УДК 519.8:622.32
DOI: 10.31471/2304-7399-2020-1(59)-72-78

МОДЕЛЬ ЖОРСТКИХ СФЕР ЯК ЗАСІБ МОДЕЛЬНОГО ПРЕДСТАВЛЕННЯ ОПИСУ СТРУКТУРИ РОЗПЛАВУ

О. О. Петрук, Т. О. Ваврик, О. С. Царева, Л. М. Гобир
Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу;
76019, м. Івано-Франківськ, вул. Карпатська, 15;
тел. (0342)723824; e-mail: pma@nung.edu.ua

В статті обґрунтовано доцільність використання моделі жорстких сфер для розрахунку кінематичних властивостей розплавів. Сформовано теоретичне підґрунтя для створення алгоритму розрахунку кінематичних властивостей розплаву як елемента опису його структури з подальшою реалізацією засобами комп'ютеризації.

Одним зі способів опису структури рідини (розплаву) є створення нових або ж удосконалення існуючих математичних моделей розрахунку характеристик розплаву.

Для опису рівноважних і кінетичних властивості рідин (розплавів), а також для інтерпретації експериментальних результатів пропонувались різноманітні моделі рідини. Модельні представлення використовують також при розв'язку інтегро-диференціальних рівнянь, які зв'язують функції розподілення з потенціалами взаємодії. Зазначено,що інтегро-диференційні рівняння є потужним математичним алгоритмом опису неоднорідних динамічних моделей, але при цьому безпосередньо залежить від ефективності програмних засобів, які реалізують запропоновані моделі.

Запропоновано в якості найпростішої моделі рідини використовувати модель жорстких сфер. Визначено причини, які дозволяють вибрати цю модель як оптимальну, а саме: наявність аналітичного виразу для структурного фактора; застосування для опису електронних і атомних властивостей розплавів. Визначено оптимальні способи отримання оптимальних значень для теоретичного розрахунку структурного фактора запропонованої моделі.

У результаті проведеного аналізу встановлено існування відповідності між розрахованими й експериментальними структурними факторами. Це дозволило зробити висновок про можливість застосування моделі жорстких для розрахунку рівноважних і кінетичних властивостей розплавів. Визначено,що модель жорстких сфер може слугувати в якості апроксимації для опису структури як однокомпонентних, так і багатокомпонентних розплавів (рідин).

Ключові слова: *модельне представлення, оптимізація, модель жорстких сфер, розплав, опис структури рідини*

Вступ

Значна частина речовин, які використовуються в промисловості формується з рідкого стану, а це означає, що в рідині закладена інформація, яка дасть можливість керувати процесами кристалізації, отримувати матеріали з наперед заданими властивостями. Ці знання можна отримати або шляхом створення теорії рідких багатокомпонентних систем, або отримання експериментальним шляхом їх фізичних властивостей. З цієї точки зору особливо актуальним постає вивчення рідин у більш вузькому, суто фізико-хімічному аспекті, а саме – розплавів.

Для опису рівноважних і кінетичних властивостей рідин (розплавів), а також для інтерпретації експериментальних результатів пропонувались різноманітні моделі рідини. Модельні представлення використовують також при розв'язку інтегро-диференціальних рівнянь, які зв'язують функції розподілення з потенціалами взаємодії.

Аналіз сучасних досліджень і публікацій

Дослідження структури розплавів як двокомпонентних систем присвячені теоретичні праці таких дослідників, як Барчій І. Є., Переш Є. Ю., Різак В. М., Худолій В. О., в яких представлені діаграми стану систем. Дослідженню закономірностей фізико-хімічної взаємодії у багатокомпонентних системах присвячено роботи Буланової М.В., Іванченка В. Г., Казимірова В. П., Носенка В. К., Петруша І. А., Роїк О. С., Дутчака Я. І. [1]. Результати їх досліджень носять фундаментальний характер і формують теоретичну базу для прогнозування рівня експлуатаційних характеристик розплавів. Практична реалізація цих результатів можлива шляхом застосування моделей і методів опису структури рідини.

Обрана нами модель жорстких сфер також широко вивчалась науковцями. Останнім часом приділялась значна увага удосконаленню цієї моделі. Так, у роботі [2] для розрахунку інтегрованої функції $I(k)$ рідких Ge, Ga, Sb використано подвійну модель жорстких сфер. У результаті $I(k)$, крім головного максимуму, має додатковий максимум, положення якого узгоджується з експериментальними даними. Автори роботи [2] розрахували структурний фактор одномірної рідини із взаємодією твердих шарів зі сходинками і отримали невелике плече на правій гілці першого піка структурного фактора, що в деяких випадках спостерігається й експериментально.

Дана модель часто використовується для розрахунку рівноважних і кінетичних властивостей розплавів. Так у роботі [3] за допомогою моделі жорстких сфер визначалась температурна залежність координаційних чисел рідких металів. Модель жорстких сфер використовувалась для розрахунку електроопору [4, 5], в'язкості [6] і термодинамічних властивостей [7, 8] розплавів.

Виділення частини невирішеної проблеми

Для оптимізації роботи промисловості необхідне розуміння основних фізичних властивостей рідин і газів, законів їх руху. З цієї точки

зору особливо актуальним видається дослідження рідин шляхом модельного представлення опису її структури, а також вибір оптимальної моделі та методу її реалізації.

Окрім того, при створені прикладних програм оптимізації необхідно враховувати як особливості розв'язуваних рівнянь, так і особливості об'єктів, що моделюються. Проте здійснити це проблематично через відсутність характеристики застосування моделі жорстких сфер для модельного представлення опису структури рідини з урахуванням перелічених особливостей.

Мета досліджень

Мета роботи – характеристика застосування моделі жорстких сфер, визначення особливостей використання моделі жорстких сфер для опису структури рідини – однокомпонентних чи багатокомпонентних розплавів.

Висвітлення основного матеріалу

Серед особливостей застосування інтегро-диференціальних рівнянь для об'єкту моделювання вирізняють:

–неоднорідність способів дискретизації диференціальної і інтегральної частин рівняння;

–необхідність точної сумісності складових частин алгоритмів моделювання;

–необхідність врахування вимог до швидкодії і т.д.

Ці обставини зумовлюють необхідність створення комплексу алгоритмів і програм моделювання для забезпечення необхідного вибору, який враховує різноманітні рівні складності і різноманітність режимів об'єктів моделювання.

Найпростішою моделлю опису структури рідини, що використовується при розв'язку інтегрального рівняння:

$$q(12)\cdot e^{\varphi(12)/KT} = 1+\rho\int[q(23)-1]q(13)[1-e^{\varphi(13)/KT}]d3, \qquad (1)$$

яке описує кінематичні властивості розплавів, є модель жорстких сфер:

У даній моделі парний потенціал взаємодії записується у вигляді:

$$\varphi(r)=\begin{cases}\infty\, при\ r\le\sigma,\\ 0\ \ при\, r>\sigma,\end{cases} \qquad (2)$$

де σ – діаметр сфери.

Така спрощена модель міжчасткової взаємодії пояснюється тим, що при скороченні відстані між іонами до певних розмірів потенціальна енергія різко зростає, нагадуючи ефект співударяння твердих куль.

Згідно робіт [2, 7] розв'язок рівняння (1) з використанням твердосферного потенціалу (2) дає наступний вираз для структурного фактора:

$$a(k\sigma)=[1-\rho\cdot c(k\sigma)]^{-1}, \qquad (3)$$

де $c(k\sigma)$ – Фур'є-образ прямої кореляційної функції:

$$c(k\sigma) = -4\pi\sigma^3 \int_0^1 r^2(\alpha + \beta r + \gamma r^3) \cdot \frac{\sin(k\sigma r)}{k\sigma r} dr. \quad (4)$$

Коефіцієнти α, β, λ визначають виразами:

$$\alpha = (1+2\eta)^2/(1-\eta)^4, \quad (5)$$

$$\beta = -6\eta(1+\eta/2)^2/(1-\eta)^4, \quad (6)$$

$$\gamma = \alpha\eta/2, \quad (7)$$

де $\eta = \frac{1}{6} \cdot \rho\pi\sigma^3$ – коефіцієнт упаковки жорстких сфер.

Таким чином, для теоретичного розрахунку структурного фактора в даній моделі необхідно мати значення η і σ. Оптимальні значення η і σ визначають двома способами. У першому з них використовують рентгенографічні дані: за висотою першого експериментального отриманого максимуму структурного фактора визначають η , а за його положенням – σ [7].

Другий спосіб ґрунтується на відомому з термодинаміки обмеженні:

$$a(0) = \rho kT\beta_T, \quad (8)$$

де β_T – ізотермічне стиснення.

З іншого боку, із рівнянь (3–7) отримаємо:

$$a(0) = (1-\eta)^4/(1+2\eta)^2. \quad (9)$$

Маючи експериментальні значення ρ і β_T , з рівнянь (8, 9) легко отримати значення η.

Слід відзначити, що краща відповідність теоретичного структурного фактора з експериментальним, особливо в області першого максимуму, отримується при використанні значень η і σ визначених першим способом.

Розв'язок інтегрального рівняння (1) для бінарної суміші жорстких сфер з діаметрами σ_1 і σ_2, здійснений у роботах [4, 5], дає аналітичні вирази для парціальних структурних факторів:

$$a_{11}(k) = [1-\rho_2 C_{22}(k)]/D(k),$$

$$a_{22}(k) = [1-\rho_1 C_{11}(k)]/D(k), \quad (10)$$

$$a_{12}(k) = \sqrt{\rho_1\rho_2} C_{12}(k)]/D(k),$$

$$D(k) = [1-\rho_1 C_{11}(k)][1-\rho_1 C_{11}(k)] - \rho_1\rho_2 C_{12}^2(k), \quad (11)$$

де $C_{i,j}$ – кореляційні функції, вирази для яких приведені в роботах [5].

Рівняння (10, 11) визначаються трьома параметрами:

–коефіцієнтом упаковки $\eta = \eta_1 + \eta_2$,

–відношенням діаметрів жорстких сфер,

–концентрацією компонента з великим діаметром x_2 .

Зокрема, модель жорстких сфер може бути використана для визначення парціальних структурних факторів певної системи сплавів.

Парціальні структурні фактори $a_{i,j}(k)$ дозволяють вирахувати сумарний структурний фактор:

$$a(k) = x_1 a_{11}(k) + 2 \cdot \sqrt{x_1 x_2} \cdot a_{12}(k) + x_2 a_{22(k)}. \qquad (12)$$

Моделі жорстких сфер можуть бути використані для розрахунку кінематичних властивостей розплавів, а саме:

–температурної залежності координаційних чисел рідких металів;

–електроопору;

–в'язкості;

–термодинамічних властивостей.

Величина загального структурного фактора *a (S)* для бінарних розплавів пов'язана з величинами парціальних структурних факторів $a_{ij}(S)$ виразом:

$$a_{ij}(s) = \frac{C_1^2 f_1^2}{< f >^2} a_{11}(s) + \frac{C_2^2 f_2^2}{< f >^2} a_{22}(s) + \frac{2C_1 C_2 f_1 f_2}{< f >^2} a_{12}(s), \qquad (13)$$

де f_1, f_2– атомні фактори розсіювання компонентів, C_1, C_2 – їх концентрації, $<f>=C_1 f_1 + C_2 f_2$ – середній фактор розсіювання розплавів.

Знаходження функцій $a_{ij}(S)$ представляє собою складну задачу як в експериментальному, так і в теоретичному плані. Для визначення парціальних структурних факторів необхідне проведення трьох незалежних дифракційних експериментів для одного розплаву або використання трьох ізотопів одного і того ж елемента. Ці експерименти визначають три функції *a (S)* для одного і того ж сплаву, але з різними ваговими множниками парціальних структурних факторів, що дозволяє розв'язати систему трьох незалежних рівнянь виду (1) і отримати значення $a_{11}(S)$, $a_{12}(S)$ і $a_{22}(S)$. Подібні розрахунки дуже трудомісткі, тому виникає необхідність створення певного алгоритму з його подальшою реалізацію засобами комп'ютеризації, що значно спростить задачу.

Висновки

Відносно непогана відповідність між розрахованими і експериментальними структурними факторами дозволяє зробити висновок, що модель жорстких сфер може слугувати (очевидно, тільки в першому наближені) хорошою апроксимацією для опису структури як однокомпонентних, так і двокомпонентних розплавів. Таким чином, обрана модель є оптимальною для представлення опису структури рідини (розп-

лаву) з метою подальшого формування необхідних експлуатаційних властивостей.

Все це дозволяє стверджувати про доцільність використання моделі жорстких сфер для розрахунку кінематичних властивостей розплаву. Дане дослідження формує теоретичне підґрунтя для розроблення алгоритму на основі математичної моделі з подальшою його реалізацією засобами комп'ютеризації.

Література

1. Дутчак Я.И. Рентгенография жидких металов. Львов, «Вища школа», 1977, 162 с.
2. Влияние обработки расплава в МГД-установке и интенсивной пластической деформации на структуру и свойства силуминов [А. Л. Березина, Т. А. Монастырская, В. И. Давиденко и др. *Металлофизика и новейшие технологии*. – 2009. – Т. 31, № 10. – С. 1417-1426.
3. Крокстан К. Физика жидкого состояния. Статистическое введение. М: «Мир», 1978, 400с.
4. І.І.Адаменко, Л.А.Булавін. Фізика рідин та рідинних систем. Київ ACMI 2006, 535с. ISBN 966-7653-32-3.
5. Моот Н., Девис Е. Електронние процеси в некристалических веществах. М., «Мир», 1972, 472с.
6. Bush G., Guntherodt H.Y. Electronic properties of liquid metals and alloys. *Soid State Phys.* Vol.29. New-Yarc-London, 1974. P. 235-313.
7. Хейне В., Коен М. Уейр Д. Теория псевдопотенциалов. М: «Мир», 1973, 557с.
8. Zaitsevskii A.V., Van Wüllen C., Titov V. Russian Chemical Reviews. 2009. Т. 78. № 12. С. 1173-1181. Relativistic pseudopotential model for superheav elements: applications to chemistry of eka-hg and eka-pb.
9. Крисько О.В., Крисько О.В., Скоробогатова Т.В. Расчет температурной части электросопротивления алюминия с помощью гладкого нелокального модельного потенциала (ГНМП) простых металлов. *Современные проблемы науки и образования.* 2014, № 6.
10. Харрисон У. Псевдопотенциали в теории металов. М.: «Мир», 1978. 366с.
11. Jin, C., Zhang, J., Li, X., Yang, X., Li, J., & Liu, J. (2013). Injectable 3-D fabrication of medical electronics at the target biological tissues. *Scientific Reports, 3(6163), 3442.*
12. Kim, D., & Lee, J. B. (2015). Magnetic-field-induced liquid metal droplet manipulation. *Journal of the Korean Physical Society,* 66(2), 282-286.
13. Tan, S. C., Yuan, B., & Liu, J. (2015). Electrical method to control the running direction and speed of self-powered tiny liquid metal motors. *Proceedings of the Royal Society A Mathematical Physical & Engineering Sciences,* 471(2183), 32-38.

Стаття надійшла до редакційної колегії 23.10.2020 р.

MODEL REPRESENTATIONS OF THE MELTS STRUCTURE DESCRIPTION BY THE MODEL OF HARD SPHERES

O. O. Petruk, O. T. Vavryk, O. S. Tsareva, L. M. Hobyr
Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas;
15, Carpathianst., Ivano-Frankivsk, 76019;
tel. +380 (342) 72-38-24; e-mail: pma@nung.edu.ua

In the article the optimization of the oil and gas enterprise, a complex process both from the technological and from the economic point of view is investigated. It is noted that today the development of methods of mathematical modeling of physical processes, for example, in oil fields on the basis of theoretical research and modern computer technology is absolutely relevant

One of the ways is to create new or improve existing mathematical models of processes occurring in oil and gas reservoirs, and calculate on their basis the characteristics of the process that optimize production. From this perspective, the study appears particularly relevant liquids in a narrow, purely physical and chemical aspects – namely melt.

Various fluid models have been proposed to describe the equilibrium and kinetic properties of liquids (melts), as well as to interpret experimental results. Model representations are also used in solving integrodifferential equations that relate distribution functions to interaction potentials. It is noted that integrodifferential equations are a powerful mathematical algorithm for describing inhomogeneous dynamic models, but they depend directly on the efficiency of software that implements the proposed models.

The model of hard spheres as simple fluid model proposed use. The reasons that allow you to choose this model as optimal were defined. Namely: the presence of analytical expression for the structural factor; application to describe the electronic and atomic properties of melts. The optimal methods for obtaining optimal values for the theoretical calculation of the structural factor of the proposed model were determined.

As a result of the analysis of existence of correspondence between the calculated and experimental structural factors it is established. This led to the conclusion that the possibility of applying the model of rigid to calculate the equilibrium and kinetic properties of melts exists. It is determined that the model of rigid spheres could be used as an approximation to describe the structure of both one-component and multicomponential melts (liquids).

Key words: *model representation, optimization, oil and gas complex, model of rigid spheres, melt, liquid structure description*