

ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

УДК 536.2

В.В. Новиков, д-р физ.-мат. наук, проф.
Б.Я. Корниенко, канд. техн. наук, доц.
А.А. Сомлев, асист.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ГРАНУЛИРОВАНИЯ В ПСЕВДООЖИЖЕННОМ СЛОЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕОРИИ ФРАКТАЛЬНЫХ МНОЖЕСТВ

Рассмотрен подход к описанию псевдоожигенного слоя в грануляторе с использованием теории фрактальных множеств. Приведено телеграфное уравнение с дробной производной по времени, которое описывает аномальную диффузию с учетом инерциальных эффектов. Уравнение аномальной диффузии с учетом инерциальных эффектов является обобщением для диффузионных процессов в неоднородной среде с хаотической структурой.

Розглянуто підхід до опису псевдозрідженого шару у грануляторі з використанням теорії фрактальних множин. Наведено телеграфне рівняння із дробовою похідною за часом, що описує аномальну дифузію з урахуванням інерціальних ефектів. Рівняння аномальної дифузії з урахуванням інерціальних ефектів є узагальненням для дифузійних процесів у неоднорідному середовищі з хаотичною структурою.

We consider the approach to the description of fluidized bed in granulator with using theories of fractal sets. If telegraph equation with fractional derivative of time that describes the anomalous diffusion given the inertial effects. Anomalous diffusion equation in the light of inertial effects is a generalization for the diffusion processes in heterogeneous environments with a chaotic structure.

Постановка проблемы

Широкое применение в технике нашел так называемый псевдоожигенный слой, в котором хаотическое движение является необходимостью. Технология псевдоожигения применяется при обезвоживании и гранулировании минеральных солей. Этот процесс представляет собой систему с распределенными параметрами, управление которой требует решения задачи идентификации распределения коэффициента диффузии или температуропроводности в пространстве.

Традиционный детерминированный подход базируется на изучении модели процесса гранулирования в виде системы нелинейных дифференциальных уравнений.

Однако реальный хаотичный характер процесса не представляется возможным адекватно описать с помощью детерминированной модели.

Описание псевдоожигенного слоя в грануляторе с использованием теории фрактальных множеств

Концентрация агрегированных частиц $p_1(r, t)$ при росте кластера зависит от времени t и расстояния r до формального центра агрегата. Если коллоидный агрегат имеет фрактальную структуру, эта концентрация зависит от координаты степенным образом:

$$p_1(r) \sim r^{df-d},$$

где d_f – фрактальная размерность агрегированных частиц;

d – размерность пространства.

Вне пределов агрегата находятся только одиночные частицы, концентрация которых $p_2(r, t)$. Гидродинамической подвижностью агрегированных частиц можно пренебречь при сильных связях между частицами в сравнении с подвижностью одиночных частиц. Поскольку рассматривается усредненная по угловым переменным ситуация, все концентрации зависят только от времени и радиальной переменной.

Агрегат занимает область пространства в форме сферы радиуса $R(t)$, проведенной по наиболее удаленной от центра связанной частице (рис. 1).

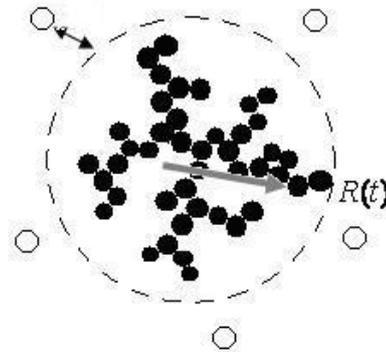


Рис. 1. Схема кластера

Движение формальной границы $R(t)$ зависит от скорости подвода частиц из объема, не занятого кластером, и динамики присоединения частиц к кластеру.

Поскольку агрегат имеет фрактальную структуру, присоединение новых частиц обусловлено попаданием подводимой частицы в то место пространства, которое не будет противоречить фрактальной структуре агрегата [1].

Если частица близка к такому пространственному положению, то вероятность присоединения больше, чем у частицы, находящейся вдалеке от такого пространственного положения.

Таким образом, присоединение частиц к фрактальному кластеру замедленно по сравнению с ростом обычного кластера.

Однако обычный кластер имеет более плотную упаковку, поэтому скорость роста обычного кластера больше, чем у фрактального, но из-за постоянно меняющейся конфигурации частиц внутри фрактального кластера (скорость изменения конфигурации меньше скорости подвода свободных частиц), скорость роста фрактального кластера больше на некоторую величину, т.е. время за которое радиус кластера увеличивается на одну частицу в обычном кластере τ' больше такого же времени для фрактального кластера.

Процессу присоединения частиц противостоит процесс отсоединения, который может происходить по различным причинам:

- превышение тепловой энергии крайних частиц потенциального барьера удерживания в кластере;
- получение дополнительной энергии от внешних источников;
- отсоединение частиц внешними по отношению к агрегату частицами, имеющими большую кинетическую энергию, позволяющую не присоединиться к кластеру и «отколоть» агрегированную частицу.

Вероятность отсоединения частиц из агрегата может быть весьма низкой, но такой процесс всегда существует в реальных системах, поэтому процесс роста кластера можно смоделировать с помощью устойчивого случайного блуждания на одномерной решетке.

Такое блуждание называют невозвратным.

График невозвратного блуждания показан на рис. 2 в рекуррентных координатах, т.е. последующее положение от предыдущего.

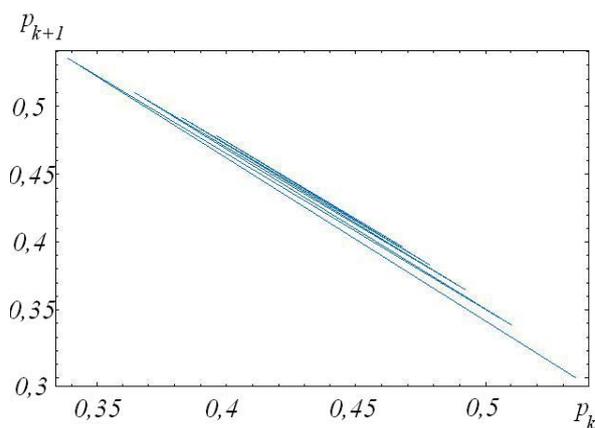


Рис. 2. График невозвратного блуждания частиц при росте кластера

Край границы агрегата представляем в виде частицы, которая блуждает случайно на оси, проходящей через центр окружности ограничивающей агрегат.

Будем предполагать, что перемещение такой частицы происходит скачками по одномерной решетке, узлы которой находятся в узлах внутренней структуры кластера (рис.3).

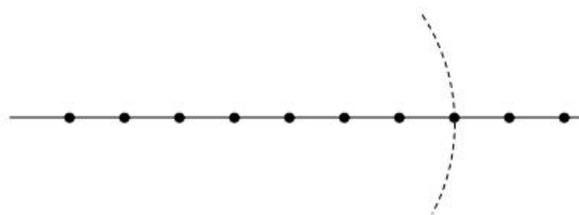


Рис. 3. Схема перемещения частицы по одномерной решетке с узлами во внутренней структуре кластера

Направление движения определяется направлением предшествующего шага по решетке. Каждый шаг делается только в ближайший узел.

Математическая формулировка устойчивости требует, чтобы в любой момент времени и места на решетке блуждающей частицы были известны две предшествующие координаты частицы, а также направление предыдущего шага.

Для описания процесса случайных блужданий рассмотрим две вероятности:

$$\{a_n(j)\} \text{ и } \{b_n(j)\},$$

где $a_n(j)$ – вероятность находиться в месте j на шаге n , из места $j-1$ в предыдущем шаге;

$b_n(j)$ – та же вероятность, только из места $j+1$ [2].

Тогда

$$\left. \begin{aligned} a_{n+1}(j) &= a_n(j-1)p_{11} + b_n(j-1)p_{12} \\ b_{n+1}(j) &= a_n(j+1)p_{21} + b_n(j+1)p_{22} \end{aligned} \right\},$$

где $p_{11} = p_{22} \equiv p$ – вероятность перехода при движении в том же направлении, что и на предыдущем шаге;

$p_{12} = p_{21} \equiv q = 1 - p$ – вероятность перехода в противоположном направлении.

Для обычного случайного блуждания $p = \frac{1}{2}$.

При правильном выборе вероятности p из рекуррентных отношений можно получить уравнение движения границы не фрактального кластера. Один из возможных вариантов выбора p рассмотрим при переходе к непрерывным переменным x и t .

Для этого определим x и t через целое j и n :

$$x = j\Delta x,$$

$$t = n\Delta t.$$

В пределе $\Delta t \rightarrow 0, \Delta x \rightarrow 0$:

$$\lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x}{\Delta t} = v,$$

где v – скорость частицы.

Для вывода уравнений в частных производных можно выбрать вероятность p в виде [2]:

$$p = 1 - \frac{\Delta t}{2\tau}, \tag{3}$$

где τ – время между последовательными соединениями частиц к агрегату.

Устойчивость случайного блуждания требует, чтобы p отличалось от единицы бесконечно мало.

Согласовав масштабные отношения в уравнениях (2) и (3) с рекуррентными уравнениями (1), при Δx и $\Delta t \rightarrow 0$ получим:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial a}{\partial t} &= -v \frac{\partial a}{\partial x} + \frac{1}{2\tau}(b-a) \\ \frac{\partial b}{\partial t} &= v \frac{\partial b}{\partial x} + \frac{1}{2\tau}(a-b) \end{aligned} \right\}. \tag{4}$$

Из уравнений (5) при полной плотности вероятности $p(x, t)$, определяемой в виде

$$p(x, t) = a(x, t) + b(x, t),$$

получим уравнение движения границы:

$$\frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial t^2} + \frac{1}{\tau} \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = v^2 \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2}. \tag{1}$$

После преобразования

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} + \tau \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial t^2} = D \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} \tag{5}$$

получим

$$D = v^2 \tau.$$

Уравнение (5) называется телеграфным уравнением.

Если начальные условия заданы в виде $p(x, 0) = \delta(x)$,

то после преобразований Лаплас и Фурье получим [2]:

$$\tilde{p}(\omega, s) = \frac{1 + s\tau}{s(1 + s\tau) + v^2 \omega^2}. \tag{6}$$

Обратное преобразование уравнения (6) даёт

$$p(x, t) = \frac{e^{-t/2\tau}}{2} \left\{ \delta(x - vt) + \delta(x + vt) + \frac{1}{4v\tau} \left[I_0(\rho) + \frac{I_1(\rho)}{2T\rho} \right] H(vt - |x|) \right\}, \tag{7}$$

$$\rho = \frac{\sqrt{v^2 t^2 - x^2}}{2v\tau},$$

где $H(x)$ – функция Хевисайда;

$I_0(\rho), I_1(\rho)$ – модифицированные функции Бесселя.

Характерной особенностью решения уравнения (7) является наличие диффузионного фронта, за пределами которого диффундирующие частицы отсутствуют, а в окрестности самого фронта частицы двигаются в баллистическом режиме и плотность вероятности нахождения частиц на границах фронта стремится к дельта-функции. Внутри диффузионного пакета плотность вероятности асимптотически приближается к классическому виду – распределению Гаусса.

Второй момент или среднеквадратичное отклонение диффузионной частицы от начального положения $\langle \Delta x^2 \rangle$ равно [2]:

$$\langle \Delta x^2 \rangle = 2D\tau \left(\exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) - 1 + \left(\frac{t}{\tau}\right) \right),$$

где D – коэффициент диффузии.

Среднеквадратичное отклонение можно интерпретировать, как квадрат среднего значения изменения координаты границы кластера.

Рассмотрим уравнение движения границы кластера, имеющего фрактальную структуру.

Для этого получим уравнение движения с дробной производной по времени, что позволит объяснить более медленный рост фрактального кластера.

Такое поведение для нашей модели называется аномальной диффузией.

При аномальной диффузии процесс переноса характеризуется тем, что Δx и Δt несоизмеримые величины, т.е. не существует предела

$$\lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x}{\Delta t},$$

а существует предел

$$\lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x}{\Delta t^\alpha}.$$

В связи с этим в выражениях (2), (3) проведем замену Δt на $(\Delta t)^\alpha$, т.е. будем время измерять не в единицах Δt , а в качестве единицы измерения выберем $(\Delta t)^\alpha$.

Проводя замены

$$\lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x}{\Delta t} = \nu \Rightarrow \lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x}{\Delta t^\alpha} = \nu_\alpha,$$

$$0 < \alpha \leq 1,$$

$$p = 1 - \frac{\Delta t}{2\tau} \Rightarrow p = 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta t}{\tau} \right)^\alpha,$$

перейдем к дробным производным по переменной времени [3].

Действительно, при Δx и $(\Delta t)^\alpha \rightarrow 0$, аналогично с уравнением (4) получим

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial^\alpha a}{\partial t^\alpha} &= -\nu_\alpha \frac{\partial a}{\partial x} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\tau} \right)^\alpha (b - a) \\ \frac{\partial^\alpha b}{\partial t^\alpha} &= \nu_\alpha \frac{\partial b}{\partial x} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\tau} \right)^\alpha (a - b) \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

Из выражений (8) получим телеграфное уравнение с дробной производной по времени:

$$\frac{\partial^{2\alpha} p}{\partial t^{2\alpha}} + \left(\frac{1}{\tau} \right)^\alpha \frac{\partial^\alpha p}{\partial t^\alpha} = \nu_\alpha^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}. \quad (9)$$

Учитывая начальные условия, уравнение (9) можно переписать в виде

$$\tau^\alpha \frac{\partial^{2\alpha} p(x,t)}{\partial t^{2\alpha}} - \frac{\tau^\alpha \delta(x)}{\Gamma(1-2\alpha)t^{2\alpha}} + \frac{\partial^\alpha p(x,t)}{\partial t^\alpha} - \frac{\delta(x)}{\Gamma(1-\alpha)t^\alpha} = D_\alpha \frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2}, \quad (10)$$

где

$$D_\alpha = \nu^2 \tau^\alpha,$$

а начальные условия имеют вид

$$\frac{\partial^{2\alpha} \tau^\alpha p(x,0)}{\partial t^{2\alpha}} = \frac{\tau^\alpha \delta(x)}{\Gamma(1-2\alpha)t^{2\alpha}},$$

$$\frac{\partial^\alpha p(x,0)}{\partial t^\alpha} = \frac{\delta(x)}{\Gamma(1-\alpha)t^\alpha}.$$

Применив преобразование Фурье к уравнению (10), получим

$$\begin{aligned} \tilde{p}(k,t) &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1-4\tau^\alpha k^2 D_\alpha}} \right) \times \\ &\times H_{1,2}^{1,1} \left[- \left(\frac{t}{\tau} \right)^\alpha \left(\frac{\sqrt{1-4\tau^\alpha k^2 D_\alpha} - 1}{2} \right) \middle| \begin{matrix} (0,1) \\ (0,1) \end{matrix} \right. \left. (0,\alpha) \right] + \\ &+ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1-4\tau^\alpha k^2 D_\alpha}} \right) \times \\ &\times H_{1,2}^{1,1} \left[\left(\frac{t}{\tau} \right)^\alpha \left(\frac{\sqrt{1-4\tau^\alpha k^2 D_\alpha} - 1}{2} \right) \middle| \begin{matrix} (0,1) \\ (0,1) \end{matrix} \right. \left. (0,\alpha) \right] \end{aligned}$$

где функция Миттаг-Лефлера

$$E_{\alpha,\gamma}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\Gamma(\alpha n + \gamma)},$$

$$z = - \left(\frac{t}{\tau} \right)^\alpha.$$

Связь функции Миттаг-Лефлера $E_{\alpha,\gamma}(z)$ с функцией Фокса имеет вид [4]:

$$E_{\alpha,\gamma}(-z) = H_{1,2}^{1,1} \left[z \middle| \begin{matrix} (0,1) \\ (0,1), (1-\gamma, \alpha) \end{matrix} \right].$$

С учетом четности $\tilde{p}(k, t)$ по k получим решение телеграфного уравнения с дробной производной (10) в виде интеграла:

$$p(x, t) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \tilde{p}(k, t) \cos(kx) dk.$$

Второй момент или среднеквадратичное отклонение диффузионной частицы от начального положения $\langle \Delta x^2 \rangle$ равно

$$\langle \Delta x^2 \rangle = 2D_{\alpha} \tau^{\alpha} \left(E_{\alpha,1} \left(-\frac{t}{\tau} \right) - 1 + \frac{1}{\Gamma(1+\alpha)} \left(\frac{t}{\tau} \right)^{\alpha} \right),$$

где $E_{\alpha,1} \left(-\frac{t}{\tau} \right)$ – функция Миттаг-Лefлера.

Для аномальной диффузии характерна более медленная степенная зависимость второго момента от времени.

При $\frac{t}{\tau} \rightarrow 0$, получаем $\langle \Delta x^2 \rangle \rightarrow D_{\alpha} t^{2\alpha} / \tau^{\alpha}$ –

баллистическое движение на краях диффузионного пакета, а внутри диффузионного пакета поведение частицы соответствует аномальной диффузии.

Выводы

Получено телеграфное уравнение с дробной производной по времени, которое описывает аномальную диффузию с учетом инерциальных эффектов.

Получено решение телеграфного уравнения с дробной производной по времени и вычислен второй момент – среднеквадратичное отклонение $\langle \Delta x^2 \rangle$.

Уравнение аномальной диффузии с учетом инерциальных эффектов представлено через функцию релаксации системы и является обобщением для диффузионных процессов в неоднородной среде с хаотической структурой.

Литература

1. Zaslavsky G.M. Chaos, fractional kinetics and anomalous transport // Ibid. – 2002. – Vol. 371. – P. 461–580.
2. Weiss G. H. Physica A // Ibid. – 2002. – Vol. 311. – P. 381.
3. Учайкин В. В. Автомодельная аномальная диффузия и устойчивые законы // Успехи физ. науки. – 2003. – Т. 173, № 8. – С. 847–876.
4. Прудников А. П., Маричев Ю. А. Интегралы и ряды. Т. 3. – М.: Физматлит, 2003. – 688 с.

Стаття надійшла до редакції 25.04.08.