

Рис. 3 – Залежність кінцевої сухості від часу пресування при різних лінійних тисках та температурі поверхні валу 150 °C і масі картону 160 г/м²

Висновки. Запропоновано математичну модель кінетики високотемпературного пресування картонного полотна. Отримано експериментальні залежності кінетики високотемпературного пресування та основні параметри процесу, необхідні для проектування гарячого пресу.

Перспективи подальших досліджень. Подальші дослідження кінетики високотемпературного пресування спрямовані на підтвердження адекватності математичної моделі гарячого пресування, розробку конструкції та створення методики розрахунку промислового зразка гарячого пресу.

Література

1. Кугушев И.Д. Процесс прессования бумаги./ Кугушев И.Д., Селедчик В.В., Алашкевич Ю.Д. - Бумажная промышленность, 1970. – С. 5-7.
2. Патент № 6398909 (US), МПК6 D 21 Н 25/04. Method and apparatus for imprinting, drying, and reeling a fibrous web / Ingvar Klerelid – Заявка № 09/596187, 16.06.2000; Опубл. 04.06.2002
3. Марчевський В.М. Алгоритм розрахунку пресів папероробної машини. Методичні вказівки / Марчевський В.М., Свечков О.Л. - ВПК «Політехніка» Київ – 2003 р.
4. Новиков Н. Е. Прессование бумажного полотна/ Новиков Н.Е.. – М.: «Лесная промышленность», 1972 г. – 240 с.

УДК 28.17.19:23

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРКОЛЯЦИОННЫХ СИСТЕМ В СПЕЦИАЛИЗИРОВАННОМ ПРОГРАММНОМ КОМПЛЕКСЕ «ОДНО»

Гергега А.Н., д-р техн. наук, доцент
Одесская национальная академия пищевых технологий

Описаны свойства специализированного программного комплекса, предназначенного для исследования перколяционных систем. Комплекс создан на основе метода мелкозернистого параллелизма, и используются как для генерации и изучения структуры и свойств модельных кластерных систем, так и для исследования гетерогенных материалов в промежуточной асимптотике.

The properties of a software environment, which is based on the fine-grain parallelism and oriented to the study of models of percolation systems, are presented. The software environment can be used for both generation and study of the structure and properties of a cluster system and for studying heterogeneous materials in the intermediate asymptotics.

Ключевые слова: мелкозернистый параллелизм, программный комплекс, перколяция, гетерогенные материалы, промежуточная асимптотика.

Введение

Непреходящая актуальность перколяционных методов исследования вещества в течение последних, примерно, пятидесяти лет связана с эффективностью теории протекания [1-3] при рассмотрении обширной области вопросов, относящихся к генезису и эволюции связанных областей в материалах. В таких задачах обычно изучается и кластерная система физического тела, и ее влияние на объект в целом.

При возрастании концентрации элементов некоторой из подсистем материала может возникнуть перколяционный кластер, что приводит к структурному фазовому переходу. В момент перехода один из характерных размеров перколяционного кластера становится сравнимым с габаритами физического тела, и, как следствие, в материале скачкообразно изменяется корреляционная длина, появляется выделенное направление, понижается симметрия объекта. В зависимости от физической природы перколяционного кластера это может привести к возникновению аномальной диффузии, к эффектам упрочнения или к деформации материала, к появлению спонтанной намагниченности в ферромагнетиках, к переходу Мотта в примесных полупроводниках, изменению тепло- и влагоемкости тела, и другим [1-7].

Специализированный программный комплекс ОДНО создан на базе программной системы WinALT [8], и предназначен для исследования моделей перколяционных систем. Программный комплекс (ПК) используется для генерации и изучения структуры и свойств модельных перколяционных кластеров различных модификаций, а также для исследования структуры композиционных материалов в промежуточной асимптотике.

ПК ОДНО предоставляет возможности конструирования алгоритмов и структур с разнообразными видами мелкозернистого параллелизма, а также средства для визуального и аналитического описания правил преобразований данных в моделях [8, 9].

Аналитический способ реализуется языком моделирования, который подразделяется на две части. Первая сформирована конструкциями общего назначения. Они служат для описания вычислений, управляющих структур, подпрограмм, модульной структуры сложной модели и библиотек подпрограмм и фрагментов моделей, импорта внешних модулей в модель или в саму систему.

Вторая часть языка отражает специфику проблемной области ПК ОДНО – исследование кластерных систем. Основные типы объектов специализированной семантики программного комплекса в этой части служат для описания кластерных структур, их частей, элементов, композиций и состояний. В программном комплексе реализованы конструкторы объектов: Cluster, Array, Dimension, Boundary, PercoCluster, DeadEnds, Lacuna, PercoField, UnitCluster, SubCluster и др.; и операторы языка для работы с объектами модели, в частности: Transform, Create Orderliness, PercoThresh, PercoLevel, CorrLength, FractDim, PCPower, Rewrite и др.

В качестве примера: для расчета клеточной информационной размерности кластера – второго члена спектра размерностей Реньи D_1 (у А. Реньи нумерация начинается от нуля) – используется оператор InfDim, который обеспечивает расчет выражения

$$D_1 = -\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (S(\varepsilon)/\ln \varepsilon),$$

где ε – линейный размер ячейки палетки,

p_i – вероятность модификации ячейки кластера.

В свою очередь InfDim использует оператор расчета энтропии Entropy

$$S(\varepsilon) = -\sum_{i=1}^{N(\varepsilon)} p_i \ln p_i,$$

и, по сути, имеет вид

$$D_1 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\sum_{i=1}^{N(\varepsilon)} p_i \ln p_i / \ln \varepsilon \right).$$

Перколяция в фазовых пространствах свойств

Ряд физических величин, характеризующих композиционные материалы, имеют степенные концентрационные зависимости, претерпевающие излом в точке структурного фазового перехода. К ним относятся коэффициент Пуассона, модуль Юнга [10], коэффициенты диффузии, тепло- и электропроводности [1] и многие другие. Такое поведение позволяет визуализировать условия, при которых реализуется структурный фазовый переход, на графиках величин, характеризующих кластерную систему. На рис. 1-3 представлены результаты работ различных авторов, исследовавших поведение величин такого типа.

Программный комплекс ОДНО реализует представление полученных результатов в фазовых пространствах, определяемых пользователем.

В качестве иллюстрации рассмотрим результаты расчетов, проведенных в перколяционной модели эффект дальнего действия при ионной имплантации [4].

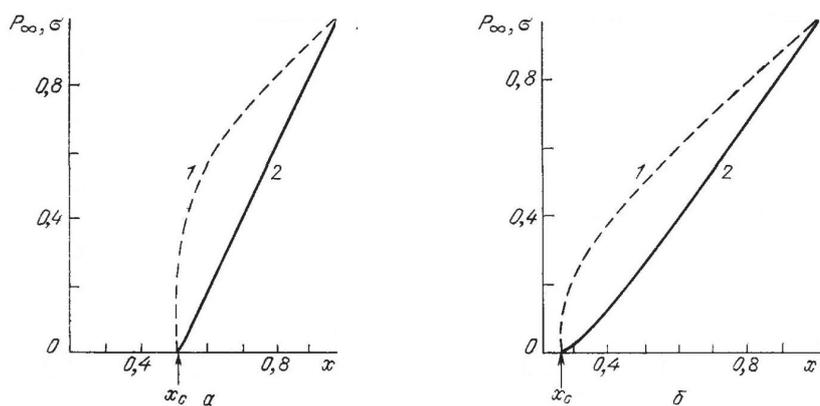


Рис. 1 – Зависимость мощности бесконечного кластера (1) и проводимости перколяционной сетки (2) от концентрации проводящей фазы в задаче связей на квадратной (а) и в простой кубической решетке (б) [1].

Суть эффекта – в изменении структуры материала на расстояниях от облучаемой поверхности, которые на несколько порядков превышают длину проективных пробегов ионов (иначе, глубину проникновения энергии облучения). Обычно это проявляется в увеличении плотности дефектов упаковки в объеме кристалла по сравнению с областью пробега ионов, возникновении в облученном кристалле аномальной диффузии, в немонотонном изменении (по мере набора дозы облучения) микротвердости образца на расстояниях до нескольких сотен микрометров от дефектного слоя, и некоторых других [12].

Предложенная в [4] перколяционная модель позволяет интерпретировать эффект дальнего действия как результат критического поведения аморфизированного слоя. В модели предполагается, что дефектный слой, расположенный на глубине наиболее вероятного проективного пробега ионов, представляет собой квазиплоскую несплошную совокупность аморфизированных областей различных размеров, причем при критической дозе облучения, часть областей объединяется, и в кристалле возникает перколяционный кластер аморфизированного слоя. Достижение критической концентрации дефектов в материале меняет характер степенной зависимости механических напряжений от расстояния: на графике функции возникает излом, что позволяет зафиксировать факт перехода и определить пороговую концентрацию.

Оказывается, этих предположений достаточно, чтобы объяснить немонотонность зависимости свойств образца от дозы облучения: области определенной степени разупорядоченности по мере набора дозы облучения теряют связность, и формируется перколяционный кластер из более разупорядоченных участков. В процессе имплантации ионов это происходит неоднократно, и приводит к скачкообразным изменениям величины механических напряжений, к выраженной немонотонности свойств облучаемого образца, в частности, микротвердости, а также позволяет объяснить наличие «магических» доз, при которых наблюдаются экстремумы свойств [4].

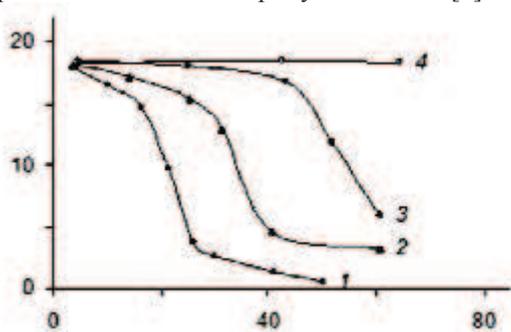


Рис. 2 – Зависимость объемного удельного сопротивления композитов (в усл. ед.) на основе полиэтилена от концентрации (в %) наполнителей: 1 – ацетиленовая сажа; 2 – графит; 3 – алюминиевая пудра; 4 – цинковая пыль [11]

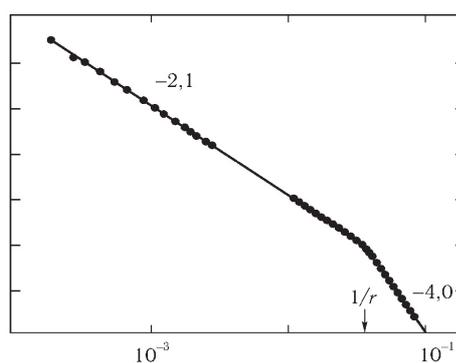


Рис. 3 – Зависимость интенсивности рассеянного излучения (в усл. ед.) от пространственной частоты (в мм⁻¹) отражающей матрицы [2]

В среде ПК ОДНО реализована континуальная перколяционная модель образования аморфизирован-

ного слоя.

В модели координаты центров модифицированных «ионами» участков, из которых формируется перколяционный кластер, определяются методом Монте-Карло; их величину можно варьировать, что соответствует изменению энергии имплантируемых ионов. Участки считаются соединенными в случае контакта; если они перекрываются, степень разупорядочения возрастает. Предусмотрены четыре степени разупорядочения, а также режимы, «включающие» любое сочетание типов модифицированных областей, т. е. имеется возможность проследить образование перколяционного кластера из всевозможных сочетаний малых кластеров.

При малых дозах облучения дефектные образования можно рассматривать как отдельные скопления, которые создают механические напряжения, убывающие как $\sigma \sim r^{-3}$ [13]. По мере роста дозы возникает разупорядоченная область перколяционного типа, которая превращается в бесконечный кластер «только при условии, что его плотность превышает некоторую критическую величину [14]». При этом скачкообразно изменяется закон падения напряжений: оно уменьшается заметно медленней, и может быть аппроксимировано законом $\sigma \sim r^{-1}$. При дальнейшем увеличении дозы, перколяционный кластер аморфизированного слоя превращается в «сплошную стенку» с экспоненциально спадающим полем напряжений [13]. Естественно, что столь резкие изменения характера механических полей в материале, существенно видоизменяют равномерное распределение дефектов, и могут приводить к образованию областей с повышенным содержанием дефектов вдали от области вероятнейшего пробега ионов.

На рис. 4 показан характер изменения механических напряжений, создаваемых перкокластером дефектной области, от модельной дозы облучения (числа справа – степень аморфизации, отрицательные числа – показатели закона $\sigma = f(r)$), а на рис. 5 – эволюция областей различной степени аморфизации по мере набора модельной дозы. Видно, что, как и следовало ожидать, первоначальный рост объема областей определенного типа сменяется убыванием: образование более разупорядоченных областей происходит за счет имеющих большую упорядоченность. В модельных экспериментах можно наблюдать и за изменением характера процесса формирования областей с различной аморфизацией. Например, на рис. 5 видно, что на заключительной стадии формирования перколяционного кластера в дефектном слое скорость генерации четырежды разупорядоченных модельных областей убывает, т.е. процесс роста этих областей идет с замедлением; трижды разупорядоченных – с положительным ускорением.

Эффективные параметры кластерных систем и их статистические распределения

Помимо задач, связанных с критическим поведением, безусловный интерес в перколяционных исследованиях и, в частности, при изучении кластерных структур гетерогенных материалов представляют вопросы статистики. В ПК ОДНО предусмотрена возможность статистических исследований малых (неперколяционных) кластеров, «мертвых концов [3]», лакун и полостей различного происхождения, сетей трещин и внутренних границ. Программный комплекс позволяет устанавливать тип распределения, определять его параметры, получать графическое представление данных.

В комплексе ОДНО реализованы процедуры расчета эффективных и средних значений физических величин, описывающих кластерную систему.

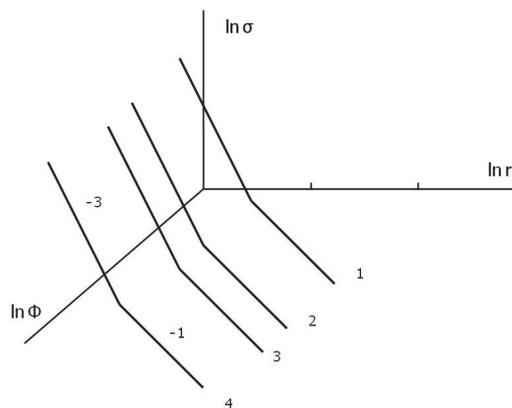


Рис. 4 – Зависимость величины механических напряжений σ , создаваемых перкокластером дефектной области, от расстояния и модельной дозы облучения Φ

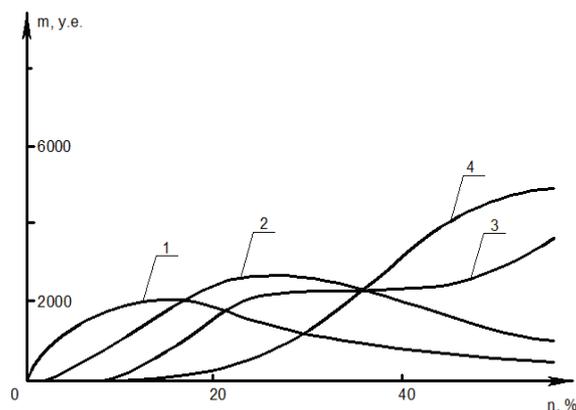


Рис. 5 – Кинетика разупорядочения областей модельного дефектного слоя по мере роста его аморфизации. Числа на полочках – степень аморфизации

В качестве иллюстрации рассмотрим определение эффективного радиуса малого фрактального кла-

стера [7].

Для этого положим, что силы взаимодействия между частицами кластера пропорциональны r^{-2} , и рассчитаем напряжённость поля внутри него. При расчёте взаимодействия соприкасающиеся частицы, как известно, дают экспоненциально большой вклад. Эти расходящиеся слагаемые устраняются в ПК ОДНО с помощью простого правила: частицы, расположенные на расстоянии 2-3 средних радиусов частиц от точки, в которой рассчитывается поле, исключаются из расчёта напряжённости в ней. В рамках модели это приводит к тому, что экспериментальные зависимости $E(r)$ внутри кластера аппроксимируются линейной функцией, а на расстоянии 5-10 радиусов от него – функцией $1/r^2$ (рис. 6).

Именно такой характер зависимости $E(r)$ позволяет ввести понятие эффективного радиуса кластера – радиуса сферы, которая могла бы заменить его при описании силовых взаимодействий. Если использовать сравнение с классическим результатом – полем сплошной сферы, – то видно, что эффективный радиус равен абсциссе точки пересечения аппроксимационных кривых графика зависимости $E(r)$.

Другой аспект необходимости вычисления эффективных значений – изучение происходящих в перколяционных кластерах процессов различной природы. В ПК ОДНО это реализуется посредством «декомпозиции» перколяционных кластеров: в геометрических тождественных кластерах могут быть реализованы процессы различной физической природы, при этом, например, эффективная длина «мертвых концов» при изучении теплопроводности, диффузии или электропроводности будет существенно различаться.

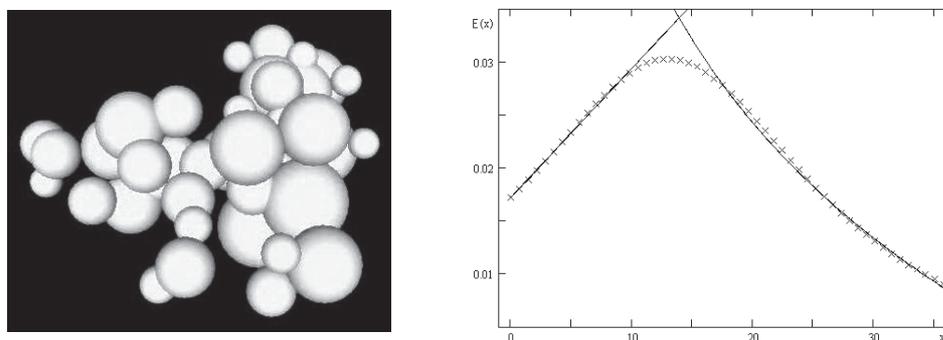


Рис. 6 – Модельный кластер и график зависимости напряжённости его силового поля (в усл. ед.) от расстояния

Заключение

Работа по расширению возможностей комплекса ОДНО продолжается в двух направлениях. Первое – создание библиотек вычислительных модулей, подпрограмм, фрагментов моделей, режимов моделирования и визуализации данных для решения обширного спектра перколяционных задач. Кроме того, создание возможностей для модификации задач в традиционной постановке в пространстве двух и трех измерений и их обобщения на произвольное число измерений в фазовых пространствах свойств кластерных систем твердотельных материалов.

Второе направление – создание программного продукта, имеющего аналитические и графические возможности моделирования объектов и систем произвольной природы, которые содержат связанные области, образующиеся в стохастических процессах. Планируется, в частности, что у исследователя будет возможность определять семантику части операторов программного комплекса, например, связности, которую можно будет трактовать достаточно широко (почти произвольно).

Литература

1. Соколов И.М. Размерности и другие критические показатели в теории протекания. // УФН. – 1986. – Т. 150, вып. 2. – С. 221-255.
2. Федер Е. Фракталы. – М.: Мир, 1991. – 254 с.
3. Шкловский Б.И., Эфрос А.Л. Электронные свойства легированных полупроводников. – М.: Наука, 1979. – 416 с.
4. Герега А.Н. Моделирование кластерных структур в материале: силовые поля и дескрипторы. // Физическая мезомеханика. – 2013. – Т. 16, №5. – С. 87-93.
5. Oshmyan V.G., Knunyants N.N., Tovmasyan Yu.M., Topolkaev V.A., Manevich L.I. Theoretical-experimental investigation of the static deformation of particulate composites. // Mechanics of Composite Materials. – 1984. – V.20, No.3. – P. 306-313.

6. Герега А.Н. Физические аспекты процессов самоорганизации в композитах. 1. Моделирование перколяционных кластеров фаз и внутренних границ. // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2013. – Т. 19, №3. – С. 406-419.
7. Герега А.Н., Выровой В.Н., Дрик Н.Г. Моделирование внутренних границ как элементов структуры материала. / Материалы XVII международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам. – М.: Изд-во МАИ, 2011. – С. 57-59.
8. Ostapkevich M., Piskunov S. The Construction of Simulation Models of Algorithms and Structures with Fine-Grain Parallelism in WinALT. // Lecture Notes in Computer Science. – Heidelberg: Springer-Verlag, 2011. – V. 6873. – P. 192-203.
9. Герега А.Н. Моделирование структурных фазовых переходов методом мелкозернистого параллелизма. // Автоматизация технологических и бизнес-процессов. – 2013. – № 11/12. – С. 10-13.
10. Берлин А.А. Принципы создания композиционных полимерных материалов. – М.: Химия, 1990. – 240 с.
11. Шевченко В.Г. Основы физики полимерных композиционных материалов. – М.: МГУ, 2010. – 98 с.
12. Овчинников В.В. Радиационно-динамические эффекты. Возможности формирования уникальных структурных состояний и свойств конденсированных сред. // УФН. – 2008. – Т. 178, №9. – С. 991-1001.
13. Косевич А.М. Физическая механика реальных кристаллов. – Киев: Наукова думка, 1981. – 328 с.
14. Смирнов Б.М. Свойства фрактального агрегата. // УФН. – 1989. – Т. 157, вып. 2. – 357-360.

УДК 663.938

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ ПОДОБИЯ В ЗАДАЧАХ ЭКСТРАГИРОВАНИЯ В МИКРОВОЛНОВОМ ПОЛЕ

Терзиев С.Г., канд. техн. наук, ассистент, Макиевская Т.Л., канд. техн. наук
Одесская национальная академия пищевых технологий

Анализируются проблемы моделирования процесса экстрагирования при микроволновом подводе энергии. Обосновываются преимущества методов теории подобия. Приведена схема получения модели в критериальной форме. Определены константы в критериальном уравнении.

The problems of modeling extraction process under microwave energy supply are analyzed. Advantages of similarity theory methods are proved. The schemes of receiving the model in criterial form are given. The constants of criterial equation are determined.

Ключевые слова: моделирование, теория подобия, экстрагирование, микроволновые технологии.

Введение. Процесс экстрагирования является ключевым в технологии растворимого кофе. Он в значительной степени определяет энергетические затраты, степень извлечения целевых компонентов, вкусоароматические качества готового продукта [1]. Технологическое оборудование для экстрагирования из зерен кофе отличается громоздкостью, металлоемкостью. Высокотемпературная обработка сырья в экстракторах существенно снижает качество экстракта. Актуальной является задача поиска новых технических решений для процессов экстрагирования из зерен кофе.

Совместные исследования в ОНАПТ и предприятия «Енни Фудз» обосновали перспективы применения микроволновых технологий для интенсификации процесса экстрагирования [2- 4]. Однако совершенствование оборудования такого класса требует решения серьезных проблем по их моделированию. Известные научные школы по проблемам экстрагирования не дает ответов на пути моделирования поставленной задачи. Проблема в сложном, комбинированном воздействии на систему инерционных, диффузионных, и энергетических потоков. В результате эффект определяется рядом движущих сил: традиционных при экстрагировании и специфических. Последние возникают за счет взаимодействием микроволнового поля (МВ) с полярными молекулами сырья. Возникают потоки, движущей силой которых являются турбулентная бародиффузия, вихревая диффузия, механодиффузия [5, 6]. Аналитическое и численное моделирование таких процессов затруднено, а для построения инженерных методов расчета целесообразно привлекать методы теории подобия [7].

Математическая модель процесса проточного экстрагирования в МВ-поле. Моделируются условия массопереноса из кофейного сырья в поток экстрагента, который движется сквозь слой сырья. Наличие трех движущих сил: внутри- внешне- и бародиффузионных, инициирует три массовых потока.