№ 6 дәріс
Химия-технологиялық процестерді модельдеу.
Ұқсастық теориясының негіздері

Технологиялық процестер физикалық, химиялық, физика-химиялық құбылыстардың жиынтығынан құралады. Бұл құбылыстарды физика, химия заңдары негізінде математикалық физика теңдеулерімен, былайша айтқанда дифференциалды теңдеулермен сипаттауға болады. Дифференциалды теңдеулер процестің маңызды параметрлері арасындағы байланысты көрсетеді, соған сәйкес белгілі бір процестің математикалық моделі ретінде қарастырылады. Дифференциалды теңдеулерді құрастырғанда процесті барлық көлем немесе уақыт бойынша емес, еркін таңдап алынған көлемнің бір бөлігінде немесе уақыт аралығында қарастырады. Дифференциалды теңдеулерді интегралдағанда бастапқы теңдеуді қанағаттандыратын сансыз көп шешімдер алынады. Сондықтан да бастапқы дифференциалды теңдеу тек бір процестің ғана емес тұтас бір құбылыстың моделі болып табылады.

Белгілі бір процесті сипаттайтын жеке бір шешімді табу үшін дифференциалды теңдеу процесті сипаттайтын шарттармен толықтырылуы қажет. Тұтас бір құбылыстың ішінен белгілі бір процесті ғана көрсететін бұл қосымша шарттар, мәні бар шарттар деп аталады.

Мәні бар шарттарға жатады:

1) Процесс жүріп жатқан көлемнің формасы мен мөлшерін сипаттайтын *геометриялық шарттар*.

2) Қарастырылып отырған маңызы бар *ортаның физикалық қасиеттері*, мысалы, тығыздығы, тұтқырлығы, жылу өткізгіштігі және т.б.

3) Процесс жүретін көлемдегі дене мен ортаның әрекеттесулерін сипаттайтын *шекаралық жағдайлар*, мысалы, материалды кептіру кезіндегі қатты дене-ауа шекаралығындағы су буының парциалды қысымы.

4) *Жүйенің бастапқы күйі* (бастапқы температура, қысым, бастапқы жылдамдық, концентрация және т.б.).

Мәні бар шарттар жеке мәндер немесе теңдеулер түрінде беріледі. Көптеген жағдайда процесті сипаттайтын дифференциалды теңдеулерді шешу өте қиынға соғады. Мұндай жағдайда процесті тәжірибе жүзінде зерттейді де, эмперикалық тәуелділіктер негізінде жүру заңдылықтарын анықтайды. Бұлай алынған заңдылықтар дифференциалды теңдеуді интегралдап алынған тәуелділіктерге сәйкес келеді. Тәжірибе нәтижелері негізінде алынған заңдылықтар тәжірибе техникасы жіберетін аукымдағы дәлдікпен, жоғары нақтылықпен ерекшеленеді. Алайда, тәжірибе мәліметтері дифференциалды теңдеулерді интегралдап алатын заңдылықтарға тән ортақтықты көрсете алмайды. Тәжірибе заңдылықтары ұқсас құбылыстарға ғана қолданылады. Ұқсастық ұғымы, процестердің ұқсас түрлері ұқсастық теориясында қарастырылады.

Екі процестің ұқсастығын анықтау процесті сипаттайтын айнымалы шамалардың мәнін қарастыруға негізделген. Бір процестен екінші ұқсас процеске көшкенде айнымалы шамалардың мәндері көбейткішке көбейтіледі. Ол түрлендіру көбейткіші деп аталады. Ұқсас процестер бірдей дифференциалды теңдеумен сипатталады. Басқаша айтқанда ұқсас процесс дегеніміз әр түрлі қарқында жүретін бір процесс. Сондықтан да бір ұқсас процестің айнымалы мәндерімен екінші бір ұқсас процесті сипаттауға болады. Оның себебі ұқсас процестерде дифференциалды теңдеулер өлшемі жоқ түрде қарастырылады.

Мысалы, күшті, массаны, үдеуді байланыстыратын (Ньютонның 2-ші заңы) теңдеуді екі жүйе үшін қарастырайық. Белгілі бір бірінші жүйе үшін бұл теңдеуді айнымалы мәндерінде индексі жоқ теңдеумен өрнектейміз:

(1.1)

Екінші жүйені айнымалы мәндерінде 1 деген индексі бар теңдеумен өрнектейміз:

(1.2)

Алынған теңдеулердің екі жақтарының да өлшем бірліктері бірдей. Егер екі теңдеуді де теңдеудің оң жағына бөлсек, өлшем бірлігі жоқ шамаларға айналады:

(1.3)

Бірінші жүйенің шамаларын көбейткішке көбейте отырып, екінші жүйенің барлық айнымалы шамаларын бірінші жүйенің айнымалы шамаларымен сипаттайық:

(1.5)

Алынған өрнектерді (1.4)-ші теңдеуге қоямыз:

(1.6)

Тұрақты көбейткіштерді дифференциалдау белгілерінің алдына шығарамыз:

(1.7)

(1.3) мен (1.7)-ші теңдеулерін салыстырсақ ұқсастық тұрақтылары 1-ге тең болуы қажет, тек осы жағдайда ғана теңдеудің мәні өзгермейді. Олай болса:

(1.8)

(1.8)-ші теңдеу ұқсастық индикаторы деп аталады. Бұдан көбейткіштерді таңдау еріксіз жүрмейтіндігін көруге болады.

Сонымен (1.3, 1.4)-ші теңдеулер орнына айнымалы мәндері арқылы өрнектелген мына жүйені аламыз:

(1.9)

(1.10)

Екі теңдеуден де бұл айнымалылар бірдей анықталынуы қажет.

Егер ұқсастық индикаторларындағы түрлендіргіш көбейткіштерді (1.5)-ші теңдеуден айнымалы мәндердің қатынасымен алмастыратын болсақ:

(1.11)

алынады:

(1.12)

немесе

(1.13)

Сонымен (1.13)-ші теңдеуден алынады:

(1.14)

Ұқсастық сандар. Гидродинамикалдық процестердің ұқсастығы

Ұқсастық теориясын гидродинамикалық процестерде қарастырайық. Егер қарастырылған ағындарда сұйықтықтарға әсер ететін күштердің қатынасы тұрақты болса, сол кезде ғана ұқсастық теориясына сәйкес екі құбырдағы сұйықтықтардың қозғалысы ұқсас болады.

Сұйықтық ағынында әрбір бөлшекке қысым, ауырлық және үйкеліс күштері әсер етеді. Сонымен бірге қозғалыстағы сұйықтықта шамасы бойынша тең, бірақ қысым, ауырлық үйкеліс күштерінің тең әсерлі күштеріне таңбасы бойынша қарама-қарсы инерция күші болады. Инерция күші бөлшек массасының үдеуге көбейтіндісі бойынша анықталады. Әрбір әсер ететін күштің инерция күшіне қатынасы ұқсастық сандарымен сипатталады. Гидродинамикалық ұқсастық сандарын реалды сұйықтықтардың дифференциалды теңдеуі Навье-Стокс теңдеуінен алуға болады.

Бір өлшемді (z осі үшін) орныққан қозғалыстағы сығылмайтын реалды сұйықтық үшін Навье-Стокс теңдеуін жазайық:

(1.1)

(1.1)-ші теңдеудің барлық бөліктерін оң жағындағы бөлікке бөлеміз:

(1.2)

Ұқсастық теориясына сәйкес (1.2)-ші теңдеудің әрбір элементтерін ұқсастық константаларына көбейтіп, көбейткіштерді дифференциалды белгілердің алдына шығарамыз:

(1.3)

(1.2) және (1.3)-ші теңдеулерін салыстыра отырып, бірдей көбейткіштерді қысқартып, ұқсастық тұрақтыларынан құралған өлшем бірлігі жоқ комплекс, *ұқсастық индикаторларын* аламыз. Көлемдік және ауырлық күштерінің әсерін ескеретін мүшелер үшін (1.3) теңдеуден алынады:

(1.4)

(1.5)

Қысым күштерінің әсерін ескеретін мүшелер үшін (1.3) теңдеуден алынады:

немесе

(1.6)

Ішкі үйкеліс күштерінің әсерін ескеретін мүшелер үшін (1.3)-ші теңдеуден алынады:

немесе

(1.7)

Ұқсастық индикаторларындағы (1.5, 1.6, 1.7) өлшем көбейткіштерінің орнына физикалық шамалардың қатынасын қойып, ұқсастық сандарын аламыз. Физикалық шамалардың бөліміндегі мәні берілген жүйені, ал алымындағы мәні ұқсас жүйені сипаттайды:

(1.8)

(1.5)-ші ұқсастық индикаторынан ауырлық күшінің инерция күшіне қатынасын сипаттайтын Фруд ұқсастық саны алынады:

(1.9)

(1.10)

немесе

(1.11)

Шамалар бөлшек болмау үшін кері өрнекті қолданады:

(1.12)

(1.6)-шы ұқсастық индикаторынан қысым күшінің инерция күшіне қатынасын сипаттайтын Эйлер ұқсастық саны алынады:

(1.13)

бұдан

(1.14)

немесе

(1.15)

Ұқсастық теориясында абсолютті мәндер емес салыстырмалы мәндер маңызды болғандықтан Эйлер ұқсастық санындағы қысымның абсолютті мәнінің орнына қысым айырымының мәні қолданылады. Соған сәйкес Эйлер ұқсастық саны жазылады:

(1.16)

Сұйықтықтың қозғалыс режимін анықтайтын үйкеліс күшінің инерция күшіне қатынасын сипаттайтын Рейнольдс ұқсастық саны (1.7) ұқсастық индикаторынан алынады:

(1.17)

бұдан

(1.18)

және

(1.19)

немесе

(1.20)

Егер орнықпаған қозғалыс қарастырылса, онда гомохронды ұқсастық саны алынады:

(1.21)

Сонымен жалпы түрде сұйықтықтың қозғалыс процесін сипаттайтын Навье-Стокс теңдеуін ұқсастық сандарының немесе белгілерінің функция ретінде қарастыруға болады:

(1.22)

Орныққан қозғалыс үшін гомохронды ұқсастық саны ескерілмейді:

(1.23)

Сұйықтықтың еріксіз қозғалысында ауырлық күшінің мәні тым аз болғандықтан ескерілмейді. Сондықтан бұл жағдайда Фруд ұқсастық санын ескермеуге болады. Соған сәйкес ұқсастық сандарының арасындағы тәуелділік жалпы түрде былай өрнектеледі:

(1.24)

(1.24) функциясы дәреже көрсеткіштері ескеріліп қарастырылады:

(1.25)

Гидродинамикалық ұқсастықтың негізгі ұқсастық сандары және кей жағдайда бұларға қарағанда күрделірек Галилей және Архимед ұқсастық сандарымен алмастырылады. Бұл ұқсастық сандар негізгі ұқсастық сандарынан алынады:

Галилей ұқсастық саны:

(1.26)

Архимед ұқсастық саны:

(1.27)

Галилей ұқсастық санын ағыстың жылдамдығын анықтау қиын болған жағдайда қолданады, себебі бұл ұқсастық санда жылдамдық ескерілмейді. Архимед ұқсастық саны табиғи конвекция жағдайындағы сұйықтық қозғалысындағы ұқсастықты сипаттайды.

Бэкингем теоремасы

Бірінші ұқсастық теоремасын Ньютон тұжырымдаған. Бұл теорема бойынша ұқсас құбылыстар сан мәні бойынша бірдей ұқсастық сандарымен сипатталады. *Бірінші ұқсастық теоремасы тәжірибе жүргізгенде нәтижелерін жинақтауды қажет ететін қандай шамаларды өлшеу керектігін, яғни құсастық сандарына кіретін шамаларды өлшеу керектігін көрсетеді.*

Екінші ұқсастық теоремасын Бэкингем, Федерман және Афанасьева-Эренфест тұжырымдаған. *Бұл теорема бойынша процеске әсері бар айнымалы шамаларды өзара байланыстыратын кез-келген дифференциалды теңдеуді шешуді ұқсастық сандары арасындағы тәуелділік түрінде өрнектеуге болады*. Егер ұқсастық сандарын π_1, π_2, π_3 … π_n деп белгілесек, онда дифференциалды теңдеуді шешу мынадай жалпылама өрнек түрінде сипатталынады:

Мұндай теңдеулер *ұқсастық теңдеулері* деп аталады. Мәні бар шарттарға кіретін шамалардан құралған ұқсастық сандары *анықтайтын ұқсастық санд*ары деп аталады. Ұқсастық сандарына мәні бар шарттардан тәуелді шамалар кіретін болса, олар *анықталатын ұқсастық сандары* деп аталады.

Екінші ұқсастық теоремасы *модельде жүргізген тәжірбиелердің нәтижелерін қалай өңдеу керектігін көрсетеді*, яғни оларды ұқсастық сандары арасындағы функционалды тәуелділік түрінде сипаттауға болады.

Өлшем бірліктерін талдау әдісі

Химиялық технологияның көптеген процестері сан алуан факторларға тәуелді болады. Сондықтан мұндай процестерді толық математикалық сипаттау мүмкін емес. *Жалпылама түрде процестің өтуіне әсері бар әртүрлі айнымалы шамалардың аралығындағы тәуелділік түрінде ғана өрнектеуге болады*. Мысалы, α шамасы β, γ, δ, θ параметрлеріне тәуелді болса, онда бұл шамалардың арасындағы тәуелділік мынадай жалпылама теңдеумен өрнектеледі:

немесе

Нақты есептеу теңдеуін табу үшін өлшем бірліктерін талдау әдісі қолданылады. Бұл әдістің негізін Бэкингемнің π - теоремасы құрайды. Бұл теорема бойынша негізгі өлшем бірліктері m болатын n айнымалы шамаларды өзара байланыстыратын жалпылама функционалды тәуелділікті осы шамалардың өлшем бірлігі жоқ (n–m) ұқсастық сандары аралығындағы тәуелділік түрінде өрнектеуге болады. Мысалы, n = 5, m = 3 болса, (n–m) = 2. Бұл жағдайда функционалды тәуелділік өрнектеледі:

немесе