

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФфуЗИИ В ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ РЕШЕТОЧНЫХ СИСТЕМАХ

Г.С. Бокун, В.С. Вихренко, Д.В. Гапанюк
(БГТУ, г. Минск)

Диффузия является одним из важнейших явлений, используемых во многих производственных процессах. Исследованию равновесных характеристик и неравновесных свойств однокомпонентных решеточных систем посвящена обширная литература [1]. Более сложные двухкомпонентные системы исследованы мало. Согласно феноменологической теории необратимых процессов [2], потоки компонентов пропорциональны градиентам соответствующих химических потенциалов, а коэффициенты пропорциональности называют кинетическими коэффициентами диффузии. С другой стороны, согласно закону Фика, потоки компонентов пропорциональны градиентам концентрации, и в эти выражения входят коэффициенты химической диффузии. Перерасчет коэффициентов диффузии осуществляется с помощью производных химических потенциалов по концентрациям компонентов.

Моделирование динамики частиц в системе производилось по методу Монте-Карло. Алгоритм моделирования [3] модифицирован к особенностям исследования двухкомпонентных систем. В отличие от работы [4], в которой рассматривалось межчастичное притяжение, ниже исследуется система с межчастичным отталкиванием. Для системы N частиц сортов A и B на периодической двумерной решетке исходными условиями моделирования являлись температура T , концентрация компонентов c_A и c_B , потенциалы взаимодействия между ближайшими соседями $J_{AA}=-J$, $J_{BB}=J_BJ$ и $J_{AB}=-J_{AB}J$ на квадратной решетке размером $L \times L$ ($L=32$) узлов с периодическими граничными условиями, которые позволяют существенно уменьшить влияние конечных размеров моделируемой системы на результаты моделирования. Начальное состояние системы генерировалось путем случайного выбора узла решетки с координатами (α, β) ($1 \leq \alpha \leq L$, $1 \leq \beta \leq L$, где α и β – целые числа), в который помещалась частица. Заполнение решетки производилось до числа частиц $N = L \times I(c_A + c_B)$.

Моделирование динамики частиц осуществлялось случайным выбором узла (α, β) решетки, занятого частицей любого сорта. Затем

разыгрывался переход этой частицы в один из четырех ближайших узлов, также выбираемых случайным образом. Если узел не был занят, то вычислялась вероятность перехода частицы: если в узле (α, β) частица сорта A , то

$$P_1 = \exp\left[-\frac{J_A}{k_B T}(S_A + J_{AB}S_B)\right] \cdot \exp\left(\frac{3J_B J_A}{k_B T}\right), \quad (1)$$

если в узле (α, β) частица сорта B , то

$$P_1 = \exp\left[-\frac{J_B}{k_B T}(J_{AB}S_A + J_B S_B)\right] \cdot \exp\left(\frac{3J_B J_A}{k_B T}\right), \quad (2)$$

где S_A, S_B – числа соседних с узлом (α, β) частиц сортов A и B , соответственно, а вторые экспоненты в выражениях введены для получения P_1 в диапазоне от 0 до 1.

Эта вероятность сопоставлялась со случайной величиной $0 \leq P \leq 1$. При $P \leq P_1$ переход частицы принимался, в противоположном случае состояния узлов оставались прежними, и осуществлялся переход к анализу следующего узла.

Один шаг процедуры Монте-Карло (МКШ) состоял из числа попыток перемещения частиц, равного числу частиц в системе. Типичная длина траектории составляла 50000 МКШ, и усреднение производилось по 10^3 траекторий. Как и следовало ожидать, зависимость среднего квадрата перемещения частиц от времени близка к линейной:

$$\langle (\Delta r)^2 \rangle \approx \frac{2d}{z} D^* t, \quad (3)$$

где d – размерность решетки ($d=2$); z – количество соседних узлов ($z=4$); t – время, пропорциональное числу МКШ. Аппроксимировав полученные кривые линейными зависимостями, находим соответствующие кинетические коэффициенты диффузии.

Моделирование было выполнено в области изменения концентраций компонентов от 0 до 0,95 при значении приведенной температуры $T/T_c=1,5$, выраженной в единицах критической температуры компонента A ($k_B T_c=0,567J$). Параметры взаимодействия приняты равными $J_B=1,44, J_{AB}=1,2$ ($J_{AB}=\sqrt{J_B}$).

На рисунке приведены результаты моделирования при $T/T_c=1,5$. Ввиду межчастичного отталкивания интенсивнее взаимодействующие частицы сорта B более подвижны. Однако при увеличении концентрации частиц сорта A ситуация изменяется и подвижность частиц обоих сортов выравнивается. Такое поведение

обусловлено взаимным распределением частиц в системе. При низких концентрациях пары частиц сорта *B* мало вероятны и коэффициенты диффузии определяются взаимодействием частиц разных сортов или сорта *A*.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bokun G. S., Groda Ya.G., Uebing C., Vikhrenko V.S. // *Physica A.* – 2001. – V. 296. – P. 83.
2. Де Гроот С.Р. и Мазур П. Неравновесная термодинамика. – М.: Мир, 1974.
3. Uebing C. and Gomer R. // *J. Chem. Phys.* – 1991. – V. 95. – P. 7626.
4. Бокун Г.С., Вихренко В.С., Гапанюк Д.В. // *Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ.* Вып. XI. 2003. С. 63.

УДК 536.24

АЛГОРИТМ РАСЧЕТА ИСПАРИТЕЛЯ ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ МОЛОКООХЛАДИТЕЛЬНОЙ УСТАНОВКОЙ

О.Н. Буляк, В.И. Володин, Н.Ф. Капустин, А.М. Литовский
(БелНИИМСХ НАН Беларуси; БГТУ, г. Минск)

Парокомпрессионные холодильные машины и установки находят широкое применение при хранении и переработке сельхозпродукции. Для эффективной работы они оснащаются автоматическими системами управления. Объектами управления являются как сами установки в целом, так и отдельные элементы их контура: испаритель, конденсатор, компрессор, ресивер, терморегулирующий вентиль. Для настройки исполнительных устройств системы автоматики требуется предварительная оценка ситуации для принятия решения об изменении рабочих режимных параметров холодильной установки. Чтобы априори сделать такую оценку, необходимо располагать адекватным описанием физических процессов, т.е. иметь алгоритм управления.

В данной работе описывается алгоритм расчета одного из основных аппаратов опытной молокоохладительной установки – испарителя, который в сочетании с другим оборудованием обеспечивает необходимую холодопроизводительность. Этот алгоритм может быть использован для построения оптимального