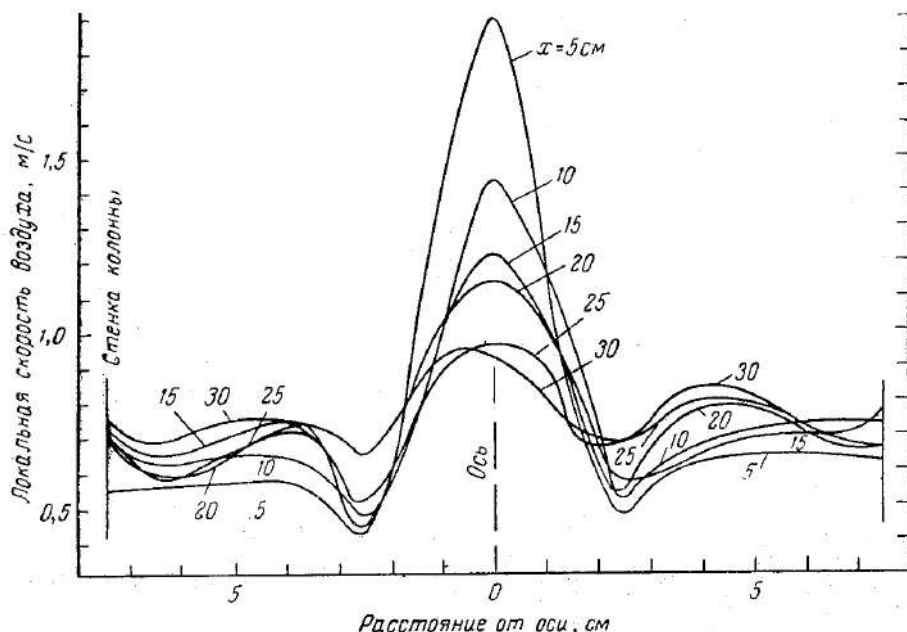


Рис. 4.3.18. Пример эпюры скоростей воздуха в фонтанирующем слое пшеницы, x – расстояния от входного отверстия.

Характер движения твердого материала. Движение зернистого материала в фонтанирующем слое является направленным и легко поддается изучению.

Движение в фонтане. Скорости восходящих частиц в различных точках измеряли с помощью:

- высокоскоростной киносъемки фонтана через плоскую прозрачную стенку аппарата полукруглого поперечного;
- пьезоэлектрического датчика, позволяющего измерять скорости в круглом цилиндрическом аппарате.

Типичные результаты опытов с коническим слоем приведены на рис. 4.3.19.

Дисперсные частицы, попадающие из кольцевой зоны в газовую струю над входным отверстием, на коротком участке приобретают максимальную скорость, которая затем постепенно уменьшается до нулевого значения в вершине фонтана. Основная сила, сообщающая ускорение, обусловлена лобовым сопротивлением частицы при ее обтекании газовым потоком. Торможение частиц вызывается силой тяжести, а также столкновениями с частицами, движущимися в зоне фонтана и образующими его стенки. В качестве первого приближения для оценки средней скорости частицы в фонтане можно решать следующее уравнение равновесия сил:

$$\frac{dw}{d\tau} = 0,75 \frac{C_{\xi}}{d} \frac{\rho_c}{\rho_d} (v - w)^2 - \left(\frac{\rho_d - \rho_c}{\rho_d} \right) g.$$

Результаты интегрирования для аппарата диаметром 610 мм при высоте слоя пшеницы 1,22 м показали приемлемое согласование с данным уравнением. Оно не учитывает влияние столкновений частиц и может быть решено только в том случае, если известна закономерность изменения скорости воздуха в фонтане по мере удаления от входного отверстия. Более обобщенный теоретический анализ без отмеченных выше ограничений еще не подтвержден прямым экспериментом.

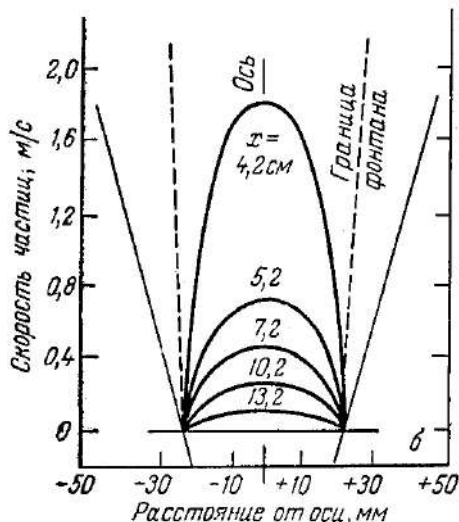


Рис. 4.3.19. Эпюра скоростей твердых частиц в фонтанирующем слое.

**Конический аппарат $\theta = 30^\circ$; $D_f = 40$ мм; $H = 12$ см; $d = 1,5$ мм;
 $U = 3,47$ м/с; материал — алюмосиликатный сферический катализатор
 $(d_k = 1,5$ мм).**

При данной скорости воздуха для мелких частиц характерны более высокие значения максимальной скорости, и они достигаются на большем расстоянии от входного отверстия, нежели для крупных частиц.

Радиальный профиль скорости частиц в фонтане на любом уровне является параболическим. Различие между осевой скоростью и скоростью около стенки уменьшается по мере увеличения расстояния от входного отверстия газа (рис. 4.3.19). Нормализованный график на рис. 4.3.20 показывает, что на любом уровне в фонтане радиусом a_s скорости частиц w_r на расстоянии r от оси и максимальная w_{ax} на самой оси потока связаны следующим уравнением:

$$w_r = w_{ax} \left(1 - \frac{r^2}{a_s^2} \right).$$

Движение в кольцевой зоне. Наблюдение за перемещением твердых частиц (через плоскую стенку полукруглого аппарата диаметром 610 мм) показало, что из любой точки свободной поверхности слоя частица движется вниз в кольцевой зоне примерно по параболической траектории, приближаясь в радиальном направлении к фонтану. Если частица достигает основания слоя, то ее траекто-

рия деформируется коническим днищем. Следовательно, только на уровнях слоя, лежащих выше конуса, скорость нисходящего движения твердых частиц на периферии аппарата подобна их скорости в поперечном сечении всей этой зоны. В слое пшеницы диаметром 152,5 мм и высотой 63,5 см поток дисперсного материала в кольцевой зоне, рассчитанный по наблюдаемой скорости частиц, вдоль стенки аппарата уменьшался, начиная от величины 0,9 кг/с у верхнего уровня слоя до 0,45 кг/с на уровне несколько выше конуса ($\theta = 85^\circ$). Это свидетельствует о наличии поперечного потока твердого материала из кольцевой зоны в фонтан.

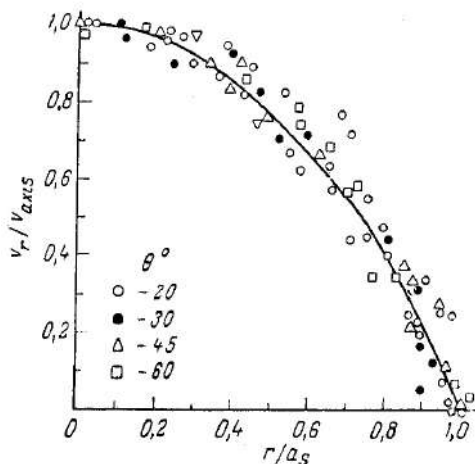


Рис. 4.3.20. Нормализованный график скоростей подъема частиц в конических аппаратах

В случае больших колонн доля частиц, составляющих поперечный поток в зону фонтана, намного меньше. Около одной трети твердых частиц, начинающих свое нисходящее движение в кольцевой зоне от свободной поверхности слоя, попадает в фонтан еще до достижения области конуса (рис. 4.3.21). Скорость движения твердых частиц у свободной поверхности слоя возрастала с увеличением высоты слоя и расхода газа, но мало зависела от угла в вершине конического основания.

Циркуляция твердых частиц и эффективность перемешивания. Поскольку время пребывания частицы в фонтане весьма мало по сравнению с продолжительностью ее нахождения в кольцевой зоне, продолжительность всего цикла может быть установлена по характеристикам движения твердых частиц в кольцевой зоне. Распределение времен цикла, рассчитанных по траекториям частиц в кольцевой зоне, приведено на рис. 4.3.21. На этом графике представлено время, затрачиваемое различными накопленными массовыми долями твердого материала для завершения одного цикла. Хотя в верхней части слоя встречались частицы с коротким циклом, основная масса частиц пшеницы (свыше 90%) для завершения одного цикла затрачивала 60 с и более.

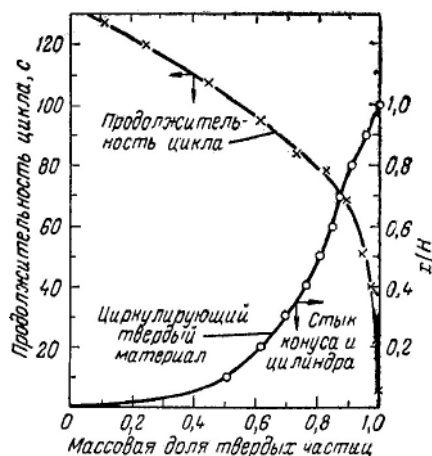


Рис. 4.3.21. Распределение времени цикла и скоростей циркуляции твердого материала в слое пшеницы

Средние скорости циркуляции твердого материала в фонтанирующем слое были определены при изучении переходного процесса перемешивания с помощью последовательного отбора твердых частиц. При этом первоначально верхняя и нижняя половины слоя состояли из частиц разного цвета. Такой метод позволяет оценить интенсивность обмена твердыми частицами между двумя зонами по средней скорости циркуляции. Было установлено, что определяющим фактором является скорость газового потока; интенсивность циркуляции увеличивается пропорционально отношению рабочей скорости газового потока и скорости, необходимой для начала фонтанирования. Циркуляция интенсифицируется при увеличении размеров частиц.

Эффективность перемешивания твердых частиц в непрерывнодействующих фонтанирующих слоях определяли методом ступенчатого импульса, заменяя подачу обычных частиц окрашенными мечеными. При этом отклик выражался концентрацией окрашенных частиц в пробах на выходе из слоя, отбираемых через интервалы в одну минуту. Твердый материал подавали в кольцевую зону сверху и выводили из слоя через отверстие, расположенное в коническом днище. Типичные результаты представлены графически на рис. 4.3.22 в виде зависимости доли меченых частиц на выходе из аппарата $f(\tau)$ от приведенного времени $\tau/\langle\tau\rangle$, где $\langle\tau\rangle$ — среднее время пребывания частиц в слое. В пределах изученного интервала времени ($\langle\tau\rangle = 25 - 40$ мин) кривая перемешивания (по форме она приближается к кривой, соответствующей полному перемешиванию) не зависела от высоты слоя, диаметра отверстия для подачи воздуха и скорости последнего.

Аналогичные результаты были получены при изучении слоев угля, когда выгрузку продукта производили через патрубок, расположенный диаметрально противоположно входному отверстию. Эти результаты интерпретированы на основе модели, предложенной для гомогенных проточных систем, при допущении, что в зоне ввода дисперсного материала в систему в верхней части аппара-

та частицы движутся в режиме идеального вытеснения. При интерпретации экспериментальных данных на основе такой модели получается, что в объеме слоя содержится 92% полностью перемешанных частиц, а остальные 8% находятся в застойных зонах без байпаса. Эффективный объем зоны идеального вытеснения составляет 10% от общего объема слоя.

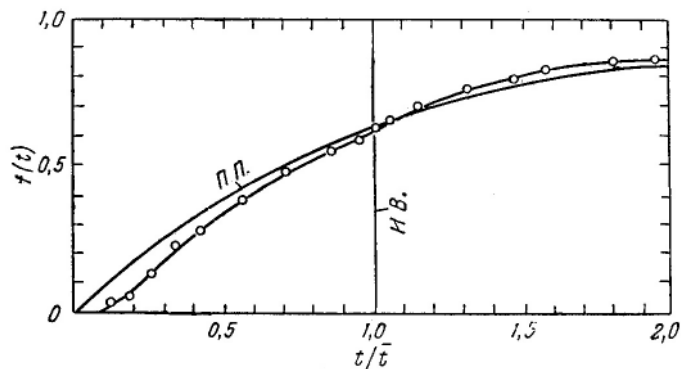


Рис. 4.3.22. Типичная кривая перемешивания зернистого материала (П. П. — полное перемешивание; И. В. — идеальное вытеснение)

Распределение порозности. Порозность в кольцевой зоне фонтанирующего слоя такая же, как в неподвижном слое с наиболее рыхлой упаковкой, и практически одинакова в различных частях кольцевой зоны. Ядро слоя аналогично подъемному стояку, через который частицы движутся в разбавленной фазе при постепенном уменьшении расхода газа и увеличении потока твердого материала по мере удаления от основания слоя. Порозность в фонтане определяется взаимодействием между потоками газа и твердых частиц.

Имеющиеся данные по скоростям частиц в пристенной части колонны и в фонтане были использованы для расчета вертикальных профилей порозности в фонтане для слоев пшеницы в аппаратах разного диаметра: 152,5 и 610 мм. Значения порозности, рассчитанные таким методом, хорошо согласуются с соответствующими значениями, вычисленными независимо — по градиенту давления и экспериментально полученным скоростям частиц в фонтане.

Непосредственные измерения порозности в фонтане с помощью пьезоэлектрических датчиков были произведены в цилиндрических и конических аппаратах. В основе этого метода лежит простой принцип, согласно которому частота и скорость, с которыми частицы ударяют в чувствительный элемент, пропорциональны концентрации твердого материала в месте размещения датчика. Во всех случаях наименьшее значение порозности наблюдается в верхней части фонтана и колеблется для различных систем от 0,7 до 0,99, причем максимальный предел встречается в слоях весьма малой высоты (значительно меньшей, чем H_{ms}). В конических аппаратах порозность практически остается неизменной по высоте фонтана.

Приведенные выше данные относятся к порозности в фонтане, усредненной по радиусу. Некоторые данные по радиальным профилям порозности четко указывают на существование переходных зон на периферии фонтана, где порозность имеет промежуточное значение между порозностями плотной фазы в кольцевой зоне и разбавленной фазы в фонтане.

Диаметр фонтана. Диаметр фонтана в широком диапазоне исследованных материалов, диаметров аппарата (100–600 мм), входных отверстий, а также высот слоя существенно не изменяется по высоте последнего. Для расчета среднего диаметра фонтана предложена формула $d_s = (1,32 \lg D - 2/20) \sqrt{G}$, где d_s и D в мм, G в кг/(ч·м²).

Свойства сыпучих материалов, высота слоя и диаметр входного отверстия влияют косвенно – через скорость газового потока. Предложена модификация формулы, базируясь на опытных данных с материалами плотностью вплоть до 7800 кг/м³: $d_s = (1,67 \lg D - 2,78) \sqrt{G/\rho_d}$, где использованы следующие единицы: мм, кг/(ч·м²), кг/м³.

Допущение о постоянстве диаметра фонтана по его высоте весьма удобно для количественной интерпретации, но не является достаточно строгим. Поскольку форма фонтана определяется равновесием сил в потоках твердого материала и газа, то изменение диаметра фонтана по высоте слоя должно быть функцией переменных, влияющих на движение газа и твердых частиц. При определенных условиях наблюдалось непрерывное увеличение диаметра фонтана по высоте слоя, в то время как при других условиях отмечалось сужение фонтана на небольшом расстоянии от отверстия для ввода газа. В некоторых случаях было обнаружено незначительное сужение фонтана в верхних областях слоя. Были предприняты попытки теоретически объяснить это явление.

4.3.4. Виброкипящий слой

Образование виброкипящего слоя. Виброкипящий слой может быть создан в аппаратах самых разнообразных конструкций путем воздействия на сыпучий материал вибрирующих дна, дополнительных перегородок или наклонных лотков, а также с помощью побудителей вибрации, введенных непосредственно в рабочую камеру. Указанные элементы могут совершать гармонические или субгармонические колебания. Траектория их колебательного движения может представлять собой прямую, направленную по вертикали или под углом к горизонту, окружность, эллипс или другую плоскую или объемную фигуру.

От амплитуды, частоты и траектории колебательного движения зависят структура слоя, интенсивность и характер перемешивания твердой фазы и скорость направленного перемещения материала в аппаратах непрерывного действия. В большинстве случаев в аппаратах с виброкипящим слоем используют гармонические колебания. Движение вибрирующей поверхности с находящимся на ней сыпучим материалом относительно неподвижной системы координат описывается уравнениями $\ddot{x} = A\omega^2 \cos\beta \sin\omega\tau$; $y = A\omega^2 \sin\beta \sin\omega\tau$.

Виброкипящий слой может быть создан:

- вибрационным воздействием на слой дисперсного материала в условно неподвижной среде;
- вибрационным воздействием в сочетании с фильтрацией газа через слой снизу вверх или сверху вниз;
- вибрационным воздействием на слой дисперсного материала в вакууме.

Точного математического определения оптимальных параметров для указанных способов создания виброкипящего слоя из-за множества влияющих факторов пока не получено. При определенных допущениях оно может быть сведено к решению задачи взаимодействия вибрирующей плоскости с сыпучими материалами и средой. Эти решения позволяют проанализировать образование виброкипящего слоя, выявить основные параметры, характеризующие этот процесс, и дать классификацию различных состояний слоя, подвергаемого вибрационному воздействию.

Образование виброкипящего слоя в условно неподвижной среде. Рассмотрим лоток, наклоненный к горизонту под углом α , совершающий прямолинейные гармонические колебания с частотой ω и амплитудой A в направлении, образующем угол β , с его плоскостью (рис. 4.3.23). На частицу массы m , находящуюся на этом лотке, действует сила тяжести $F = mg$, сила трения о поверхность лотка $F_{тр}$, нормальная реакция поверхности на частицу N , а также сила инерции I .

Движение частицы относительно вибрирующей по гармоническому закону поверхности в системе координат, связанной с этой поверхностью, описывается уравнениями:

$$\ddot{x} = A\omega^2 \cos\beta \sin\omega\tau - mg \sin\alpha + F_{тр}; \quad \ddot{y} = A\omega^2 \sin\beta \sin\omega\tau - mg \cos\alpha + N.$$

Если частица находится на вибрирующей поверхности и не отрывается от нее, то ее ускорение относительно этой поверхности равно $\ddot{y} = 0$. Тогда из последнего уравнения находим $N = -A\omega^2 \sin\beta \sin\omega\tau + mg \cos\alpha$.

Свойства слоя дисперсного материала при увеличении интенсивности вибрационного воздействия существенно изменяются при начале отрыва частиц друг от друга и от вибрирующей поверхности, на которой они находятся. До начала отрыва материал растекается по вибрирующей поверхности, находясь как бы в состоянии виброоживления. После наступления отрыва при увеличении интенсивности колебаний начинается перемещение материала. Слой как бы вскипает. Частица оторвется от поверхности, когда нормальная реакция $N = 0$. Тогда, согласно последнему уравнению, получим

$$(A\omega^2)_{кр} = \frac{g}{\sin\omega\tau} \frac{\cos\alpha}{\sin\beta}.$$

Минимальное критическое ускорение вибрации поверхности, при котором произойдет отрыв частицы, будет при $\sin\omega\tau = \pm 1$, т. е. фазовых углах 90 и 360° . В эти моменты относительное критическое ускорение вибрации равно

$$[(A\omega^2)_{кр} \sin\beta] / g \cos\alpha = \pm 1. \quad (4.3.9)$$

Для частицы, лежащей на вертикально вибрирующей горизонтальной поверхности, последнее выражение принимает вид

$$(A\omega^2)_{кр} / g = \pm 1. \quad (4.3.10)$$

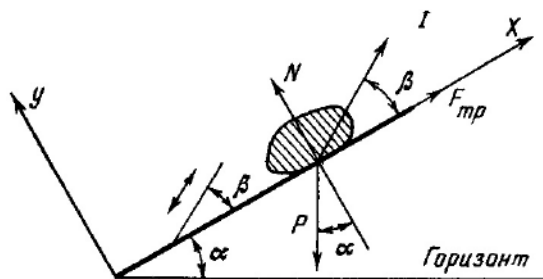


Рис. 4.3.23. Схема действия сил на частицу при вибрации

Для дисперсных материалов, подвергаемых только вибрационному воздействию, переход слоя из состояния виброожижения к виброкипению зависит не от массы частиц, а от ускорения вибрации ($A\omega^2$) поверхности, на которой находится материал.

Если масса вибрирующей площадки соизмерима с массой частиц вибрирующего материала, то по изменению скорости движения системы, контролируемой осциллографом, возможно фиксировать момент начала падения частиц на поверхность вибрирующей площадки, а следовательно, и факт их отрыва. При определенном ускорении движения вибрирующей площадки на осциллограмме (рис. 4.3.24) появляется всплеск, вызванный падением на нее частиц.

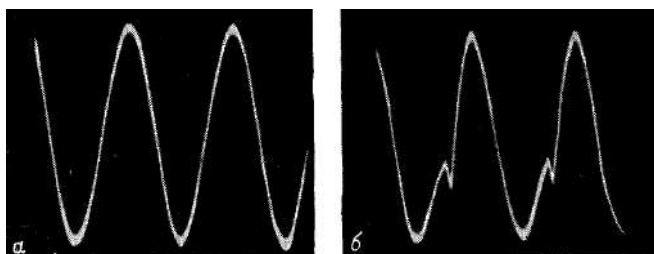


Рис. 4.3.24. Осциллограммы скорости движения вибрирующей площадки и находящегося на ней материала (песка): *а* – до отрыва частиц песка от площадки; *б* — при отрыве и падении частиц на площадку.

Вычисленный по формуле (4.3.10) график и экспериментальные значения параметров вибрации, при которых частицы отрываються от вертикально вибрирующей горизонтальной площадки для слоя высотой 20 мм кварцевого песка разного зернового состава и стальных шариков, показаны на рис. 4.3.25. Эта кривая разделяет область вибрационного воздействия на две зоны, характеризующие два состояния слоя дисперсного материала.

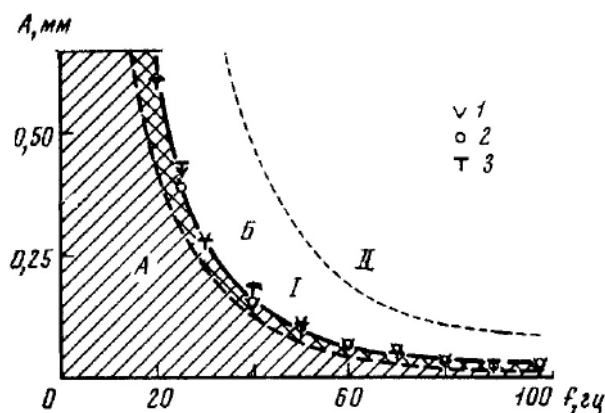


Рис. 4.3.25. Два состояния слоя дисперсного материала, подвергаемого вибрации: *A* — виброожиженный слой; *B* — виброкипящий слой; *I* — область сепарации частиц; *II* — область интенсивного перемешивания частиц, *I* — кварцевого песка с размером частиц $0,165 + 0,355$ мм; *2* — то же, $0,355—0,6$; *3* — стальных шариков диаметром $0,65+7$ мм.

При изменении частот и амплитуд в пределах зоны *A* слой остается в состоянии виброожижения. При переходе в зону *B* он становится виброкипящим. Малый по высоте слой грубодисперсного материала, свободно лежащий на горизонтальной поверхности, совершающей вертикальные колебательные движения при ускорении вибрации, равном ускорению свободного падения, переходит из состояния виброожижения к виброкипению.

Состояние виброожижения слоя характеризуется уменьшением трения между частицами и их проскальзыванием относительно друг друга, что способствует более плотной их укладке. Переходная область между зонами *A* и *B* является областью наиболее плотной укладки материала. На рис. 4.3.25 она выделена в зоне *A* пунктирной линией и обозначена двойной штриховкой.

В состоянии виброкипания частицы периодически отрываются друг от друга и от вибрирующей поверхности. В результате увеличивается объем слоя, значительно снижается внутреннее трение в системе и начинается перемешивание материала.

В виброкипящем слое есть две области. В первой области, лежащей по параметрам вибрации выше указанной границы перехода из состояния *A* в *B*, слой разрыхляется, но в то же время наблюдается сепарация частиц разного размера и удельного веса (рис. 4.3.25, зона *I*). Дальнейшее увеличение параметров вибрации способствует переходу слоя во вторую область, где сепарация прекращается и наступает интенсивное перемешивание частиц (рис. 4.3.25, зона *II*). Для слоя зерна переход в зону бурного перемешивания происходит в диапазоне частот от 12 до 50 гц при ускорении вибрации, приблизительно равном $2g$.

В случае направленного перемещения дисперсного материала по наклонному лотку виброкипящий слой, согласно выражению (4.3.9), создается при следующем условии:

$$\frac{A\omega^2 \sin \beta}{g \cos \alpha} = K \geq 1.$$

Безразмерный коэффициент K не только характеризует переход в область виброкипящего слоя, но и определяет интенсивность виброкипения. Обычно значения K лежат в диапазоне $1,2 < K < 5$. Работа с большими значениями K неблагоприятно отражается на прочности и долговечности привода и самой установки.

Требуемый режим работы K может быть достигнут увеличением как частоты, так и амплитуды колебаний. Увеличение частоты выше 50 гц вызывает повышение шума, снижает надежность работы узлов установки. Создание больших амплитуд колебаний требует громоздких вибраторов, усложняет пуск и остановку машины, связанные с проходом через резонанс, а также увеличивает пусковые моменты электродвигателей. Поэтому в мировой практике нижний предел частоты вибрации аппаратов с виброкипящим слоем равен 5 гц.

Рассмотренные уравнения описывают движение отдельных частиц и не учитывают влияния среды, а также специфику воздействия вибрации на слой дисперсного материала. На нижние слои, помимо учтенных для отдельной частицы сил, действует вес вышележащего материала, а на весь слой – давление среды, возникающее в результате насосного действия виброкипящего слоя. Эти силы прижимают нижний слой к вибрирующей поверхности, препятствуя его отрыву и расширению. Сообщаемое первому от вибрирующей поверхности ряду частиц ускорение не остается постоянным по высоте слоя. Как показывают исследования, относительное ускорение вибрации по высоте виброкипящего слоя убывает по экспоненциальному закону.

В некоторых случаях отрыву материала от вибрирующей поверхности и разрыву связей между отдельными частицами при указанных критических ускорениях препятствуют высокие адгезионные силы и силы Ван-дер-Ваальса. Эти силы особенно существенно влияют при работе с частицами размером менее 10–20 мкм, большой высоте слоя и низкой его газопроницаемости. В некоторых промышленных установках, когда приходится иметь дело с небольшими по высоте слоями ($h \leq 50$ мм) грубодисперсных материалов ($d \geq 1$ мм), влиянием этих факторов можно пренебречь. В других случаях их необходимо учитывать введением поправочных коэффициентов.

Образование виброкипящего слоя в движущемся потоке газа. Структура виброкипящего слоя может быть существенно улучшена путем дополнительной фильтрации через него снизу газа. Степень влияния каждого из факторов псевдооживления на интенсивность перемешивания слоя зависит от многих свойств материала. Для дисперсных материалов, не склонных к агрегированию и имеющих малое трение между частицами, как вибрационное воздействие, так и продувка могут создать хорошую структуру слоя (кварцевый песок, сульфит магния, корунд и др.).

Создать однородный кипящий слой некоторых тонкодисперсных порошков только путем продувки газа трудно. Трудно создать и чисто виброкипящий слой. В этом случае только сочетание вибрации и продувки газа через слой

обеспечивает равномерное ожижение слоя. Вибрационное воздействие снижает вязкость системы, способствует разрушению образующихся агрегатов частиц и тем самым создает условия более равномерного распределения газового потока в объеме слоя материала.

Например, слой угольного порошка со средним размером частиц 4,3 мкм при совместном действии вибрации и скоростях продувки порядка 0,003 м/с становится очень текучим. Для обеспечения той же текучести без вибрации потребовалась бы такая скорость воздуха, при которой невозможно существование кипящего слоя данного материала.

Слой полиэтилена, полистирола, полиформальдегида и других порошкообразных полимеров, которые легко электризуются и насыщаются влагой, являются полидисперсными и имеют развитую поверхность частиц, с большим трудом переводится в состояние кипящего слоя. Псевдоожижение газом отличается большой нестабильностью. В слое образуются сквозные воздушные каналы и застойные зоны. При дополнительном вибрационном воздействии слой этих материалов переходит в состояние равномерного псевдоожижения.

Большую группу порошков полимеров (например, полиэтилен, полипропилен, полиформальдегид, полистирол, фторопласты) не удастся перевести в состояние псевдоожижения только потоком газа. Это объясняется склонностью их к слеживанию и образованию комков до полной потери сыпучести. В виброкипящем слое с дополнительной продувкой слоя снизу порошки хорошо перемешиваются, создается равномерное кипение дисперсного материала.

Вибрация наклонных решеток позволяет снизить скорость продувки до значения ниже скорости начала псевдоожижения. Аналитически условие отрыва частиц от горизонтальной вибрирующей поверхности с учетом движения газа через слой снизу вверх было выражено в виде

$$A\omega^2 \sin \beta \geq g - \frac{F_v}{m} \sin \varphi.$$

Критическое ускорение вибрации, при котором начнется образование виброкипящего слоя, исходя из последней формулы:

$$(A\omega^2)_{кр} = \left(g - \frac{F_v}{m} \sin \varphi \right) \frac{1}{\sin \beta},$$

а коэффициент режима работы установки выражается формулой

$$K = \frac{A\omega^2 \sin \beta}{g - \frac{F_v}{m} \sin \varphi}.$$

Результирующая сила F_v , действующая на частицу, представляется как сумма гидродинамической силы проходящего через слой потока газа F_n и возникающего при перемещении частицы сопротивления среды F_c :

$$F_v = \sqrt{F_n^2 + F_c^2 + 2F_n F_c \cos(\gamma - \beta)}.$$

В общем случае гидродинамическая сила потока, действующая на одиночную шарообразную частицу, определяется известной формулой (см. раздел 4.1):

$$F_n = \zeta(\text{Re}) \pi d^2 / 4 \rho v^2 / 2.$$

Для комплекса частиц отношение гидродинамической силы потока к весу слоя может быть выражено как

$$F_n / F = F_n / S \cdot S / F = \Delta P / P,$$

где S – площадь перфорированной поверхности, на которой находится слой материала; ΔP – перепад давления на слое фильтруемой через него среды; P – давление слоя на перфорированную поверхность.

Поток газа создается не только специальным компрессором, но и насосным действием виброкипящего слоя.

Сложнее определить силу F_c , возникающую в результате перемещения частицы. Движение частиц при отрыве их от перфорированной поверхности становится неупорядоченным, и сила F_c не остается постоянной.

Для случая безотрывного движения частицы направление действия этой силы совпадает с направлением вибрации. С допущениями можно полагать, что частица находится в неподвижной среде и испытывает гидродинамическое сопротивление, которое она испытывала бы при движении с постоянной скоростью $w_c = A\omega$.

Для частиц в слое материала сила F_c находится в более сложной зависимости от амплитуды и частоты вибрации, ее формы и размера, высоты и пористости слоя, его газопроницаемости. В практических случаях приходится проводить расчет, принимая $F_v \cong F_n$ и уточнять результаты по экспериментальным данным.

Скорость газа, продуваемого через виброкипящий слой, может быть значительно снижена по сравнению со скоростью газа, необходимой для создания кипящего слоя. Хорошее перемешивание слоя картофеля, нарезанного кубиками $9 \times 9 \times 9$ мм, получено при вибрации газораспределительной решетки с частотой 12,5 гц и амплитудой 3 мм при скорости продуваемого газа 1,26 м/с. При выключении вибрации кубики картофеля ложатся на решетку плотным слоем. Для создания кипящего слоя требуется увеличить скорость продуваемого газа в 2 раза, однако получить прежнюю структуру слоя не удастся.

Рассмотрим условия существования режима с непрерывным подбрасыванием частицы на вибрирующей перфорированной поверхности при наличии восходящего потока воздуха. Приходим к следующему выражению для коэффициента режима работы установки:

$$K = \left(1 - \frac{w_n^2}{w_0^2} \frac{1}{\cos \alpha} \right) \sqrt{\pi^2 k^2 + 1},$$

где w_0 – скорость витания частицы; $k=l, 2$. При комплексном воздействии вибрации и потока газа они исключают влияние на слой. Особенно это сказывается когда скорость продуваемого через слой газа выше критической.

При скорости воздуха выше 0,3 м/с слой кварцевого песка высотой 15 мм переходил в состояние витания, отрывался от газораспределительной решетки. Ее воздействие на слой песка почти исключалось.

Рассмотрим движение частицы относительно вибрирующей по гармоническому закону перфорированной поверхности. Учтем фильтрацию через слои га-

за и архимедову силу F_a в системе координат, связанной с этой поверхностью. Получим следующую систему уравнений (рис. 4.3.26):

$$\ddot{x} = A\omega^2 \cos\beta \sin\omega\tau - mg \sin\alpha + F_a \sin\alpha + F_{mp} + F_v \cos\varphi;$$

$$\ddot{y} = A\omega^2 \sin\beta \sin\omega\tau - mg \cos\alpha + F_a \cos\alpha + N + F_v \sin\varphi.$$

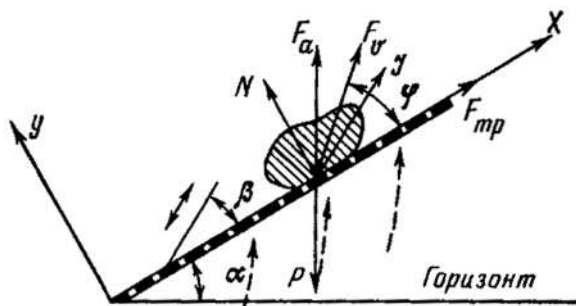


Рис. 4.3.26. Схема действия сил на частицу при вибрации

Если частица находится на вибрирующей поверхности и не отрывается от нее, то ее ускорение относительно этой поверхности равно $\ddot{y} = 0$. Тогда из последнего уравнения получим $N = -A\omega^2 \sin\beta \sin\omega\tau + mg \cos\alpha - F_a \cos\alpha - F_v \sin\varphi$.

Отрыв частицы от поверхности произойдет, когда $N = 0$. Тогда согласно последнему уравнению минимальное критическое относительное ускорение вибрации будет при $\sin\omega\tau = \pm 1$ и может быть выражено формулой

$$\frac{(A\omega^2)_{кр}}{g} \frac{\sin\beta}{\cos\alpha} = 1 - \frac{F_a}{mg} + \frac{F_v \sin\varphi}{mg \cos\alpha}. \quad (4.3.11)$$

Для частицы, лежащей на вертикально вибрирующей горизонтальной перфорированной поверхности, поток газа к которой направлен по нормали, последнее выражение примет вид

$$\frac{(A\omega^2)_{кр}}{g} = 1 - \frac{F_a}{mg} + \frac{F_v}{mg}.$$

Как видно из двух последних выражений, при принудительной фильтрации газа через слой критическое ускорение вибрации, при котором слой переходит из состояния виброоживления к виброкипению, не равно ускорению свободного падения. Если поток фильтруемой через материал среды направлен сверху вниз слоя, критическое ускорение вибрации будет выше, а если снизу вверх – ниже ускорения свободного падения. Когда гидродинамическая сила потока становится равной весу слоя, отношение $F_v \sin\varphi / mg \cos\alpha = 1$.

Материал при этом отрывается от перфорированной поверхности и переходит в состояние кипящего слоя. Согласно двум последним уравнениям, ускорение вибрации перфорированной поверхности в этом случае может быть равно нулю. Это справедливо только для слоя с идеальной структурой, когда не возникают каналы, не создаются застойные зоны, газ равномерно распределяется по площади аппарата и не происходит агломерации частиц. Если же указанные

явления имеют место, вибрация при оптимальных параметрах способствует их устранению или значительному снижению. Согласно формуле (4.3.11), грубый дисперсный материал, лежащий на вибрирующей перфорированной поверхности, посредством которой через него фильтруется газ, будет находиться в состоянии виброкипящего слоя при

$$\frac{A\omega^2}{g} \frac{\sin\beta}{\cos\alpha} + \frac{F_a}{mg} + \frac{F_v}{mg} \frac{\sin\varphi}{\cos\alpha} = K_v \geq 1,$$

где K_v – безразмерный коэффициент, характеризующий режим работы виброкипящего слоя с учетом фильтруемой через него среды.

Для частицы, лежащей на вертикально вибрирующей горизонтальной поверхности, поток газа к которой направлен по нормали, получим

$$\frac{A\omega^2}{g} + \frac{F_a}{mg} + \frac{F_v}{mg} = K_v \geq 1. \quad (4.3.12)$$

В формулах принято $F_v = S\Delta P$; $F_a = V\rho$ (V – объем частиц слоя, ρ – плотность среды). Произведение mg условно можно принять за вес слоя F , хотя в действительности m является только присоединенной массой.

Влияние скорости потока газа на вибрационные параметры образования виброкипящего слоя хорошо иллюстрируют данные, приведенные в табл. 4.3.1. При дополнительной фильтрации воздуха снизу ускорение вибрации, при котором создается хорошо перемешиваемый виброкипящий слой порошков полимеров, может быть ниже ускорения свободного падения. В частности, для порошков полиформальдегида, фторопласта 3-П и поливинилбутирала нижнее его значение равно 0,6 g.

Таблица 4.3.1

Параметры условий перемешивания полимерных порошков в виброкипящем слое и коэффициенты, характеризующие увеличение его высоты

Наименование материала	Относительное ускорение вибрации	Скорость газового потока, см/мин	k	n
Поликапроамид	0,8—1,0	2,0—3,0	2,7	1,1
Полиамид П-68	0,8—1,2	1,8—2,2	2,6	0,8
Полиамид АК-7	0,8—1,0	1,5—2,0	2,7	0,7
Капролон В	0,8—1,0	3,5—4,0	2,7	2,0
Капролон С	0,6—0,8	1,0—2,0	2,1	1,0
Полиэтилен низ. давл.	0,8—1,2*	3,5—4,5	2,8	2,5
Полипропилен	0,8—1,2*	2,5—3,5	2,0	3,0
Полиформальдегид	0,6—0,8	1,2—2,2	2,3	1,0
Полистирол	1,0—1,2*	3,0—4,0	2,2	0,4
Фторопласт 3-П	0,6—0,8	0,6—1,0	2,3	0,7
Фторопласт 32 Л	0,8—1,0*	2,5—3,5	2,0	2,8
Фторопласт 42 Л	1,2—1,5*	6,0—7,5	1,5	1,2
Поливинилбутираль	0,6—0,8	1,5—2,0	1,3	2,5

* Материал без вибрации не псевдооживается.

На рис. 4.3.27 показана зависимость сопротивления в слое зерна пшеницы влажностью 13,5% от частоты вибрации и разных скоростей потока воздуха, продуваемого через слой снизу вверх. Заштрихованная часть графика отмечает область, в которой вибрационные воздействия и поток воздуха создают хорошее перемешивание и равномерное разрыхление слоя. Для получения хорошей структуры слоя при уменьшении скорости потока воздуха и постоянной амплитуде колебаний требуется большая частота вибрации, и наоборот. Оптимальные условия равномерного разрыхления слоя и максимальной скорости перемешивания лежат в диапазоне ускорений вибрации $35\text{--}50\text{ м/с}^2$ и скоростей воздуха $0,6\text{--}0,7\text{ м/с}$. С увеличением ускорения вибрации и скорости воздуха выше оптимальных возникает неравномерность кипения слоя с образованием «фонтанов».

С увеличением скорости газа выше оптимальной происходит некоторое взвешивание слоя над вибрирующей поверхностью, и влияние вибрации на материал снижается. Создать хорошую структуру слоя и равномерное «кипение» дисперсного материала при заданных скоростях газа можно только при соответствующих этим скоростям газа параметрах вибрации, и, наоборот, при заданных параметрах вибрации – при соответствующих скоростях воздуха.

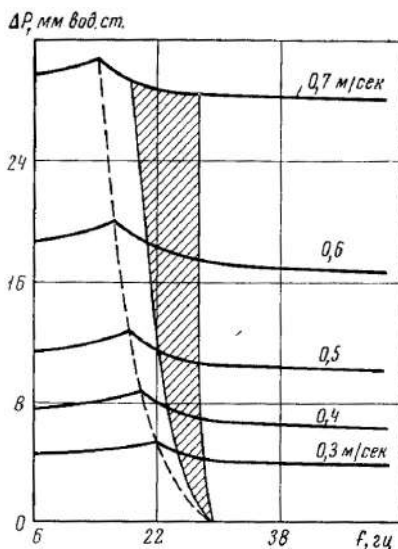


Рис. 4.3.27. Потери напора на слое пшеницы высотой 100 мм в зависимости от частоты вибрации при амплитуде 1,5 мм

Образование виброкипящего слоя горизонтально направленной вибрацией. Исследования виброкипящего слоя в аппаратах с горизонтально направленной вибрацией показали, что под влиянием сил инерции в слое мелкодисперсного материала происходит интенсивное перемешивание частиц и его поступательное перемещение вдоль аппарата. Уравнение движения частиц массой m в начальный период относительно наклонного лотка в системе координат x и y , связанной с лотком (рис. 4.3.28), имеет вид $m\ddot{y} = -mA\omega^2 \sin \alpha \cos \varphi - mg \cos \alpha + N$.

На первом этапе движения частица находится на плоскости лотка, т. е. $\ddot{y} = 0$, тогда последнее уравнение запишется $N = mA\omega^2 \sin \alpha \cos \varphi + mg \cos \alpha$.

Отрыв частицы от поверхности лотка произойдет, когда $N = 0$, т. е.

$$mA\omega^2 \sin \alpha \cos \varphi + mg \cos \alpha = 0.$$

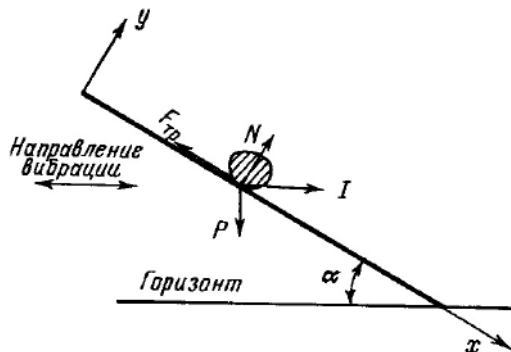


Рис. 4.3.28. Схема действия сил на частицу при вибрации

Критическое ускорение вибрации, при котором слой переходит в состояние виброкипящего, т. е. произойдет отрыв частиц от лотка, будет при $\cos \varphi = \pm 1$ и равно

$$(A\omega^2)_{кр} = \pm g \frac{\cos \alpha}{\sin \alpha} = \pm g \operatorname{ctg} \alpha.$$

При $\alpha = 90^\circ$ частицы отрываются без вибраций ($\operatorname{ctg} 90^\circ = 0$); при $\alpha = 0^\circ$ отрыв частиц от лотка вообще не произойдет ($\operatorname{ctg} 0^\circ = \infty$). При промежуточных значениях α переход частиц материала в состояние виброкипящего слоя происходит при определенных ускорениях вибрации. Основными факторами, влияющими на образование виброкипящего слоя, являются ускорение вибрации и угол наклона лотка к горизонту.

Закономерности перемещения и перемешивания слоя частиц на наклонных лотках горизонтальной вибрацией еще недостаточно изучены, однако уже накоплен некоторый опыт, позволяющий создавать промышленные агрегаты.

Образование виброкипящего слоя при круговой траектории колебаний рабочей камеры аппарата. При круговой траектории колебаний аппарата, как и в описанных случаях, при небольших ускорениях вибрации слой материала не отрывается от поверхности рабочей камеры в течение всего периода ее движения. При превышении критического ускорения материал начинает отрываться от вибрирующей поверхности и слой переходит в состояние виброкипания. В этом состоянии частицы подсакивают, сталкиваются друг с другом и совершают отражательные броски, вращаются и соударяются со стенкой камеры. Слой материала совершает циркуляционное перемещение внутри камеры.

Наиболее распространенной формой рабочей камеры аппарата с круговой вибрацией является горизонтальный цилиндр. Траектория любой точки рабочей

камеры такого аппарата, совершающего круговые колебания, лежит в плоскости, перпендикулярной оси цилиндра и оси дебалансного вибратора.

Рассматривая образование виброкипящего слоя в таком аппарате (рис. 4.3.29), условие отрыва слоя от поверхности рабочей камеры без учета свойств материала можно записать в виде $m_1 g < m_2 A \omega^2 \sin \psi$, где m_1 – масса материала; m_2 – масса аппарата и дебалансов вибратора; ψ – угол «выбрасывания» массы материала.

Отрыв слоя в каждой из точек поверхности рабочей камеры аппарата происходит в разное время периода его колебаний, а угол «выбрасывания» ψ зависит от ускорения вибрации $\psi = \psi_0 + k_1 \exp(-k_2 A \omega^2)$, где опытные коэффициенты $\psi_0 = 7^\circ$, $k_1 = 83^\circ$ и $k_2 = 0,057$.

В результате совместного движения слоя и рабочей камеры аппарата между ними образуется перемещающаяся серповидная «прозрачная» зона.

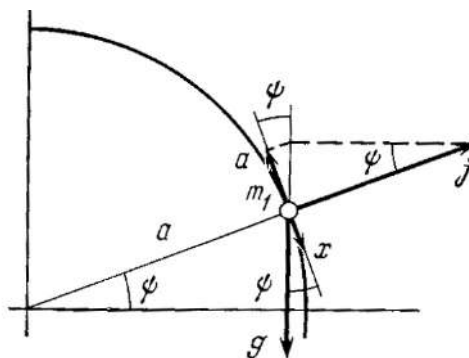


Рис. 4.3.29. Расчетная схема условий отрыва слоя от вибрирующей цилиндрической камеры

Свойства виброкипящего слоя. Пористость. Оказывая существенное влияние на свойства слоя дисперсного материала, вибрация может вызывать повышение или снижение его пористости.

При воздействии на сыпучий материал вибрации с ускорением ниже ускорения свободного падения происходит уплотнение слоя (снижение ϵ) (рис. 4.3.30). Уплотнение слоя объясняется снижением внутреннего трения в системе, что при наличии дополнительных к силе тяжести инерционных сил способствует оптимальной самостоятельной укладке частиц с минимальными зазорами между ними.

Для некоторых дисперсных материалов абсолютное значение достигнутой плотности слоя близко к максимальной теоретической величине. Так, для порошкообразных пластмасс такой метод уплотнения позволяет иметь вполне определенную и удобную для оценки состояний слоя плотность упаковки.

В большинстве случаев увеличение ускорения вибрации до величины ускорения свободного падения не позволяет осуществить плотную упаковку дисперсного материала. Превышение ускорения выше критического вызывает от-

рыв частиц друг от друга и увеличение пористости слоя. Слой переходит в состояние виброкипения и разрыхляется. Величина пористости виброкипящего слоя зависит как от частоты, так и от амплитуды колебания (рис. 4.3.30).

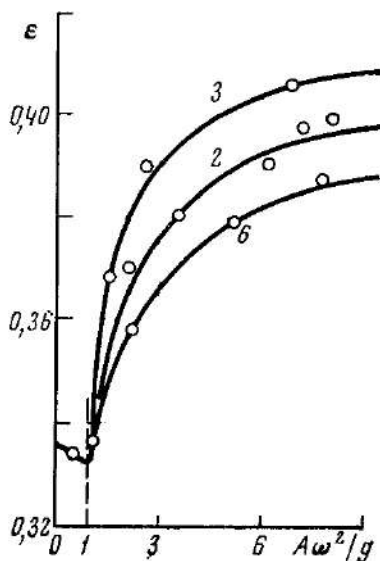


Рис. 4.3.30. Зависимость изменения пористости виброкипящего слоя кварцевого песка от ускорения вибрации площадки при различных частотах

Чем ниже частота вибрации площадки, тем большая пористость слоя может быть создана при сравнительно одинаковых ускорениях вибрационного воздействия. В интервале от 1g до 4g объем слоя увеличивается более интенсивно, чем при дальнейшем повышении ускорения вибрации. Это в первую очередь объясняется действием аэродинамической силы, которая возникает в результате образования под виброкипящим слоем разрежения. Сила атмосферного давления, действующая на сыпучий материал, прижимает его ко дну формы и препятствует увеличению пористости слоя. Величина этой силы может во много раз превышать вес самого слоя материала. Например, на виброкипящий слой стеклянных шариков размером 0,13 мм при частоте 50 гц и амплитуде 1,42 мм максимальные значения аэродинамического давления в девять раз превышают силу тяжести.

В вакууме, где давление среды на слой снижается, пористость виброкипящего слоя увеличивается. Следовательно, разрыхление слоя дисперсного материала начинается с увеличением ускорения вибрации выше 1g. Интенсивность разрыхления слоя существенно зависит от физических свойств дисперсных материалов. Так, пористость слоя некоторых тонкодисперсных порошков полимеров заметно увеличивается при ускорениях колебаний выше 5g.

Увеличение высоты слоя в состоянии виброкипения пропорционально величине относительного ускорения вибрации. Исследования с песком сахара показали, что в диапазоне частот колебаний 30–70 гц и амплитуд 0,5–2,5 мм высота виброкипящего слоя в основном зависит от амплитуды вибрации. Влажность

песка сахара 0,3%, высота неподвижного слоя 30 мм. Зависимость между величиной приращения высоты слоя и амплитудой колебаний имела линейный характер $\Delta h = 5,48A$, где Δh – приращение высоты слоя. Относительное увеличение высоты виброкипящего слоя описывается уравнением $\Delta h / \Delta h_{\text{нел}} = 0,11A$, где $\Delta h_{\text{нел}}$ – начальная высота свободно засыпанного неподвижного слоя. В общем случае приращение высоты слоя Δh с увеличением амплитуды колебаний описывалось формулой $\Delta h \approx k_1 A^{k_2}$, где k_1 и k_2 – постоянные коэффициенты.

Зависимость пористости виброкипящего слоя от основных определяющих ее факторов представлена в виде уравнения

$$\varepsilon = K \text{Re}_v^{k_1} (A/d)^{k_2} (A\omega^2/g)^{k_3} (M/(D^3\rho_d))^{k_4},$$

где $\text{Re}_v = \rho_c d \omega^2 / \mu_c$ – вибрационное число Рейнольдса; $q = M/(D^3\rho_d)$ – удельная загрузка аппарата; m – масса дисперсного материала; D – диаметр аппарата. На основании опытов со слоем полидисперсного порошка карбида кремния ($\rho_d = 3300 \text{ кг/м}^3$; $d = 0,08 - 0,16 \text{ мм}$; $f = 30 - 50 \text{ гц}$; $A = 0,1 - 1,3 \text{ мм}$; $q = 0,24 - 1$) получены следующие значения коэффициента и показателей степени уравнения: $K = 0,395$; $k_1 = -0,073$; $k_2 = 0,006$; $k_3 = 0,094$; $k_4 = 0,138$.

Рассмотренным закономерностям не подчиняется слой тонкодисперсных порошков, частицы которых обладают высокими силами сцепления. Вибрационное воздействие, способствуя тесному сближению таких частиц, уплотняет слой, а не разрушает образующиеся агрегаты. В некоторых случаях расширения слоя тонкодисперсных материалов удастся добиться при совместном действии вибрации и продуваемого через слой газа.

Одновременное воздействие вибрации и газа, продуваемого через виброкипящий слой снизу вверх, позволяет получить равномерное распределение газа в объеме аппарата при значительном увеличении пористости слоя. Например, объем слоя угля с частицами размером 4,3 мкм и плотностью 1 кг/м³ при одновременном действии вибрации и воздуха, продуваемого через слой, увеличивается не менее чем на 30%, что почти в 1,3 раза больше увеличения объема кипящего слоя. Слой более тяжелых частиц меньше увеличивается в объеме. Например, объем слоя никелевого порошка с размером частиц 63 мкм и плотностью 8,9 кг/м³ в состоянии виброкипания увеличивается всего в 1,1 раза по сравнению с объемом слоя без вибрационного воздействия и той же скорости продуваемого воздуха.

Некоторые порошки полимерных материалов, пористость засыпки которых не повышается при малых параметрах вибрации, при воздействии вибрации с продувкой газа на 60–70% увеличивают объем слоя. Коэффициенты увеличения объема виброкипящего слоя в случае продувки газом выше, чем кипящего. По абсолютным значениям эти коэффициенты значительно выравниваются для материалов, сложно поддающихся переводу в кипящий слой.

Псевдоожижение многих порошков в кипящем слое нестабильно и зависит от степени предварительного уплотнения материала. Влияние степени предварительного уплотнения при псевдоожижении можно проследить на примере поликапроамида (рис. 4.3.31). Для свободно насыпанного слоя этого полимера

скорость начала псевдооживления равна 0,003 м/с, а скорость, при которой достигается максимальное увеличение высоты засыпки, превышает 0,05 м/с. Высота слоя при малых скоростях газа увеличивается неравномерно, образуются застойные зоны вблизи стенок аппарата; возникают газовые каналы. Кипение слоя выравнивается только при больших скоростях газа. Скорость начала псевдооживления станет равной 0,006 м/с, если под слой максимальной высоты прекратить, а затем начать подачу газа. При скорости потока 0,003 м/с слой достигнет максимальной высоты. Образуется меньшее число каналов, высота слоя увеличивается более равномерно, но получить максимальную его пористость удастся только в режиме бурного кипения.

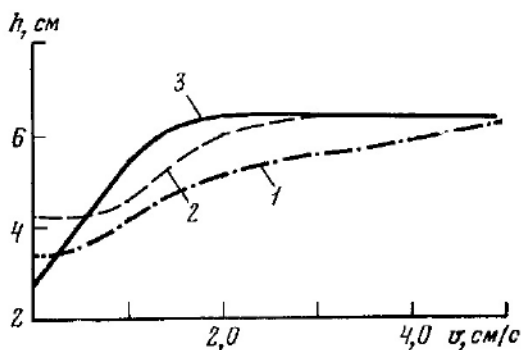


Рис. 4.3.31. Изменение высоты слоя поликапроамида от скорости газового потока: 1 – кипящего слоя с уровня свободно засыпанного материала; 2 – то же, предварительно расширенного слоя; 3 – виброкипящего слоя.

Виброкипящий слой с увеличением скорости продуваемого снизу газа расширяется более равномерно. Зависимость изменения высоты слоя от скорости продуваемого газа легко воспроизводима и не зависит от степени начальной упаковки материала.

Рассмотрим увеличение высоты виброкипящего слоя порошков полимеров при продувке его потоком воздуха. Для создания оптимальной структуры такого слоя достаточно иметь ускорение вибрации порядка (0,6–1,5)g. Под действием такой вибрации без дополнительной продувки воздуха слой материала уплотняется. Уплотнение слоя прекратится, когда будет достигнута плотная упаковка частиц. С началом подачи газа под вибрирующую пористую перегородку слой начинает расширяться. Кривая увеличения высоты слоя с повышением скорости газового потока имеет два явно выраженных участка (рис. 4.3.32). На первом участке высота слоя возрастает пропорционально увеличению скорости потока. На втором участке высота не увеличивается, так как достигла максимального для данных параметров вибрации и скорости газа значения.

Повышение скорости газового потока на втором участке приводит к бурному кипению с образованием газовых пузырей, фонтанов, верхняя граница слоя становится расплывчатой. Переход от одного участка к другому происходит плавно. В зависимости от гранулометрического состава материала интервал скоростей потока, ограничивающий переходную зону, меняется. Большой интервал имеют полидисперсные порошки, меньший интервал – монодисперсные.

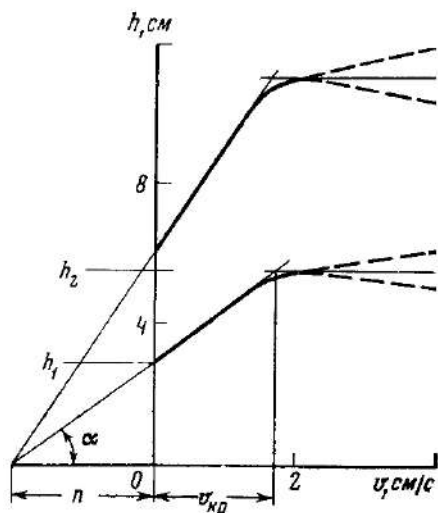


Рис. 4.3.32. Зависимость изменения высоты виброкипящего слоя порошков полимеров от скорости газового потока

Обозначим высоту, достигнутую при вибрации предельно плотного слоя h_1 , а максимально расширенного – h_2 . Тогда коэффициент расширения слоя запишется как $k = h_2 / h_1$. Продолжив линию увеличения высоты виброкипящего слоя до пересечения с осью абсцисс, получим некоторый отрезок n , которому при выполнении графика в масштабе может быть дана размерность скорости газового потока. Угол наклона полученной линии к оси абсцисс определяется из отношения $\operatorname{tg} \alpha = h_1 / n$. Отсюда легко определить скорость газового потока v_2 , при которой достигается максимальное увеличение высоты слоя $\operatorname{tg} \alpha = h_1 / n = (h_2 - h_1) / v_2$, отсюда $v_2 = n(h_2 - h_1) / h_1 = n(k - 1)$.

Аналогичное построение графика для слоя того же материала, но другой начальной высоты дает тот же результат. Коэффициенты k и n , являясь экспериментальными только для слоя одной высоты, позволяют легко построить линию расширения слоя любой другой высоты. По последней формуле можно рассчитать скорость газового потока, при которой достигается максимальная высота слоя. В табл. 4.3.1 для порошков полимеров показаны экспериментально полученные ускорения вибрации и скорости газового потока, создающие оптимальную для нанесения покрытий структуру слоя и коэффициенты k и n .

Вязкость. Было выдвинуто предположение, что под действием вибрации прилегающий к свае слой грунта становится подобным вязкой жидкости, а коэффициент эффективной вязкости этого слоя существенно зависит от ускорения его вибрации. Понятие вязкости в применении к сыпучим материалам является весьма условным. При вибрационном воздействии эти системы приобретают текучесть, свойственную истинно вязким жидкостям, и могут быть охарактеризованы обычными реологическими константами. Реологические характеристики позволяют полнее количественно выразить состояние слоя дисперсного материала, подвергаемого вибрационному воздействию. Установить оптимальные условия перемешивания и перемещения материала под действием

вибрации, а также выяснить влияние различных факторов на структуру виброожигенного и виброкипящего слоев.

Вибрационное воздействие на дисперсные материалы снижает силы взаимодействия между частицами. При повышении энергии вибрации коэффициент внутреннего трения в песках снижается на 25–30%.

Параметры вибрации, влияющие на уменьшение эффективного коэффициента трения между частицами дисперсного материала, определяются: гранулометрическим составом материала, размером и формой частиц, коэффициентом трения между ними. Для многих тонкодисперсных порошков увеличение ускорения его вибрации до величины g не вызывает значительного уменьшения эффективного коэффициента трения.

Экспериментальные данные, полученные при вибрировании песка, показывают, что эффективные коэффициенты трения песка по стали в виброкипящем слое снижаются в 40 раз и более в сравнении с неподвижным материалом. Наибольшее снижение эффективного коэффициента трения происходит при переходе слоя из состояния виброожигения к виброкипящему слою, т. е. при ускорении вибрации, большем g . Экспериментальные исследования кембрийской глины с разной влажностью также показывают резкое снижение эффективного коэффициента трения при том же ускорении вибрации.

Экспериментально показано, что течение тонкодисперсных порошков при определенных режимах вибрационного воздействия подчиняется законам, характерным для ньютоновской жидкости.

Исследование течения тонкодисперсных порошков проводили на специальном капиллярном вискозиметре, устанавливаемом на многочастотном гидравлическом вибростенде. В качестве модельного порошка использовали химически осажденный CaCO_3 , с удельной поверхностью по 3000 $\text{м}^2/\text{кг}$. Порошок предварительно уплотняли в сосуде вискозиметра при частоте 50 гц и амплитуде 0,5 мм. Для уплотнения порошка с помощью груза давали дополнительное давление на слой. Истечение порошка проводили при вибрировании, удаляя диафрагму, отделяющую сосуд с материалом от капилляра. Вискозиметр совершал вертикальные гармонические колебания с частотами 50, 75 и 100 гц, амплитуда вибрации изменялась от 0,1 до 0,5 мм. Допуская, что $\Delta h \ll h$, напряжение сдвига P рассчитывали по формуле

$$P = \frac{(h\rho_d g + \Delta P_0)r}{2L}.$$

Примем, что распределение скоростей в сечении капилляра от центра, где скорость истечения порошка максимальна, к периферии, где скорость вблизи стенки равна нулю, изменяется по линейному закону. Усредненный градиент скорости можно определить по формуле $\dot{\epsilon} = d\epsilon/d\tau = 3Q/\pi r^3$, где h – высота слоя порошка в сосуде вискозиметра; ρ_d – плотность материала; ΔP_0 – избыточное давление; r – радиус капилляра; L – длина капилляра; Q – объемный расход порошка через капилляр.

Для тонкодисперсного порошка (рис. 4.3.33) при определенных режимах вибрации наблюдается линейная зависимость градиента скорости $\dot{\epsilon}$ от напря-

жения сдвига P . Характерно, что на каждую прямую линию ложатся экспериментальные точки, соответствующие определенному уровню вибрационного воздействия на слой материала. Продолжая линейные участки графиков (пунктирные линии), получим систему прямых, проходящих через начало координат. Вязкость такой системы в пределах линейной зависимости $\dot{\epsilon}$ от P можно определить по формуле $\mu = P/\dot{\epsilon}$. Вязкость дисперсного материала на этих участках не зависит от действующего на него напряжения сдвига и градиента скоростей деформации, т. е. по реологическим свойствам такая система подчиняется закону, характерному для ньютоновской жидкости. Каждому уровню вибрационного воздействия на материал соответствует свой уровень вибровязкости.

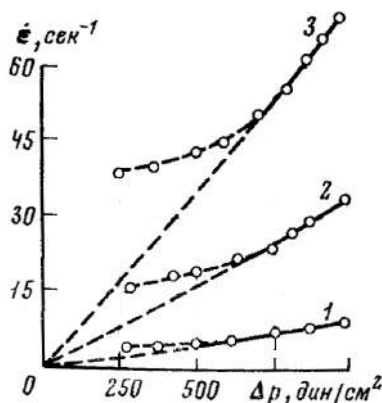


Рис. 4.3.33. Виброреограммы истечения тонкодисперсного порошка из капилляра вискозиметра при различных частотах и амплитудах вибрации:
1 — 50 гц и 0,1 мм; 2 — 75 и 0,25; 3 — 50 гц и 0,5 мм.

Как показали исследования, на капиллярном вискозиметре с увеличением интенсивности вибрации вязкость виброоживленного слоя снижается (рис. 4.3.34, кривая 1).

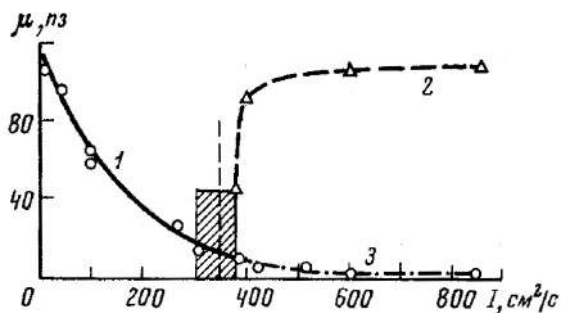


Рис. 4.3.34. Зависимость условной эффективной вязкости порошка от режимов вибрации: 1 — режим вибрации с интенсивностью ниже критической; 2 — то же, выше критической; 3 — то же, с давлением газа на слой.

При переходе дисперсного материала в состояние виброкипящего слоя наблюдали уменьшение объемного расхода порошка через капилляр, а отсюда —

увеличение эффективной вязкости материала (рис. 4.3.34, кривая 2). Это явление объясняется образованием в слое перепада давления газа, которое создает в сосуде потоки среды и материала, что препятствует направленному истечению порошка в капилляр. Режим виброожижения материала в этом случае создавали дополнительным давлением на слой. Давление осуществляли с помощью резиновой мембраны, над которой создавалось давление газа, или непосредственно давлением газа на слой. Эффективная вязкость слоя (рис. 4.3.34) при таком давлении газа на слой с увеличением интенсивности вибрации продолжала снижаться (кривая 3).

Капиллярный вискозиметр позволял измерять вязкость дисперсного материала только в состоянии виброожижения и в начальной стадии виброкипения слоя, когда отсутствует интенсивное перемешивание материала.

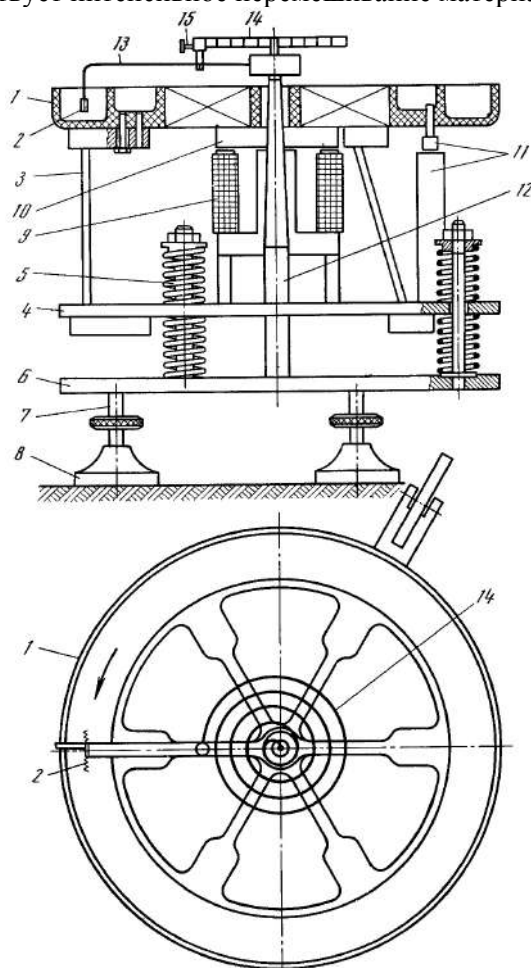


Рис. 4.3.35. Схема ротационного лоткового вибровискозиметра

В целях устранения указанного недостатка в лаборатории физико-химической механики ИФХ АН СССР разработан новый ротационный виско-

зиметр (рис. 4.3.35), позволяющий исследовать вязкость виброожиженного и виброкипящего слоев в процессе их перемещения по лотку.

Вискозиметр состоит из наружного цилиндра 1, выполненного в виде горизонтального кольцевого лоткового вибротранспортера, внутреннего цилиндра 2, выполненного в виде коаксиального цилиндрического сектора. Наружный цилиндр посредством трех наклонных упругих стержней 3, расположенных по окружности симметрично оси прибора, соединен с промежуточной плитой 4. Плита 4 через спиральные пружины 5 опирается на основание 6, которое на трех регулируемых опорах 7 с резиновыми амортизаторами 8 устанавливается на лабораторном столе. Цилиндр 1 подвергается вибрации с помощью электромагнитного вибратора, состоящего из электромагнита 9, закрепленного на плите 4, и якоря 10, связанного с цилиндром 1. Питание вибратора может осуществляться от лабораторного регулируемого автотрансформатора, генератора электрических колебаний мощностью от 500 Вт или специального инвертора. В последнем случае на вискозиметре устанавливают контактный прерыватель 11. В центре лотка-цилиндра 1 на неподвижном основании 6 установлена ось 12, на верхнем конце которой с помощью подшипников закреплен рычаг 13. На конце этого рычага закреплены сменные рифленные цилиндрические секторы 2, опущенные в слой испытуемого материала и выступающего в роли внутреннего цилиндра. Загружаемый в лоток-цилиндр 1 вискозиметра исследуемый сыпучий материал под действием направленных под углом 30° к горизонту вибрационных колебаний совершает круговое движение, увлекая за собой находящийся в слое цилиндрический сектор 2. Действующая при этом на сектор сила, направленная по касательной к траектории его движения, контролируется по углу закручивания динамометра 14, закрепленного на рычаге 13 и оси 12. Скорость перемещения виброкипящего слоя материала может в широких пределах регулироваться путем изменения параметров вибрации лотка и поддерживаться постоянной в процессе измерения. Скорость перемещения материала определяли по оборотам сектора 13, который для этого при помощи зажима 15 освобождали от пружины динамометра 14. В лоток-цилиндр может дополнительно устанавливаться газораспределительное устройство, что позволяет исследовать вязкость виброкипящего слоя, продуваемого снизу вверх газом.

Исследования на рассмотренном ротационном вискозиметре позволили изучить реологические свойства перемещающегося виброожиженного и виброкипящего слоев в практически полном диапазоне изменения величины их вязкости. Задавая напряжение сдвига и изменяя параметры вибрации, можно получить виброреограммы, описывающие поведение исследуемой системы при $P = \text{const}$. На рис. 4.3.36 показаны виброреограммы для слоя высотой 20 мм сухого кварцевого песка с зерновым составом 0,25–0,35 мм при разных режимах вибрации.

Зависимости изменения градиента скорости от напряжения сдвига для каждого из режимов вибрационного воздействия выражались прямыми линиями, проходящими через начало координат для слоев материалов, отличающихся друг от друга плотностью и размером частиц. Это стальные шарики размером

2,5 мм; поваренная соль со средним диаметром частиц 0,5 мм и кварцевый песок широкого зернового состава и рассеянный на узкие фракции.

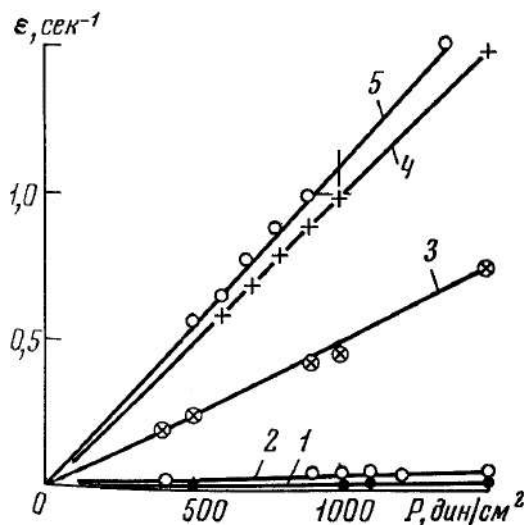


Рис. 4.3.36. Виброреограммы слоя сухого кварцевого песка

По спектру виброреограмм в области инвариантных значений вязкости, полученному в диапазоне вибрации $f = 25 - 50$ гц и $A = 0,2 - 2$ мм, построена виброреологическая кривая (рис. 4.3.37). Выражает зависимость изменения величины эффективной вязкости (т. е. истинного коэффициента внутреннего трения в слое дисперсного материала) от безразмерного ускорения вибрационного воздействия в исследованном диапазоне изменения этой системы.

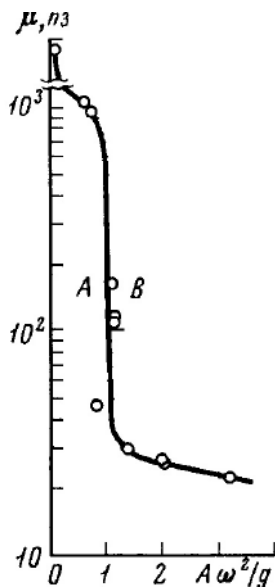


Рис. 4.3.37. Полная виброреологическая кривая слоя сухого кварцевого песка

Виброреологическая кривая имеет три явно выраженных участка (рис. 4.3.37). При увеличении относительного ускорения вибрации до g внутреннее трение в системе постепенно снижается. Переход из состояния виброожоженного слоя (зона A) к виброкипящему (зона B) характеризуется снижением вязкости системы при $1g$ на два порядка. В виброкипящем слое вязкость изменяется незначительно, приближаясь при ускорениях свыше $4g$ к наименьшей вязкости максимально разрыхленного слоя.

Распространение механических колебаний. В виброкипящем слое частицы находятся в постоянном движении, поддерживаемом непрерывным подводом энергии от вибрирующей поверхности или от вибрирующей поверхности и дополнительно подаваемого в слой сжижающего агента. Энергия от частиц, расположенных непосредственно у вибрирующей поверхности, передается в глубь слоя при соударении частиц, за счет неупругости частиц и проскальзывания их при ударах неизбежны потери энергии. От величины потерь существенно зависит возможность создания виброкипящих слоев большой высоты. В связи с этим вопросы распространения механических колебаний в виброкипящем слое имеют принципиальное значение в оценке перспективы применения этого способа в крупнотоннажных промышленных аппаратах.

Высота слоя, на которую проникают низкочастотные колебания, зависит от многих свойств материала и от того, действуют ли на него только вибрационным воздействием или вибрационным воздействием совместно с дополнительной подачей через слой сжижающего агента.

Если виброкипящий слой создается только вибрационным воздействием, то амплитуда и ускорение вибрации по высоте слоя убывают по экспоненциальному закону:

$$A_c = A \exp\{-k_1 H\}, \quad j_c = j \exp\{-k_2 H\},$$

где A и A_c , j и j_c – соответственно амплитуда и относительное ускорение вибрации дна аппарата и слоя; k_1 и k_2 – коэффициенты поглощения энергии слоем; H – высота от дна аппарата до места замера ускорения.

Эффективная вязкость виброкипящего слоя сыпучего материала может быть охарактеризована коэффициентом вибровязкости $\nu = K j_c^{-k}$.

Подставляя в данное уравнение величину относительного ускорения вибрации слоя из уравнения для j_c , получим $\nu_c = \exp(KAH)$.

Из уравнения видно, что с увеличением расстояния от дна аппарата коэффициент вибровязкости возрастает, а подвижность частиц падает.

Глубина проникновения колебаний в слой дисперсного материала может быть определена по эмпирической формуле $\delta = \sqrt{\nu/2\omega}$, где ν – эффективная кинематическая вязкость слоя материала; ω – угловая частота вибрации.

Величина эффективной кинематической вязкости слоя может быть вычислена по формуле для ν . Подставляя ν в формулу для δ , находим

$$\delta = \frac{2N}{SA^2\omega^3} \sqrt{1/\rho_d},$$

где N – мощность, передаваемая слою; S – площадь поверхности аппарата, со-общающей колебания слою.

Величина зоны проникновения вибрации в слой стальных шаров при круговой траектории колебаний аппарата составляет несколько сантиметров. Есть указания на то, что оптимальная высота виброкипящего слоя равна 10–20 диаметрам частиц. При большой его высоте вибрация быстро затухает. При снижении частоты колебаний величина зоны проникновения вибрации в слой материала увеличивается. Поэтому при создании аппаратов с виброкипящим слоем без дополнительной фильтрации сжижающего агента лучше работать с низкими частотами вибрации и с малыми по высоте слоями материала. Но не следует считать, что высота виброкипящего слоя должна ограничиваться только зоной проникновения в него колебаний. Интенсивное перемешивание частиц захватывает большую высоту слоя материала. Это позволяет создавать хорошую структуру виброкипящего слоя при высотах, вполне приемлемых для промышленных аппаратов. Без дополнительной фильтрации сжижающего агента она не превышает 300–500 мм.

Особым случаем являются аппараты с круговой траекторией колебательного движения и круглой горизонтальной рабочей камерой, в которых возможно создание интенсивно перемешиваемого слоя с еще большими высотами. Однако в установках такого типа, когда они заполняются шарами и используются как вибромельницы, расстояние между стенкой камеры и центрально установленным вибратором желательно иметь не выше 2δ .

Как показывают исследования, при дополнительной фильтрации ожижающего агента влияние вибрации на структуру слоя не ограничивается только зоной около решетки, а способствует ее улучшению по всей высоте слоя. Это объясняется тем, что вибрация газораспределительной решетки вызывает колебание не только частиц твердой фазы, но и создает пульсации скорости сжижающего агента, который распространяет эти колебания по высоте дисперсного материала.

Когда скорости сжижающего агента малы и расширение слоя незначительно, частицы соприкасаются между собой и передача вибрации происходит через их контакты. С повышением скорости сжижающего агента слой расширяется, расстояния между частицами увеличиваются; колебания по высоте такого слоя в основном передаются вследствие вибрации дисперсионной среды.

Гидродинамика виброкипящего слоя. Перемещение дисперсного материала в виброкипящем слое не подчиняется законам движения частиц в безвоздушном пространстве. Рассматривая виброкипящий слой в аппаратах с закрытым и открытым для доступа воздуха дном, можно, например, оценить влияние внешней среды на высоту отрыва дисперсного материала от вибрирующей поверхности. На рис. 4.3.38 показаны аппараты одинаковой формы и размера, установленные рядом на одной вертикально вибрирующей с частотой 40 гц и амплитудой 2,5 мм площадке. Высота свободно засыпанного слоя кварцевого песка 30 мм. При создании виброкипящего слоя в аппарате с закрытым для доступа воздуха дном (рис. 4.3.38,а) материал незначительно отделялся от вибрирующей поверхности. В аппарате с перфорированным дном (рис. 4.3.38,б) слой

высоко витал в воздухе, на поверхности его образовывались фонтаны дисперсного материала.

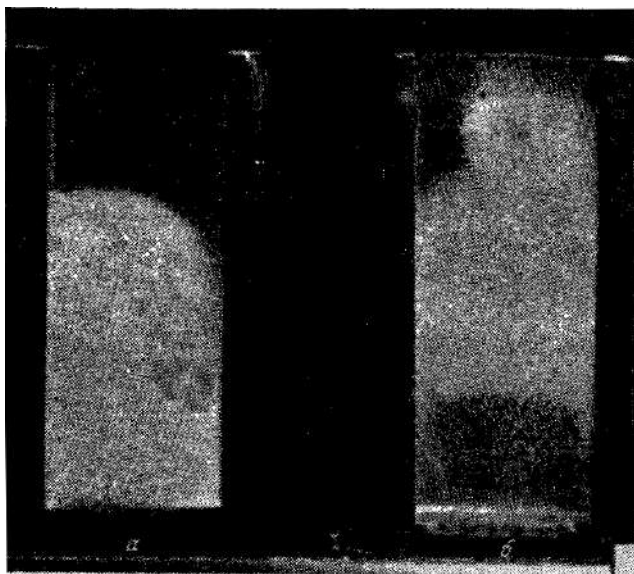


Рис. 4.3.38. Виброкипящий слой кварцевого песка в аппарате:
***a* – с закрытым дном; *б* – с открытым дном для доступа воздуха под слой.**

Экспериментальные данные о высоте отрыва материала от вибрирующей поверхности значительно расходятся с теоретическими значениями, полученными для одиночных частиц и без учета аэродинамических сил, действующих на слой. Например, для слоя высотой 35 мм стеклянных шариков средним диаметром 0,13 мм при частоте колебаний 50 гц и амплитуде 1,42 мм время движения слоя без контакта с вибрирующей поверхностью, полученное расчетным путем, составляет $\tau = 4,3T$ и высота отрыва $H = 11$ мм (по экспериментальным данным, $\tau = 0,66T$ и $H = 1,2$ мм). При частоте колебаний 100 гц и амплитуде 1,42 мм теоретические значения $\tau = 18T$ и $H = 42$ мм, практически $\tau = 0,85T$ и $H = 2,1$ мм (здесь T – период колебаний вибрирующей поверхности).

Сравнения показывают, что помимо силы веса на траекторию перемещения слоя дисперсного материала существенное влияние оказывает среда. Вследствие периодического движения дисперсного материала на площадке, совершающей вертикальные колебательные движения в пространстве между площадкой и слоем материала, при подбрасывании образуется разрежение, а при падении – повышение давления среды.

Исходя из условий постоянной пористости слоя дисперсного материала при его подъеме и падении, предложена феноменологическая модель (рис. 4.3.39), где слой материала рассматривается как поршень с вертикальным отверстием. Поршень движется в вертикально стоящем цилиндре, совершающем вертикальные гармонические колебания. Описание условной модели включает систему трех исходных уравнений:

$$M_M(H + \Delta\ddot{H}) + M_M g + (P_a - P_i) = 0, \quad (4.3.13)$$

$$P_i H = M_B R T, \quad (4.3.14)$$

$$M_B = k(P_a - P_i)/P_a, \quad (4.3.15)$$

где M_M – масса дисперсного материала; H – высота отрыва нижней поверхности слоя материала (поршня) от дна; ΔH – отклонения поршня; M_B – масса воздуха, заключенного в пространстве площадью 1 м^2 и высотой H между материалом и дном в момент времени τ ; k – коэффициент газопроницаемости слоя; P_a – давление среды над слоем; P_i – давление среды в пространстве между слоем и дном.

Уравнение (4.3.13) описывает движение слоя материала массой M_M и высотой h с площадью горизонтального сечения цилиндра 1 м^2 для промежутка времени, в течение которого материал не лежит на площадке, т. е. $H \neq 0$.

Уравнение (4.3.14) отражает состояние воздуха между слоем материала и поверхностью в пространстве площадью 1 м^2 и высотой H в момент времени τ . В качестве граничного условия в последующих расчетах принимается, что в каждые последующие моменты отрыва давление под слоем равно атмосферному давлению, т. е. при $\tau = 0$, $P_a = P_i$. В последующем будет показано, что данное допущение несправедливо.

Уравнение (4.3.15) учитывает количество воздуха M_B , проникающего через слой, за единицу времени при разности давлений $P_a - P_i$.

При решении системы уравнений (4.3.13)–(4.3.15) введем обозначения

$$q = (P_a - P_i)P_a, \quad \xi = P_a/M, \quad \beta = RT/P_a,$$

где β – удельный объем воздуха при давлении P_a и температуре T , и, приняв при решении уравнения (4.3.13), что при возникающих изменениях давления газ несжимаем, для уравнений (4.3.13)–(4.3.15) получим

$$\ddot{H} + \xi q = -\Delta\ddot{H} - g, \quad \dot{M}_B = \dot{H}/\beta, \quad \dot{M}_B = kq. \quad (4.3.16)$$

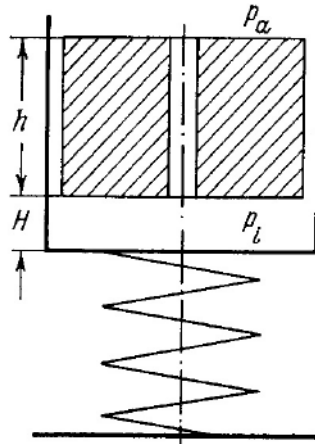


Рис. 4.3.39. Модель виброкипящего слоя

После подстановки отношения \dot{H}/β в последнее уравнение для дифференцирования с исключением \ddot{H} из уравнения (4.3.16) получено

$$\dot{q} + \frac{\xi}{\beta k} q = \frac{1}{\beta k} (-\Delta \dot{H} - g). \quad (4.3.17)$$

После ряда преобразований, интегрируя уравнение (4.3.17) и определяя постоянные интегрирования из граничных условий $q=0$ и $\tau=0$, получим зависимость перепада давления во времени

$$\frac{P_a - P_i}{P_a} = h \left\{ \left[\frac{g\rho}{P_a} - \frac{A\omega^2}{\sqrt{P_a^2/\rho^2 + (\beta\omega k_1)^2}} \sin(-\delta) \right] e^{-\frac{P_a\tau}{\rho k_1\beta}} - \frac{g\rho}{P_a} + \frac{A\omega^2}{\sqrt{P_a^2/\rho^2 + (\beta\omega k_1)^2}} \sin(-\delta) \right\}, \quad (4.3.18)$$

где $\delta = \arctg(\omega\beta k_1 \cdot m/P_a) - \omega\tau_0$, $k_1 = kh$ – удельный коэффициент газопроницаемости слоя дисперсного материала.

Из уравнения (4.3.17) можно легко получить зависимость высоты отрыва H материала от дна во времени, которая может быть выражена в виде

$$H = \beta k \int_0^\tau q d\tau. \quad (4.3.19)$$

Решение последнего уравнения с учетом (4.3.18) и с соблюдением начального условия $H=0$ при $\tau=0$ дает

$$\begin{aligned} H = & \frac{\beta^2 \rho k_1^2}{P_a} \left[\frac{g\rho}{P_a} - \frac{A\omega^2}{\sqrt{P_a^2/\rho^2 + (\beta\omega k_1)^2}} \sin(-\delta) \right] e^{-\frac{P_a\tau}{\rho k_1\beta}} - \frac{g\rho\beta k_1\tau}{P_a} + \\ & + \frac{A\omega^2}{\sqrt{P_a^2/\rho^2 + (\beta\omega k_1)^2}} \sin(-\delta) + \frac{A\omega^2}{\sqrt{P_a^2/\rho^2 + (\beta\omega k_1)^2}} \left[-\frac{\beta^2 \rho k^2}{P_a} \sin(-\delta) + \frac{\beta k_1}{\omega} \cos(-\delta) \right] + \\ & + \left(\frac{\rho\beta k_1}{P_a} \right)^2. \end{aligned}$$

На рис. 4.3.40 показаны измеренные давления и высоты отрыва слоя материала от вибрирующей плоскости в зависимости от фазового угла ϕ колебаний плоскости. Расчетные значения H получены по последней формуле для вибрирующего слоя стеклянных шариков средним диаметром 0,13 мм. Абсолютные значения образующегося давления и разрежения достигают значительной величины и в экстремуме для слоя высотой 35 мм превышают 2200 мм вод. ст. (рис. 4.3.40).

Опытные и расчетные значения, полученные из уравнений (4.3.18)–(4.3.19), удовлетворительно совпадают, пока высота слоя остается ниже критической величины, зависящей от параметров вибрации плоскости и газопроницаемости слоя материала. Для морского песка со средним размером частиц 0,29 мм при частоте 50 гц, амплитуде 1,42 мм и слое выше 70 мм, вместо теоретически предсказанного роста начинается резкое снижение максимального давления. На частоте 23,3 гц и амплитуде 3,72 мм такое же снижение начинается при высоте слоя песка выше 140 мм. Для стеклянных шариков с размером частиц 0,13 мм при частоте 50 гц и амплитуде 1,42 мм критической оказалась высота 65 мм.

Несоответствие расчетных и опытных данных объясняется неравномерным распределением давления по высоте слоя. Расчетным путем показано, что распределение давления по высоте слоя не имеет линейной зависимости. На нижние слои материала приходится больший перепад давления, чем на верхние. Так, при высоте слоя 130 мм стеклянных шариков средним диаметром 0,13 мм и частоте пульсации давления воздуха 50 гц весь перепад давления приходится меньше чем на 1/2 всей его высоты. Чем выше слой, тем значительнее выражена эта нелинейность.

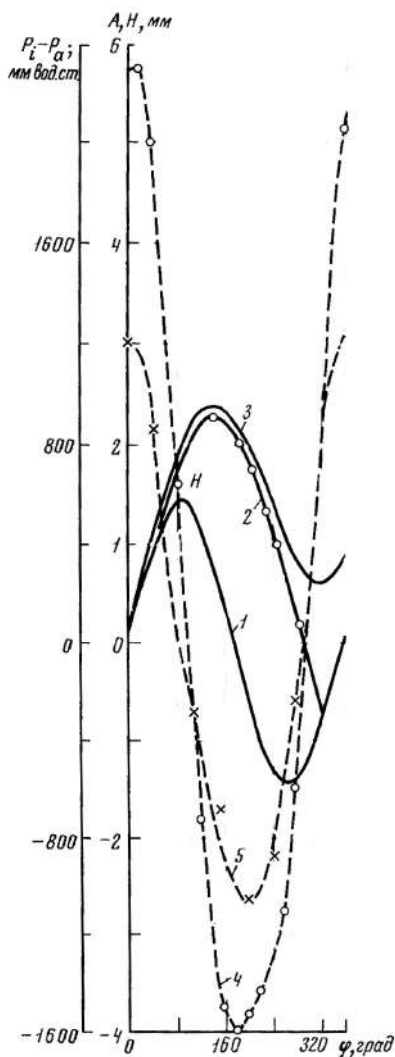


Рис. 4.3.40. Зависимость высоты подъема слоя стеклянных шариков и давления под слоем от фазового угла колебаний при частоте 100 гц и амплитуде 1,42 мм: 1 – движение плоскости; 2 – измеренное движение материала при высоте слоя 35 мм; 3 – расчетный график движения; 4 – измеренное давление при высоте слоя 35 мм; 5 – то же, при высоте слоя 70 мм.

Возникающие перепады давления в виброкипящем слое вызывают некоторые изменения плотности воздуха. Если за короткий отрезок времени, в течение которого может происходить тепло- и массообмен, принять адиабатическое изменение состояния воздуха, то изменение давления на 1000 мм вод. ст. (что со-

ставляет приблизительно 10% от атмосферного давления) соответствует изменению плотности воздуха примерно на 7%.

Каждая частица виброкипящего слоя находится в газовой среде, давление которой меняется от положительных до отрицательных значений. Максимальный перепад давления действует весьма непродолжительное время. Чем ближе к вибрирующей поверхности находится частица, тем большие перепады давления газовой среды она испытывает. Избыточное давление в виброкипящем слое, вызванное колебаниями, компенсируется периодическим оттоком избыточного или недостающего количества воздуха через поры слоя материала.

Пористость виброкипящего слоя при подъеме и падении частиц неодинакова. В первый период при синусоидальном вертикально-колебательном движении вверх с ускорением, большим ускорения свободного падения, слой уплотняется.

Во второй период уплотненный слой дисперсного материала продолжает двигаться по инерции вверх, тогда как поверхность движется вниз. В этот момент под слоем дисперсного материала и образуется разрежение.

В третий период, потеряв кинетическую энергию, слой материала начинает опускаться, а давление под слоем снова начинает увеличиваться. Материал падает уже не плотным слоем.

Нижние частицы, передав кинетическую энергию верхним, начинают падать раньше. В то время как верхние еще продолжают двигаться плотным поршнем, транспортируя находящийся над ним воздух вверх. «Поршень» частиц быстро перемещается вверх по аппарату, распадается снизу и уплотняет набегающий на него сверху материал.

В четвертый период поверхность площадки вновь встречается с потоком материала, уплотняя его. При этом материал уплотняется сначала в нижних слоях и, постепенно наступая на верхние, вытесняет воздух снизу слоя вверх.

Достигнув максимального амплитудного значения перемещения, площадка начинает перемещаться вниз, в то же время материал продолжает двигаться относительно площадки вверх. Между плотным слоем материала и поверхностью сосуда вновь образуется разрежение. Опускаясь на площадку, нижние частицы снова создают плотный слой, который вытесняет новую порцию воздуха. При вибрационном воздействии на слой дисперсного материала многократное повторение такого движения дополнительно к гармоническому изменению давления создает статическое разрежение под слоем, которое может быть измерено обычными V-образными манометрами.

Суммарный перепад гармонически изменяющегося давления и разрежения под виброкипящим слоем не равен нулю, а под слоем материала сохраняется некоторое разрежение.

В аппаратах с открытым для подсоса воздуха дном виброкипящий слой захватывает воздух снизу и вытесняет его сверху слоя дисперсного материала. Виброкипящий слой является как бы «насосом», транспортирующим через себя газ или воздух.

Насосное действие начинает возникать с момента образования виброкипящего слоя. Абсолютное значение образующегося статического перепада давле-

ния зависит: от частоты и амплитуды вибрации, высоты слоя, размера частиц и влажности дисперсного материала, коэффициента трения частиц друг о друга. Интенсивность насосного действия виброкипящего слоя может быть охарактеризована тремя основными параметрами: давлением над и разрежением под виброкипящим слоем, перепадом давления в слое.

Перепад давления в закрытой системе определяли путем измерения его дифференциальным манометром под и над виброкипящим слоем. Разрежение под слоем и давление над слоем измеряли при открытом доступе воздуха с другой стороны слоя. Зависимость указанных давлений при частоте 50 гц от амплитуды вибрации кварцевого песка, отсеянного на ситах с отверстиями 0,355–0,5 мм и насыпанного слоем высотой 35 мм, показана на рис. 4.3.41.

С увеличением высоты слоя дисперсного материала количество образующихся «поршней» повышается. Это создает дополнительные компрессионные ступени и уменьшает утечку транспортируемого газа или воздуха. С увеличением высоты материала возникает большее разрежение под виброкипящим слоем. Если проследить за изменением разрежения с увеличением высоты слоя при постоянной амплитуде вибрации, то при определенной его высоте начинается уменьшение разрежения. Чем выше амплитуда вибрации, тем при большей высоте слоя наступает предел роста разрежения. Это может быть объяснено тем, что вес вышележащего дисперсного материала и атмосферное давление, действующее на слой, препятствуют движению частиц в нижних слоях, а также тем, что в вибрационном движении участвует не вся масса слоя, а только ее часть. Эту часть слоя называют присоединенной массой. В зависимости от условий опыта она составляет 20–40% от массы материала, находящегося на вибрирующей поверхности.

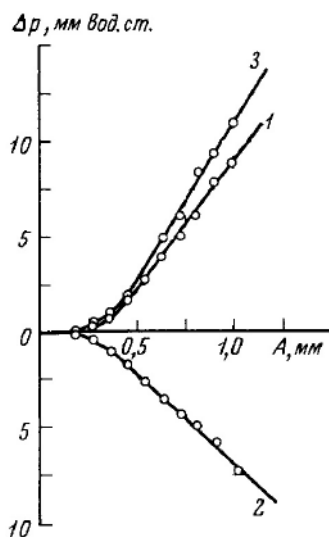


Рис. 4.3.41. Зависимость насосного действия виброкипящего слоя песка от амплитуды вибрации: 1 — давление над слоем; 2 — разрежение под слоем; 3 — перепад давления в виброкипящем слое.

Величина образующегося под виброкипящим слоем разрежения существенно зависит от его гранулометрического состава. С уменьшением среднего диа-

метра частиц относительная плотность «поршней» возрастает, что дает меньшую утечку транспортируемого газа или воздуха. В связи с этим разрежение под слоем увеличивается. Чем меньшую воздухопроницаемость имеет слой дисперсного материала, тем незначительнее утечки и подсосы газа через образующиеся «поршни». Это хорошо показывает результат измерения разрежения под виброкипящим слоем карьерного песка, имеющего широкий гранулометрический состав и малую воздухопроницаемость слоя. Например, полученные статистические разрежения под виброкипящим слоем песка при амплитуде колебаний 2,5 мм достигают 180 мм вод. ст.

При достижении определенного значения параметров вибрации (рис. 4.3.42) зависимость разрежения от амплитуды колебаний становится линейной.

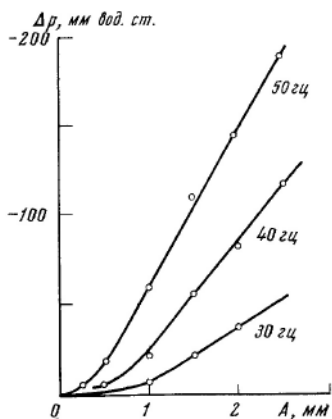


Рис. 4.3.42. Зависимость статического разрежения под виброкипящим слоем песка от амплитуды вибрации

Этот момент может определять граничную точку состояния виброкипящего слоя. Положение граничной точки для сухого кварцевого песка в основном зависит от ускорения вибрации площадки. Чем выше частота, тем при меньшей амплитуде колебаний виброкипящий слой достигает граничной точки и тем интенсивнее увеличивается разрежение. Чем ниже частота вибрации при одинаковых ускорениях, тем выше разрежение под слоем.

Исследования, проведенные в широком диапазоне частот 25–150 гц при постоянных ускорениях вибрации, показывают, что разрежение под виброкипящим слоем дисперсного материала в газе также имеет ярко выраженные пики. Многократные эксперименты со слоем кварцевого песка высотой 30 мм и размером частиц 0,165–0,21 мм, обобщенные на графике (рис. 4.3.43), показывают, что первая так называемая резонансная или оптимальная частота лежит в пределах 24–26 гц. При подходе к этим частотам наблюдается резкое увеличение разрежения. Совершенно четко вырисовываются пики на второй (48–52 гц) и менее на третьей гармониках (96–104 гц). Чем больше ускорение вибрации, тем существеннее сказывается этот резонансный эффект. Это объясняется более свободным движением частиц при расширении слоя с увеличением параметров вибрации площадки.

Влияние различных факторов на образование перепада давлений в виброкипящем слое может служить хорошим индикатором его структуры. Данное яв-

ление может свидетельствовать об агрегировании частиц, а также помогать в определении оптимальных параметров вибрации, при которых создается большая подвижность частиц в слое. Перепад давления оказывает существенное влияние на процессы в виброкипящем слое.

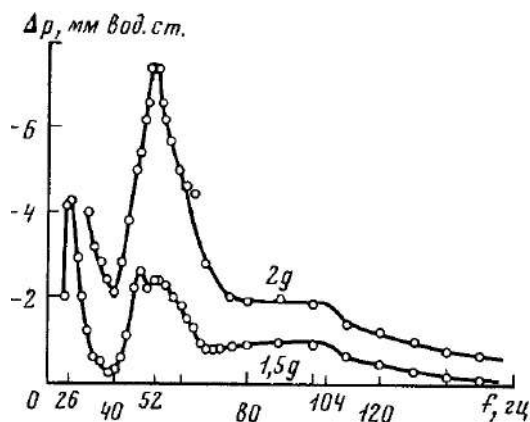


Рис. 4.3.43. Зависимость разрежения под виброкипящим слоем кварцевого песка от частоты при постоянных ускорениях вибрации площадки

Движение газа через слой. Сопротивление слоя материала при продувке его снизу вверх газом при постоянной средней скорости прекрасно иллюстрирует наличие двух состояний слоя дисперсного материала, находящегося на площадке, которая совершает вертикальнонаправленные колебания. Такая зависимость для слоя высотой 40 мм кварцевого песка с диаметром частиц 0,21–0,36 мм для средней эффективной скорости воздуха 0,016 м/с показана на рис. 4.3.44.

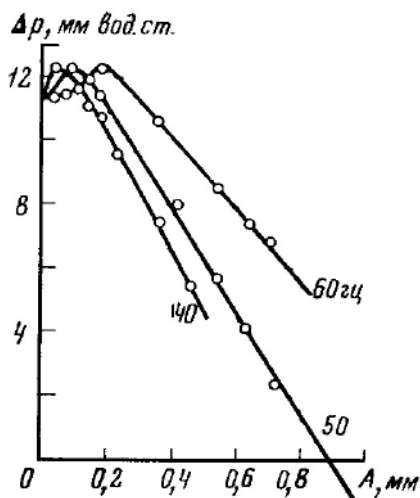


Рис. 4.3.44. Зависимость сопротивления виброкипящего слоя кварцевого песка при продувке его снизу вверх воздухом с постоянной скоростью от амплитуды вибрации

Точка перехода из состояния виброожижения к виброкипению характеризуется максимальным уплотнением материала и максимальным сопротивлением слоя. В состоянии виброкипения, несмотря на резкое уменьшение трения между частицами, вибрация увеличивает пористость слоя и соответственно уменьшает его сопротивление. Увеличение параметров вибрации приводит к моменту, когда сопротивление на слое дисперсного материала не только становится равным нулю, но и меняет знак, переходя к отрицательным значениям. На слое цинковой пыли с эквивалентным диаметром частиц 5 мкм, при частоте 25 гц амплитуде 4,5 мм и скорости продуваемого через слой воздуха 0,007 м/с разрежение под слоем достигает 250–300 мм вод. ст. Без вибрации сопротивление того же слоя составляет 79 мм вод. ст.

Определение газопроницаемости слоя зерновых продуктов (пшеницы, ржи, кукурузы и люпина) также показывает, что с увеличением до некоторого предела параметров вибрации наблюдается возрастание сопротивления слоя по сравнению с его сопротивлением при свободной засыпке продуктов. С увеличением параметров вибрационного воздействия выше ускорения свободного падения начинается разрыхление слоя, газопроницаемость его повышается.

Вибрационные воздействия, способствуя снижению эффективной вязкости слоя, а также созданию прозрачной зоны над газораспределительной решеткой, способствуют более равномерному, чем в аппаратах с кипящим слоем, распределению фильтруемого снизу газа.

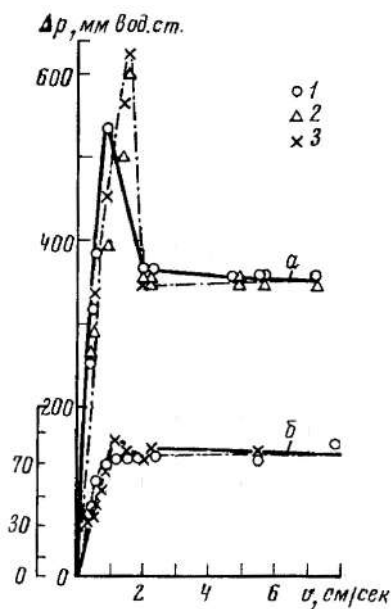


Рис. 4.3.45. Кривые псевдоожижения для слоев полипропилена с начальной высотой 280 и 80 мм:
а – слой с начальной высотой 800 мм;
1 – частота вибрации 47 гц, амплитуда 1,5 мм; **2** – частота вибрации 26 гц, амплитуда 0,5 мм; **3** – данные при отсутствии вибрации; **б** – с высотой 280 мм; **1** – частота вибрации 35 гц, амплитуда 1,5 мм; **3** – данные при отсутствии вибрации.

При оптимальных параметрах вибрации переход слоя в состояние виброкипения с увеличением скорости продуваемого снизу вверх газа происходит без появления пика перепада давления. Особенно четко это видно при создании виброкипящего слоя влажных продуктов. На рис. 4.3.45 представлены зависи-

мости перепада давлений на кипящем и виброкипящем слоях порошкообразного полипропилена со средним размером частиц 150 мкм от скорости фильтрации воздуха. Аппарат диаметром 140 мм, высотой 1400 мм был установлен на неподвижном кронштейне. Колебания от вибратора слою передавали через свободно установленную в аппарате газораспределительную решетку, состоящую из нескольких слоев стеклоткани, зажатых между двумя перфорированными металлическими пластинами. Живое сечение решетки 10%.

В кипящем слое наблюдаются явно выраженные пики перепада давления (рис. 4.3.45, *а* и *б*, кривая 3). В виброкипящем слое при параметрах вибрации, достаточных для проработки слоя по всей высоте (рис. 30, *б*), пика перепада давления не наблюдается. Если параметры вибрации недостаточны для проработки слоя (рис. 30, *а*, кривая 3), пик перепада давления сохраняется (кривая 1), но он ниже, чем в кипящем слое. В виброкипящем слое пик перепада давления наблюдается при скорости воздуха на 30% ниже скорости начала псевдооживления кипящего слоя.

На рис. 4.3.46 показано, как влияет ускорение вибрации на изменения потери давления слое с увеличением скорости газа. Зависимости получены для слоя порошка поликапроамида с размером частиц 105–150 мкм при ускорениях вибрации 0,5g и 4g. Они существенно отличаются друг от друга. При ускорении вибрации ниже критического (0,5g) в переходной зоне рассматриваемой закономерности наблюдается явно выраженный пик перепада давления, характерный для кипящего слоя. Переход слоя в состояние кипения сопровождается образованием каналов. Поскольку часть газа проходит через каналы, потери напора на слое до его полного взвешивания меньше, чем потери напора на слое при ускорении вибрации 1g.

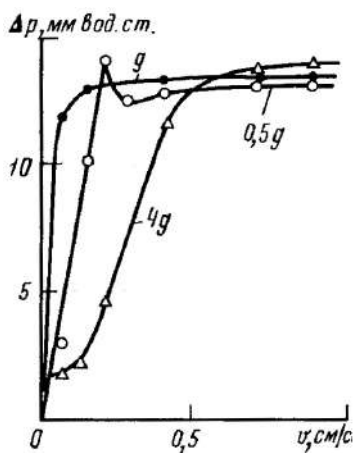


Рис. 4.3.46. Зависимости потери давления на слое порошка поликапроамида от скорости фильтруемого газа

Когда ускорение вибрации решетки равно 1g, то пика перепада давления на слое не наблюдается. Слой переходит в состояние виброкипания при более равномерном распределении фильтруемого газа. В создании взвешенного слоя основную роль продолжает играть скорость потока газа. Слой частиц поднима-

ет поток газа, поэтому потеря напора на слое с увеличением скорости газа резко возрастает и уже при малых его скоростях достигает максимума. После превышения скорости газа, соответствующей точке прекращения равномерного расширения слоя, в нем начинают возникать пузыри, создающие неоднородное кипение материала.

Когда ускорение вибрации равно $4g$, расширение слоя наблюдается и без потока газа. Некоторый объем материала взвешен силой вибрационного воздействия, и на долю потока газа приходится только часть его веса. Поэтому потеря напора на слое с увеличением скорости фильтрации газа повышается менее резко, чем в ранее наблюдаемых случаях. Пика потери напора в переходной зоне не наблюдается.

Вибрация с параметрами ниже ускорения свободного падения, уменьшая внутреннее трение в слое, создает плотную укладку частиц материала. Укладка такой плотности не может обеспечить фильтрацию газа в требуемых количествах. Поэтому с увеличением скорости подачи газа под такой слой в нем начинается перестройка частиц. Эта перестройка выражается в некотором увеличении объема слоя, однако контакты между частицами сохраняются.

При дальнейшем увеличении скорости газа наступает такой момент, когда частицы начинают отрываться друг от друга. Дальнейшее увеличение объема слоя идет вследствие увеличения расстояния между частицами. Одновременно с повышением скорости газа происходят новые перестройки частиц в слое, и в результате – спрямление каналов прохода воздуха. Предполагается, что при малых расстояниях между частицами компоновка их напоминает форму тетраэдра, а с увеличением расстояний компоновка стремится к кубической. С увеличением расстояния между частицами некоторым из них удастся занять наиболее выгодное положение в кильватере предыдущих. Уходя от потока газа, они теряют «опору» и могут падать на нижние частицы. Подобные движения создают неравномерность плотности и в слое образуются пузыри. Начиная с этого момента избыточный газ проходит через слой в виде пузырей. Увеличение высоты слоя связывается с возрастающим количеством и объемом пузырей. Пузыри интенсифицируют перемешивание твердой фазы.

Рассмотренный механизм недостаточно отражает влияние вибрационных воздействий в области виброкипения слоя. Вибрационные воздействия, создавая пульсации твердой и газовой фаз, дополнительно к отмеченному выше явлению создают неравномерность концентрации твердой фазы в локальных участках слоя. При определенных условиях это может приводить к образованию пузырей, однако те же пульсации способствуют их разрушению и нивелируют возникающие в слое каналы. В результате при оптимальных параметрах вибрации и скорости фильтруемого газа создается равномерный макрооднородный виброкипящий слой.

Существенное влияние на прохождение газа через слой дисперсного материала оказывает насосное действие виброкипящего слоя. На рис. 4.3.47 показано семейство кривых изменения потери давления на виброкипящем слое кварцевого песка высотой 15 мм от скорости продуваемого воздуха при разных амплитудах вибрации. При малых эффективных скоростях потока на слое созда-

ется отрицательный перепад давления и не требуется принудительной подачи газа. Виброкипящий слой сам работает как насос, транспортирующий через себя газ. При скорости $v'_{кр}$ перепад давления на слое равен нулю.

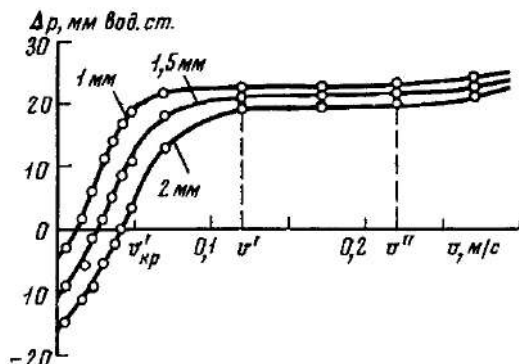


Рис. 4.3.47. Семейство кривых потерь давления на виброкипящем слое песка от скорости продуваемого снизу вверх воздуха при частоте вибрации 50 гц, размер частиц 0,165–0,355 мм

При дальнейшем увеличении скорости виброкипящий слой начинает оказывать сопротивление проходящему газу. В пределе скоростей от v' до v'' перепад давления на слое постоянен. Переход от линейного закона увеличения сопротивления к постоянному перепаду давления на слое происходит постепенно и занимает широкий интервал изменения скорости газа, причем $Re = vd/\nu$ (где v – эффективная скорость потока; d – средний эквивалентный диаметр частиц; ν – кинематическая вязкость сжижающего агента) в интервале постоянного перепада давления изменяется при продувании воздухом примерно от 20 до 50. При скорости газа выше v'' его роль начинает преобладать над вибрационным воздействием. Все большее количество частиц окончательно отрывается от вибрирующей поверхности, переходя в состояние витания. При этом сопротивление слоя начинает возрастать, достигая величины сопротивления, характерного для кипящего слоя. Изменение параметров вибрации, не влияя на характер показанной зависимости, меняет абсолютные значения возникающего перепада давления. Чем выше амплитуда вибрации, тем меньше перепад давления при продувке слоя воздухом и тем выше абсолютная величина его скорости в точке с нулевым перепадом давления.

Исследования потери давления на виброкипящем слое зерна при изменении скорости воздушного потока в пределах 0,2–0,6 м/с были выполнены с использованием пшеницы, отсортированной на парусном классификаторе в диапазоне скорости витания 11,5 м/с; вес 1000 зерен 37 г; влажность 15%. Частоту колебаний изменяли от 20 до 50 гц в области ускорений вибрации 0–60 м/с². На рис. 4.3.48 показаны зависимости ΔP в слое пшеницы, отнесенные к высоте слоя h , от скорости продуваемого воздуха при частоте колебаний 20 гц и амплитуде 2,96 мм (кривая 8), при свободной засыпке (кривая 7) виброуплотненного слоя при ускорении вибрации 9,8 м/с² (кривая 6).

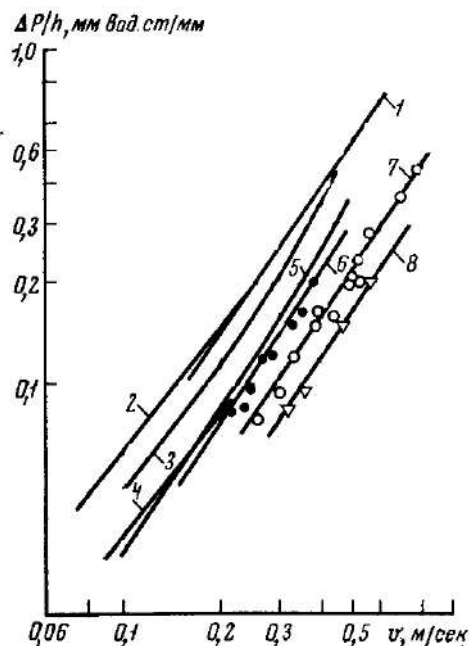


Рис. 4.3.48. Зависимость потери давления на слое зерна от скорости воздуха, продуваемого снизу вверх

Линейный характер зависимостей, построенных в логарифмической системе координат, показывает, что для расчета перепада давления может быть принята формула Л. К. Рамзина:

$$\Delta P = Ah \cdot v^n. \quad (4.3.20)$$

Использование в данном случае для пшеницы значения $A=1,41$ и $n=1,43$ (кривая 1), для плотного (кривая 2) и рыхлого (кривая 4) слоев по Шедду; формулы

$$\Delta P = ahv + bhv^2$$

с коэффициентами $a=191,5$ и $b=1120$ для максимально уплотненного слоя (кривая 5); $a=294$ и $b=1540$ для наименее уплотненного (кривая 3), не дает хорошей сходимости расчетных и экспериментальных данных. Значение коэффициента A в виброкипящем слое дополнительно становится сложной функцией параметров вибрационного воздействия на слой.

Определение такого коэффициента является малоудобным. Для аналитического расчета перепада давления ΔP на виброкипящем слое зерна предложено, помимо коэффициента A , для учета вибрационного воздействия ввести в формулу (4.3.20) дополнительный множитель k . Тогда формула для определения перепада давления ΔP на виброкипящем слое запишется в виде $\Delta P = kAh \cdot v^n$, где h — высота слоя зернистого материала; v — скорость движения газа, отнесенная к полному сечению камеры или ко всей площади, занимаемой слоем; A и n — коэффициенты, зависящие от размеров, формы и степени уплотнения слоя; k — коэффициент, учитывающий влияние вибрационного воздействия на слой.

Соппротивление в слое при вибрации с ускорением, равным ускорению силы тяжести, не зависит от частоты колебаний, и засыпка имеет максимальное уплотнение. Такое состояние слоя целесообразно использовать в качестве эталонного. В сравнении со свободной засыпкой определение значений A и n в этом случае дает значительно меньшую погрешность. Обработка экспериментальных данных позволила получить эмпирическую зависимость коэффициента k для зернового слоя от ускорения вибрации и частоты колебаний:

$$k = k_1[(A\omega^2 - g)^2 + k_2]/k_2[(A\omega^2 - g)^2 + k_1],$$

где $k_1 = 0,32f^2 - 2,83f$; $k_2 = 0,32f^2 - 1,95f$; $A\omega^2$ – ускорение вибрации.

Зависимость изменения гидравлического сопротивления виброкипящего слоя от основных определяющих факторов можно представить в виде функции, где в качестве определяемого был взят критерий Эйлера $Eu = \Delta P / \rho_g v^2$, в который входят перепад давления на слое ΔP . Эта функция представлена в виде

$$Eu = k Re^{k_1} Re_v^{k_2} (A\omega^2 / g)^{k_3} (m / D^3 \rho)^{k_4} (\rho / \rho_g)^{k_5} (A / d_g)^{k_6},$$

где $Re_v = \rho_g d_g v / \mu_g$; v – средняя скорость потока газа в свободном сечении аппарата; ρ_g – плотность газа; $Re = \rho_g d^2 \omega / \mu_g$ – вибрационный критерий Рейнольдса; m – масса слоя материала; D – внутренний диаметр аппарата.

Получены следующие численные значения постоянного коэффициента функции Eu и показателей степени ее множителей: $k = 3,43 \cdot 10^7$; $k_1 = -0,7$; $k_2 = -1,176$; $k_3 = 0,013$; $k_4 = 0,9$; $k_5 = -0,45$ и $k_6 = -0,843$.

Исследования дают представление о распределении давления газа в слое материала. Давление в виброкипящем слое поликапроамида с размером частиц 105–150 мкм (рис. 4.3.49) уменьшается по мере приближения к его поверхности. На большом участке высоты слоя, за исключением зоны вблизи решетки, эта закономерность линейна. С увеличением скорости потока газа давление в слое естественно увеличивается.

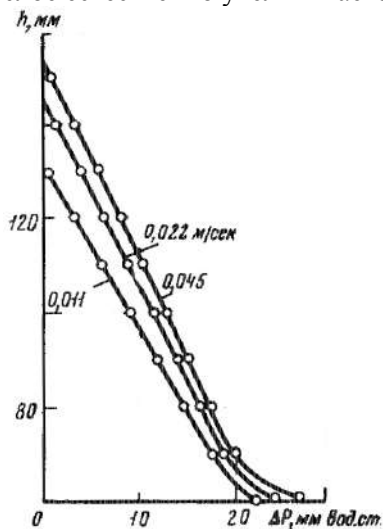


Рис. 4.3.49. Распределение давления по высоте виброкипящего слоя поликапроамида при ускорении вибрации 0,8g

Подведем итоги. Кипящий слой является таким оптимальным состоянием дисперсной системы, в которой создаются благоприятные условия осуществления различных гетерогенных процессов. Несмотря на значительные преимущества кипящего слоя перед другими способами организации процесса, он, как и любой другой, не является универсальным и имеет ряд существенных недостатков. Один из них заключается в том, что кипящий слой создается только при определенных скоростях газа и жидкости, которые в ряде случаев являются далеко не оптимальными для физико-химического процесса и не дают возможности работать с материалом широкого гранулометрического состава. Кроме того, перевести слой некоторых материалов в состояние кипения вообще не удастся, что особенно характерно для частиц, склонных к агрегированию. Применение аппаратов, создающих виброкипящий слой, позволяет организовать хорошее перемешивание дисперсных материалов и значительно приблизиться к предельному случаю создания аппарата с идеальным смешением или гомогенной реакционной зоной. В условиях виброкипящего слоя снижается тормозящее действие внешних диффузионных микро- и макрофакторов, что благоприятствует повышению коэффициентов тепло- и массопереноса.

4.3.5. Транспорт систем «газ – дисперсные частицы»

Горизонтальный транспорт. Визуальные наблюдения за поведением потока твердых частиц в стеклянной трубе показали, что его характер весьма сложен и зависит от отношения расходов твердого материала и газа μ . При очень низких значениях этого отношения твердые частицы достаточно равномерно распределены в трубе (рис. 4.3.50). Некоторые частицы при своем движении отскакивают от стенок трубы.

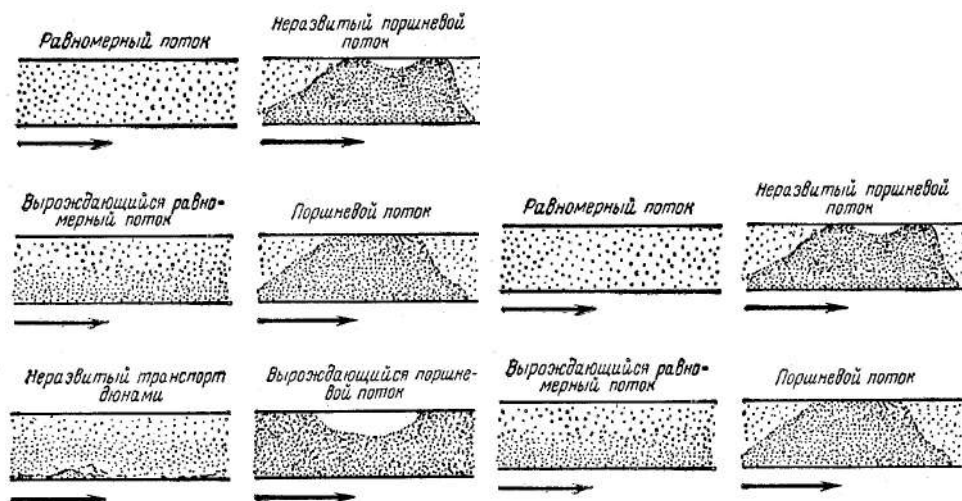


Рис. 4.3.50. Характер потоков «газ – дисперсные частицы» в горизонтальных каналах

При увеличении μ частицы стремятся проскальзывать над другими частицами, осевшими в нижней части трубы. Когда сегрегация твердых частиц становится достаточно большой, они перемещаются от «дюны» к «дюне», подвергаясь чередующимся ускорениям и замедлениям. Дальнейшее повышение μ может привести к поршневому режиму. Последний характеризуется пульсацией потоков газа и твердого материала, перемещающихся в виде последовательно движущихся порций. При еще более высоких величинах μ твердый материал может заполнить значительную долю сечения трубы. В этом случае движение происходит в форме волн, причем основная масса твердого материала остается неподвижной. В таких режимах относительная концентрация твердого материала может достигать 900 кг твердого материала на 1 кг газа.

Потоки с высокими значениями μ нестабильны и сопровождаются большими флуктуациями перепада давления. В связи с этим корреляциями, предложенными различными авторами для перепада давления, нужно пользоваться с осторожностью и в ограниченном диапазоне условий проведенного эксперимента. Распространения этих корреляций за пределы исследованного диапазона (без тщательного анализа реальных условий движения) следует избегать.

Характеристики потока «газ – дисперсные частицы» иллюстрируются схематической диаграммой на рис. 4.3.51, где перепад давления на единицу длины горизонтальной трубы представлен в зависимости от скорости газа. Параметр W выражает фиксированную массовую скорость твердого материала. Линия $A - B$ при $W = 0$ характеризует сопротивление трубы при движении по ней газового потока без твердых частиц.

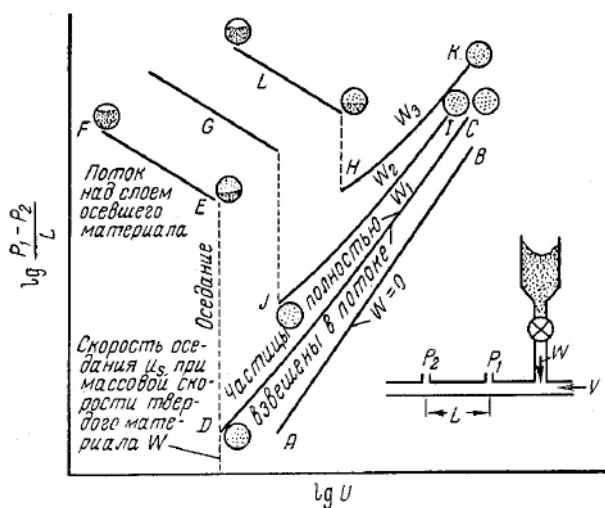


Рис. 4.3.51. Схематическая диаграмма горизонтального транспорта систем «газ – дисперсные частицы»

Перепады давления в трубопроводе возрастают с увеличением расхода твердого материала, причем для расходов W_1, W_2 и W_3 наблюдается разрыв непре-

рывности в точках D , J и H соответственно. В этих точках значения μ соответствуют предельной несущей способности газового потока. При понижении скорости газа до точки насыщения потока частицами происходит выпадение (или оседание) частиц, сопровождающееся резким скачком перепада давления. Точки D , J и H соответствуют началу выпадения частиц, и скорость газа в этих точках называется скоростью оседания. Из рис. 4.3.51 видно, что скорость оседания является функцией относительной концентрации частиц в потоке.

Движение разбавленной газовой взвеси. Форма профиля скоростей газа в отсутствие и при наличии в потоке частиц дисперсного материала зависит от относительной концентрации μ , но не зависит от скорости воздуха. По оси трубы массовые скорости твердого материала W близки к их средним значениям по сечению трубы $\langle W \rangle$.

Попробуем установить общую зависимость между скоростями твердых частиц и газа и перепадом давления на основе анализа сил трения. Опубликованные экспериментальные данные привлекаются ниже с целью подтверждения справедливости полученных соотношений.

Силы, действующие со стороны потока на одиночную частицу в неограниченном пространстве, достаточно изучены и могут быть выражены с учетом коэффициента лобового сопротивления (см. 4.1.1):

$$F_{ds} = C_{\xi} \frac{\pi d^2}{4} \frac{\rho_c (w - v)^2}{2}.$$

По данному уравнению силу трения, действующую на частицу, находящуюся в массе других частиц, можно оценивать только при очень низких их концентрациях. Сила трения, действующая на твердую частицу в относительно концентрированной системе «газ – дисперсные частицы», больше и связана с порозностью системы:

$$F_{ds} = C_d \frac{\pi d^2}{4} \frac{\rho_c (w - v)^2}{2},$$

где

$$C_d = C_{\xi} f(\epsilon) \approx \epsilon^{-4,7}.$$

Чаще всего $\epsilon = 0,6 - 1,0$ и коэффициент лобового сопротивления C_d возрастает с увеличением концентрации частиц. Здесь под скоростями твердых частиц и газа подразумеваются средние горизонтальные составляющие скорости. Данное уравнение применимо к однородным пневмотранспортным системам в случае сферических частиц. Однородные потоки на рис. 4.3.50 можно считать близкими к таким системам.

Пусть dG_d – эффективная масса, твердых частиц на элементарном участке длины трубопровода dL . Число частиц на этом участке равно

$$dn = \frac{dG_d}{(\rho_d - \rho_c) \pi d^3 / 6}.$$

Если G_d – расход твердых частиц, то $dG_d = G_d dL / w$ и

$$dn = \frac{6 G_d dL}{(\rho_d - \rho_c) \pi d^3 w}.$$

По определению порозность ε на участке dL равна

$$\varepsilon = \frac{(\pi D^2 dL/4) - (n\pi d^3/6)}{(\pi D^2 dL/4)} = 1 - \frac{4G_d}{(\rho_d - \rho_c)\pi D^2 w}.$$

Полная сила трения, действующая на дисперсные частицы, находящиеся на участке dL транспортной линии, получится суммированием сил, действующих на каждую частицу в отдельности:

$$dF_d = F_{d0}n = \frac{3}{4}C_\xi \frac{G_d \rho_c (w-v)^2 dL}{(\rho_d - \rho_c)w} \left[1 - \frac{4G_d}{(\rho_d - \rho_c)\pi D^2 w} \right]^{-4,7}.$$

Потеря давления, вызванная силой трения потока о частицы, составляет

$$\frac{dP_d}{dL} = \frac{dF_d}{dL} \frac{4}{\pi D^2}.$$

Тогда

$$\frac{dP_d}{dL} = C_\xi \frac{3G_d \rho_c (w-v)^2 dL}{\pi D^2 (\rho_d - \rho_c)wd} \left[1 - \frac{4G_d}{(\rho_d - \rho_c)\pi D^2 w} \right]^{-4,7}.$$

Подставляя $\mu = G_d / (\pi D^2 v \rho_c)$, получим

$$\frac{dP_d}{dL} = 3C_\xi \left(\frac{\rho_c^2}{\rho_d - \rho_c} \right) \frac{(w-v)^2}{d} m \left[1 - \frac{4\rho_c m}{(\rho_d - \rho_c)} \right]^{-4,7}.$$

Полный перепад давления в установившемся потоке складывается из потерь давления на трение потока о частицы и на трение газового потока о стенки трубы: $\Delta P = \Delta P_d + \Delta P_c$, где ΔP_c можно рассчитывать по коэффициенту гидравлического сопротивления и скорости газового потока, свободного от твердых частиц. Подход упрощен и не учитывает, что дисперсные частицы деформируют газовый поток. По этой причине формула для гидравлического сопротивления становится неточной. Ее использование для расчета ΔP_c , строго говоря, неправомерно.

Выведенные уравнения относятся к потоку разбавленной газовой смеси в горизонтальной трубе. При повышении расходной концентрации или понижении скорости газа дисперсные частицы будут выпадать на нижнюю часть горизонтальной трубы, в некоторой степени перекрывая ее поперечное сечение. Скорость газа, минимально необходимая для транспортировки без выпадения твердых частиц из потока (скорость оседания), является важнейшим фактором при разработке пневмотранспортных систем. Характеристики транспорта материала в разбавленной и плотной фазах совершенно различны.

Прежде чем применить то или иное расчетное уравнение, необходимо знать режим движения. В случае крупных частиц скорость оседания v_0 понижается с уменьшением их размера до определенной величины, после чего наблюдается обратная зависимость. Минимум на кривой зависимости v_0 от d указывает на существование области, где более мелкие частицы труднее поддерживать во взвешенном состоянии. Требуется более высокие скорости, чтобы транспортировать их в виде разбавленной газовой смеси. Это вызвано ростом влияния поверхностных сил и электростатических зарядов при использовании мелких частиц.

Транспорт систем «газ – дисперсные частицы» в плотной фазе. Когда скорость газа уменьшается ниже скорости оседания и расходная концентрация повышается, частицы начинают выпадать из потока и скользить вдоль трубы по дну, как это показано на рис. 4.3.50. Транспорт в плотной фазе обычно наблюдается при использовании питателей с псевдооживленным слоем.

Воронкообразную напорную трубу (горизонтальную или вертикальную) использовали для питания смесью «газ – дисперсные частицы» в плотной фазе, забираемой из псевдооживленного слоя. В обычных пневмотранспортных линиях расходная концентрация изменяется примерно в пределах от 0,1 до 5,0. При использовании питателя с псевдооживленным слоем можно работать с расходной концентрацией от 25 и даже до 900.

В непосредственной близости к питателю с псевдооживленным слоем материал еще движется равномерно распределенным, но в последующих зонах трубы дисперсные частицы стремятся осесть и начинают образовывать чередующиеся дюны. Можно ожидать, что при таких нарушениях однородности скорости твердых частиц в различных точках поперечного сечения трубы будут значительно отличаться. Фактически оказалось, что скорости частиц изменяются от точки к точке и вдоль трубы (даже за пределами предполагаемого разгонного участка), где они подвергаются попеременному ускорению и замедлению. Вероятны также значительные флуктуации перепада давления.

Поскольку при движении в плотной фазе перемещаются не одиночные дисперсные частицы, а их группы, то влияние индивидуальных свойств частиц (размер, форма) может стать малозаметным. В связи с этим логичнее выражать скорость частиц как среднюю скорость группы частиц по длине исследуемого участка транспортной линии на основе объемной плотности последних в потоке ρ_{de} . Она определяется методом отсечки, как отношение массы твердых частиц в исследуемом участке трубы к объему исследуемого участка трубы.

Средняя скорость частиц рассчитывается как $w_d = W / \rho_{de}$. Было установлено, что величина ρ_{de} при транспорте в плотной фазе в два-три раза превышает величину, рассчитанную по потокам твердых частиц и газа, что указывает на существенное проскальзывание газового потока относительно твердого материала. Были изучены перепады давления и скорости твердых частиц в стеклянных трубах трех диаметров при транспорте, обслуживаемом питателем с псевдооживленным слоем. Оказалось, что в условиях выполненного эксперимента скорость газа примерно вдвое превышает скорость твердых частиц и степень проскальзывания газа не зависит от размера последних.

Перепад давления в виде эмпирической зависимости двух безразмерных комплексов от скорости частицы описывается уравнением

$$\left(\frac{\Delta P_{mp}}{L g \rho_{ds}} \right) \left(\frac{D}{d} \right)^{1/4} = 4,3 w_d^{0,45}.$$

Возможным источником ошибок при использовании данного уравнения является возникновение значительных электростатических зарядов при движении твердых частиц в трубе. В этом отношении важна влажность несущего газового потока. Чтобы уменьшить заряды статического электричества, требуется зазем-

ление, особенно в случае использования очень сухого газа и малой электропроводности твердых частиц.

Вертикальный транспорт. Проиллюстрируем характеристики вертикального транспорта схематической диаграммой (рис. 4.3.52).

Для данной массовой скорости зернистого материала W_1 или W_2 перепад давления уменьшается при постепенном понижении расхода газа от точек C или F до точек D или G соответственно. Одновременно уменьшаются также скорость частиц и порозность слоя, но возрастает гидростатический напор. В точке D (или G) напор твердого материала превысит воздействие газового потока, и дальнейшее уменьшение последнего будет сопровождаться быстрым ростом перепада давления.

При достижении точки E (или H) скорость твердых частиц падает настолько низко, что газ больше не может поддерживать их высокую концентрацию в потоке, и тогда возникает поршневой режим движения. Скорость газа в точке E (или H) называется скоростью зависания и соответствует предельной несущей способности газового потока. Скорость зависания аналогична скорости оседания в горизонтальном транспорте. Обе величины выражают граничную несущую способность, разделяющую движение в разбавленной и плотной фазе.

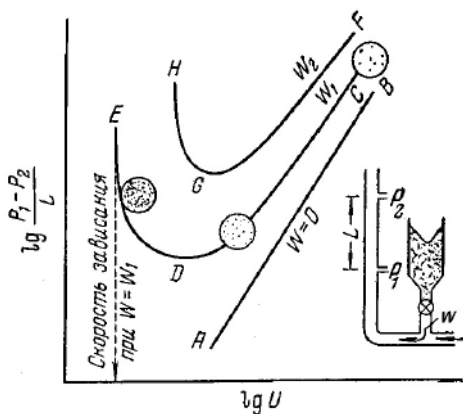


Рис. 4.3.52. Схематическая диаграмма вертикального транспорта систем «газ (жидкость) – дисперсные частицы»

Скорость зависания можно оценить по следующей формуле:

$$W_{ch} = \rho_d (1 - \epsilon^*) (w_0 - v),$$

где критическая порозность ϵ^* , почти не зависящая от размера частиц (в диапазоне 0,17–1,7 мм), но сильно зависящая от их плотности, может быть найдена по формуле $\epsilon^* = 0,03\rho_d + 0,91$, причем ρ_d – в г/см³; для $d > 0,17$ мм получается $0,945 < \epsilon^* < 0,987$.

Для монодисперсных смесей скорости зависания и оседания примерно равны, но для полидисперсных – первая в 3–6 раз меньше второй.

Опубликовано мало данных о транспортных системах с плотной фазой, где бы плотность последней при восходящем движении достигала плотности неподвижного слоя.

Перепад давления при вертикальном транспорте. В отличие от горизонтального, при вертикальном транспорте частицы взвешены и распределены в потоке относительно равномерно, по крайней мере, до возникновения поршневого режима. В связи с этим правомерно рассматривать вертикальный транспорт как движение газа через расширившийся зернистый слой с относительной скоростью $w_0 - v$. Тогда как и для неподвижного или однородного псевдооживленного (порозностью не ниже 0,8) слоя сопротивление системы вследствие взаимодействия газа и твердых частиц может быть рассчитано по уравнению Эргана:

$$\frac{\Delta P_f}{L} = 150 \frac{(1 - \varepsilon_0)^2}{\varepsilon_0^3 \phi_d^2} \frac{\mu v_{mf}}{d^2} + 1,75 \frac{(1 - \varepsilon_0)}{\varepsilon_0^3} \frac{\rho_c v_{mf}^2}{d \phi_d},$$

где ϕ_d – фактор формы частиц.

Потери давления на преодоление статического напора столба взвешенного материала составляют

$$\frac{\Delta P_s}{L} = (1 - \varepsilon)(\rho_d - \rho_c)g.$$

Потери давления на трение газа о стенки трубы точно оценить нельзя из-за присутствия твердых частиц. Эта составляющая обычно невелика по сравнению с остальными, и ее можно примерно рассчитать по обычному уравнению:

$$\frac{\Delta P_v}{L} = \frac{\lambda}{D} \frac{\rho_c v^2}{2}.$$

где λ – коэффициент гидравлического сопротивления.

Полный перепад давления при вертикальном транспорте составляет:

$$\Delta P = \Delta P_f + \Delta P_s + \Delta P_v.$$

Порозность ε может быть рассчитана согласно методике для псевдооживленного слоя.

Подведем итог. Приведенный выше метод расчета вертикального транспорта твердых материалов требует знания лишь легкодоступных характеристик системы. Этот метод весьма чувствителен к изменениям порозности.

4.4. ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕМЕШИВАНИЯ ДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ

Для большинства рассмотренных нами смесителей непосредственно смешивание имеет место тогда, когда дисперсный материал находится во взвешенном состоянии, т. е. вес частиц компенсируется некоторым внешним воздействием. Перевести дисперсный материал во взвешенное состояние возможно:

- за счет подачи воздуха (газа) – взвешенный слой;
- используя механические перемешивающие устройства самой разной конструкции – механическое взвешивание;
- при наложении вибрации – вибровзвешивание.

Несмотря на принципиальное различие этих трех способов, общим для них является то, что во взвешенном состоянии частицы дисперсного материала приобретают значительную подвижность — способность интенсивно перемещаться относительно друг друга.

В 1960–1970-е гг., когда наблюдался период широкого внедрения аппаратов с взвешенным слоем в промышленность, появилось большое число теоретических и экспериментальных исследований в области гидродинамики таких аппаратов. Эти исследования обусловили выход монографии М. Э. Аэрова и О. М. Тодеса, в которой был систематизирован достаточно большой объем экспериментальных данных по перемешиванию дисперсных материалов в псевдоожигенном слое. Термин *перемешивание* используется применительно к описанию явления переноса дисперсных частиц, не отличающихся своими свойствами. Поскольку характер поведения дисперсных частиц во взвешенном состоянии, независимо от способа его создания, имеет много общего, то для понимания особенностей изучаемого явления ограничимся аппаратами с взвешенным слоем и будем следовать работе М. Э. Аэрова и О. М. Тодеса. Материал излагается с несколько измененной терминологией и без дополнительных библиографических ссылок.

4.4.1. Движение дисперсных частиц во взвешенном слое

Во взвешенном состоянии дисперсные частицы непрерывно перемешиваются и участвуют в сложном хаотическом пульсационном движении. Вектор скорости одиночной частицы \vec{w}_d непрерывно меняется по величине и направлению вследствие столкновений частиц и гидродинамических взаимодействий через изменения локальной структуры потока в их окрестности. Поскольку частица в целом не выходит за пределы аппарата, то в среднем за достаточно большой промежуток времени вектор скорости равен нулю, но его абсолютное значение или квадрат в среднем отличны от нуля: $\tilde{w}_d = 0$, но $|w_d| \neq 0$ и $\tilde{w}_d^2 \neq 0$.

Подобного рода системы наблюдаются и в других областях физики и техники. Так, в любом газе молекулы находятся в состоянии хаотического теплового движения, причем мгновенные значения скоростей ближайших молекул никак не связаны друг с другом. Другой характер носят турбулентные пульсации в потоке жидкости. Группы соседних частиц жидкости, так называемые вихри, движутся совместно с близкими пульсационными скоростями, причем корреляция этих скоростей постепенно уменьшается во время движения, вихри распадаются и возникают вновь. Такое пульсационное движение характеризуется определенным масштабом (путем смещения l^*) и средней частотой или периодом образования и распада вихрей.

К какому же из этих двух типов хаотических движений ближе перемешивание твердой фазы в кипящем слое? Поскольку нам неизвестны детально гидродинамические силы, вызывающие это движение, то ответ на поставленный вопрос пришлось искать экспериментально. С этой целью была проведена киносъемка в сильно разреженном слое стальных шариков, взвешенного воздушным потоком. Каждый движущийся шарик дает на снимке два параллельных блика. По длине

этих бликов и известному времени выдержки кадра (1/250 с) можно было измерить проекцию мгновенной скорости шарика на вертикальную плоскость и найти ее среднее значение для группы шариков, попавших в данный кадр. Кинокадры убедительно показывают, что соседние шарики движутся с близкими по величине и направлению скоростями, меняющимися от кадра к кадру и более или менее точно повторяющимися спустя определенное число кадров.

Даже в очень разреженном взвешенном слое имеется сильная корреляция скоростей движения соседних частиц и движение твердой фазы приближается к типу турбулентных пульсаций в жидкости. Некоторым, правда существенным для дальнейшего, различием является то, что масштаб этих пульсаций возрастал со скоростью потока примерно от радиуса до диаметра колонки, т. е. этот масштаб пульсаций сравним с размерами самого слоя. Естественно, что для обычного более плотного слоя такая корреляция скоростей частиц, образующих непрерывно возникающие и распадающиеся движущиеся «пакеты», также должна осуществляться.

Для оценки величины пульсационных скоростей \tilde{w}_d был разработан специальный *турбулиметр*, схематически изображенный на рис. 4.4.1. Крупный стальной шарик с массой M подвешивался на стерженьке к плоской горизонтальной пружине. Под воздействием ударяющихся об него частиц слоя шарик приходил в колебательное движение, в котором, как известно, средняя кинетическая и потенциальная энергии равны друг другу:

$$\tilde{E} = \frac{M\tilde{w}_{us}^2}{2} = \frac{k\tilde{x}^2}{2}, \quad (4.4.1)$$

где x – прогиб пружины, совпадающий с вертикальным смещением шарика; k – жесткость пружины.

На плоскую пружину был наклеен проволочный тензометр, регистрировавший мгновенный прогиб пружины. С помощью обычной мостовой схемы зависимость $x(\tau)$ записывалась шлейфовым осциллографом в определенном масштабе и рассчитывались средняя энергия \tilde{E} и средняя квадратичная скорость пульсаций шарика:

$$\sqrt{\tilde{w}_{us}^2} = \sqrt{\frac{2\tilde{E}}{M}}. \quad (4.4.2)$$

Соотношение между пульсационными скоростями шарика турбулиметра \tilde{w}_{us} и пульсационными скоростями частиц твердой фазы \tilde{w}_d зависит от модели явления. Если частицы движутся хаотически и независимо, как молекулы газа, то шарик турбулиметра представляет собой своеобразную броуновскую частицу. В этом случае средняя энергия его броуновского колебания должна быть равна средней энергии хаотического движения отдельной частицы массы m :

$$\frac{M\tilde{w}_{us}^2}{2} = \frac{m\tilde{w}_d^2}{2}. \quad (4.4.3)$$

Откуда

$$\tilde{w}_d \approx \tilde{w}_{us} \sqrt{\frac{M}{m}}. \quad (4.4.4)$$

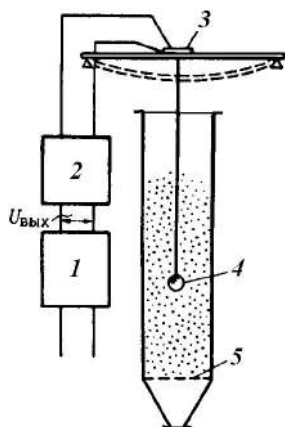


Рис. 4.4.1. Схема турбулиметра: 1 – осциллограф; 2 – тензостанция; 3 – тензометр; 4 – шар; 5 – сетка.

Следовательно, пульсационные скорости частиц должны были на 2–3 порядка превышать наблюдаемые пульсационные скорости колебания турбулиметра. Расчет по формуле (4.4.4) приводит к несообразно высоким значениям скорости \tilde{w}_d , которые на несколько порядков превышают значения \tilde{w}_d , определенные кинематографическим методом.

Если массивный шарик помещен в среду, находящуюся в турбулентном движении, и диаметр его много меньше основного масштаба пульсаций, то, как указали Л. Д. Ландау и И. М. Лифшиц:

$$\tilde{w}_d = \tilde{w}_{ш} \frac{\rho_{сл} + 2\rho_{ш}}{3\rho_{сл}} = \tilde{w}_{ш} \frac{1}{3} \left(1 + 2 \frac{\rho_{ш}}{\rho_{сл}} \right). \quad (4.4.5)$$

Плотность взвешенного слоя находится из соотношения:

$$\rho_{сл} = \rho_d (1 - \epsilon). \quad (4.4.6)$$

При подстановке уравнения (4.4.6) в (4.4.5) получается окончательная расчетная формула:

$$\tilde{w}_d = \tilde{w}_{ш} \frac{1}{3} \left(1 + 2 \frac{\rho_{ш}}{\rho_d (1 - \epsilon)} \right) = \tilde{w}_{ш} \frac{1}{3} \left(1 + 2 \frac{\rho_{ш}}{\rho_d} \frac{L_0}{L} \right). \quad (4.4.7)$$

Рассчитанные из формулы (4.4.7) пульсационные скорости частиц порядка $\tilde{w}_{ш}$ и для сильно разреженных слоев оказались действительно близкими к измеренным кинематографическим путем \tilde{w}_d . Можно считать, что движение частиц твердой фазы по характеру близко к турбулентным пульсациям с той лишь разницей, что основной масштаб этих пульсаций сравним с размерами слоя – диаметром для высоких слоев при больших L/D_T и высотой для низких слоев при малых L/D_T . Этот вывод подтверждается многочисленными визуальными наблюдениями и киносъемками.

Применяя метод турбулиметра, проводились замеры пульсационной скорости взвешенных слоев из различных фракций песка со средними диаметрами $\langle l \rangle$ от 100 до 477 мк в лабораторной колонке $D_{ан} = 80$ мм до очень больших расширений слоя. На рис. 4.4.2 показаны полученные результаты. Из данного

рисунка достаточно сложно говорить об однозначном изменении \tilde{w}_d во взвешенном слое с ростом скорости воздушного потока w_c .

Киносъемки пульсационных движений частиц во взвешенном слое проводились рядом исследователей. Для сравнительно плотных слоев киносъемка позволяет следить лишь за движением частиц, прилегающих к прозрачной стенке. Чтобы следить за движением частиц, расположенных внутри слоя, применялась киносъемка с помощью рентгеновских лучей. Меченая частица обрабатывалась солями тория, сильно поглощающего рентгеновские лучи, которыми просвечивался взвешенный слой. С помощью электронно-оптического преобразователя изображение получалось в видимой области и фотографировалось с экрана.

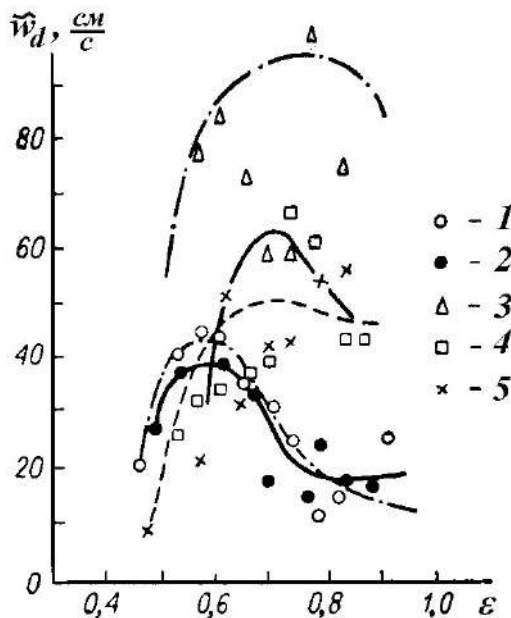


Рис. 4.4.2. Зависимость пульсационных скоростей частиц в псевдооживленном слое от пористости последнего, для различных размеров дисперсных частиц: 1 – 100 мкм; 2 – 153 мкм; 3 – 233 мкм; 4 – 315 мкм; 5 – 477 мкм.

За движением одиночной частицы внутри взвешенного слоя можно следить, если пометить ее каким-либо радиоактивным гамма-излучателем. Поскольку излучение от такого точечного источника распространяется во все стороны с интенсивностью, обратно пропорциональной квадрату расстояния, то расшифровка показаний одного счетчика неоднозначна и необходимо применять несколько счетчиков, расположенных в различных точках реактора. На рис. 4.4.3 изображена схема расположения сцинтилляционных счетчиков при изучении движения радиоактивно помеченных частиц во взвешенном слое.

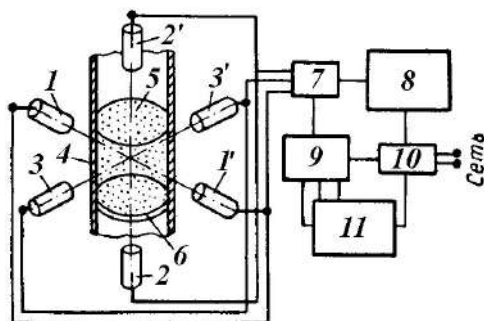


Рис. 4.4.3. Блок-схема установки по изучению движения радиоактивно помеченных частиц во взвешенном слое: 1–3, 1'–3' – датчики; 4 – цилиндр; 5 – слой; 6 – решетка; 7 – распределительная коробка; 8 – выпрямитель; 9 – усилитель; 10 – стабилизатор; 11 – осциллограф.

Методика измерений в этих опытах была довольно сложной и требовала расшифровки одновременно записывающихся шести осциллограмм. Задаваясь интервалом $\Delta t = 0,5$ с, отмечались сотни последовательных положений помеченной частицы по вертикали (ось z) и горизонтали (оси x и y) в реакторе. Примеры полученных траекторий, точнее их проекций в трех взаимно перпендикулярных плоскостях, приведены на рис. 4.4.4 при скорости воздуха $w_c = 1,19$ м/с и интервале времени между точками по оси абсцисс 0,5 с.

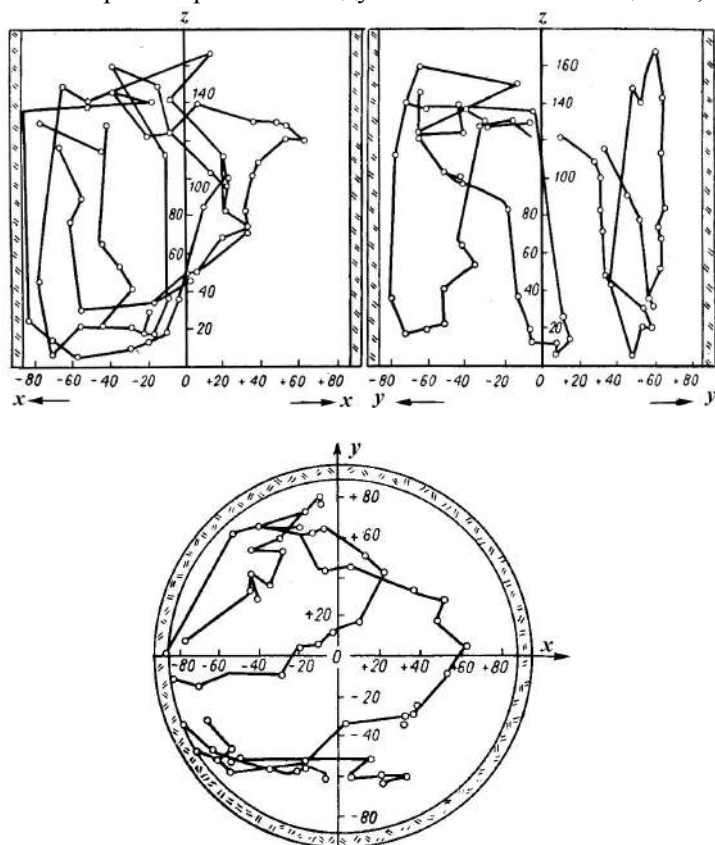


Рис. 4.4.4. Траектория частицы в кипящем слое

Измеряя последовательные разности координат Δz_i , были рассчитаны проекции вертикальной скорости $w_{dz,j} = \Delta z_i / \Delta \tau$, средние на каждом участке. Пример такой записи значений z_i и $w_{dz,j}$ для $N = 100$ последовательных точек приведен на рис. 4.4.5.

Как видно из рис. 4.4.5, распределение вероятностей положительных и отрицательных значений несимметрично. Меченая частица чаще оказывается движущейся вниз, чем вверх, но зато при одинаковых $\Delta \tau$ перескакивает вниз в среднем на меньшие отрезки, чем вверх.

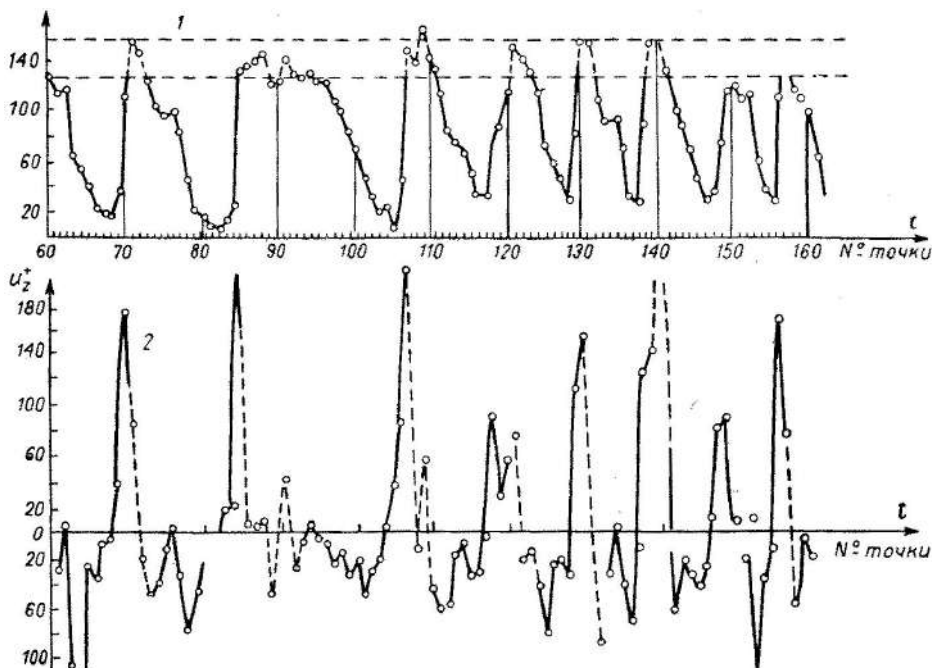


Рис. 4.4.5. График перемещений и скоростей частицы в кипящем слое в вертикальном направлении; 1 – верхний и 2 – нижний уровни поверхности кипящего слоя.

Для характеристики такой несимметрии было предложено ввести отдельное усреднение скоростей движения вверх и вниз. Пусть N_1 есть число интервалов, на которых скорости $w_{dz,j}^+ > 0$, а N_2 – число интервалов, на которых скорости $w_{dz,k}^- < 0$.

Можно ввести две средние величины:

$$\langle w_{dz}^+ \rangle = \frac{1}{N_1} \sum_{j=1}^{N_1} w_{dz,j}^+ \quad \text{и} \quad \langle w_{dz}^- \rangle = \frac{1}{N_2} \sum_{k=1}^{N_2} w_{dz,k}^-, \quad (4.4.8)$$

различные по абсолютной величине. Поскольку общее среднее:

$$\langle w_{dz} \rangle = \frac{1}{N_1 + N_2} \left[\sum_{j=1}^{N_1} w_{dz,j}^+ + \sum_{k=1}^{N_2} w_{dz,k}^- \right] = 0, \quad (4.4.9)$$

то $\frac{\langle w_{dz}^+ \rangle}{|\langle w_{dz}^- \rangle|} = \frac{N_2}{N_1}$ – т. е. положительное среднее $\langle w_{dz}^+ \rangle$ больше отрицательного среднего $|\langle w_{dz}^- \rangle|$ во столько же раз, во сколько отрицательные значения $w_{dz,k}^-$ наблюдаются чаще положительных.

Для конкретной системы скорость начала псевдооживления шариков алюмосиликатного катализатора $l = 2,81$ мм воздушным потоком составляла $w_c = 0,84$ м/с. При скорости потока $w_c = 1,19$ м/с средние скорости движения меченого шарика вверх и вниз составляют $\langle w_{dz}^+ \rangle = 0,077$ м/с и $\langle w_{dz}^- \rangle = -0,031$ м/с, т. е. отличаются по абсолютной величине в 2,5 раза. На рис. 4.4.5 явно заметны повторяющиеся, близкие по форме, циркуляционные циклы. В центральной части слоя частицы быстро поднимаются вверх и даже на некоторое время подбрасываются над верхним уровнем, а затем медленно опускаются вниз, ближе к периферии реактора. Перфорированная газораспределительная решетка имела живое сечение $\sim 2\%$, и из отверстий решетки вверх били мощные воздушные струи. Когда меченый шарик, оседая, попадал в такую струю, он останавливался, не доходя до решетки, и начинал подниматься вверх.

При увеличении скорости воздуха до $w_c = 2,62$ м/с возрастают и циркуляционные скорости движения меченой частицы до $\langle w_{dz}^+ \rangle = 0,12$ м/с и $\langle w_{dz}^- \rangle = -0,13$ м/с и практически сравниваются по абсолютной величине друг с другом. Очевидно, взвешенный слой стал таким неоднородным, что основной циркуляционный контур разбился на ряд параллельных контуров с одинаковой циркуляцией вверх и вниз.

Меченая частица на фоне характерного циркуляционного движения совершает еще хаотические пульсации (см. рис. 4.4.4 и 4.4.5), выделить которые на общем фоне непросто. Довольно сложно, оказывается, однозначно выделить и сами скорости циркуляционных потоков.

Для слежения за одиночной частицей и определения ее кинематических характеристик внутри взвешенного слоя необходимо эту частицу как-то пометить и суметь ее «увидеть» визуально или с помощью приборов. Наиболее просто для этого использовать плоские аппараты *толщиной в одну частицу*, в которых положение и движение меченой частицы не было бы закрыто другими. Такие установки были применены для взвешивания сравнительно крупных частиц воздухом и жидкостью. В первой из этих установок использовали плоскую прозрачную кювету с расстоянием между стенками 35 мм, в которой взвешивали воздухом слой из легких полых типа пинг-понговых шариков диаметром 30 мм. Один или несколько шариков помечали черными полосами или пятнами. Состояние системы фиксировали кинокамерой. Проектируя кинокадры на экран, отмечали последовательные положения центра помеченного шарика и соединяли эти положения отрезками, длины которых Δl_i варьировали от кадра к кадру. В аналогичной установке снимали и обрабатывали последовательные переме-

щения стеклянных и алюминиевых шайб с $l=8-10$ мм и $h=4-5$ мм, взвешенных смесями глицерина с водой при различной вязкости так, что определяющий критерий Архимеда изменялся в очень широких пределах от $\sim 10^3$ до $\sim 10^8$.

На рис. 4.4.6 приведен пример подобной траектории. Однако отношения $\langle \Delta l_i \rangle / \Delta \tau$, где $\Delta \tau$ – интервал съемки между соседними кинокадрами, не могут рассматриваться как скорости частицы на этих интервалах. Если, как показано на том же рис. 4.4.6 штриховой линией, удвоить интервалы $\Delta \tau' = 2\Delta \tau$, то длины новых отрезков $\Delta l'$ не удваиваются, так как каждое $\Delta l'$ является замыкающей треугольника, построенной на двух соседних отрезках Δl_i и Δl_{i+1} , и, следовательно, в общем случае меньше их суммы. Среднее значение $\Delta l / \Delta \tau$ по траектории с ростом интервала $\Delta \tau$ убывает. Подобная картина типична для хаотического диффузионного движения, когда $\Delta l \approx \sqrt{\Delta \tau}$ и $\Delta l / \Delta \tau \approx (1/\sqrt{\Delta \tau})$ возрастает с уменьшением интервала $\Delta \tau$.

Полученная траектория частицы существенно отличается от типичной траектории броуновской частицы. Хаотическое, «дрожащее» движение частицы накладывается на крупномасштабную траекторию, охватывающую почти все поле.

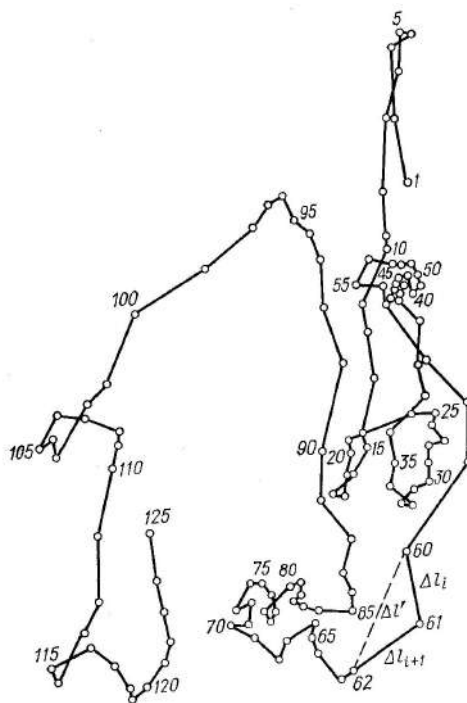


Рис. 4.4.6. Траектория движения центра шарика в двумерной модели

Перемещение частицы явно есть результат совмещения двух механизмов: диффузионного – $\Delta l_o = \sqrt{D_{\text{пер}} \Delta \tau}$, где $D_{\text{пер}}$ – некоторый эффективный коэффициент «диффузии» случайных хаотических пульсационных движений частицы;

циркуляционного – $\Delta l_y = \tilde{w}_y \Delta t$ вдоль крупномасштабной траектории. Так как эти перемещения все время направлены случайно в разные стороны, то складывать их следует как векторы:

$$(\Delta l)^2 = (\Delta l_o)^2 + (\Delta l_y)^2 = D_{nep} \Delta t + \tilde{w}_y^2 (\Delta t)^2.$$

Разделив обе части равенства на Δt , получаем

$$\langle (\Delta l)^2 / \Delta t \rangle = D_{nep} + \tilde{w}_y^2 (\Delta t). \quad (4.4.10)$$

Среднее значение отношения $(\Delta l)^2 / \Delta t$ не является постоянной величиной, как при чистой диффузии, а должно линейно возрастать с интервалом Δt . На рис. 4.4.7 приведен один из графиков, построенных в координатах $\langle (\Delta l)^2 / \Delta t \rangle$ и Δt . Экспериментальные точки довольно хорошо укладываются на прямую линию. Отрезок, отсекаемый этой прямой на оси ординат, дает значение D_{nep} , а тангенс угла наклона – квадрат циркуляционной скорости \tilde{w}_y^2 . Для приведенного примера при $w_c = 4$ м/с было найдено, что $\langle w_d \rangle = 0,061$ м/с и $D = 6,9 \cdot 10^{-4}$ м²/с.

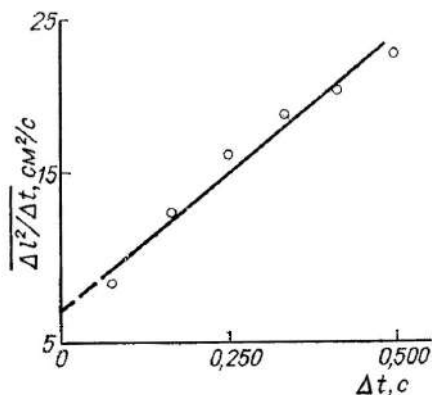


Рис. 4.4.7. К определению параметров модели движения дисперсной частицы в псевдооживленном слое

Аналогичные измерения были проведены в трехмерном слое стеклянных шаров, взвешенных диметилфталатом; показатель преломления которого (1,510) тот же, что и у материала шаров. Шары были не видны, кроме одного или двух специально затемненных (например, облучением γ -квантами). Синхронная съемка двумя киноаппаратами позволила по кинокадрам определять три координаты частицы и находить отдельно составляющие векторы $\vec{\Delta l} / \Delta t$ в осевом, радиальном и тангенциальном направлениях.

Достаточно малые значения средней тангенциальной скорости обосновывают разумность измерения кинематических параметров движения меченой частицы в плоской модели, являющейся как бы вырезкой вдоль диаметра цилиндрического аппарата и препятствующей лишь тангенциальному перемещению. Дополнительным подтверждением является и то, что при обработке полученных данных по соотношению (4.4.10) значения \tilde{w}_y^2 и D_{nep} получились того же порядка, что и в плоской модели при близких значениях критерия Архимеда.

Подведем итоги. Исследования различных авторов показывают, что пульсационные скорости частиц \tilde{w}_d сравнимы со скоростью восходящего потока газа w_c и достигают максимума при значительных расширениях слоя. Возможности описанных выше методик измерения \tilde{w}_d ограничены, особенно в аппаратах крупного масштаба. Поэтому в настоящее время не имеется достаточно подробных систематических исследований и достаточно достоверных корреляций величины \tilde{w}_d с другими параметрами взвешенного слоя.

4.4.2. Эффективная диффузия дисперсных частиц во взвешенном слое

Хаотическое движение молекул в газе обуславливает возникновение диффузии и определяет количественные закономерности этого процесса.

По первому закону Фика

$$J = D \frac{dn}{dx}, \quad (4.4.11)$$

где коэффициент диффузии

$$D = \frac{1}{3} \tilde{w} l^* \quad (4.4.12)$$

определяется величиной хаотической скорости молекул \tilde{w} и длиной их свободного пробега l^* :

$$l^* \ll L. \quad (4.4.13)$$

Иными словами, законы диффузии справедливы в газе лишь постольку, поскольку длина свободного пробега мала по сравнению с масштабом той области, в которой разыгрывается диффузионный процесс и наблюдается заметное изменение концентрации меченых молекул (примеси). С понижением давления длина свободного пробега растет и в сильно разреженных газах $l^* \approx L$. В этой области так называемого физического вакуума молекулы сталкиваются практически только со стенками сосуда, и применимость законов диффузии становится ограниченной. Известно, например, что в этой области при течении Кнудсена разреженного газа через капилляр расход газа не зависит от его среднего давления. В двух сосудах, соединенных узким капилляром и нагретых до разных температур, равновесие потоков молекул устанавливается не при равенстве давлений, а когда давления в сосудах пропорциональны квадратным корням из их абсолютной температуры.

Закон Фика (4.4.11) хорошо выполняется и в другом предельном случае – при макроскопическом перемешивании в турбулентном потоке газа. Коэффициент турбулентной диффузии выражается аналогичной формулой:

$$D_{турб} = \psi \tilde{l} \langle \tilde{w} \rangle, \quad (4.4.14)$$

где $\langle \tilde{w} \rangle$ – средняя скорость турбулентных пульсаций; \tilde{l} – основной масштаб этих пульсаций или путь смещения турбулентного вихря.

Численный множитель ψ несколько зависит от метода усреднения и порядка 10^{-1} . Применимость закона турбулентной диффузии ограничивается тем же

требованием зависимости (4.4.13). Обычно это ограничение всегда выполняется, поскольку путь смещения вихрей \tilde{l} на порядок ниже масштаба потока L .

Как мы указывали выше, пульсационные движения дисперсных частиц во взвешенном слое ближе по своему характеру к турбулентным пульсациям, чем к хаотическому перемещению молекул газа. Поэтому коэффициент скорости перемешивания дисперсных частиц во взвешенном слое должен по своему характеру совпадать с зависимостью (4.4.14) и выражаться формулой

$$D_{nep} = \psi l^* \langle \tilde{w}_d \rangle, \quad (4.4.15)$$

поскольку для взвешенного слоя $\tilde{l} \approx l^* \approx L$.

Несоблюдение во взвешенном слое условия (4.4.13) должно ограничивать применимость понятия диффузии и его закономерностей. Поскольку нас интересует микроскопическое перемешивание, определяемое хаотической составляющей движения одиночной частицы, то данное условие в нашем случае выполнимо. Применение уравнений диффузии к анализу перемешивания в твердой фазе на уровне аппарата в целом $\tilde{l} \approx L$ носит ограниченный характер. Оно будет давать лишь усредненную картину, на фоне которой будут наблюдаться значительные отклонения и «выбросы» концентраций, способные на 100% превышать ожидаемые усредненные значения.

Остановимся на анализе микроскопических аспектов поведения дисперсной системы, если величина вводимой на единицу объема мощности превышает ее необходимое для взвешивания дисперсных частиц минимальное значение. Решение данной задачи возможно в рамках статистической модели, которая впервые была предложена для описания структуры взвешенного слоя «газ – твердые частицы» и обязана своим появлением внешним сходством движения дисперсных частиц и молекул газа. В основу модели положено уравнение для одночастичной функции распределения, нормированной на среднее число частиц в единице объема $f(\vec{x}, \vec{w}, \tau)$. При этом число частиц, находящихся в объеме $d\vec{V} = dx dy dz$ и имеющих скорости в интервале $d\vec{w} = dw_x dw_y dw_z$, равно $f(\vec{x}, \vec{w}, \tau) d\vec{V} d\vec{w}$. Для простоты принимается, что дисперсные частицы представляют собой упругие шарики одинакового размера. Изменение числа частиц в объеме фазового пространства $d\vec{V} d\vec{w}$ происходит за счет конвективного переноса их через границы указанного объема и в результате взаимных столкновений в объеме $d\vec{V}$. Учитывая, что скорость частиц изменяется и под действием сил, зависящих от скорости их движения, и что скорость частицы между двумя столкновениями не остается постоянной, повторяя вывод основного уравнения кинетической теории газов, получим

$$\frac{\partial f}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial x_j} w_j f + \frac{\partial}{\partial w_j} \left(\frac{F_j}{m} f \right) = J(f, f_1), \quad (4.4.16)$$

где F_j – полная сила, действующая на отдельную частицу; $J(f, f_1)$ – скорость изменения числа частиц в объеме фазового пространства в результате их взаимных попарных столкновений с частицами в объеме $d\vec{V}$.

Уравнение (4.4.16) является основным кинетическим уравнением статистической модели, описывающим поведение дисперсных систем на микроскопическом уровне. Определить полную силу, действующую на отдельную частицу, можно на основании уравнения движения дисперсной частицы в локально-однородной среде:

$$\frac{\vec{F}}{m} = \frac{1}{\rho_d + 0.55\rho_c} \left[-\xi(\varphi) \frac{3}{4} \rho_c (\vec{w} - \vec{w}_c) |\vec{w} - \vec{w}_c| - \frac{d\vec{P}}{dx} + \vec{g}(\rho_d - \rho_c) + \vec{F}'(\tau) \frac{6}{\pi l^3} \right].$$

Если теперь учесть, что основной вклад в $\vec{F}'(\tau)$ должны давать только ближайшие соседние частицы, и предположить, что режим обтекания частицы квазистационарный, то поведение $\vec{F}'(\tau)$ во времени с достаточной степенью точности может быть моделировано δ -коррелированным случайным процессом Маркова. Выражение для $\vec{F}'(\tau)$ запишется так:

$$\vec{F}'(\tau) = \frac{\pi l^3}{6} \frac{\partial}{\partial w_j} [D_{jw}],$$

где D_{jw} — коэффициент диффузии в пространстве скоростей динамического состояния частицы.

Смысл коэффициента диффузии в пространстве скоростей сходен со смыслом обычного коэффициента диффузии. Он количественно характеризует малые изменения скорости частицы, которые происходят в результате воздействия на нее потока несущей среды в промежутках между столкновениями. Интеграл столкновений уравнивает энергию сталкивающихся частиц, сохраняя неизменной общую энергию хаотического движения частиц системы. Как показано в работах Бувича, можно с некоторым допущением предположить, что столкновения между частицами непосредственно не имеют места, а взаимодействие между ними осуществляется через посредство среды. В этом случае $J(f, f_1)$ можно принять равным нулю. Два других слагаемых, учитывающих случайные изменения скорости частиц под действием несущей среды, меняют величину энергии хаотического движения частиц за счет действия диссипативных сил. Приводят ее к значению, при котором диссипация энергии в системе компенсируется внешним притоком энергии от несущей среды.

Для практического использования уравнения (4.4.16) в общем случае необходимо: дополнить его уравнениями для расчета скорости относительного движения несущего потока и частиц; выявить связи коэффициента диффузии в пространстве скоростей с параметрами, определяющими макроскопическое состояние системы частиц; установить явный вид функции $J(f, f_1)$.

Решение такой задачи связано с большими математическими трудностями и пока невозможно без введения ряда допущений. Одной из основных статистических характеристик локально-однородной фазы является функция распределения частиц по скоростям, которая может быть получена из (4.4.16). Можно записать основное кинетическое уравнение статистической модели (4.4.16) для

некоторого элементарного объема взвеси, если движение стационарно и прямых столкновений между частицами не происходит, $J(f, f_1) \equiv 0$, то

$$\frac{\partial}{\partial \vec{w}} \left[(\vec{F}_2 - \vec{F}_1) f_o + \frac{\partial}{\partial \vec{w}} (D_w f_o) \right] = 0,$$

где f_o – функция распределения для локально-однородной среды.

Для локально-однородной среды в некотором выделенном объеме можно считать, что скорость несущего потока постоянна по его объему, и в этом случае $\vec{w} = \vec{w}_c + \vec{\bar{w}}$, т. е. в качестве независимой переменной можно использовать скорость движения частицы относительно сплошной среды. Переходя к новой переменной, получим

$$\frac{\partial}{\partial \vec{\bar{w}}} \left[[\vec{F}_2(\vec{\bar{w}}) - \vec{F}_1] f_o + \frac{\partial}{\partial \vec{\bar{w}}} (D_w f_o) \right] = 0, \quad (4.4.17)$$

где \vec{F}_1 – сила, не зависящая от скорости частицы и структуры взвеси, при данных условиях псевдооживления; \vec{F}_2 – сила, зависящая от структуры взвеси:

$$\vec{F}_1 = \left[-\frac{d\vec{P}}{dx} + \vec{g}(\rho_d - \rho_c) \right] \frac{\pi l^3}{6}, \quad \vec{F}_2 = \xi(\varphi) \frac{\pi}{4} l^2 \rho_c (\vec{w} - \vec{w}_c) |\vec{w} - \vec{w}_c|.$$

В результате интегрирования (4.4.17), предполагая, что $f_o(\vec{\bar{w}}) \rightarrow 0$ при $\vec{\bar{w}} \rightarrow \pm\infty$ и D_w не зависит от $\vec{\bar{w}}$, получим следующее уравнение для функции распределения частиц по относительным скоростям:

$$f_o(\vec{\bar{w}}) = B \exp \left\{ -\frac{1}{D_w} (\vec{F}_2 - \vec{F}_1) \vec{\bar{w}} \right\}$$

или

$$f_o(\vec{\bar{w}}) = B \exp \left\{ -\frac{E_2 - E_1}{D_w} \right\}, \quad (4.4.18)$$

где B – постоянная интегрирования.

Согласно (4.4.18), формирование функции распределения частиц по скоростям в двухфазном потоке связано с перераспределением энергии в системе, которая подводится к ней несущим потоком. В качестве аргумента функции (4.4.18) выступает разница между значениями скорости диссипации энергии в пограничных слоях, окружающих частицы E_2 , и скоростью работы диссипации, затрачиваемой на поддержание частиц во взвешенном состоянии. Величина D_w имеет размерность скорости диссипации энергии, и ее можно трактовать как среднюю интенсивность флуктуации в системе.

Аналогичные результаты получены, когда взвешенный слой представляется как диссипативная структура, гидродинамические характеристики которой зависят от механизмов диссипации потока энергии, поступающего от внешнего источника. Для рассматриваемого случая предлагается строить диссипативную функцию в зависимости от пульсационной составляющей относительной скорости фаз $E(\vec{\dot{w}})$. В данном случае диссипативная функция строится в зависимости от полной относительной скорости $E(\vec{\bar{w}})$, но состоит из двух слагаемых. Первое слагаемое есть диссипативная функция для полной относительной ско-

рости $E(\vec{\bar{w}})$, а второе – скорость работы диссипации, затрачиваемой на поддержание частиц во взвешенном состоянии $E(\vec{w}_o)$. Их разность можно считать равной скорости работы диссипации, связанной с пульсациями относительной скорости дисперсных частиц и несущего потока \vec{w} . Вследствие нелинейности функции $E(\vec{w})$ мы имеем

$$E(\vec{w}) = E(\vec{w}_0 - \vec{\bar{w}}) \neq E(\vec{w}_o) - E(\vec{\bar{w}}).$$

Следовательно, введение $E(\vec{w}_0 - \vec{\bar{w}})$ в качестве аргумента функции распределения частиц по скоростям неправомерно. Как было отмечено выше, в качестве $E(\vec{\bar{w}})$ принимается скорость диссипации энергии в пограничных слоях, окружающих частицы дисперсной фазы. При обтекании системы сферических частиц E_2 определяется соотношением

$$E_2(\vec{\bar{w}}) = \xi(\varphi) \frac{\pi}{4} l^2 \rho_c (\vec{w} - \vec{w}_c)^2 |\vec{w} - \vec{w}_c|,$$

где $\xi(\varphi)$ – коэффициент сопротивления частицы при ее осаждении в стесненных условиях.

Скорость диссипации энергии, затрачиваемая на поддержание частиц во взвешенном состоянии, равна

$$E_1(\vec{\bar{w}}) = \left[-\frac{d\vec{P}}{dx} + \vec{g}(\rho_d - \rho_c) \right] \frac{\pi l^3}{6} (\vec{w} - \vec{w}_c).$$

Рассмотрим случай одномерного приближения, когда направление движения дисперсных частиц совпадает с направлением действия силы тяжести. Для дисперсных систем, имеющих место при смешивании дисперсных материалов, величиной градиента давления $d\vec{P}/dx$ в направлении действия силы тяжести можно пренебречь.

$$E_2(\vec{w}) = \xi(\varphi) \frac{\pi}{4} l^2 \rho_c (w - w_c)^2 |w - w_c|, \quad (4.4.19)$$

$$E_1(\vec{w}) = g(\rho_d - \rho_c) \frac{\pi l^3}{6} (w - w_c). \quad (4.4.20)$$

С учетом (4.4.19) и (4.4.20) уравнение для функции распределения частиц по скоростям \vec{w} запишется в виде

$$f_o(\vec{w}) = B \exp \left\{ -\frac{g(\rho_d - \rho_c) \pi l^3 |\vec{w}|}{6 D_w} \left[\left(\frac{\vec{w}}{w_\phi} \right)^2 - \frac{\vec{w}}{|\vec{w}|} \right] \right\},$$

где w_ϕ – скорость относительного движения фаз, рассчитанная с учетом среднего объемного содержания дисперсной фазы:

$$w_\phi = \frac{4(\rho_d - \rho_c) g l}{3 \rho_c \xi(\varphi)}. \quad (4.4.21)$$

Величина w_ϕ может быть рассчитана также через скорость осаждения одиночной частицы и среднее объемное содержание дисперсной фазы ϕ или порозности взвешенного слоя $\varepsilon = 1 - \phi$.

С учетом (4.4.22) получим

$$f_o(\bar{w}) = B \exp \left\{ -\frac{N_{\min}}{D_w} \frac{|\bar{w}|}{w_\phi} \left[\left(\frac{\bar{w}}{w_\phi} \right)^2 - \frac{\bar{w}}{|\bar{w}|} \right] \right\}.$$

Множитель $K^* = N_{\min} / D_w$ представляет собой отношение минимальной мощности, которую необходимо затратить на поддержание дисперсных частиц во взвешенном состоянии, к суммарной скорости диссипации энергии в системе:

$$f_o(\bar{w}) = B \exp \left\{ -K^* \frac{|\bar{w}|}{w_\phi} \left[\left(\frac{\bar{w}}{w_\phi} \right)^2 - \frac{\bar{w}}{|\bar{w}|} \right] \right\}. \quad (4.4.22)$$

Полученная зависимость для распределения частиц по скоростям (см. рис. 4.4.8) характеризует микроскопические аспекты поведения дисперсной системы, где в качестве масштаба длин выступает характерный размер дисперсной частицы. Уравнение (4.4.22) может быть использовано при расчете коэффициента эффективной диффузии частиц во взвешенном слое.

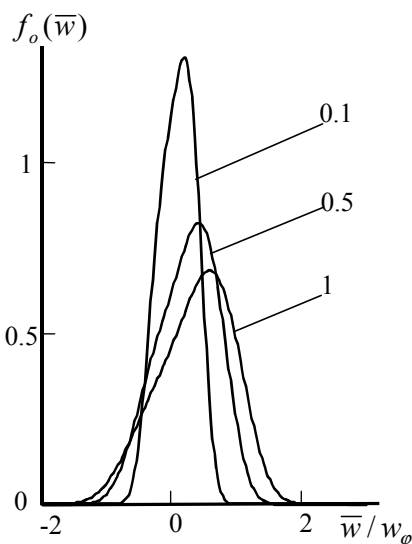


Рис. 4.4.8. Вид функции распределения частиц по скоростям.
Цифры на кривых – значение K^*

В общем случае во взвешенном слое наблюдается общее направленное движение частиц со средней скоростью $\langle w_d \rangle$, на которое накладывается интенсивное хаотическое мелкомасштабное движение отдельных частиц с пульсационной составляющей \tilde{w}_d . Мгновенная скорость движения дисперсной частицы может быть представлена в виде

$$w_d = \langle w_d \rangle + \tilde{w}_d. \quad (4.4.23)$$

С целью упрощения дальнейшего анализа предположим, что имеет место устойчивый режим работы слоя и средняя скорость частиц равна нулю, т. е. поток частиц через любое сечение слоя равен нулю. Такое движение приводит к флуктуациям других величин, характеризующих состояние слоя, в частности к колебаниям объемного содержания дисперсной фазы. Причиной колебаний являются несколько физических процессов, причем вклад каждого из них в общий механизм пульсационного движения фаз еще до конца не выявлен. Взаимодействие отдельных частиц друг с другом происходит не в результате их непосредственного столкновения, а через посредство несущей (сплошной) фазы. При достаточно больших относительных скоростях движения фаз отдельные частицы имеют турбулентные следы, которые могут взаимодействовать как между собой, так и с дисперсными частицами. Оценка пространственного масштаба такого хаотического движения имеет порядок средней длины свободного пробега частиц между столкновениями l_n , а временной масштаб τ порядка величины $l_n / \langle \tilde{w} \rangle$, где $\langle \tilde{w} \rangle$ – средняя по модулю пульсационная скорость частицы.

Хаотическое движение частиц и будет являться причиной их перемешивания в слое, которое может быть описано уравнением диффузии. Коэффициент эффективной диффузии частиц в слое может быть представлен в виде (4.4.14) $D_{nep} \approx l_n \langle \tilde{w} \rangle$. Для устойчивого режима работы слоя, когда крупномасштабная циркуляция дисперсных частиц и жидкости в нем отсутствует, величину l_n можно принять пропорциональной размеру частиц и обратно пропорциональной их объемному содержанию $l_n \approx l/\phi$.

Для расчета $\langle \tilde{w} \rangle$ воспользуемся полученным нами распределением дисперсных частиц по скоростям (4.4.22), исходя из общих представлений о взвешенном слое как о диссипативной структуре. Учитывая характер движения частиц в слое (4.4.23), уравнение (4.4.22) можно записать

$$f_o(\tilde{w}) = B \exp \left\{ -K * \frac{|\tilde{w}|}{w_\phi} \left[\left(\frac{\tilde{w}}{w_\phi} \right)^2 - \frac{\tilde{w}}{|\tilde{w}|} \right] \right\}. \quad (4.4.24)$$

Тогда с точностью до постоянной выражение для $\langle \tilde{w} \rangle$ будет иметь следующее уравнение:

$$\langle \tilde{w} \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{w} \exp \left\{ -K * \frac{|\tilde{w}|}{w_\phi} \left[\left(\frac{\tilde{w}}{w_\phi} \right)^2 - \frac{\tilde{w}}{|\tilde{w}|} \right] \right\} d\tilde{w}}{\int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -K * \frac{|\tilde{w}|}{w_\phi} \left[\left(\frac{\tilde{w}}{w_\phi} \right)^2 - \frac{\tilde{w}}{|\tilde{w}|} \right] \right\} d\tilde{w}} = \frac{w_\phi \int_{-\infty}^{+\infty} x \exp \{ -|x| [x^2 / (K*)^2 - \text{sign}(x)] \} dx}{K * \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \{ -|x| [x^2 / (K*)^2 - \text{sign}(x)] \} dx},$$

или

$$\langle \tilde{w} \rangle = w_\phi (K*)^{-1} 0.37 (K*)^{-2/3} = 0.37 w_\phi (K*)^{-5/3}. \quad (4.4.25)$$

Уравнение (4.4.14), с учетом полученного выражения для средней пульсационной скорости дисперсных частиц (4.4.26), примет вид

$$D_{nep} \approx l_n \langle \tilde{w} \rangle \approx 0.037 l w_\phi (K*)^{-5/3}. \quad (4.4.26)$$

Ввиду достаточной общности приведенного вывода, уравнение (4.4.26) может быть использовано при расчете коэффициента эффективной диффузии в аппаратах самой различной конструкции.

Для однородного взвешенного слоя $w_\phi = w_c$:

$$\langle \tilde{w} \rangle = 0.37 w_c (K^*)^{-5/3}. \quad (4.4.27)$$

С целью проверки правильности полученной зависимости нами были обработаны данные, представленные на рис. 4.4.2. Результаты обработки подтвердили характер зависимости пульсационной скорости дисперсных частиц от скорости сплошной фазы (см. рис. 4.4.9). Имеющиеся экспериментальные данные не позволяют с достаточной для практики точностью вычислить коэффициент пропорциональности в искомом выражении $\tilde{w}_d \approx k w_c / (1 - \phi)$. Можно только предположить, что его значение находится в пределах от 0,5 до 1,5.

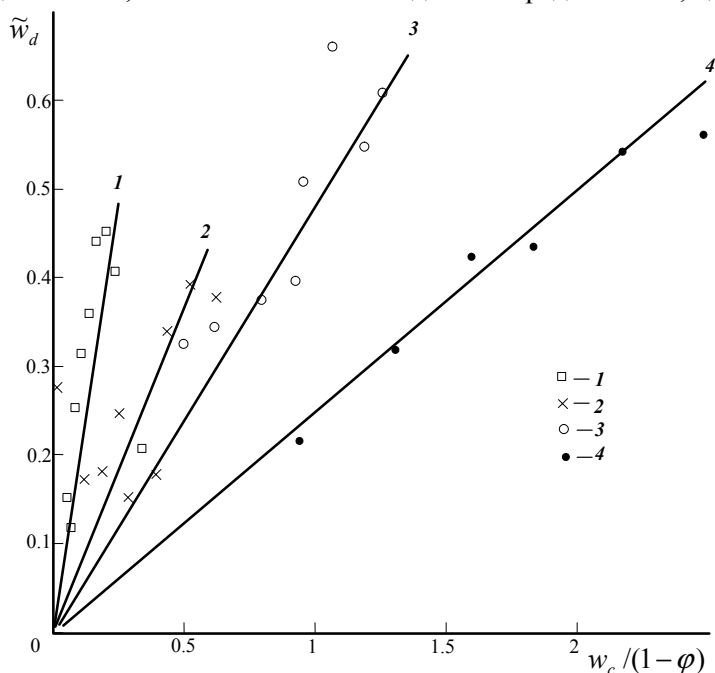


Рис. 4.4.9. Зависимость средней пульсационной скорости частиц во взвешенном слое от скорости газа, для дисперсных частиц различного размера: 1 — 100 мкм; 2 — 153 мкм; 3 — 315 мкм; 4 — 477 мкм.

Подставляя (4.4.27) в выражение для эффективного коэффициента перемешивания, получим

$$D_{nep} \approx 0.037 \frac{l}{\phi(1 - \phi)} w_c (K^*)^{-5/3}. \quad (4.4.28)$$

Подведем итоги. Полученное в данном разделе выражение (4.4.27) совпадает с уравнением (4.4.15), с той лишь разницей, что в первом случае величина l_n рассчитывается исходя из анализа микроскопических аспектов поведения дис-

персной фазы, а в уравнении (4.4.15) – исходя из макроскопических аспектов (масштаба аппарата). При увеличении скорости сплошной фазы наблюдается уменьшение объемного содержания дисперсной фазы и величина l_n/φ может стать сравнимой с размерами аппарата.

4.4.3. Методы исследования диффузии во взвешенном слое

В последующих по времени исследованиях предполагалось, что перемешивание твердой фазы во взвешенном слое происходит по механизму турбулентной диффузии, и в принципе методика замера D_{nep} сводилась к следующему. Во взвешенный слой вводятся тем или иным путем «помеченные» частицы, имеющие те же гидравлические характеристики, что и частицы основного слоя. В зависимости от способа введения помеченных частиц решается задача их нестационарной или стационарной диффузии во взвешенном слое. Результаты решения сравниваются с экспериментальными данными.

Нестационарная диффузия во взвешенном слое. При соответствующих данным условиям опыта начальных и граничных условиях решается дифференциальное уравнение нестационарной диффузии:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = \text{div}(D_{nep} \text{grad} C) \quad (4.4.29)$$

и находится ожидаемое распределение концентрации меченых частиц:

$$C = C_{расч}(\vec{r}, \tau, D_{nep}). \quad (4.4.30)$$

Измеряя получаемое на опыте распределение концентраций

$$C = C_{эсп}(\vec{r}, \tau), \quad (4.4.31)$$

подбирают затем такую величину D_{nep} , при которой совпадение выражения (4.4.30) с (4.4.31) было бы наилучшим. На пути реализации данной технологии определения D_{nep} имеются значительные трудности.

Вернемся к снимкам на рис. 4.4.8. Прерывая процесс на стадии, соответствующей второму фотоснимку, через время τ после начала псевдооживления измеряли относительную долю частиц одного сорта, проникших за это время в другую половину слоя, и рассчитывали коэффициент перемешивания по соотношению

$$\frac{C_A}{C_A + C_B} = \frac{2}{L} \sqrt{\frac{D_{nep} \tau}{\pi}}, \quad (4.4.32)$$

при условии, что $C_A/(C_A + C_B) < 0,15$.

Формула (4.4.32) соответствует начальной стадии чисто диффузионного одномерного перемешивания и предполагает, что относительная концентрация меченых частиц на каждом вертикальном уровне одинакова по всему сечению. Наличие «языков» приводит к очень большим отклонениям от этого предположения, и расчет величины D_{nep} по уравнению (4.4.32) должен давать заметный разброс от опыта к опыту. Усреднение концентрации примеси по объему половины слоя сглаживает этот разброс и позволяет проследить за влиянием различных параметров на величину D_{nep} .

В результате измерений было установлено, что величина D_{nep} прямо пропорциональна диаметру зерен l , а при $l = \text{const} = 10 \text{ мм}$ – величина D_{nep} прямо пропорциональна $w_c / w_{c0} - 1$. Судя по рис. 4.4.8, измерения велись в одной колонке при $L_0 / D_{an} = 8$. Зависимость величины D_{nep} от масштабов аппарата и отношения L_0 / D_{an} не изучались.

Основной практической проблемой является подбор наилучшего метода «пометки» дисперсных частиц и измерений их концентрации в отобранных пробах или непосредственно внутри слоя. Наиболее простым методом пометки частиц является их окраска в определенный цвет, как это делалось в описанных выше опытах. Однако при этом необходимо в отобранной пробе визуально обнаруживать и вручную отделять окрашенные частицы от неокрашенных.

Была испробована «химическая» пометка частиц. Существенным недостатком этого метода является большая длительность обработки и сушки проб. Применение другими исследователями пористых зерен импрегнированных химическим реагентом с последующим химическим анализом пробы обладает тем же недостатком – относительно высокой длительностью заключительной стадии анализа по сравнению с продолжительностью смешения.

Дальнейшего резкого ускорения анализа проб удалось достигнуть при введении магнитно-помеченных частиц. В качестве материала для основного взвешенного слоя использовали узкие ситовые фракции барита с порцией магнетита, имеющего практически ту же плотность ($\rho_d \approx 5400 \text{ кг/м}^3$). Отобранную пробу взвешивали, затем с помощью сильного магнита из нее извлекали магнетит и остаток снова взвешивали. В работах английских авторов применяли смеси частиц меди и никеля и в отобранной пробе магнитом извлекали никель.

Из-за «мажущей» консистенции барита в смеси барит–магнетит часто образуются трудно распадающиеся «языки». В связи с этим в качестве модельной системы использовалось смешивание песка с более тяжелыми, но зато более мелкими эквивалентными по скорости осаждения частицами магнетита. Для изучения перемешивания зерен пористых катализаторов был разработан метод пометки осаждением в них ферромагнитного феррита кобальта.

Ведение магнитно-помеченных частиц позволило авторам, в конце концов, отказаться от забора проб и разработать магнитный метод измерения и записи локальной концентрации этих частиц непосредственно внутри самого взвешенного слоя. В качестве датчика был использован высокочувствительный феррозонд малого размера. Примерная схема измерительной установки с двумя зондами показана на рис. 4.4.10. Когда порция меченых частиц вбрасывается из воронки на верхний уровень взвешенного слоя и диффундирует внутрь последнего, осциллограммы позволяют регистрировать кривую изменения локальной концентрации меченых частиц в области каждого из зондов. На основании полученных данных представляется возможным отсчитать время начала появления меченых частиц на уровне первого, а затем и второго расположенного глубже зонда и рассчитать величину эффективного коэффициента диффузии.

При своей простоте и удобстве описанный магнитный метод не свободен от некоторых принципиальных трудностей.

Во-первых, необходимо очень жестко закреплять сами зонды и реактор. Во-вторых, в отличие от емкостного зонда, феррозонд представляет собой открытую систему, регистрирующую изменения внешнего по отношению к ней магнитного поля. Хотя интенсивность этих воздействий и убывает примерно, как куб расстояния, но все же сильные изменения магнитного состояния кипящего слоя на больших расстояниях могут в некоторой степени исказить более слабые, но важные изменения, происходящие на меньших расстояниях в непосредственной окрестности зонда. Магнитная проницаемость раздробленной системы ферромагнитных частиц представляет собой не вполне определенное понятие, зависящее от степени дробления и взаимного расположения частиц.

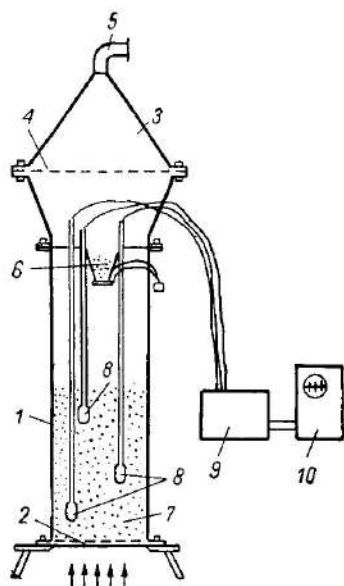


Рис. 4.4.10. Схема измерительной установки: 1 – колонка; 2 – поддерживающая решетка; 3 – колпак с фильтром; 4 – фильтр; 5 – патрубок для присоединения к газопроводу; 6 – воронка; 7 – слой материала; 8 – феррозонды; 9 – измерительный канал; 10 – осциллограф.

Указанные обстоятельства приводят к необходимости очень тщательно обрабатывать получаемые осциллограммы. Высокая чувствительность метода делает его и более чувствительным к различным возмущениям.

Во-вторых, принципиальной трудностью методик применения меченых частиц является необходимость точного нахождения расчетных концентраций по уравнению (4.4.30) и их зависимости от $D_{пер}$. Решение же основного уравнения диффузии (4.4.29) для ограниченной со всех сторон области пространства выражается, как правило, в виде громоздких и мало обозримых функциональных рядов. Поэтому большей частью оказывается удобным использовать решения, получаемые для неограниченной или полуограниченной среды. Подбирать условия опыта такими, чтобы эти приближенные решения еще не слишком заметно отличались от точных решений. Поясним это на конкретном примере.

На рис. 4.4.11 изображена схема одного из наших опытов с «плоским мгновенным источником». На основной слой сверху насыпан тонкий слой примеси с массой на единицу площади m (в $\text{кг}/\text{м}^2$). Ось Oz направлена вниз. В момент

$\tau=0$ слой приводится во взвешенное состояние и примесь меченых частиц начинает диффундировать вниз.

Приближенное решение уравнения диффузии для полуограниченной среды имеет вид

$$C(z, \tau) = \frac{m}{\sqrt{\pi D_{nep} \tau}} \exp \left\{ -\frac{z^2}{4 D_{nep} \tau} \right\}. \quad (4.4.33)$$

Спустя время

$$\tau \ll \frac{L^2}{4 D_{nep}},$$

подача воздуха прекращается, слой разбирается по участкам $0 - z_1$, $z_1 - z_2$, $z_2 - z_3$ и определяется масса на единицу площади на каждом участке и в сумме участков от 0 до z_i . Расчетное значение последней массы должно быть

$$\frac{m_i}{m} = \int_0^{z_i} \exp \left\{ -\frac{z^2}{4 D_{nep} \tau} \right\} \frac{dz}{\sqrt{\pi D_{nep} \tau}} = \Phi(\eta_i),$$

где

$$\Phi(\eta_i) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\eta_i} \exp(-\eta^2) d\eta. \quad (4.4.34)$$

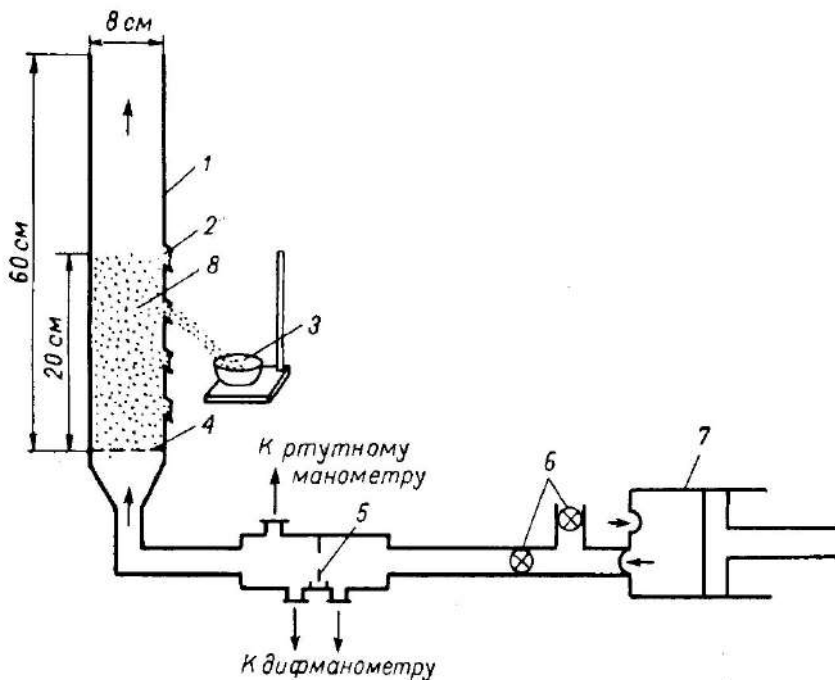


Рис. 4.4.11. Схема экспериментальной установки: 1 — труба из органического стекла; 2 — отверстия для отбора проб; 3 — приемник; 4 — сетка; 5 — диафрагма; 6 — вентили; 7 — компрессор; 8 — кипящий слой.

Есть известный интеграл Крампа (4.4.34), а его аргумент

$$\eta_i = \frac{z_i}{\sqrt{4D_{nep}\tau}},$$

отсюда

$$D_{nep} = \frac{z_i^2}{4\eta_i^2\tau}. \quad (4.4.35)$$

Для каждого измеренного значения m_i/m по таблицам функции Крампа находится соответствующее ему значение аргумента η_i и из уравнения (4.4.35) – расчетная величина эффективного коэффициента диффузии. Величина D_{nep} вычисляется для каждого из измеренных уровней z_i и определяется ее среднее значение. Обычно значение на первом уровне z_1 приходится отбрасывать ввиду того, что в момент начала псевдооживления наверху проскакивает фонтан, искажающий предполагаемую одномерность. Отбрасывать приходится и самый нижний уровень $z_m = l$, так как он не соответствует приближенному аналитическому решению уравнения (4.4.33). Значения же D_{nep} для средних уровней оказываются сравнительно близкими. При интенсивном перемешивании, когда D_{nep} становится большим, предельно допустимое время псевдооживления $\tau_M = L^2/4D_{nep}$ становится меньшим времени практического включения и выключения дутьевого устройства, и после прекращения псевдооживления в колонне обнаруживается почти полное выравнивание концентрации примеси.

Проводились измерения горизонтальной диффузии меченых (окрашенных) гранул удобрений в узких длинных (6 и 10 м) пневматических желобах. При вбрасывании в середине длины желоба в момент $\tau=0$ некоторого небольшого количества окрашенного материала решение уравнения нестационарной диффузии с отражающими стенками при $x = \pm L/2$ имеет вид

$$C(z, \tau) = \frac{Q}{2L\sqrt{\pi D_{nep}\tau}} \sum_n \exp\left\{-\frac{(nL+x)^2}{4D_{nep}\tau}\right\}, \quad (4.4.36)$$

где x – расстояние от середины желоба общей длиной L .

Сопоставление расчетных значений уравнения (4.4.36) с экспериментальными данными позволяет определить величину D_{nep} . Значения этой величины чувствительно реагировали на изменения скорости воздуха и высоты.

В обстановке, соответствующей рис. 4.4.11, слой приводится в состояние псевдооживления заранее, и с момента $\tau=0$ начинается подача примеси на верхний уровень с некоторой почти постоянной скоростью. В этом случае решение имеет вид

$$C(z, \tau) = 2q\sqrt{\frac{\tau}{\pi D}} \exp\left\{-\frac{z^2}{4D\tau}\right\} - \frac{2qz}{D\sqrt{\pi}} \int_{x=\frac{z}{2\sqrt{D\tau}}}^{\infty} \exp(-x^2) dx.$$

Вначале, пока «фронт» примеси не дошел до точки наблюдения, концентрация в этой точке еще мала, но скорость ее возрастания $\partial C/\partial \tau$ увеличивается.

Затем при $\tau_m = z^2 / 2D_{nep}$ имеется точка перегиба $\partial^2 C / \partial \tau^2 = 0$, после которой темп роста концентрации замедляется и

$$C(z, \tau) \rightarrow 2q \sqrt{\frac{\tau}{\pi D_{nep}}}.$$

Оценивая по осциллограмме положение точки перегиба, можно найти

$$D_{nep} = 0,5 \frac{z^2}{\tau_m}.$$

Непрерывная регистрация кривых $C(z, \tau)$ производилась описанным выше магнитным методом.

Во взвешенный слой стеклянных частиц $\langle d \rangle = 0,7$ мм сверху дождем посыпали окрашенные частицы, а снизу с таким же расходом высыпались частицы основного слоя. На глубине $z = 120$ мм под поверхностью периодически через 20 с отсасывались пробы дисперсных частиц весом ≈ 9 г, в которых визуальнo отделялись и пересчитывались окрашенные зерна и их концентрация сравнивалась с расчетной формулой

$$\frac{C}{C_0} = 1 - \Phi \left(\frac{z}{\sqrt{2D_{nep}\tau}} \right).$$

Величина D_{nep} была порядка $0,5-1,0$ см²/с и росла примерно пропорционально скорости газа. При помещении в слой горизонтальных сеток («заторможенные слои») при одинаковом расходе газа наблюдается коэффициент диффузии D_{nep} того же порядка, что и в незаторможенном слое. Более однородный режим при наличии сеток, разбивающих пузыри, позволил в этом случае измерить D_{nep} до более высоких значений скорости потока.

Диффузия в установившемся режиме. Если в каком-либо месте взвешенного слоя (внутри или на границах) непрерывно подавать меченые частицы, а в другом их выводить, то спустя некоторое время установится определенное распределение концентрации $C(\vec{r}, D_{nep})$, по которому можно судить о величине D_{nep} . Само уравнение диффузии (4.4.29) при таком стационарном режиме $dC/d\tau = 0$ примет вид

$$\text{div grad} C = 0 \quad (4.4.37)$$

и не содержит явно коэффициента диффузии. Величина D_{nep} будет входить лишь в граничные условия и тем самым определять расчетную концентрацию $C(\vec{r}, D_{nep})$. Так, например, для точечного источника производительностью Q в безграничном пространстве сферически симметричное решение уравнения (4.4.37) имеет вид

$$C(\vec{r}, D_{nep}) = \frac{Q}{4\pi D_{nep} r}.$$

Измеряя зависимость C от r и определяя среднее значение произведения $rC(r) = A$, можно рассчитать искомую величину:

$$D_{nep} = \frac{Q}{4\pi A}.$$

Обычно в случае непрерывной работы взвешенного слоя, при подаче твердой фазы с одного конца аппарата и выгрузке с другого конца, через аппарат проходит направленный поток твердых частиц с некоторой средней скоростью перемещения $\langle w_{d0} \rangle$. При одномерном движении полный поток меченых частиц через данное сечение \vec{J} будет складываться из двух частей – направленного потока со скоростью $\langle w_{d0} \rangle$ и диффузионного потока, т. е.

$$\vec{J} = \langle w_{d0} \rangle - D_{nep} \text{grad} C.$$

Уравнение нестационарной диффузии (4.4.30) заменится на

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = \text{div}[D_{nep} \text{grad} C - \langle w_{d0} \rangle C] \pm q^*, \quad (4.4.38)$$

где q^* – мощность дополнительных «источников» или «стоков» твердой фазы в аппарате.

При $dC/d\tau = 0$ получится уравнение для стационарного режима. Ищется решение уравнения (4.4.38) в общем случае или для стационарного режима при заданных начальных и граничных условиях с разными значениями D_{nep} . Сопоставляя полученные расчетные кривые с экспериментальными, можно подобрать то значение D_{nep} , при котором совпадение этих кривых наилучшее. В тех случаях, когда движение твердой фазы в аппарате можно считать практически одномерным, под C надо понимать среднюю по сечению концентрацию (в г/см³) или массу, отнесенную к единице длины реактора (в г/см).

Подведем итоги. Широкое применение современных ПЭВМ позволяет в короткий срок перебрать достаточно большое число значений D_{nep} и удовлетворительно решить поставленную задачу идентификации экспериментальных данных. При этом конечные выводы на основе экспериментальных данных должны строиться с учетом имеющихся физических представлений о характере решаемой задачи.

4.4.4. Эффективная вязкость взвешенного слоя

Внутреннее трение в газе обусловлено хаотическим движением и перемешиванием молекул, переносящих с собой из слоя в слой приобретенное ими количество движения в направлении молярных движений слоев. Отсюда закон внутреннего трения:

$$\frac{F}{S} = -\mu \frac{dw}{dx} \quad (4.4.39)$$

и выражение для коэффициента внутреннего трения:

$$\mu = \frac{1}{3} \langle \tilde{w} \rangle \tilde{l} \rho = D\rho, \quad (4.4.40)$$

где \tilde{l} – длина свободного пробега молекул; $\langle \tilde{w} \rangle$ – средняя скорость их хаотического движения; ρ – плотность газа.

При турбулентном перемешивании перенос количества движения осуществляется целыми вихрями из группирующихся и расходящихся частиц и турбулентная вязкость определяется формулой:

$$\mu_{турб} = \chi l^* \langle \tilde{w} \rangle \rho_{cl}, \quad (4.4.41)$$

где l^* – путь смещения; $\langle \tilde{w} \rangle$ – средняя скорость турбулентных пульсаций; χ – численный коэффициент порядка 10^{-1} .

Несколько иным является механизм внутреннего трения в жидкости при отсутствии турбулентных пульсаций. Благодаря тому, что молекулы жидкости в основном колеблются около временных положений равновесия и лишь изредка перескакивают с места на место, механизм переноса количества движения из слоя в слой для внутреннего трения играет лишь подчиненную роль. Главную же роль играют силы взаимодействия между соприкасающимися молекулами соседних слоев, сдвигающимися благодаря различной скорости их молярного движения. Поэтому в жидкости μ не прямо пропорционально D , а обратно пропорционально и не выражается столь простой формулой, как (4.4.40). Для разреженного взвешенного слоя должен быть справедлив турбулентный механизм с оговорками, аналогичными турбулентной диффузии, и выполняться соотношение (4.4.41). Однако при приближении к критической скорости w_{c0} пульсационные скорости $\tilde{w}_d \rightarrow 0$, но вязкость взвешенного слоя при его остановке должна стремиться не к нулю, а возрастая до очень больших значений. При этом механизм внутреннего трения должен приближаться к вязкости пластической среды.

Измерения вязкости взвешенного слоя проводились многими исследователями и различными методами. Вопрос о выборе метода измерения является весьма трудным.

Во-первых, как известно по измерениям аналогичных систем в устойчивых суспензиях, последние не являются чисто ньютоновскими жидкостями, и их вязкость зависит от скорости [9].

Во-вторых, из определения коэффициента внутреннего трения по закону (4.4.39) следует, что величина μ определяет распределение массовых скоростей $\vec{w}(\vec{r})$, вызванное движением в ней твердых тел. Введение эффективной вязкости μ эквивалентно утверждению, что эти массовые движения описываются уравнениями, тождественными уравнениями движения обычной вязкой жидкости:

$$\rho_{cl} \left[\frac{\partial \vec{w}}{\partial \tau} + (\vec{w} \vec{\nabla}) \vec{w} \right] = \mu \nabla^2 \vec{w} \quad (4.4.42)$$

с граничным условием на поверхности твердых тел $w_n = 0$.

Если \vec{w} – направленная скорость за вычетом пульсаций, то возникающие за их счет вязкие напряжения объединяются со слагаемыми правой части уравнения (4.4.42). В этом случае μ – суммарная турбулентная вязкость.

Непосредственное измерение распределения усредненных массовых скоростей во взвешенном слое практически невозможно. Поэтому о величине μ можно судить лишь по интегральной силе сопротивления движению тел, дви-

жущихся со скоростью \vec{w}_0 во взвешенном слое (лопастей мешалок, ротора вискозиметра, падающего шарика и т. п.). Вследствие нелинейности исходных уравнений (4.4.42) при увеличении \vec{w}_0 в несколько раз не наблюдается прямо пропорционального возрастания $\vec{w}(\vec{r})$ во всех точках слоя и соответственного возрастания во столько же раз суммарной силы сопротивления \vec{F}_0 .

Такая пропорциональность должна существовать лишь пока силы инерции внутри слоя малы по сравнению с силами трения, т. е.

$$\rho_{cl} |(\vec{w}\vec{\nabla})\vec{w}| \ll |\mu \nabla^2 \vec{w}|.$$

Отношение сил инерции к силам трения характеризуется критерием Рейнольдса для слоя. Если l_0 – размер движущегося тела, то получим

$$\text{Re}_{cl} = \frac{w_0 l_0 \rho_{cl}}{\mu}. \quad (4.4.43)$$

При $\text{Re}_{cl} > 1$ пропорциональность $F_0 \approx w_0$ нарушается, а при достаточно больших значениях Re_{cl} следует ожидать практической независимости F_0 от μ и пропорциональности $F_0 \approx w_0^2$.

Эффективная вязкость μ определяет сопротивление движению тел, погруженных во взвешенный слой, лишь при малых значениях критерия Re_{cl} , т. е. при малых скоростях движения. В свою очередь, при измерении вязкости взвешенного слоя по движению погруженных в него тел следует проводить эти измерения при малых скоростях. Это обстоятельство часто не учитывалось, и измерения μ велись при $\text{Re}_{cl} > 1$.

Практически ряд исследователей пытались обойти эту трудность, задавая w_0 и l_0 вращающихся тел и измеряя силу F_0 или момент сопротивления слоя, а затем градуировали зависимость $F_0 = F_0(\mu)$, погружая вискозиметр в жидкости с известными μ . Из уравнения (4.4.43) следует, что равенство $\mu = \mu_c$ еще не обеспечивает равенство $\text{Re}_{cl} = \text{Re}_c$, т. е. одинаковости гидродинамической обстановки. Необходимо еще потребовать равенства $\rho_{cl} = \rho_c$, что обычно выполняется не вполне точно.

В-третьих, при измерении вязкости взвешенного слоя надо учитывать возможность сильного нарушения структуры и свойств слоя при помещении в него движущегося тела «вискозиметра». Измерения вязкости методом падающего шарика соответствуют другой задаче – установлению закономерностей падения или всплывания тел во взвешенном слое из мелких частиц.

Как известно, для шарика, движущегося в вязкой жидкости со скоростью w_0 , сила сопротивления при малых значениях критерия Рейнольдса выражается законом Стокса:

$$F_0 = 3\pi\mu l_0 w_0. \quad (4.4.44)$$

При установившемся падении тяжелого шарика весом G $w_0 = \text{const}$ при $F_0 = G$, измеряя эту установившуюся скорость, можно рассчитать величину вязкости среды:

$$\mu = \frac{G}{3\pi l_0 w_0}. \quad (4.4.45)$$

В кипящем слое с плотностью $\rho_n = \rho_d(1 - \varepsilon)$ под G следует понимать не истинный вес шарика $G_{ист}$, а кажущийся с поправкой на закон Архимеда:

$$G = G_{ист} - \rho_n \frac{\pi}{6} l_0^3. \quad (4.4.46)$$

В принципе наличие восходящего потока газа должно давать некоторую дополнительную силу трения о поверхность шара, поддерживающую последний. При размерах шара, намного превышающих размеры частиц, взвешенных потоком, эта дополнительная поддерживающая сила должна быть ничтожно мала по сравнению с $G_{ист}$. Такой метод определения был использован для измерения вязкости взвешенных слоев угольных частиц в воде и для взвешенных слоев из частиц песка в воздухе. Падающий стальной шарик был помечен радиоактивным изотопом, и с помощью счетчиков отмечалось его прохождение между двумя заданными уровнями. В первом случае использовались сравнительно узкие трубки и при расчете по формуле (4.4.45) вводили поправку на стесненность падения шарика, установленную ранее таким же радиометрическим методом на смесях глицерина с водой известной вязкости. При тех же режимах псевдооживления им производились измерения роторным вискозиметром с перфорированным ротором.

Значения μ , рассчитанные по падению шарика, оказались в хорошем согласии со значениями μ , измеренными роторным вискозиметром. При падении же радиоактивно помеченных угольных частиц, размеры которых лишь в 2–3 раза превышали размеры частиц самой суспензии, расчетное значение μ повысилось за счет трения падающего тела о частицы суспензии и столкновения с ними.

Аналогичные измерения в песчаных аэровзвешах дали зависимость скорости падения стальных шариков (d_0 от 6 до 25 мм) по оси колонки от их диаметра вида

$$w_0 = -w^* + \frac{1}{\mu} \frac{g l_0^2 (\rho_{ш} - \rho_{сл})}{18}, \quad (4.4.47)$$

отличающуюся от закона Стокса дополнительным слагаемым w^* . Величина w^* характеризует собой скорость подъема двухфазного потока по оси взвешенного слоя. Напомним, что в относительно узких колонках всегда наблюдается циркуляция взвешенного слоя вверх по оси колонки и вниз у стенок. Для снижения величины критерия Рейнольдса целесообразно пойти на искусственное снижение скорости падения w_0 , используя дополнительные силы F_g , противодействующие силе тяжести, и рассчитывая μ из соотношения

$$\mu = \frac{G - F_g}{3\pi l_0 w_0}, \quad (4.4.48)$$

более общего, чем (4.4.45). Сила F_g должна быть такова, чтобы разность $G - F_g$ была на 1–2 порядка ниже, чем G . При больших значениях критерия Рейнольдса уравнение (4.4.48) должно быть заменено соотношением

$$F_{comp} = G - F_g, \quad (4.4.49)$$

и установка подобного типа должна позволять задавать величину силы сопротивления и измерять ту скорость падающего шарика w_0 , при которой установится данное значение F_{comp} . Можно определить закон сопротивления падению шара во взвешенном слое:

$$F_{comp} = F(w_0) \quad (4.4.50)$$

во всем интервале изменения определяющих параметров. Поскольку таких параметров, влияющих на структуру взвешенного слоя и его взаимодействие с движущимся телом, очень много, то желательно предварительно оценить характер и степень их влияния. Известны попытки использовать для этой цели анализ размерностей. Общий вид зависимости (4.4.50) до настоящего времени еще не установлен.

Сопоставим коэффициенты переноса во взвешенном слое. Если движение твердой фазы во взвешенном слое носит турбулентный характер, то величина пульсационной скорости определяет скорость связанных с твердой фазой явлений переноса – диффузии и перемешивания, а также эффективной вязкости. Для эффективного коэффициента диффузии твердых частиц мы вывели теоретическое соотношение (4.4.14) $D_{nep} = \psi L \tilde{w}_d$. Для вязкости взвешенного слоя должно выполняться соотношение (4.4.41) $\mu = \chi L \tilde{w}_d \rho_d \phi$. Для оценки справедливости этих соотношений была поставлена серия измерений величин \tilde{w}_d , D_{nep} , μ , ϕ в одних и тех же системах при различных скоростях потока.

На рис. 4.4.12 приведены результаты одной из таких серий для взвешенного слоя кварцевого песка со средним диаметром $l = 100$ мк в лабораторном аппарате диаметром $D_{an} = 80$ мм.

С увеличением скорости потока w_c объемная концентрация твердой фазы $\phi = 1 - \varepsilon$ монотонно падает, а пульсационная скорость \tilde{w}_d измерена методом турбулиметра и имеет максимум порядка 0,4 м/с. Их произведение $\tilde{w}_d \phi$ должно, следовательно, тоже проходить через максимум.

Измерения коэффициента перемешивания, выполненные методом плоского источника с засыпкой на верхний уровень тонкого слоя бихромата калия, показывают рост D_{nep} со скоростью потока до максимума w_c . При более высоких, чем $30 \text{ см}^2/\text{с}$ значениях D_{nep} применявшаяся методика величину и положение максимума измерить не позволила. Отношение $D_{nep}/L \tilde{w}_d = \phi$ в этих и других опытах несколько колебалось. При выборе в качестве основного масштаба радиуса колонки $R = L = 4$ см величина константы ϕ оказалась порядка 0,1.

Измерения эффективной вязкости μ в данной системе производили роторным вискозиметром с перфорированным ротором. Измерения для этой системы были выполнены в области падения \tilde{w}_d и ϕ , а также их произведения. Отношение $\mu/(R \tilde{w}_d \rho_d \phi) = \chi$ в этих и других опытах в среднем составляло около 0,01.

Проведенное сопоставление подтверждает справедливость положения об общности механизма явлений переноса в кипящем слое. Сравнительно низкое

значение множителя χ на порядок ниже ожидаемых и связано с некоторой анизотропией циркуляционных потоков в узких лабораторных колонках. Интенсивность циркуляционных потоков вдоль оси для относительно узкого аппарата примерно на порядок выше, чем в перпендикулярном направлении.

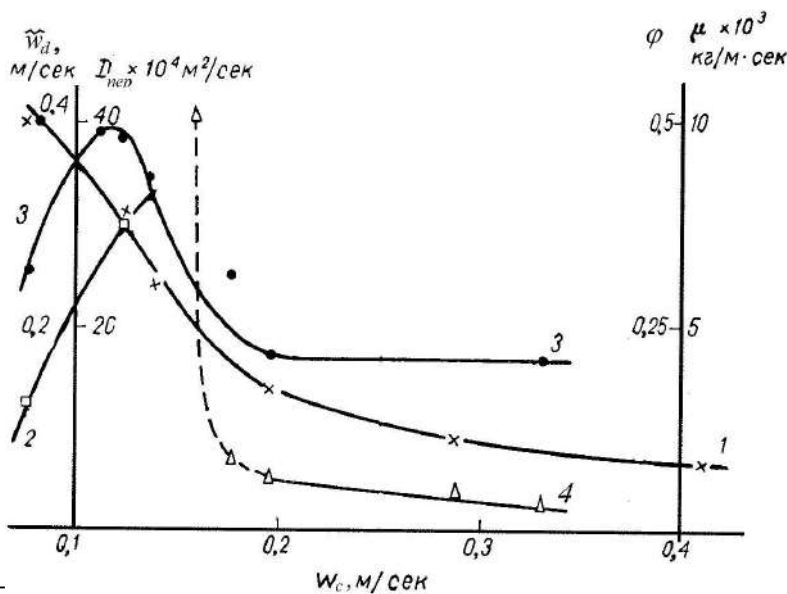


Рис. 4.4.12. Зависимость коэффициентов переноса от скорости потока. 1 – объемная концентрация твердой фазы; 2 – эффективный коэффициент диффузии; 3 – пульсационная скорость частиц; 4 – эффективная вязкость.

Рассматривая с этой точки зрения описанную серию измерений, следует отметить, что турбулиметр колебался в вертикальном направлении и, следовательно, измерял $\tilde{w}_{d,вер}$. Измерения эффективной диффузии методом плоского источника также велись в вертикальном направлении, и значение константы $\varphi \approx 0,1$ получилось ожидаемого порядка. Вращение же ротора производилось в горизонтальном направлении, и в соотношение (4.4.41) должна была входить величина $\tilde{w}_{d,гор}$. Полученное значение $\chi \approx 0,01$ можно тогда рассматривать как подтверждение того, что в данных условиях $\tilde{w}_{d,гор} \approx 0,1 \tilde{w}_{d,вер}$.

С учетом полученного выражения для средней пульсационной скорости дисперсных частиц (4.4.26) может быть предложено следующее выражение для расчета вязкости взвешенного слоя:

$$\mu = 0,0037 L p_d \varphi w_c (K^*)^{-5/3}, \quad (4.4.51)$$

которое можно использовать при расчете вязкости слоя дисперсных частиц в смесителях с перемешивающими устройствами самой различной конструкции. Вместо скорости сплошной фазы w_c необходимо использовать скорость частиц дисперсного материала w_ϕ .

Подведем итоги. Полученные в данном разделе результаты подтверждают правильность выдвинутых физических представлений о характере процессов переноса во взвешенных слоях и могут явиться основой расчета смесителей самых различных конструкций.

4.4.5. Время пребывания дисперсных частиц во взвешенном слое

Анализ уравнения (4.4.39) позволяет разобрать еще один важный для смешивания вопрос о времени пребывания отдельных дисперсных частиц в аппарате. Рассмотрим одномерную задачу без объемных источников и стоков:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = D_{\text{неп}} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \langle w_{d0} \rangle \frac{\partial C}{\partial z}. \quad (4.4.52)$$

Пусть в начальный момент $\tau = 0$ меченые частицы в смесителе отсутствовали, т. е. $C(z, 0) = 0$ при $0 \leq z \leq L$. Далее за короткий промежуток времени $\Delta \tau$ на входе в аппарат подается импульс из m меченых частиц.

Решая уравнение (4.4.52), мы должны найти, какая доля поданных частиц $p(\tau) = M(\tau)/m$, спустя время τ , выйдет за пределы аппарата, т. е. имеет вероятность $p(\tau)$ находиться в смесителе время, меньшее или равное τ . Величина $\pi(\tau) = dp(\tau)/d\tau$ будет представлять собой дифференциальную вероятность времени τ пребывания меченой частицы в аппарате (на единицу интервала времени $d\tau = 1$). Поскольку меченые частицы ничем, кроме пометки, не отличаются от остальных, то величина $dp(\tau) = \pi(\tau)d\tau$ представляет собой вероятность того, что время пребывания любой данной частицы в аппарате заключено в интервале от τ до $\tau + d\tau$.

Характер протекания этого процесса зависит от двух характеристических времен: $\langle \tau \rangle = L/\langle w_{d0} \rangle$ – среднего времени пребывания частиц в аппарате и $\tau_D = L^2/D_{\text{неп}}$ – среднего времени их диффузионного перемешивания и безразмерного отношения этих времен:

$$\lambda = \frac{\tau_D}{\langle \tau \rangle} = \frac{\langle w_{d0} \rangle L}{D_{\text{неп}}}.$$

Если перемешивание происходит достаточно медленно и $\tau_D \gg \langle \tau \rangle$, а $\lambda \gg 1$, то в уравнении (4.4.52) можно пренебречь первым слагаемым в правой части и оно примет вид

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = -\langle w_{d0} \rangle \frac{\partial C}{\partial z}.$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$C(z, \tau) = f(z - \langle w_{d0} \rangle \tau),$$

где $f(z)$ – форма поданного импульса в начальный момент времени $\tau = 0$.

В отсутствие перемешивания поданный в аппарат импульс (и каждая отдельная частица в нем) перемещается параллельно самому себе с постоянной скоростью $\langle w_{d0} \rangle$. Интегральная функция распределения $p(\tau)$ имеет характер-

ный для режима «идеального вытеснения» вид «ступеньки»: при $\tau < \langle \tau \rangle$ $p(\tau) = 0$, а при $\tau > \langle \tau \rangle$ $p(\tau) = 1$.

Во втором предельном случае очень интенсивного перемешивания, когда $\tau_D \ll \langle \tau \rangle$ и $\lambda \ll 1$, предварительно проинтегрируем обе части равенства (4.4.38) по длине аппарата. Тогда

$$\frac{d}{d\tau} \int_0^L C(z, \tau) dz = \left[D_{nep} \frac{\partial C}{\partial z} - \langle w_{d0} \rangle C \right]_{z=L} - \left[D_{nep} \frac{\partial C}{\partial z} - \langle w_{d0} \rangle C \right]_{z=0} = -J_{z=L} + J_{z=0}.$$

При $D_{nep} \rightarrow \infty$ мы должны считать, что $dC/dz \rightarrow 0$, т. е. концентрация примеси внутри вдоль всего аппарата одинакова $C(z, \tau) = C(\tau)$. Произведение $D_{nep} dC/dz$ тогда становится неопределенностью.

В начальный момент подавали импульс, и примесь мгновенно распределилась по всему смесителю с постоянной концентрацией $C_n = m/LS$. С этого момента примесь больше не подается и

$$J_{z=0} = \left[D_{nep} \frac{\partial C}{\partial z} - \langle w_{d0} \rangle C \right]_{z=0} = 0.$$

Поток же на выходе остается только конвекционным, т. е. $J_{z=L} = -\langle w_{d0} \rangle C$. Учитывая эти обстоятельства, перепишем последнее уравнение:

$$\frac{dC}{d\tau} = -\frac{\langle w_{d0} \rangle}{L} C.$$

Его решение с учетом начального условия будет

$$p(\tau) = \frac{C_n - C(\tau)}{C_n} = 1 - \exp\left\{ \frac{\langle w_{d0} \rangle \tau}{L} \right\} = 1 - \exp\left\{ \frac{\tau}{\langle \tau \rangle} \right\}.$$

Для промежуточных значений $\lambda \approx 1$, когда время смешения сравнимо со средним временем пребывания частиц в смесителе, аналитическое решение уравнения (4.4.52) приводит к довольно громоздким выражениям. Поэтому для математического описания прибегнем к искусственной модели и разделим аппарат на $n+1$ равных участков. Внутри каждого участка считают, что происходит идеальное смешение дисперсных частиц, а от каждого участка к следующему – как бы идеальное вытеснение через разделяющую их границу. Решая получающуюся последовательность уравнений типа:

$$\begin{aligned} \frac{dC_0}{d\tau} &= -\frac{(n+1)\langle w_{d0} \rangle}{L} C_0, \\ \frac{dC_k}{d\tau} &= -\frac{(n+1)\langle w_{d0} \rangle}{L} (C_{k-1} - C_k), \quad k = 1, 2, 3, \dots, n, \end{aligned}$$

находим, что

$$C_k(\tau) = \frac{C_n}{k!} \left[\frac{(n+1)\langle w_{d0} \rangle \tau}{L} \right]^k \exp\left[-\frac{(n+1)\langle w_{d0} \rangle \tau}{L} \right]$$

и

$$p(\tau) = 1 - \exp\left\{ -\frac{(n+1)\langle w_{d0} \rangle \tau}{L} \right\} \sum_{k=0}^{k=n} \frac{1}{k!} \left[\frac{(n+1)\langle w_{d0} \rangle \tau}{L} \right]^k. \quad (4.4.53)$$

Полученные интегральные функции распределения вероятности имеют следующий характер. При $n=0$ они дают режим идеального смешения. При $n > 0$ – это кривые, точка перегиба которых

$$\tau_{nep} = \frac{L}{\langle w_{d0} \rangle} \frac{n}{n+1} = \langle \tau \rangle \frac{n}{n+1}$$

с ростом n приближается $\langle \tau \rangle$. При $n \rightarrow \infty$ мы в пределе получим ступеньку идеального вытеснения.

Деление смесителя на целое число «ячеек» идеального смешения, конечно, весьма условно. Для оценки будем считать, что такой секцией может служить участок $L/(n+1)$, внутри которого время перемешивания $\tau_{D,n} = L^2/(n+1)^2 D_{nep}$ в 11 раз короче среднего времени пребывания $\langle \tau_n \rangle$, т. е.

$$\frac{L}{(n+1)\langle w_{d0} \rangle} = \frac{11L^2}{(n+1)^2 D_{nep}} \text{ и } n = 10 \frac{L\langle w_{d0} \rangle}{D_{nep}}.$$

Иными словами, если интегральное распределение вероятностей соответствует кривой (4.4.53) с каким-то определенным значением $n > 10$, то можно оценить величину эффективного коэффициента перемешивания твердой фазы: $D_{nep} \approx L\langle w_{d0} \rangle 10/n$.

Подведем итоги. В зависимости от среднего времени пребывания частиц в аппарате и среднего времени их диффузионного перемешивания возможны самые различные режимы работы смесителя. Если среднее время пребывания частиц в аппарате значительно больше, чем среднее время их диффузионного перемешивания, то имеет место режим идеального вытеснения. В противном случае характер движения дисперсных частиц приближается к режиму идеального вытеснения. Однако на практике имеют место и промежуточные режимы, которые более соответствуют перемешиванию и движению твердой фазы в секционированных аппаратах с перетоками. В этом случае с увеличением числа секций уменьшается разброс времени пребывания отдельных дисперсных частиц в аппарате и наблюдается переход от режима идеального смешения к режиму идеального вытеснения.

ИСПОЛЬЗОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Веригин А. Н. Химико-технологические агрегаты. Системный анализ при проектировании / А. Н. Веригин, С. А. Малютин, Е. Ю. Шашхин. – СПб. : Химия, 1996. – 256 с.
2. Веригин А. Н. Химико-технологические агрегаты. Имитационное моделирование / А. Н. Веригин, В. Н. Федоров, В. С. Данильчук. – СПб. : СПбГУ, 1998. – 218 с.
3. Веригин А. Н. Химико-технологические агрегаты конденсационного улавливания пыли / А. Н. Веригин, В. Н. Федоров, С. А. Малютин. – СПб. : СПбГУ, 2000. – 336 с.
4. Веригин А. Н. Химико-технологические агрегаты механической обработки дисперсных материалов / А. Н. Веригин, А. И. Вареных, В. Г. Джангирян, А. Г. Ишутин. – СПб. : СПбГУ, 2002. – 482 с.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	3
ВВЕДЕНИЕ	4
ГЛАВА 1. ОСНОВЫ СОЗДАНИЯ ОБЪЕКТОВ ТЕХНИКИ	28
1.1. Моделирование	29
1.1.1. Проблематика моделирования	30
1.1.2. Модели структуры потоков	35
1.1.3. Стохастические модели	61
1.1.4. Метод Монте-Карло в инженерном приложении	86
1.2. Управления качеством объектов техники	104
1.2.1. Производство дисперсных материалов и изделий на их основе	104
1.2.2. Современные концепции совершенствования объектов техники	107
1.2.3. Управление и его характеристики	115
1.2.4. Стратегии принятия управляющих решений	121
1.3. Химико-технологический агрегат как объект проектирования	129
1.3.1. Обоснование выбора объекта проектирования	129
1.3.2. Особенности химической техники	133
1.3.3. Структура первичной семантической информации	137
1.3.4. Обобщенная модель как вторичная семантическая информация	145
ГЛАВА 2. КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ДИСПЕРСНЫЕ МАТЕРИАЛЫ	152
2.1. Особенности структуры	152
2.2. Морфология	176
2.3. Свойства дисперсных материалов	189
2.4. Распределение дисперсных частиц по размерам	198
2.4.1. Методы анализа дисперсного состава материала	198
2.4.2. Критерии качества разделения дисперсных материалов	210
2.5. Дисперсный материал как объект сушки	218
2.6. Методы усреднения свойств дисперсных материалов	229
2.6.1. Среднее значение признака	229
2.6.2. Средние аналитические значения признака	232
2.6.3. Средние неаналитические (позиционные) значения признака	237
2.6.4. Общие свойства средних величин	240
2.7. Методы контроля качества дисперсных материалов	242
2.7.1. Измерение химического состава	242
2.7.2. Неконтактный метод измерения влажности	245
2.7.3. Методы и средства контроля дисперсного состава материалов	247
ГЛАВА 3. ДИСПЕРСНЫЕ СИСТЕМЫ	256
3.1. Дисперсные системы аэрозольных частиц	256
3.1.1. Частицы аэрозоля в атмосфере	256
3.1.2. Фрактальная размерность и дисперсные системы	260
3.1.3. Описание свойств дисперсных систем	268
3.1.4. Модель дисперсной системы со случайным распределением частиц	272
3.1.5. Кинетика конденсационного роста аэрозольных частиц	282
3.1.6. Модель конденсации как неоднородная цепь Маркова	289

3.2. Образование дисперсных систем	299
3.2.1. Фазовый переход из газообразного в жидкое состояние	300
3.2.2. Скорость зародышеобразования	307
3.2.3. Вероятность образования зародышей при конденсации	315
3.2.4. Стохастическая теория кинетики зародышеобразования	324
3.3. Испарение и рост капель	327
3.3.1. Уравнение Максвелла для скорости испарения капли	327
3.3.2. Время жизни капли	331
3.3.3. Рост капель из чистых паров	334
3.3.4. Рост и испарение движущихся капель	337
3.4. Броуновское столкновение и диффузия частиц	338
3.4.1. Теория броуновского движения Эйнштейна	339
3.4.2. Особенности броуновского движения	342
3.4.3. Блуждание не слишком малых частиц	347
3.4.4. Уравнение Фоккера–Планка. Гидродинамическое приближение	350
3.5. Коагуляция частиц	354
3.5.1. Особенности коагуляции	355
3.5.2. Коагуляция монодисперсных сферических частиц. Приближение Смолуховского	357
3.5.3. Коагуляция в движущейся среде	362
3.5.4. Дифференциальное уравнение коагуляции	367
ГЛАВА. 4. ГИДРОДИНАМИКА ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ	370
4.1. Динамика частиц	370
4.1.1. Сопротивление среды	370
4.1.2. Движение в вязкой среде	376
4.1.3. Силы, действующие на частицу в потоке газа	380
4.2. Особенности движения газовзвесей	386
4.2.1. Турбулентность, ее свойства и характеристики	386
4.2.2. Турбулентный поток в трубах и каналах	393
4.2.3. Движение мелких частиц в турбулентном потоке	402
4.3. Гидродинамика аппаратов	415
4.3.1. Гидродинамические режимы работы аппаратов	415
4.3.2. Псевдооживленный слой	422
4.3.3. Фонтанирующий слой	442
4.3.4. Виброкипящий слой	456
4.3.5. Транспорт систем «газ – дисперсные частицы»	493
4.4. Явления перемешивания дисперсных частиц	499
4.4.1. Движение дисперсных частиц во взвешенном слое	500
4.4.2. Эффективная диффузия дисперсных частиц во взвешенном слое	509
4.4.3. Методы исследования диффузии во взвешенном слое	517
4.4.4. Эффективная вязкость взвешенного слоя	523
4.4.5. Время пребывания дисперсных частиц во взвешенном слое	529
ИСПОЛЬЗОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА	532

*Александр Николаевич ВЕРИГИН,
Виталий Сергеевич ДАНИЛЬЧУК,
Николай Александрович НЕЗАМАЕВ*

**МАШИНЫ И АППАРАТЫ ПЕРЕРАБОТКИ
ДИСПЕРСНЫХ МАТЕРИАЛОВ
ОСНОВЫ ПРОЕКТИРОВАНИЯ**

Учебное пособие

Под редакцией профессора А. Н. Веригина

Зав. редакцией
естественнонаучной литературы *М. В. Рудкевич*
Ответственный редактор *Т. С. Спирина*
Выпускающие *Т. А. Кошелева, С. Ю. Гаганов*

ЛР № 065466 от 21.10.97
Гигиенический сертификат 78.01.10.953.П.1028
от 14.04.2016 г., выдан ЦГСЭН в СПб

Издательство «ЛАНЬ»
lan@lanbook.ru; www.lanbook.com
196105, Санкт-Петербург, пр. Юрия Гагарина, д. 1, лит. А
Тел./факс: (812) 336-25-09, 412-92-72
Бесплатный звонок по России: 8-800-700-40-71

Подписано в печать 13.09.17.
Бумага офсетная. Гарнитура Школьная. Формат 70×100 ¹/₁₆.
Печать офсетная. Усл. п. л. 43,55. Тираж 100 экз.

Заказ № 366-17.

Отпечатано в полном соответствии с качеством
предоставленного оригинал-макета в АО «Т8 Издательские Технологии».
109316, г. Москва, Волгоградский пр., д. 42, к. 5.