УДК 622.232

СТРОИТЛЕЬНЫЕ РАБОТЫ С ПРИМЕНЕНИЕМ ВРЕДНЫХ ВЕЩЕСТВ. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССРВ ФИЛЬТРАЦИИ ДЫХАТЕЛЬНЫХ АППАРАТОВ

Д.В. КЛЮЧНИК
(Представлено: д-р техн. наук, проф. С.Г. ЕХИЛЕВСКИЙ, Е.П. ПОТАПЕНКО)

Задача динамики сорбции вредной примеси лежит в основе многих химических и природоохранных технологий, связанных с очисткой, переработкой и утилизацией сточных вод, шламов, в частности с регенерацией воздуха строительных производств.

При создании математических моделей регенерации атмосферы используемых в строительном производстве необходим развитый теоретико-вероятностный подход к моделированию. Обычно для моделирования этого процесса используют уравнения математической физики. В частности, в области Генри после формирования квазистационарного распределения концентрации вредной примеси доля проскочивших молекул может быть найдена как решение интегро-дифференциального уравнения

$$-\omega'_{\xi} = e^{-\tau}\left(e^{-\xi} + \int_0^{\tau} e^{\tau} d_{\tau}\omega\right), \qquad (1)$$

в котором ω – приведенная концентрация сорбтива; ξ и τ – соответственно обезразмеренные координата и время [1].

В [1] развит теоретико-вероятностный подход к моделированию динамической сорбционной активности, отличающийся от идеологии уравнений математической физики с их полным детерминизмом при наличии соответствующих граничных и начальных условий. В его рамках $1-\omega(\xi,\tau)$ – вероятность поглощения молекулы слоем сорбента толщины ξ, а

$$f(\xi,\tau) = \frac{\partial(1-\omega(\xi,\tau))}{\partial\xi} = -\omega'_{\xi}(\xi,\tau) \qquad (2)$$

– дифференциальная функция распределения координаты элементарного акта сорбции, являющейся, очевидно, случайной величиной. С помощью (1), не решая самого уравнения, можно найти начальные моменты произвольных порядков (см. (13) в [1]):

$$\nu_n(\tau) = n!\sum_{k=0}^{n}(-1)^k\tau^k\frac{1}{k!}\sum_{l=0}^{k}C_{n+1}^{l}(-1)^l, \qquad (n=0,1,2,...) \qquad (3)$$

где C_n^l – числа сочетаний. Из теории вероятностей известно, что знание всех моментов эквивалентно знанию закона распределения случайной величины. Опираясь на это обстоятельство, в [1] получено, что при $\tau \ge 18$ случайная величина ξ распределена по закону, близкому к нормальному. Установлена зависимость от времени его параметров

$$m(\tau) = 1+\tau, \qquad \sigma^2(\tau) = 1+2\tau, \qquad (4)$$

и найдены поправки к $f(\xi,\tau)$, обусловленные асимметрией и эксцессом распределения.

Выполним аналогичное исследование при малых временах. Согласно (4) при $\tau = 0$ математическое ожидание $m(\tau)$ и среднеквадратическое отклонение $\sigma(\tau)$ совпадают $m(0) = \sigma(0) = 1$. Таким свойством обладает экспоненциальное распределение

$$f(\xi,0) = e^{-\xi}. \qquad (5)$$

С помощью (1), (2) в справедливости (5) легко убедится непосредственно.

Имея в виду асимптотику (5), плотность вероятности $f(\xi,\tau)$ при отличных от нуля временах будем искать в виде

$$f(\xi,\tau) = e^{-\xi}\left(1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\tau^n}{n!}R_n(\xi)\right), \qquad (6)$$

где $R_n(\xi)$ – неизвестные функции, подлежащие дальнейшему определению. Для этого воспользуемся (3) и определением начальных моментов

$$\nu_n(\tau) = \int_0^{\infty}\xi^n f(\xi,\tau)\,d\xi. \qquad (7)$$

Подставив (3) и (6) в (7) получим

$$n!\sum_{k=0}^{n}(-1)^k\tau^k\frac{1}{k!}\sum_{l=0}^{k}C_{n+1}^{l}(-1)^l = \int_0^{\infty}\xi^n e^{-\xi}\left(1+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\tau^k}{k!}R_k(\xi)\right)d\xi. \qquad (8)$$

Приняв во внимание, что

$$\int_0^\infty \xi^n e^{-\xi}\, d\xi = n!, \tag{9}$$

упростим (8)

$$n!\sum_{k=1}^{n}(-1)^k \tau^k \frac{1}{k!}\sum_{l=0}^{k} C_{n+1}^l (-1)^l = \sum_{k=1}^{\infty}\frac{\tau^k}{k!}\int_0^\infty \xi^n e^{-\xi} R_k(\xi)d\xi. \tag{10}$$

Пусть

$$R_k(\xi) = \sum_{l=0}^{k} R_{kl}\xi^l, \tag{11}$$

где R_{kl} – искомые коэффициенты.

Подставив (11) в (10), получим с учетом (9)

$$n!\sum_{k=1}^{n}(-1)^k \tau^k \frac{1}{k!}\sum_{l=0}^{k} C_{n+1}^l (-1)^l = \sum_{k=1}^{\infty}\frac{\tau^k}{k!}\sum_{l=0}^{k} R_{kl}(n+l)! \quad (n = 0,1,2,...). \tag{12}$$

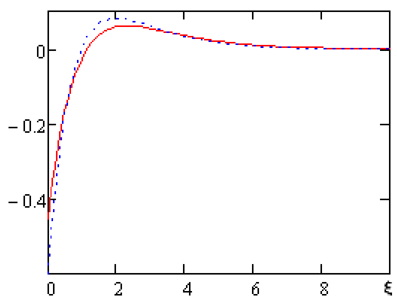
Система (12) позволяет вычислить все R_{kl} для какого угодно k. Для этого нужно выписать любые $k+1$ уравнений, содержащих τ^k, и приравнять в них коэффициенты при τ^k. В результате получим определенную систему линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов k-го полинома. Решив ее, завершим определение $R_k(\xi)$.

Проиллюстрируем предлагаемый алгоритм примерами. Пусть $k=1$, то есть нам потребуется два уравнения (12), содержащие τ в первой степени, так как у $R_1(\xi)$, согласно (11), два неизвестных коэффициента. Положим в (12) $n=1$ и $n=2$ и приравняем в полученных уравнениях коэффициенты при τ:

$$-\sum_{l=0}^{1} C_2^l(-1)^l = 1 = \sum_{l=0}^{1} R_{1l}(1+l)! = R_{10} + 2R_{11};$$

$$-2\sum_{l=0}^{1} C_3^l(-1)^l = 4 = \sum_{l=0}^{1} R_{1l}(2+l)! = 2R_{10} + 6R_{11}.$$

Полученная система имеет единственное решение $R_{10} = -1$, $R_{11} = 1$. Рисунок показывает, как при $\tau = 0,6$ поправка первого порядка (пунктир) аппроксимирует отличие (сплошная) между плотностью вероятности $f(\xi,\tau)$ и ее пределом (5).



Остальные уравнения относительно коэффициентов $R_1(\xi)$, получаемые из (12) при других n, являются линейно зависимыми, то есть удовлетворяются тем же набором чисел. В частности, для $n=3$ из (12) следует

$$-6\sum_{l=0}^{1} C_4^l(-1)^l = 18 = \sum_{l=0}^{1} R_{1l}(3+l)! = 6R_{10} + 24R_{11},$$

и легко видеть, что иллюстрируемое утверждение имеет место.

Это значит, что k – старшая степень ξ в $R_k(\xi)$. Попытки формально добавить к правой части (11) слагаемые более высоких степеней приведут к тому, что коэффициенты при добавленных слагаемых окажутся равными нулю. Например, полагая, что

$$R_1(\xi) = \sum_{l=0}^{2} R_{1l}\xi^l,$$

для определения коэффициентов R_{1l} вместо приведенной выше получим систему, дополненную третьим уравнением, отвечающим $n=3$

$$1 = R_{10} + 2R_{11} + 6R_{12};$$

$$4 = 2R_{10} + 6R_{11} + 24R_{12};$$
$$18 = 6R_{10} + 24R_{11} + 120R_{12}.$$

Необходимый для вычисления R_{12} вспомогательный определитель имеет вид

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 6 & 4 \\ 6 & 24 & 18 \end{vmatrix}.$$

Умножив первый столбец на найденное выше значение $R_{10} = -1$ и прибавив результат ко второму, умноженному на $R_{11} = 1$, получим третий столбец, так как каждая из трех строк образована коэффицентами и свободными членами решенных выше уравнений. Таким образом, исходя из теоремы Крамера и свойств определителей $R_{12} = \Delta_2 / \Delta = 0$.

Получим теперь $R_2(\xi)$. Так как у этого полинома три коэффициента, потребуется три уравнения (12), содержащие τ^2. Поэтому положим последовательно $n = 2$, $n = 3$ и $n = 4$ и приравняем в полученных уравнения коэффициенты при τ^2:

$$2\sum_{l=0}^{2} C_3^l (-1)^l = 2 = \sum_{l=0}^{2} R_{2l}(2+l)! = 2R_{20} + 6R_{21} + 24R_{22},$$

$$6\sum_{l=0}^{2} C_4^l (-1)^l = 18 = \sum_{l=0}^{2} R_{2l}(3+l)! = 6R_{20} + 24R_{21} + 120R_{22},$$

$$24\sum_{l=0}^{2} C_5^l (-1)^l = 144 = \sum_{l=0}^{2} R_{2l}(4+l)! = 24R_{20} + 120R_{21} + 720R_{22}.$$

Решив полученную систему, найдем $R_{20} = 1$, $R_{21} = -2$, $R_{22} = 1/2$. Аналогично (выписав уравнения с $n = 3$, $n = 4$, $n = 5$ и $n = 6$, приравняв в них коэффициенты при τ^3 и решив полученную систему линейных алгебраических уравнений) найдем $R_{30} = -1$, $R_{31} = 3$, $R_{32} = -3/2$, $R_{33} = 1/6$.

Действуя так и далее, можно убедиться, что найденные коэффициенты являются частными проявлениями общей закономерности

$$R_{kl} = (-1)^{k-l} C_k^l / l!. \qquad (l = 0, 1, ..., k). \tag{13}$$

Заметим, что в нее укладывается и случай $k = 0$. Для него $R_{00} = 1$, что позволяет включить фигурирующую в (6) и отвечающую нулевому приближению единицу под знак суммы, поменяв в ней нижний предел суммирования на ноль.

$$f(\xi, \tau) = e^{-\xi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\tau^k}{k!} \sum_{l=0}^{k} \xi^l (-1)^{k-l} C_k^l / l! = e^{-\xi} \sum_{k=0}^{\infty} \tau^k \sum_{l=0}^{k} \frac{(-1)^{k-l} \xi^l}{(k-l)!(l!)^2}. \tag{14}$$

При малых временах двойной ряд (14) быстро сходится к $f(\xi, \tau)$. Это позволяет с высокой точностью численно экспериментировать при создании установок регенерации атмосферы строительных производств и индивидуальных средств защиты дыхания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ехилевский, С.Г. Метод моментов в моделировании динамической сорбционной активности / С.Г. Ехилевский, Д.В. Пяткин // Создание новых и совершенствование действующих технологий и оборудования нанесения гальванических и их замещающих покрытий: материалы республ. науч.-техн. семинара, Минск, 6–7 дек. 2011 г. – Минск, 2011. – С. 150–153.

УДК 543.42; 517.518.45

ТЕОРЕТИКО-ВЕРОЯТНОСТНЫЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ УРАВНЕНИЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Д.В. КЛЮЧНИК
(Представлено: д-р техн. наук, проф. С.Г. ЕХИЛЕВСКИЙ; Е.П. ПОТАПЕНКО)

Предложена новая идеология поиска и исследования решений уравнений математической физики. Исходя из сути решаемой задачи вводится квазистационарная плотность вероятности некоторой случайной величины, связанной с искомой функцией. Асимптотика дифференциальной функции распределения устанавливается вариационно (из условия экстремальности энтропии). При этом параметры распределения получаются методом моментов с помощью самого уравнения, а также связанных с ним начальных (граничных) условий.

При создании установок по регенерации атмосферы промышленных предприятиях и производств строительной отрасли используются уравнения математической физики. Данные уравнения, описывающие явления переноса (вещества, энергии, импульса и т.п.) получаются на основе рассуждений, учитывающих молекулярную природу моделируемых процессов. Однако распространенные методы их решения эту природу игнорируют и сводятся к реализации абстрактного математического формализма (метода