# *Предисловие*

Технологическое моделирование является одним из прикладных аспектов системно-динамического моделирования (системной динамики), которое широко применяют для анализа и прогнозирования сложных процессов как различной природы, так и различных специализированных информационно-аналитических систем поддержки принятия решений. Применение методов имитационного моделирования в исследовании промышленных систем позволяет решать задачи бизнес-планирования, логистики и обработки грузов, повышения эксплуатационной надежности и оптимизации систем энерго- и водоснабжения.

Реализация положений системной динамики позволяет исследовать технологические риски промышленных систем, осуществлять анализ риска аварий, оценивать условия обеспечения работоспособности технологических установок при сохранении заданного уровня производительности. На основе использования методов теории живучести стали возможными оценка безопасности промышленных технологий, обеспечение интеграции пространственной информации и экспертных знаний при моделировании природно-технических комплексов.

Основой системного анализа технологических процессов является математическое моделирование, в частности с применением методов математической статистики. Поэтому в пособии подробно изложены классические схемы построения статистических моделей на основе D-оптимальных планов и метода наименьших квадратов.

Навыки по анализу априорной информации, выбору нужного плана опытов, построению математического описания процесса в области экспериментирования, проведению статистического анализа, выбору наикратчайшего пути к оптимуму и осуществлению движения по этому пути составляют сумму знаний и умений, необходимых каждому экспериментатору.

Из многих возможных путей поиска оптимальных условий рассмотрен метод Бокса—Уилсона, который позволяет получать статистические модели процессов, используя факторное планирование, регрессионный анализ и движение по градиенту. Изложены основ-

ные положения аналитической оптимизации моделей технологических процессов в условиях однозначности.

В пособии рассматриваются различные аспекты технологического моделирования в рамках системного анализа технологических процессов и синтеза строительных материалов. Представлены различные методики построения моделей и нахождения области оптимума. Теоретические концепции и модельные построения иллюстрируются практическими примерами получения строительных материалов.

Целью, которую ставил перед собой автор, является изложение классических и современных методов аналитического моделирования технологических процессов и математического планирования экспериментов; развитие навыков практического применения планирования эксперимента; проведение системного анализа технологических процессов.

Изложены основные принципы построения логических и детерминированных моделей отдельных технологических процессов. Рассмотрены способы построения интерполяционных моделей и аналитическая оптимизация этих моделей в условиях адекватности.

Положения теории живучести рассмотрены применительно к схеме конструкция — технология — бизнес. «Живучесть» конструкций — это их надежность, обусловленная выбором материалов, грамотным проектом и ответственным монтажом. «Живучесть» технологии — возможность получить материалы с заданными свойствами с оптимизированными затратами и на оптимальном оборудовании. Основным же критерием является способность «выживания» предприятий, занимающихся и проектированием конструкций, и производством материалов, и комплектацией, и возведением зданий и сооружений, т.е. «живучесть бизнеса».

*Автор благодарит инженеров П.К. Гудкова, Т.В. Смирнову и А.В. Чугункова за помощь в подготовке материалов учебного пособия.*

# 1. Моделирование как способ изучения процессов и явлений

## 1.1. ВИДЫ МОДЕЛЕЙ И СПОСОБЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

### 1.1.1. Модель как инструмент изучения физического объекта

Изучая любой объект, — физическое ли то явление или технологический процесс — мы умышленно упрощаем до удобного или до понятного нам уровня, т.е. представляем это явление или этот процесс в виде модели. Два условия должны при этом соблюдаться: модель должна достоверно описывать реальный процесс и способствовать получению полезной и новой информации, а также быть экономична и удобна в использовании.

Модель может отличаться от реального объекта как масштабом, так и природой [35; 39]. В этом отношении математические модели не составляют особого исключения. Согласно существующим представлениям [25] существует пять типов математических моделей: уравнения математической физики, концептуальные математические модели, экспериментально-статистические модели, модели исследования операций, имитационные модели.

*Модели, основанные на уравнениях математической физики,* базируются на анализе бесконечно малых изменений в физической системе бесконечно малого объема. В основе таких моделей лежат фундаментальные законы природы или не менее фундаментальные следствия из этих законов. Для инженерных расчетов необходим переход от бесконечно малых величин к конечным (измеримым) величинам в реальной системе. Этот переход в некоторых случаях аналитически сложен, а в большинстве невозможен, поэтому интегрирование заменяют приближенными методами. В качестве инженерного средства преодоления подобных «аналитических барьеров» и сформировалась теория подобия [22; 26], соединившая дифференциальные уравнения с экспериментальной информацией о системе.

*Концептуальные математические модели* имеют в своей основе некую инженерную мысль, выраженную в терминах данной науки с последующим абстрактно-знаковым описанием с помощью диффе-

ренциальных или алгебраических уравнений, геометрических соотношений, логических операций. Подобные модели достаточно просто поддаются инженерной интерпретации, но не всегда могут быть адекватны реальным процессам.

*Экспериментально-статистические модели* описывают с известной точностью (степенью адекватности) связь между входами и выходами системы без анализа внутренней структуры этой системы. Для данного способа моделирования характерны универсальность методологии сбора экспериментальной информации; сложность всесторонней интерпретации параметров моделей и ограниченность области применения такой модели, адекватной только в рамках объекта, для которого эта модель построена.

*Модели исследования операций* как совокупности действий, направленных на достижение какой-либо цели, характерны, главным образом, для технико-экономических задач.

В основе *имитационных моделей* лежит объединение различных способов моделирования, включение моделей любых типов.

Отдельной областью моделирования являются *модели, построенные на умозаключениях*, т.е. на теоретическом осмыслении имеющихся предпосылок (существующих концепциях и «багаже» знаний), а также на результатах практических исследований, добытых в эксперименте, и умозаключениях самого «разработчика» модели. В этом «создателю» широкую поддержку оказывают базы данных и современные способы накопления и обработки информации.

При решении реальных задач нет четких границ применения различных типов моделей. В задачах анализа систем, направленных на познание внутренних механизмов их функционирования, приоритетным являются физико-математическое и концептуальное моделирование. В задачах управления конкретной системой (технологией изготовления материала, например) приоритетными являются статистические модели, модели исследования операций, а также имитационные модели на их основе.

*Статистические методы* разработаны, обоснованы и широко применяются в практике моделирования и анализа технологических процессов. Статистические модели получают на основе специальных методов планирования и обработки результатов эксперимента, т.е. реализации той совокупности действий, к которой надо обращаться, чтобы задавать природе интересующие нас вопросы. Подобные модели занимали и, вероятно, будут занимать основное ме-

сто в инженерной практике, особенно, в условиях все более расширяющегося применения компьютеров.

В учебном пособии рассматриваются способы моделирования, каждый из которых предполагает знание экспериментатором теории процесса, законов физики, основных положений, излагаемых в дисциплине «Процессы и аппараты». О моделировании технологических процессов в рамках кибернетических моделей, моделей, построенных на основе систем дифференциальных уравнений и законов, описывающих макрообъекты, а также графического моделирования, и пойдет речь в учебном пособии.

## 1.1.2. Модели и системы дифференциальных уравнений

Использование уравнений математической физики, статистической физики Гиббса и других методов описания процессов, протекающих в окружающем нас мире, является одним из наиболее распространенных приемов математического (знакового) моделирования. Применительно к технологии строительных материалов методы математической физики используют при описании способов помола сырьевых компонентов, приготовления смесей, формования и тепловой обработки, а также при изучении свойств изделий и их поведении в конструкции. Объектом изучения в данном случае является тепло- и массоперенос [8; 27], распространение звука, формирование и дрейф эксплуатационных характеристик.

### Построение детерминированной модели процесса

Технология строительных изделий, в частности их формование и тепловая обработка, зачастую сопровождаются созданием в материале избыточных давлений. Такие приемы широко распространены в технологии бетонов, керамических материалов, ячеистого бетона, вспученного перлита, керамзита и пеностекла. Управление процессами в макросистемах удобнее всего организовывать изнутри, влияя на процессы, протекающие на уровнях от элементарной структуры до микроструктуры изучаемых систем. Подобный подход позволяет глубже понять и создать методологию регулирования процессами переноса энергии и вещества в материале.

**Напряженное состояние и теория тепломассопереноса.** Напряженное состояние не обязательно должно формироваться за

счет воздействия внешних сил: приложения внешней нагрузки, вибрации, избыточного давления. Процессы теплопереноса, переноса влаги и вещества также формируют в материале, в том или ином виде, напряженное состояние. Теория тепломассопереноса, в том числе капиллярно-пористых и капиллярно-пористо-коллоидных систем, к которым относится большинство строительных формовочных смесей, создана трудами А.В. Лыкова, Н.Н. Долгополова, В.В. Перегудова, А.Б. Заседателева, В.Г. Петрова–Денисова [18; 23; 26].

На основе закономерностей переноса и законов сохранения вещества А.В. Лыковым [23] получена система дифференциальных уравнений, описывающих перенос теплоты и влаги:

$$\frac{\partial U}{\partial \tau} = a_m^{'} \nabla^2 U + a_m^{'} \delta \nabla^2 t;$$

$$\frac{\partial t}{\partial \tau} = a \nabla^2 t + \varepsilon \frac{\nu}{c} \cdot$$

Коэффициенты $a$ и $a'_m$ имеют одинаковую размерность (м$^2$/с) и являются коэффициентами пропорциональности между плотностью потока вещества или тепла и градиентом объемного содержания вещества ($\rho_0 \nabla U$) и тепла ($\rho_0 \nabla t$) и характеризуют инерционные свойства системы.

Термоградиентный коэффициент $\delta$ определяется как отношение градиентов массосодержания и температуры и характеризует перемещение влаги по направлению теплового потока от нагретых мест к холодным (термокапиллярный эффект), или наоборот (термоосмос).

Критерий фазового превращения $\varepsilon$ характеризует вид массопереноса и изменяется от 0 (массоперенос в виде жидкости) до 1 (массоперенос за счет испарения или конденсации пара).

Дифференциальные уравнения справедливы для любого вида влаготеплопереноса при известных коэффициентах тепломассопереноса и термодинамических характеристиках.

Теория, по своей сути, базируется на трех утверждениях, касающихся природы взаимодействующих параметров и механизма этого взаимодействия. В любой капиллярно-пористой и капиллярно-пористо-коллоидной системе формируются взаимодействующие поля температуры и влажности. Характер этого взаимодействия описывают дифференциальные уравнения переноса, решение которых возможно только в частных случаях, для процессов, близких к стационарным.

Температура в данном объеме материала пропорциональна теплу, подведенному к объему извне, теплу, создаваемому в данном объеме

за счет внутренних источников (экзотермические реакции, механическое тепло, тепло от прохождения электрического тока промышленной или высокой частоты); теплу, удаленному из данного объема теплопроводностью и вместе с переносимой массой, теплу, забранному в данном объеме внутренними стоками (эндотермические химические реакции, теплота фазового перехода). Коэффициентами пропорциональности являются теплопроводность, температуропроводность, теплоемкость и средняя плотность среды, слагающей данный объем. Эти параметры, в свою очередь, являются величинами, зависящими от температуры и влажности.

Влагосодержание данного объема среды (ее влажность) пропорционально количеству влаги, пришедшей из окружающих объемов за счет градиентов концентраций, давлений и температуры; количеству влаги, освобожденной в данном объеме (отжатой из матрицы, испаренной в поры и капилляры); количеству влаги, иммобилизованной в объеме (гидратация, хемо- и адсорбция, поверхностное натяжение); количеству влаги, удаленной из данного объема за счет градиентов концентраций, давлений и температуры. Коэффициентами пропорциональности являются массопроводность среды, ее реологические характеристики. Эти параметры зависят от физического состояния переносимой влаги (капельно-жидкое состояние, паровоздушная смесь), от температуры среды и ее фильтрационных характеристик. Большую роль играют граничные условия, условия внешнего тепло- и массообмена.

Структура среды принимается близкой к однородной, так как в противном случае пришлось бы говорить о ее дискретности, что привело бы к невозможности применения дифференциальных уравнений математической физики. Отметим, что носители индивидуальных свойств (монополи) поля температур настолько невелики, что относительно них это поле может рассматриваться как однородное. Другое дело поле влажности: перенос вещества (в том числе влаги, пара и пр.) осуществляется по капиллярам, образованным имеющими развитую поверхность частицами матрицы. Процессы не только происходят в поле действия сторонних сил (поверхностного натяжения, гравитационных), не учитываемых дифференциальными уравнениями, но и размер самих «монополей» — видим глазом. Подобные рассуждения приводят к необходимости введения характеристики, отражающей свойства среды, т.е. к необходимости введения понятия «элементарного объема».

В качестве «элементарного» принимается такой элемент объема капиллярно-пористо-коллоидного тела, в котором сосредоточены все его характеристики структуры. С учетом того, что упаковка частиц в реальном теле находится между кубической и ромбоэдрической (как шары в пирамиде), в качестве элементарного объема принят тетраэдр, построенный на центрах масс (или геометрических центрах) четырех граничащих друг с другом объемных элементов. В качестве подобных элементов могут быть приняты частицы твердой фазы, слагающей матрицу, частицы заполнителя, поры в материале или ячейки его структуры. Размер «элементарного объема», таким образом, зависит от геометрических характеристик этих элементов и толщины прослойки между ними.

**Тепломассоперенос в условиях среднеинтенсивного напряженного состояния.** В традиционных видах тепломассопереноса, сопровождающих такие процессы, как сушка, тепловлажностная обработка, давление (внутреннее напряжение в среде) является второстепенным по значимости процессом. Давление рассматривают как одну из причин массопереноса и фактор, определяющий изменение фильтрационных характеристик среды. Подобный подход полностью соответствует динамике процессов, растянутых во времени. Ситуация меняется, когда внутренние напряжения создаются в объеме специально. Подобные приемы позволяют как улучшить структуру материала (что отражается на его эксплуатационных свойствах), так и регулировать ее формирование, т.е. оперативно вмешиваться в технологический процесс.

Существует группа технологических приемов, когда в состав исходной смеси вводятся специальные добавки, расширяющиеся (или инициирующие газообразование) в процессе формования и (или) последующей тепловой обработки. Низкотемпературные добавки широко применяются в технологии газобетона; в технологии пенополистиролбетонов используется подвспененный полистирол, в технологии пеностекла — мел или сажа, в технологии перлита — пары воды. Принципы действия расширяющихся добавок основаны на выделении газообразных продуктов либо за счет химических реакций, либо за счет фазового перехода: испарения воды или порофоров.

Формирование поля напряжений, как во всем уплотняемом объеме, так и в его микрообъемах в значительной степени изменяет характер массообменных процессов в системе по сравнению с классическими теориями тепломассопереноса. Напряженное состояние в данном микрообъеме складывается (аддитивность давлений) из дав-

ления, переданного на данный элементарный объем через жесткую матрицу или через жидкую фазу (закон Паскаля); из давления, создаваемого собственно в элементарном объеме (температурное расширение твердой, жидкой и газовой фаз, фазовый переход и химические реакции, сопровождающиеся газовыделением); давления, релаксируемого в элементарном объеме за счет уплотнения структуры (минеральной матрицы), за счет потерь на вязкое трение, а также за счет отжатия жидкой фазы или перемещения вязкопластичной массы в соседние микрообъемы за счет градиента давлений.

Взаимосвязь тепломассопереноса и формирования напряженного состояния проявляется по многим параметрам. Внешние источники тепла, давления, задачи наружного тепломассообмена относятся к краевым условиям и устанавливаются в каждом конкретном случае. Если забыть на какое-то время, что рассматриваемые процессы архинестационарны, что среда, в которой они протекают, неоднородна, то описанные взаимосвязи могут быть представлены системой дифференциальных уравнений.

Использование математического аппарата тепломассопереноса [18; 19] с учетом фактора напряженного состояния [28] позволяет установить общие теоретические предпосылки формирования внутреннего напряженного состояния массопереноса.

Изменение давления в уплотняемом объеме устанавливается исходя из условия неразрывности потоков вещества и аддитивности самого интенсивного параметра, с учетом потерь на вязкое трение $\varepsilon_p$ и за счет релаксационных процессов, обусловливаемых массопереносом $q_m$. Закон формирования напряженного состояния в уплотняемом объеме приобретает вид

$$dP/d\tau = P(x, y, z, \tau) + \frac{1}{\eta\rho}\varepsilon_p + \frac{1}{\rho}\nabla q_m.$$

Дифференциальное уравнение влагопереноса в условиях гидротеплосилового воздействия сформулировано с использованием методологической базы теории А.В. Лыкова. Бесконечно малое локальное изменение влагосодержания в уплотняемом объеме равно бесконечно малому изменению влагосодержаний за счет удаления (переноса, отжатия) жидкости $q_m$, ее химической иммобилизации $\varepsilon_a$ и фазового перехода $\varepsilon_m$:

$$dU/d\tau = \nabla q_m + (\varepsilon_a + \varepsilon_m).$$

Для систем, в которых формируются внутренние напряжения на стадии формования, определяющими составляющими потенциала

массопереноса являются градиенты давлений и температур. В условиях среднеинтенсивного напряженного состояния температуры являются вспомогательными факторами.

Общий поток массы (влаги) можно представить как сумму плотностей частных потоков. Коэффициент $a_p$ характеризует влагопроницаемость материала при движении влаги в виде жидкости за счет избыточного давления, $a_m$ — паропроницаемость при наличии молярного переноса.

$$q_m = a_p \nabla P + a_m \rho \delta_t \nabla t \cdot$$

Функция $P(x,y,z,\tau)$ в уравнении, описывающем напряженное состояние, характеризует закономерность связи между потенциалопределяющими факторами (температурой и (или) скоростью химических реакций) и создаваемым давлением.

В основе этой связи лежат химические (физико-химические) процессы расширения паров воды, паровоздушной смеси, химического газообразования, поэтому точное аналитическое определение этой функции крайне сложно и весьма громоздко. В связи с этим в диссертационных исследованиях обоснован и реализован аналитически-экспериментальный способ определения напряженного состояния по этапам.

Формирование структуры газобетонной массы в замкнутом объеме проходит следующие этапы: приготовление формовочной смеси, содержащей вяжущее, молотый песок, газообразователь, добавки и воду; свободное вспучивание в смеси, до заполнения ею всего объема закрытой формы. Далее происходит структурообразование в замкнутом объеме в условиях формирования напряженного состояния и температурного воздействия; твердение в условиях повышенного давления при термосном выдерживании сырцового изделия в форме.

Применение систем уравнений математической физики позволяет глубже изучать процессы изготовления материалов, а в частном случае исследовать и закономерности формирования структуры материалов в условиях вариотропии давлений, и среднеинтенсивное напряженное состояние. При этом обязательным условием является изотропность (однородность) среды относительно функций, стоящих под знаком дифференциала. Если среда неоднородна, то оперировать такими понятиями, как «дифференциальная модель» или поле изменения и взаимодействия ряда физических величин, можно только в качестве иллюстрации процессов или явлений.

## Динамика процессов и построение комбинированных моделей

При исследовании технологических процессов или при решении анимационных задач может возникнуть необходимость моделирования этих процессов в реальном времени. В таком случае целесообразно применять динамические комплексные (математические) модели, которые учитывают временной фактор и строятся с применением различных способов моделирования

*Комбинированная модель* является совокупностью приемов, использующих различные типы математических моделей с реализацией активного эксперимента. Построение модели начинают с *формирования логической схемы*, учитывающей, что процессы происходят во времени $\tau$ в анизотропной среде с меняющейся однородностью. Параметры, характеризующие процесс, определяются как временной характеристикой, так и свойствами среды.

*Основой логической схемы является шаговый принцип*, основанный на дискретном восприятия времени и пространства. Используются временные интервалы $\Delta\tau$ и геометрические интервалы $\Delta x$, $\Delta y$, $\Delta z$ или «элементарный объем» $\Delta V = \Delta x \times \Delta y \times \Delta z$. При этом постулируется условие, что в пределах интервалов свойства среды описываются системой принятых в конкретной модели уравнений.

Временной интервал устанавливает оператор модели, он может быть выбран таким образом, чтобы процесс развивался как бы в реальном времени, а также ускоренно или замедленно. Для перехода от одного состояния модели к другому используют «шаговый принцип»: размер «шага» равен величине временного интервала. Допустим, что во времени модель проходит состояния: 1, 2, 3, …, $n$. Шаги по временным интервалам соответственно представляются системой:

$$\begin{cases} \tau_1 = \tau_0 + \Delta\tau \\ \tau_2 = \tau_1 + \Delta\tau \\ \tau_3 = \tau_2 + \Delta\tau \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ \tau_{n-1} = \tau_{n-2} + \Delta\tau \\ \tau_n = \tau_{n-1} + \Delta\tau \\ \tau_{n+1} = \tau_n + \Delta\tau \end{cases}$$

Работа с моделью начинается при $\tau_n = \tau_0$ и проходит последовательно все временные позиции от $\tau_1$ до $\tau_{n+1}$

В качестве примера построения модели рассмотрим технологический прием получения изделий способом формования в условиях вариотропии давлений и повышенных температур. Название сравнительно новое, но данный технологический прием широко применяют в технологии строительных материалов. В его основе лежит создание внутреннего давления за счет выделения газов (в результате фазового перехода или химических реакций).

Способ «вариотропии давлений» можно разделить на высокотемпературный (получение пеностекла, вспучивание керамзита или перлита) и низкотемпературный (получение газобетона, пенополистиролбетона, пенопластов, пенополиуретанов). При низкотемпературном способе вспучивание происходит при температурах, не превышающих 100 $^{o}$C как за счет выделения газообразователей, фазового перехода воды (испарения), так и за счет температурного расширения парогазовой смеси.

Реологические характеристики смесей на основе гидравлических или гипсовых вяжущих регулируют расходом воды, введением добавок, механическим воздействием. У пенопластов обязательным условием является размягчение полимера; у полиуретанов — вязкость исходного мономера и активность порофора. Определяющий вид теплопереноса — кондукция.

При высокотемпературном вспучивании процессы происходят в условиях формирования пиропластического состояния. Оптимальные температуры определяются характеристиками исходных смесей. Для чистоты построения моделей необходимо учитывать как кондуктивный теплоперенос, так и перенос тепла излучением.

Отметим, что независимо от разновидностей вспучивания внутреннее давление не превышает 100 кПа. Значения внутреннего давления в материале могут превышать 0,1 МПа только при создании специальных условий. В этом случае используют жесткие перфорированные или сплошные формы. Этот технологический прием опробован в технологии пенополистиролбетона, гипсополистиролбетона, легковесных огнеупоров и ячеистого стекла на основе перлитовой породы.

*Таким образом, процесс протекает во времени и характеризуется двумя параметрами: давлением, создаваемым в материале, и температурой материала.*

В дифференциальной форме этот процесс описывают системы тепло- и массопереноса в условиях вариотропии давлений. Поле температур является непрерывным и задано в каждой точке. Флуктуации температур определяемы и полностью соответствуют статистической термодинамике Гиббса. Величины же давлений экспериментатор может зафиксировать только для макрообластей, соразмерных макропорам, или, в крайнем случае, — размерам датчиков. Даже теоретически среду, в которой формируется напряженное состояние, нельзя рассматривать как однородную (поры, капилляры, пленки и прослойки матрицы, поверхности раздела фаз, инертные включения). Поэтому говорить о поле внутренних давлений некорректно. Можно оценивать только характерные изменения давления от одной микрообласти к другой, т.е. — *вариотропию давлений*.

Для оценки характера протекания процесса достаточно знать изменение интегральных значений его характеристик (температуры и давления) в характерных точках, например в центре объема изделия, у наиболее холодной и наиболее нагреваемой поверхностей. В технологии легких бетонов нагрев объема, как правило, осуществляют путем электропрогрева, поэтому за характерную точку принимают геометрический центр уплотняемой смеси в форме. Электроды располагают на боковых поверхностях.

Рассмотрим модель прогрева материала, которая является сложной временной функцией параметров среды. Базовые интегральные уравнения, описывающие процесс, следующие:

| | |
|---|---|
| Выделение тепла в материале в результате прохождения электрического тока..... | $Q_{эл} = \dfrac{U^2 \tau}{R}$; |
| Нагрев материала за счет выделенного тепла..... | $Q_{н} = c \cdot m(t - t_0)$; |
| Потери тепла в окружающую среду..... | $Q_{о.с} = \dfrac{\lambda F (t - t_0)}{\delta} \times \tau$; |
| Уравнение теплового баланса (выделившееся тепло идет на нагрев материала и потери)..... | $Q_{эл} = Q_{н} + Q_{о.с}$; |
| Удельное сопротивление..... | $R = \rho \dfrac{\delta}{S}$. |

Расчетную формулу выводим из зависимости $Q_{эл} = Q_{н}$. Температура является функцией начального состояния, электрического напряжения $U$, сопротивления среды $R$; ее теплоемкости $c$ и массы $m$:

$$t = t_0 + \frac{U^2}{R \cdot c \cdot m}\tau.$$

С учетом временных интервалов температурная функция приобретает вид

$$t_\tau = t_{t-1} + \frac{U^2}{\rho \cdot c \cdot m} \times \frac{S}{\delta} \times \Delta\tau.$$

Характеристики среды изменяются в зависимости от температуры и влажности этой среды. Чтобы учесть эти измерения вводят систему уравнений с эмпирическими коэффициентами $a_1 \ldots a_6$ и $b_1 \ldots b_6$, определяемыми опытным путем.

Удельное сопротивление среды зависит от влажности среды и температуры:

$$\rho_{wt} = \rho_0 (1 + a_1 t)^{b_1} \times (1 + a_2 W)^{b_2}.$$

Теплоемкость смеси и изменение ее массы определяются влажностью:

$$c_W = c_0 (1 + a_3 W)^{b_3};$$

$$m_W = m_0 (1 + a_4 W)^{b_4}.$$

Потери в окружающую среду зависят от температуры смеси и ее влажности и от поверхности теплообмена. Удельные потери могут быть определены функцией

$$k_t = k_0 (1 + a_5 t)^{b_5}.$$

Изменение влажности зависит от давления, создаваемого в смеси, химических реакций и может быть задано как функция температуры:

$$W_t = W_0 (1 + a_6 t)^{b_6}.$$

С учетом всех дополнений модельная температурная функция приобретает следующий вид:

$$t_\tau = t_{\tau-1} + \frac{U^2}{k_t \rho_{Wt} c_W m_W} \cdot \frac{S}{\delta} \cdot \Delta\tau.$$

Значения коэффициентов $a_i$ и $b_j$ зависят от свойств минеральной матрицы, т.е. от ее природы и вещественного состава. Эти коэффициенты определяют опытным путем с аппроксимацией к линейным функциям, функциям второго порядка или к математическим полиномам. После вещественного определения этих коэффициентов становится возможным реализация программы по алгоритму, представленному на рис. 1.

Реализация этого алгоритма позволяет оценить изменение характеристик процесса во времени. Температурная функция рассчитывается по значениям характеристик состояния, определенным для предыдущего временного интервала, а давление, создаваемое в системе, определяется как функция температуры. Подобные приемы могут широко использоваться в решении технологических задач и при имитационном моделировании. Адекватность подобных моделей проверяется по специальным методикам, основанным на проверке сходимости результатов и соответствии теоретических (рассчитанных) зависимостей реальному распределению точек, характеризующих опытные значения.

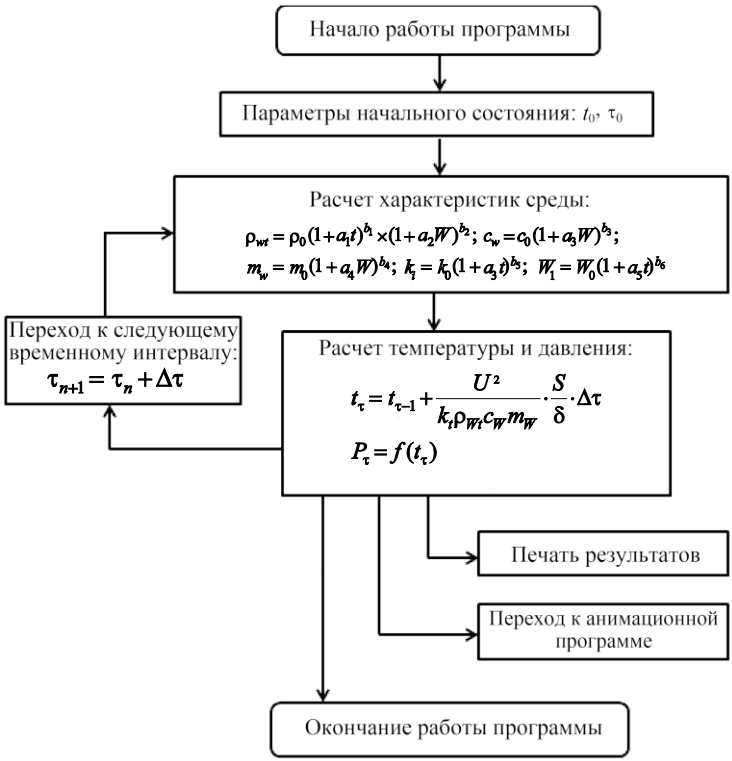


Рис. 1. Блок-схема модели

Модели, учитывающие временной фактор, широко применяют при исследовании нестационарных процессов, в том числе и тепло- и массопереноса; при технологическом моделировании и изучении технологических процессов.

## Статистика Гиббса и состояние газа внутри ячейки

Теплоизоляционные материалы характеризуются высокопористой структурой, поэтому состояние газообразной фазы в ячейке самым непосредственным образом влияет на теплопроводность материала. Состояние газа характеризуется двумя характеристиками: энергией и подвижностью. В комнатных условиях (температура 18—20 $^{o}$C и давление 0,1 МПа) газ в ячейке практически неподвижен, и его теплопроводность близка к теплопроводности покоящегося воздуха — 0,018 Вт/(м·К). Единственным способом передачи тепла является кондуктивный перенос через минеральную матрицу. При нагреве газа в ячейке его теплопроводность начинает расти вплоть до «тепловой прозрачности» материала [10].

Построение моделей на основе уравнений математической (или статистической) физики начинается с формирования логической схемы и (или) структурной модели процесса. Ниже, с использованием аппарата молекулярно-кинетической теории газа и классической статистики Гиббса, исследуется механизм теплопереноса в высокопористом материале.

*Отдельно взятая ячейка* в материале может рассматриваться как автономная система с определенными особенностями взаимодействия с окружением. Эти особенности, как и состояние самой системы, подчиняются законам статистической физики [37].

**Оценка энергетического состояния.** Рассмотрим систему А, включающую: выделенную ячейку в структуре газо- или пенобетона, заполненную газом (водородом и паровоздушной смесью) и минеральную матрицу, окружающую эту ячейку. Весь массив ячеистого бетона, окружающий систему А, рассматривается как внешний объем, находящийся с системой в состоянии тепло- и массообмена. Задача анализа энергетического состояния — изучение макросвойств системы А и оценка влияния этих макросвойств и на молекулярно-кинетические характеристики, и на теплопроводность газа, находящегося в ячейке.

Начальное состояние системы характеризуется температурой материала, равной 10–12 $^{o}$C. Газовая фаза в ячейке в этом случае находится в состоянии равновесия. Ее макросвойства практически равны своим средним значениям. Энергия постоянна и количество молекул газа так же неизменно ($E$=const, $N$=const). С течением времени система А обменивается и энергией, и числом частиц с соседними системами; для нее характерно состояние $dE \neq 0$ и $dN \neq 0$.

Физические (и химические тоже) свойства рассматриваемой системы не могут зависеть ни от чего иного, кроме как от внешних условий, в которых находится эта система, и свойств частиц, из которых она состоит. Только использование правильных моделей, адекватно отражающих свойства системы в данных физических условиях, позволяет получать на основе статистического метода такие результаты, которые хорошо соответствуют опыту.

Статистический подход ведет к более глубокому изучению макросвойств, в частности из статистики Гиббса следует возможность вычисления различных физико-химических характеристик произвольных макросистем на основе молекулярных данных. Задачи обоснования предвычисления макросвойств могут быть решены на основе статистического метода, который с самого начала исходит из наиболее фундаментальных соображений о связи между свойствами частиц макросистемы и ее физико-химическим поведением.

Основой классической статистической физики является положение о том, что каждому значению $E_i$ и $n$ отвечает некоторая группа состояний $\Gamma(E_i, n)$. Вероятность $w(E_i, n)$ застать систему в состоянии с энергией $E_i$ при фиксированном числе частиц $n$ может быть выражена формулой, известной как микроканоническое распределение Гиббса и являющейся принципиальной основой статистической физики:

$$w(E_i, n) \sim \Gamma(E_i, n).$$

Микроканоническое распределение показывает, что вероятность нахождения замкнутой системы в одном из состояний с данной энергией пропорциональна кратности вырождения. Чем больше состояний с данной энергией (кратность вырождения), тем с большей вероятностью можно застать систему А в одном из них.

Ячейка с газом не является замкнутой системой (строго говоря, таковых в природе вообще нет). Изучаемую систему можно рассматривать как макроскопическую в окружении среды с постоянными характеристиками, с которой возможен обмен частицами и энергией. В этом случае к изучаемой системе применимы следующие зависимости:

$$(E_i, n) = \frac{\exp[(\mu n - E_i)/\theta] \cdot \Gamma(E_i, n)}{\sum_{i,n} \exp[(\mu n - E_i)/\theta] \cdot \Gamma(E_i, n)};$$

$$(E_i) = \frac{\exp[(-E_i)/\theta] \cdot \Gamma(E_i)}{\sum_i \exp[(-E_i)/\theta] \cdot \Gamma(E_i)};$$

$$Z = \sum_i \exp\left(-{}^{E_i}/_{\theta}\right) \Gamma(E_i).$$

Конец ознакомительного фрагмента.
Приобрести книгу можно
в интернет-магазине
«Электронный универс»
e-Univers.ru