

УДК 669.27:519

## КОМПЬЮТЕРНЫЕ СИСТЕМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

*Докт. физ.-мат. наук, проф. ЧИЧКО А. Н.*

*Белорусский национальный технический университет*

Развитие современных вычислительных методов и быстродействующих компьютеров с большой дисковой и оперативной памятью открывает новые возможности для моделирования динамики технологических процессов. В связи с этим для промышленных предприятий и научно-исследовательских организаций представляют интерес программные продукты, моделирующие физические процессы, лежащие в основе современных промышленных технологий.

В Белорусском национальном техническом университете на механико-технологическом факультете начаты работы по разработке универсальных программных средств, которые предназначены для моделирования физических процессов технологического назначения, протекающих в сложных пространственных структурах, которые являются виртуальными элементами промышленного оборудования. Цель выполнения работ – создание импортозамещающих программ для моделирования различных процессов. Актуальность решения такого рода задач связана с тем, что универсальные программы по моделированию имеют высокую стоимость, которая на западном рынке исчисляется сотнями тысяч долларов. Поэтому многие исследователи используют программные продукты либо пиратского происхождения, либо учебные версии, которые не позволяют иметь такие возможности моделирования, которые может позволить собственный програм-

мный продукт. Следует отметить, что многие не знают о том, что специализированные продукты имеют внутреннюю защиту, поэтому результаты решения задачи могут существенно отклоняться от реальности. Создавая собственные программы, мы углубляемся в физику и математику моделируемого процесса и тем самым можем четко идентифицировать получаемые результаты. К тому же можно бесконечно улучшать модели, приближая их к реальности. Существующее многообразие программных продуктов свидетельствует и о том, что данные вопросы являются предметом ноу-хау. Наши программные продукты основаны на математическом ядре, включающем уравнения математической физики, связанные в виде дискретных правил клеточно-автоматного типа, позволяющие моделировать динамику сложных процессов в пространстве любой конфигурации. Это модели с высокой степенью дискретности, накладываемой на физические параметры процессов.

В основе ядра компьютерных систем лежат математические модели, построенные на физических уравнениях, описывающих движение веществ, охлаждение и кристаллизацию, процессы нагрева. В частности, используются система уравнений Навье–Стокса, уравнения неразрывности, уравнения движущегося потока и другие в зависимости от физики процесса [1–4]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \left( \frac{\partial V}{\partial t} + V \frac{\partial V}{\partial x} + U \frac{\partial V}{\partial y} + W \frac{\partial V}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \eta \left( \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right); \\ \rho \left( \frac{\partial U}{\partial t} + V \frac{\partial U}{\partial x} + U \frac{\partial U}{\partial y} + W \frac{\partial U}{\partial z} \right) = \rho g - \frac{\partial P}{\partial y} + \eta \left( \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \right); \\ \rho \left( \frac{\partial W}{\partial t} + V \frac{\partial W}{\partial x} + U \frac{\partial W}{\partial y} + W \frac{\partial W}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial z} + \eta \left( \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial z^2} \right); \\ \frac{\partial p}{\partial t} + \rho \left( \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial W}{\partial z} \right) = 0; \\ p = f(\rho); \\ \rho \left( \frac{\partial T}{\partial t} + V \frac{\partial T}{\partial x} + U \frac{\partial T}{\partial y} + W \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \lambda \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + q, \end{array} \right. \quad (1)$$

где  $V, U, W$  – проекции скорости на осях  $X, Y, Z$  соответственно;  $g$  – ускорение свободного падения;  $\rho$  и  $\eta$  – плотность и динамическая вязкость расплава;  $t$  – время;  $p$  – давление в рассматриваемой точке потока;  $T$  – температура в рассматриваемой точке потока;  $\lambda$  и  $c$  – теплопроводность и теплоемкость жидкости;  $q$  – функция, связанная с выделением твердой фазы.

Для учета процессов нагрева и охлаждения используются уравнения теплопроводности, учитывающие процессы фазовых и структурных превращений [5–7]:

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{1}{c(T)\rho} \left( \frac{\partial \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial y} \right)}{\partial y} + \frac{\partial \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right)}{\partial z} + F \right), \quad (2)$$

где  $\tau$  – время;  $x, y, z$  – декартовы координаты;  $\lambda(T)$  – коэффициент теплопроводности материала;  $c(T)$  – удельная теплоемкость материала;  $F$  – функция объемной мощности выделения теплоты при изменении структуры сплава (фазового перехода).

При моделировании термических напряжений используются системы уравнений теории

деформированного состояния [8–10] для сплошных сред:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} + \rho \bar{X} = \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}; \\ \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} + \rho \bar{Y} = \rho \frac{\partial^2 v}{\partial t^2}; \\ \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} + \rho \bar{Z} = \rho \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}; \end{array} \right. \quad (3)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \epsilon_x = \frac{\partial u}{\partial x}; \\ \epsilon_y = \frac{\partial v}{\partial y}; \\ \epsilon_z = \frac{\partial w}{\partial z}; \\ \gamma_{xy} = \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}; \\ \gamma_{yz} = \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z}; \\ \gamma_{zx} = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}; \end{array} \right. \quad (4)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_x = 2G \left( \epsilon_x + \frac{\nu}{1-2\nu} \epsilon - \frac{1+\nu}{1-2\nu} \alpha \theta \right); \\ \sigma_y = 2G \left( \epsilon_y + \frac{\nu}{1-2\nu} \epsilon - \frac{1+\nu}{1-2\nu} \alpha \theta \right); \\ \sigma_z = 2G \left( \epsilon_z + \frac{\nu}{1-2\nu} \epsilon - \frac{1+\nu}{1-2\nu} \alpha \theta \right); \\ \tau_{xy} = G \gamma_{xy}; \\ \tau_{yz} = G \gamma_{yz}; \\ \tau_{zx} = G \gamma_{zx}; \end{array} \right. \quad (5)$$

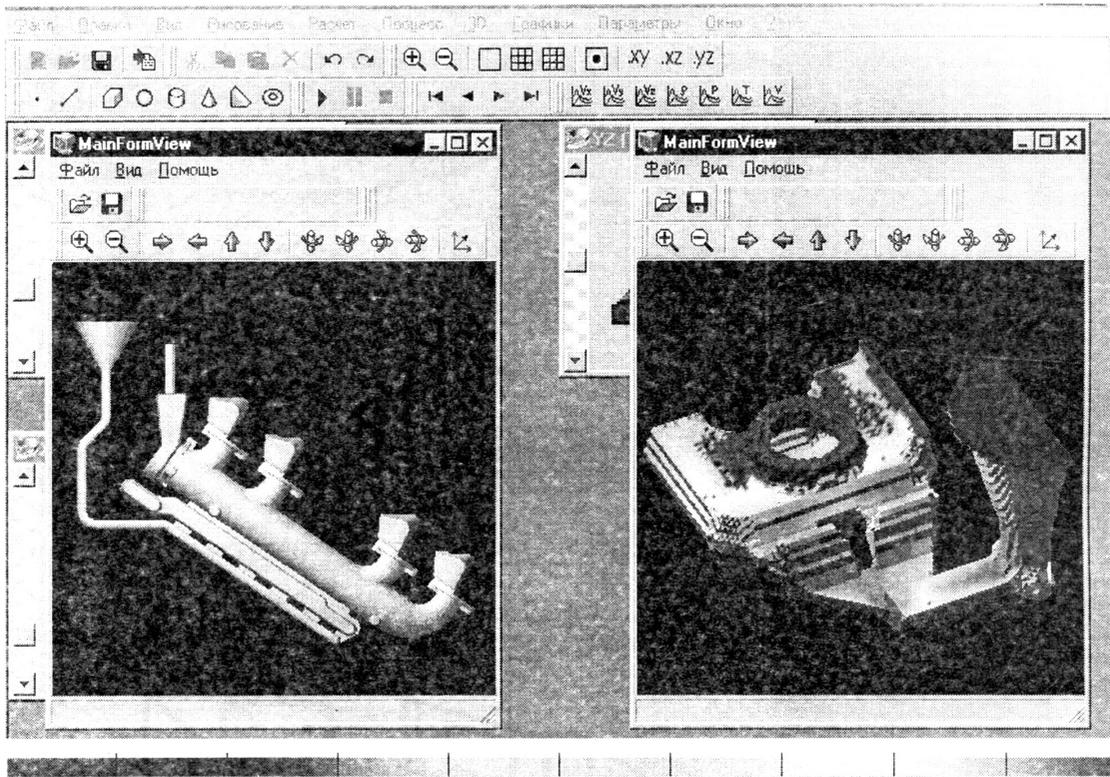


Рис. 1. Интерфейс компьютерной системы «ПроЛит» для моделирования процесса заполнения формы и кристаллизации сплава

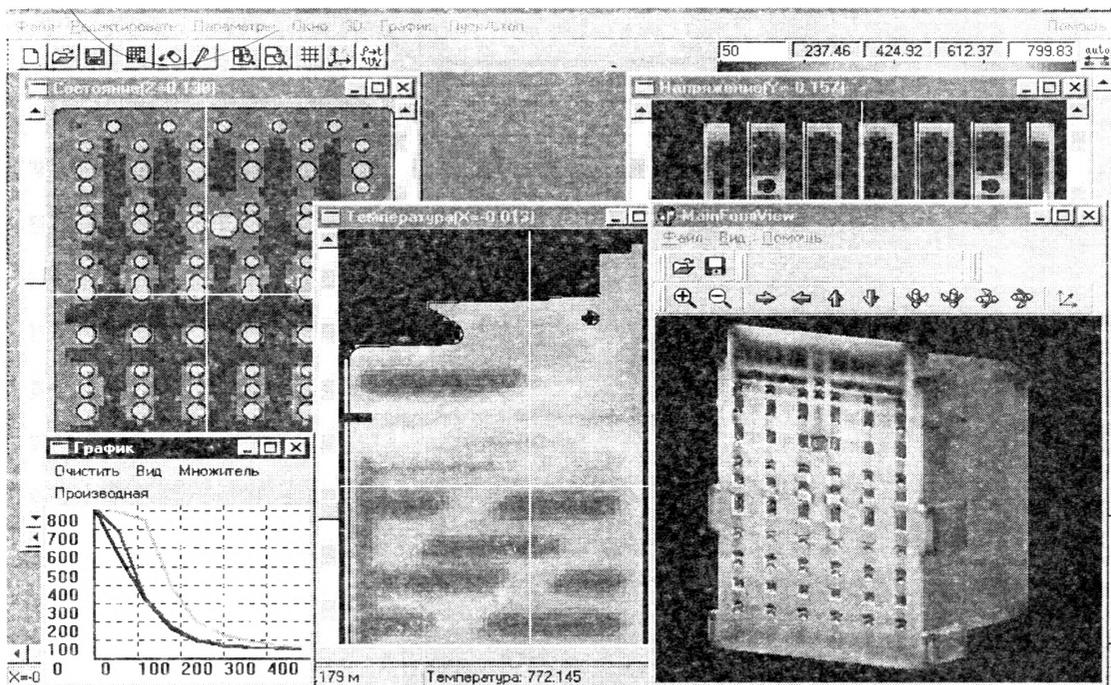


Рис. 2. Моделирование распределения температур и напряжений в детали, подвергнутой термической обработке с помощью компьютерной системы «ПроТерм»

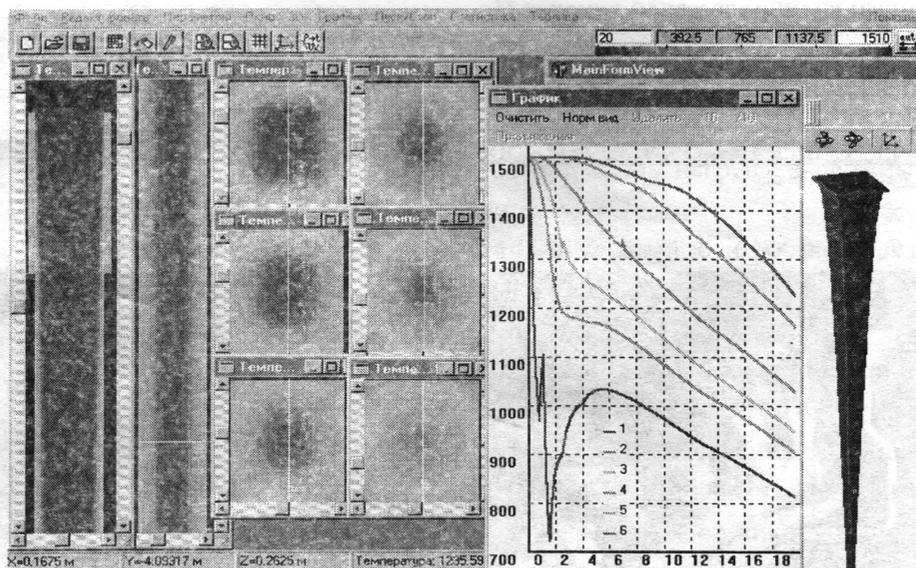


Рис. 3. Моделирование процесса кристаллизации и охлаждения промышленного слитка с помощью компьютерной системы «ПроНРС»

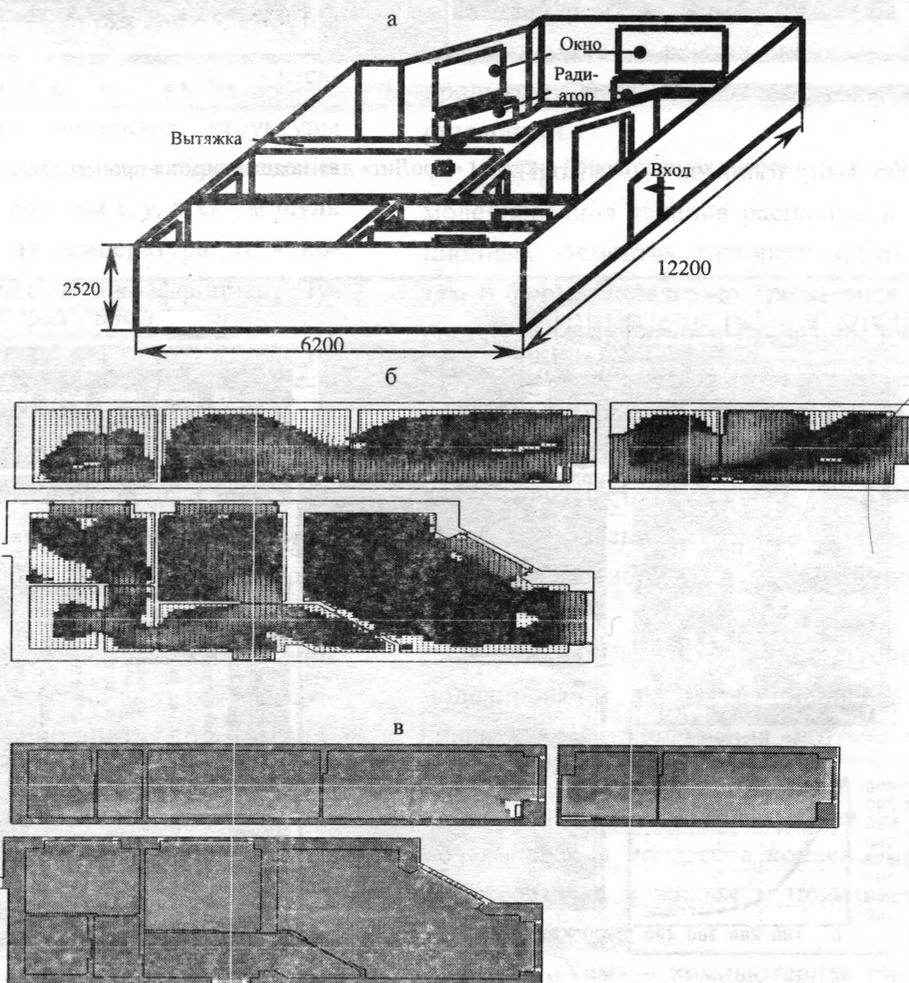


Рис. 4. а – моделирование теплового режима и воздухообмена в двухкомнатной квартире; б, в – пространственное распределение скорости и температуры воздушных потоков соответственно

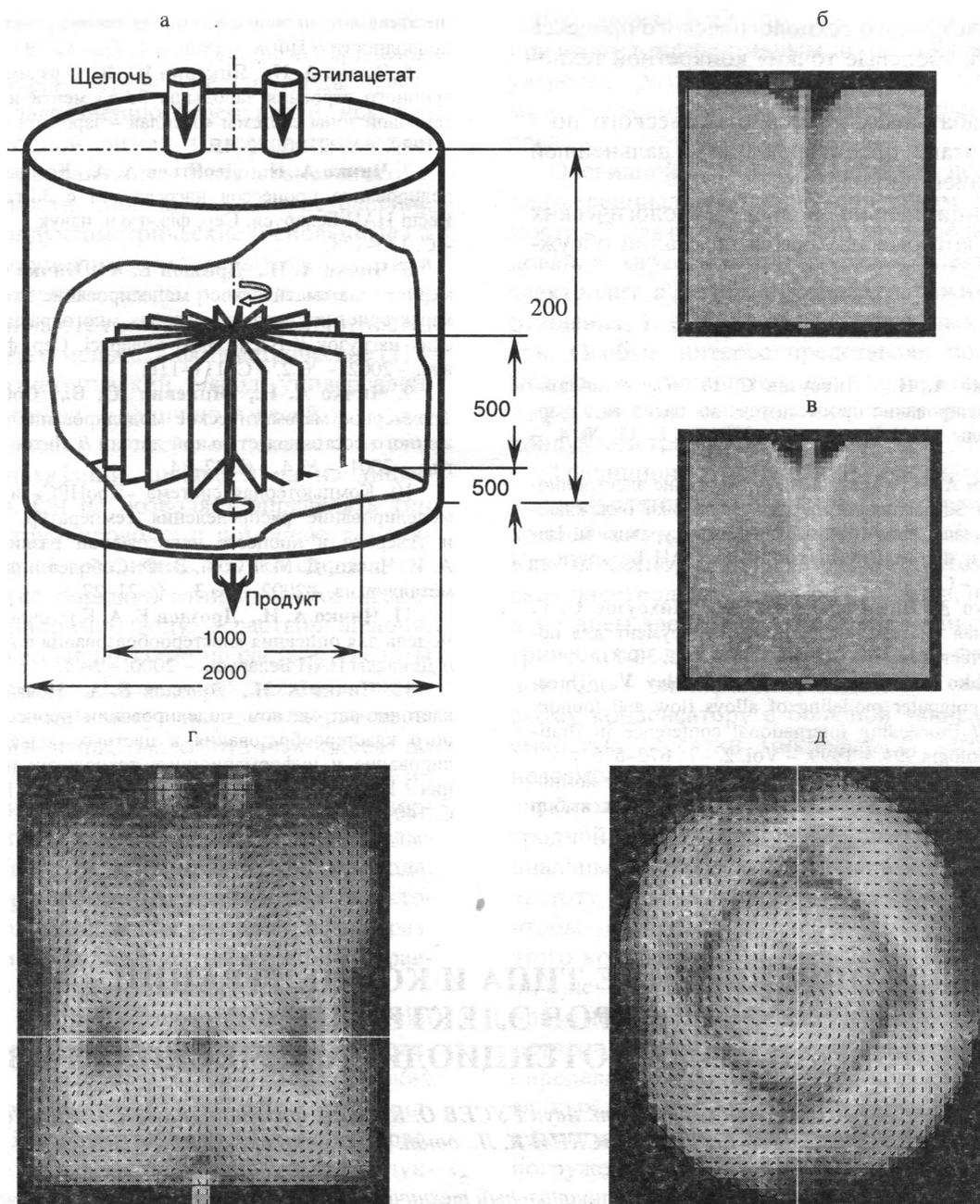


Рис. 5. Моделирование химического реактора смешения двух веществ: а – схема установки; б – распределение щелочи и этилацетата; в – то же для продуктов реакции; г, д – то же для скоростей жидкости в вертикальном и горизонтальном сечениях реактора соответственно

6. «ПроИмп» – компьютерная система для моделирования взрывных процессов, протекающих в пространственной структуре, позволяющая визуализировать весь процесс.

На рис. 1–5 представлены возможности разрабатываемых продуктов. На иллюстрациях моделируемых процессов показаны трехмерные изображения объектов (рис. 1–3), распределение температурных и скоростных потоков рас-

плавов (рис. 1–3) и воздушной среды (рис. 4–5) для различных пространственных точек.

### ВЫВОДЫ

Разработка систем перечисленных выше направлений позволит предложить белорусским предприятиям специализированные программы, позволяющие оперативно решать проблемы:

$$\left. \begin{aligned} \sigma_x \left( \frac{1}{\partial t} + \frac{1}{k} \right) &= 2G \frac{\partial}{\partial t} \left( \varepsilon_x + \frac{\nu}{1-2\nu} \varepsilon - \frac{1+\nu}{1-2\nu} \alpha \theta \right); \\ \sigma_y \left( \frac{1}{\partial t} + \frac{1}{k} \right) &= 2G \frac{\partial}{\partial t} \left( \varepsilon_y + \frac{\nu}{1-2\nu} \varepsilon - \frac{1+\nu}{1-2\nu} \alpha \theta \right); \\ \sigma_z \left( \frac{1}{\partial t} + \frac{1}{k} \right) &= 2G \frac{\partial}{\partial t} \left( \varepsilon_z + \frac{\nu}{1-2\nu} \varepsilon - \frac{1+\nu}{1-2\nu} \alpha \theta \right); \\ \tau_{xy} \left( \frac{1}{\partial t} + \frac{1}{k} \right) &= G \frac{\partial}{\partial t} \gamma_{xy}; \\ \tau_{yz} \left( \frac{1}{\partial t} + \frac{1}{k} \right) &= G \frac{\partial}{\partial t} \gamma_{yz}; \\ \tau_{zx} \left( \frac{1}{\partial t} + \frac{1}{k} \right) &= G \frac{\partial}{\partial t} \gamma_{zx}, \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

где  $\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z$  – деформации элементов структуры по осям  $x, y, z$  (общая деформация  $\varepsilon = \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z$ );  $\gamma_{xy}, \gamma_{yz}, \gamma_{zx}$  – касательные деформации элементов структуры плоскостей  $xy, yz, zx$ ;  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  – напряжения элементов структуры по осям  $x, y, z$ ;  $\tau_{xy}, \tau_{yz}, \tau_{zx}$  – касательные напряжения элементов структуры плоскостей  $xy, yz, zx$ ;  $u, v, w$  – перемещения элементов структуры по осям  $x, y, z$ ;  $G$  – модуль сдвига;  $\theta$  – остаточная температура;  $\alpha$  – коэффициент расширения;  $\nu$  – коэффициент Пуассона металлической среды;  $k = \frac{\eta}{G}$ .

Перечисленные уравнения составляют основу программных продуктов. При конкретной реализации используются различные зависимости, основанные на собственных экспериментальных данных, а также данных других исследователей, что позволяет обеспечить наибольшую адекватность моделей. В математическом ядре используются клеточно-автоматные правила, разработанные применительно к моделируемому процессу. С помощью этих правил учитываются многие особенности физики процесса, которая не может быть учтена перечисленными выше уравнениями [11, 12].

В настоящий момент разрабатывается несколько компьютерных систем различного назначения, которые позволяют проводить моделирование:

- 1) течения охлаждающихся расплавов в песчано-глинистых формах;
- 2) движения воздуха в помещениях различного назначения;
- 3) процессов нагрева в сложных промышленных печах;
- 4) напряжений и деформаций, структурообразования в деталях сложной конфигурации при термической обработке;
- 5) импульсных процессов при получении покрытий при динамическом нагружении;
- 6) кластерообразования в двойных, тройных системах (научная задача как пример моделирования процессов на микроуровне);
- 7) распределения напряжений и углерода в слитках для процессов непрерывной разливки стали.

Моделирование перечисленных процессов осуществляется в рамках специализированных продуктов, ряд которых находится на стадии разработки.

1. «ПроЛит» – компьютерная система для моделирования течения расплавов в конструктивных элементах литниково-питающих систем и форм. Определяет трехмерное поле скоростей и температур в промышленных конструктивных элементах (рис. 1).

2. «ПроТерм» – компьютерная система для моделирования процессов нагрева деталей. Определяет напряжение и оценивает процессы образования трещин в детали, проходящей термообработку в промышленных печах (рис. 2).

3. «ПроНРС» – компьютерная система для моделирования процессов непрерывной разливки сталей и получения слитков в промышленных условиях (рис. 3).

4. «ПроВент» – компьютерная система для моделирования процессов конвекции и вентиляции воздуха в жилых и производственных помещениях (рис. 4).

5. «ПроХим» – компьютерная система для моделирования процессов смешения реагирующих веществ в химическом реакторе (рис. 5).

- используемого технологического процесса и выявлять «болевые точки» конкретной технологии;
- разрабатываемого технологического процесса на этапе проектирования с дальнейшей оптимизацией технологии;
- принципиально новых технологических решений, которые находятся на стадии обсуждения.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Чичко А. Н., Лихоузов С. Г. Клеточно-автоматное моделирование процесса течения расплава в форме // Доклады НАН Беларуси. – 2001. – Т. 45, № 4. – С. 110–114.
2. Чичко А. Н., Дроздов Е. А. Влияние электронного строения 3d-расплавов на характеристики охлаждающегося расплава, рассчитанные на основе уравнений Навье–Стокса и Фурье–Киргофа // Вести НАН Беларуси. – 2000. – № 2. – С. 5–10.
3. Чичко А. Н., Соболев В. Ф., Лихоузов С. Г. Компьютерная система «ПроЛит» – инструмент для повышения качества // ТЭО. – 2001. – № 6. – С. 30–31.
4. Chichko A., Yatskevich V., Sobolev V. Three-dimensional computer modeling of alloys flow and foundry technology // Proceeding International conference in Bratislava «Technologia 99». – 1999. – Vol. 2. – P. 672–675.
5. Чичко А. Н., Яцкевич Ю. В. Трехмерное компьютерное моделирование охлаждения отливки и выбор

питателя литниковой системы на основе уравнения теплопроводности // ИФЖ. – 1999. – Т. 72. – С. 797–801.

6. Чичко А. Н., Яцкевич Ю. В. О взаимосвязи электронного строения зародыша 3d-элемента и параметров тепловой зоны системы «расплав – зародыш» // Металлы. – 1999. – № 6. – С. 42–45.

7. Чичко А. Н., Леонтьев А. А. Компьютерное моделирование процессов нагрева тел с 3d-геометрией // Весті НАН Беларусі. Сер. фіз.-тэхн. навук. – 2001. – № 3. – С. 135–138.

8. Чичко А. Н., Дроздов Е. А., Чичко О. И. Трехмерное математическое моделирование термоупругих характеристик сплава в условиях многократных термических нагрузок // Весті НАН Беларусі. Сер. фіз.-тэхн. навук. – 2002. – № 2. – С. 111–116.

9. Чичко А. Н., Яцкевич Ю. В., Соболев В. Ф. Трехмерное математическое моделирование термонапряженного состояния стальной детали // Литье и металлургия. – 2001. – № 4. – С. 82–84.

10. Компьютерная система «ПроНПС» и трехмерное моделирование распределения температур, напряжений и углерода в процессе непрерывной разливки стали / А. Н. Чичко, Д. М. Кукуй, В. Ф. Соболев и др. // Литье и металлургия. – 2002. – № 3. – С. 21–27.

11. Чичко А. Н., Дроздов Е. А. Клеточно-автоматная модель для описания кластерообразования в Al-Si сплавах // Доклады НАН Беларуси. – 2000. – № 4.

12. Чичко А. Н., Дроздов Е. А. Новые подходы в клеточно-автоматном моделировании процесса трехмерного кластерообразования в цветных сплавах // Моделирование и информационные технологии проектирования / Институт технической кибернетики. – Мн., 2000. – С. 140–146.

УДК 621.317

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТИПА И КОНЦЕНТРАЦИИ РАСТВОРОВ ЭЛЕКТРОЛИТОВ НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА ПОТЕНЦИОДИНАМИЧЕСКИХ КРИВЫХ

*Инж. ВОРОБЕЙ Р. И., канд. физ.-мат. наук ГУСЕВ О. К., канд. физ.-мат. наук КИРЕЕНКО В. П.,  
асп. ТЯВЛОВСКИЙ А. К., ТЯВЛОВСКИЙ К. Л., докт. физ.-мат. наук ЯРЖЕМБИЦКИЙ В. Б.*

*Белорусский национальный технический университет*

Одной из ключевых задач технологического контроля на предприятиях химической, пищевой, фармацевтической и некоторых других отраслей промышленности является раздел сред, суть которого сводится к фиксации момента смены типа жидкой среды в определенной точке технологической магистрали (трубопровода), например при промывке сменяющимися моющими и нейтрализующими растворами. Как правило, в качестве определяемой среды выступают растворы кислот, щелочей, некоторых солей, синтетических моющих средств, а также чистая вода. Чем ниже порог

срабатывания сигнализатора раздела сред (т. е. чем ниже концентрация раствора, при которой возможно достоверное определение его типа), тем ниже экономические потери предприятия, связанные с несвоевременным переключением конфигурации технологических линий, сбросом в канализацию пригодных для дальнейшего использования растворов и т. д.

Очевидным способом решения данной задачи выглядит использование рН-метрии для анализа кислотности раствора. Но на реальном промышленном предприятии он неприменим: технологические среды, как правило, содержат