

## Кинетика смешивания порошковых материалов: численное моделирование в трехмерной постановке

А.Ф. Ревуженко, Н.И. Александрова

Институт горного дела СО РАН, Новосибирск, 630091, Россия

Сформулированы требования к теоретически идеальному процессу смешивания. Рассмотрена одна из возможных схем реализации такого процесса. Методом клеточных автоматов исследована кинетика смешивания в трехмерной постановке. Показана устойчивость по отношению к малым возмущениям — дефектам, которые могут присутствовать в реальном смесителе.

## Powder mixing kinetics: numerical simulation in a 3D statement

A.F. Revuzhenko and N.I. Alexandrova

Institute of Mining SB RAS, Novosibirsk, 630091, Russia

We have formulated requirements for a theoretically ideal process of mixing. One of possible schemes of the process realization is considered. A cellular automaton method is used to study the mixing kinetics in a 3D statement. Stability of the kinetics to weak disturbances, namely, defects that can be in a real mixer, is shown.

### 1. Введение

В трудах академика В.Е. Панина и его научной школы сформулирована концепция структурных уровней деформации твердых тел [1–3]. Ее развитие привело к созданию нового научного направления — физической мезомеханики [4]. В рамках данного направления открываются возможности создания материалов с заданными свойствами, а также теоретическое описание их поведения при различных условиях нагружения. Для этого привлекаются различные математические методы, и среди них важную роль играет метод подвижных клеточных автоматов [5].

Данный метод можно использовать для моделирования создания новых материалов путем обработки различных порошковых смесей. Для их получения необходимо реализовать специальный технологический процесс смешивания порошковых материалов. От качества смеси существенно зависит качество полученного материала и соответствующих изделий. Поэтому задача о смешивании порошковых материалов представляет большой прикладной и теоретический интерес.

На примере данной задачи можно показать, как чисто теоретические построения приводят к вполне опреде-

ленным техническим решениям. Если наука призвана отвечать на вопрос «почему?», а техника на вопрос «как сделать?», то на примере данной задачи видно, как ответ на первый вопрос приводит к ответу и на второй.

Исходная постановка задачи состоит в следующем. Имеются две заданные навески порошковых материалов  $A$  и  $B$ . Пересыпем их произвольным образом в ограниченную емкость объемом  $V$ . Начальное распределение компонентов  $A$  и  $B$  будет неоднородным. Требуется реализовать процесс, который за приемлемое время приводил бы к однородному распределению компонент. Предположим, что материалы  $A$  и  $B$  состоят из отдельных твердых частиц. В объеме  $V$  они образуют определенную упаковку. Данную упаковку будем считать устойчивой, то есть ее самопроизвольное расслоение исключим. В работе [6] были рассмотрены условия, которым должен удовлетворять теоретически идеальный процесс смешивания. Данные условия определили основные черты реального процесса и соответствующие технические решения. Одним из авторов [6] рассмотрена кинетика смешивания в рамках плоской модели. В качестве следующего шага необходимо исследование процесса в трехмерной постановке.

## 2. Математическая постановка

Пусть  $Oxyz$  — декартова система координат и  $\mathbf{p}$  — радиус-вектор произвольной частицы в начальный момент времени  $t = 0$ . Радиус-вектор той же частицы в момент времени  $t$  обозначим через  $\mathbf{r}(\mathbf{p}, t)$ . Пусть от момента  $t = 0$  до момента  $t = T$  со смесью производятся некоторые манипуляции так, что в момент  $t = T$  все частицы возвращаются в емкость  $V$  и опять образуют определенную упаковку. Результатом смешивания от  $t = 0$  до  $t = T$  является новое положение частиц. Например, частица  $\mathbf{p}$  займет новое положение  $\mathbf{r}(\mathbf{p}, T)$ . Можно сказать также, что результатом смешивания за время от 0 до  $T$  является перемещение частицы  $\mathbf{p}$  на вектор  $\mathbf{L} = \mathbf{r}(\mathbf{p}, T) - \mathbf{p}$ . Аналогичные перемещения реализуются за промежуток времени от  $T$  до  $2T$  и т.д. Таким образом, весь процесс смешивания от момента  $t = (n-1)T$  до  $t = nT$  можно описать одной функцией

$$\mathbf{L}(\mathbf{p}, nT) = \mathbf{r}(\mathbf{p}, nT) - \mathbf{r}(\mathbf{p}, (n-1)T). \quad (1)$$

Определение (1) выглядит почти тривиальным, но именно оно является основным для всех построений. Величина  $\mathbf{L}$  играет ту же роль, что и свободный пробег молекулы газа в теории диффузии газов. Смещение  $\mathbf{L}$  является величиной случайной. Пусть  $F d\Omega$  — вероятность того, что вектор смещения имеет длину в интервале от  $L$  до  $L + dL$  и лежит внутри конуса с углом при вершине  $d\gamma$  и осью, направленной вдоль единичного вектора  $\mathbf{e}$  ( $d\Omega$  — соответствующий объем).

Известно, что многократная реализация случайных пробегов (1) в ограниченном объеме приводит к равномерному распределению компонент. При этом плотность вероятности  $F$  должна удовлетворять определенным условиям. Основное из них сводится к тому, что  $F$  не должна зависеть от типа частиц, т.е.  $F$  не должна зависеть ни от размера, ни от удельного веса, ни от каких-либо других свойств частиц.

В природе есть единственный нетривиальный процесс, который обеспечивает кинематику, удовлетворяющую указанным свойствам. Это — свободное падение в поле силы тяжести. Следовательно, частицам необходимо дать возможность свободно падать вниз (в вакууме) и в процессе падения сообщать им случайные компоненты скорости.

Пробеги (1) образуют случайное векторное поле. Это означает, что в поведении различных частиц есть определенная связь. Основная из них выражается в том, что реализация поля (1) переводит одну упаковку частиц в другую ее упаковку, т.е. в исходном состоянии нет перекрытия частиц и каждая из них имеет достаточное число контактов с соседями. Преобразование (1) меняет упаковку, но в новом состоянии указанные условия (условия совместности) должны снова выполняться. В остальных отношениях смещения различных частиц должны быть независимыми друг от друга. Следова-

тельно, в процессе падения смесь необходимо разредить в пространстве так, чтобы появилась возможность независимых случайных перемещений различных частиц. Технически удобнее задавать только горизонтальную случайную компоненту смещения. Вертикальную случайную компоненту можно получить, если емкость-накопитель выполнить в виде набора ячеек различной глубины.

Для описания случайного поля можно использовать многомерные плотности вероятности. Аналитическая формулировка необходимых условий для функции  $F$  никаких трудностей не представляет: в идеальном случае  $F = \text{const}$  для значений  $\mathbf{L}$  и  $\mathbf{e}$ , которые не выводят частицу из объема  $V$ , и  $F = 0$  в противном случае. Попытки аналитического описания многомерных плотностей вероятности наталкиваются на значительные трудности. Ниже рассмотрим способ описания, который гарантирует выполнение всех условий совместности без обращения к соответствующим аналитическим условиям.

Пусть емкость  $V$  представляет собой прямоугольный параллелепипед (рис. 1). Разобьем весь объем парал-

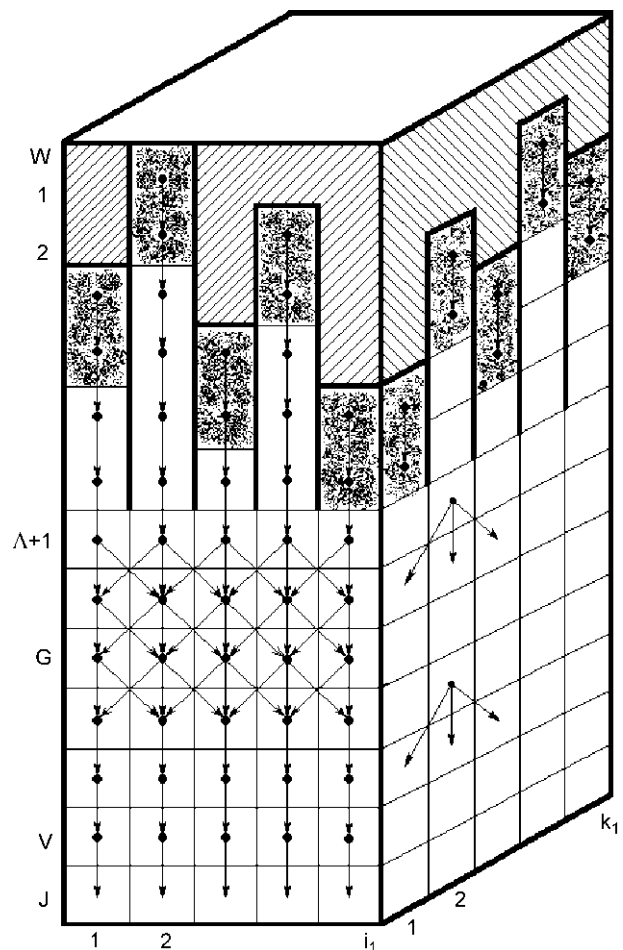


Рис. 1. Схема смесителя

лелепипеда, где могут оказаться частицы, на кубические элементы. Осредненные по элементу параметры будем относить к его центру. Центры элементов образуют трехмерную сетку. Пронумеруем узлы сетки тремя индексами  $(i, j, k)$ :  $i = 1, \dots, i_1$ ;  $j = 1, \dots, J$ ;  $k = 1, \dots, k_1$ . Здесь  $i_1, k_1$  — количество ячеек в направлениях  $x$  и  $y$  соответственно;  $J$  — в направлении  $z$ . В каждом узле определим пару чисел  $a_{ijk}, b_{ijk}$ . Первое характеризует концентрацию материала  $A$  в элементе, второе — материала  $B$ . Мера концентрации выбрана так, что случаю  $a_{ijk} + b_{ijk} = 1$  соответствует определенная упаковка контактирующих между собой частиц, которые заполняют элемент полностью.

В процессе смешивания концентрации частиц меняются. Внутри одного цикла переменные  $a_{ijk}, b_{ijk}$  зависят от дискретного времени  $t = 0, 1, 2, \dots, T$ . Одному преобразованию ( $\Delta t = 1$ ) соответствует промежуток физического времени, за который частица смещается вниз на высоту одного элемента разностной сетки. Это возможно, так как падение свободно и скорости движения частиц одинаковы.

В начальный момент времени  $t = 0$  в точках  $V$  задается пара чисел  $a_{ijk}, b_{ijk} = 1 - a_{ijk}$ , в остальных точках — нули. Перевернем контейнер. Накопитель окажется наверху и материал начнет двигаться вниз к устройству горизонтального смешивания, которое представляет собой ряд активных слоев  $j = \Lambda + 1, \Lambda + 2, \dots, \Lambda + g$ .

Пусть элементы  $p_{i,s,r,k}, q_{i,s,r,k}$  матриц  $P$  и  $Q$  соответственно определяют вероятность попадания каждого из компонентов  $A$  и  $B$  при прохождении активного слоя из элементарного объема  $(s, j + 1, r)$  в объем  $(i, j, k)$  (или при переходе из  $W$  в  $V$ :  $(s, j, r) \rightarrow (i, j - 1, k)$ ). Матрицы  $P$  и  $Q$  считаются заданными. Будем предполагать, что устройство горизонтального смешивания  $G$  обладает следующими свойствами:

1. Линейно, т.е. частицы в процессе прохождения через устройство  $G$  между собой не взаимодействуют. В рамках принятой расчетной схемы учет любых нелинейностей трудностей не представляет. Эксперименты [6] показывают, что предположения о линейном характере выполняются достаточно точно.

2. Однородно, т.е.

$$\sum_{k=1}^{k_1} \sum_{i=1}^{i_1} p_{i,s,r,k} = 1, \quad \sum_{k=1}^{k_1} \sum_{i=1}^{i_1} q_{i,s,r,k} = 1, \quad (2)$$

$$s = 1, \dots, i_1, \quad r = 1, \dots, k_1.$$

Данное условие означает, что при подаче материала равномерным «дождем» после прохождения устройства равномерность «дождя» сохраняется.

3. Выполняется условие сохранения массы, т.е.

$$\sum_{r=1}^{k_1} \sum_{s=1}^{i_1} p_{i,s,r,k} = 1, \quad \sum_{r=1}^{k_1} \sum_{s=1}^{i_1} q_{i,s,r,k} = 1, \quad (3)$$

$$i = 1, \dots, i_1, \quad k = 1, \dots, k_1.$$

Равенство (3) означает, что ни в одном из слоев не происходит накопления (застревания) материала.

4. Одинаково реагирует на материалы  $A$  и  $B$ , т.е.

$$p_{i,s,r,k} = q_{i,s,r,k}. \quad (4)$$

После прохождения устройства  $G$  материал попадает в разноглубокие ячейки и накапливается в них. Когда весь материал перейдет в ячейки, осуществляется следующий поворот контейнера и материал начинает двигаться из ячеек  $W$  в накопитель  $V$ .

Обозначим через  $h_{ik}$  — глубину ячейки с координатами  $(i, k)$ . Элементы  $h_{ik}$  образуют матрицу  $H = (h_{ik})$ . Пусть  $n = i_1 \times k_1$  — общее число ячеек в горизонтальном сечении. Перенумеруем их в порядке возрастания глубины. За единицу длины выберем глубину самой мелкой ячейки, тогда через  $h_i$  обозначим глубину ячейки с номером  $i$  и  $h_{\min} = 1 = h_1 \leq h_2 \leq \dots \leq h_n = h_{\max}$ . Пусть  $S$  спектр глубин ячеек:  $S = (h_1, h_2, \dots, h_n)$ .

Возникают вопросы: каким должен быть спектр глубин ячеек  $S$ ; каково должно быть взаимное расположение ячеек, имеющих разную глубину, т.е. какова должна быть матрица  $H$ , чтобы процесс смешивания был наиболее эффективным? Отметим, что выбор глубины самой мелкой ячейки трудностей не представляет. Если устройство работает линейно и выполняется условие однородности, то  $h_{\min} \geq h_0$ , где  $h_0$  — высота засыпки материала.

Рассмотрим численную реализацию процесса накопления материала в части  $W (h_{ik} \leq j \leq \Lambda)$ . Если элемент свободен, т.е.  $V_{ijk} = a_{ijk}(t) + b_{ijk}(t) = 0$ , то происходит простое смещение материала вниз из элемента  $(i, j + 1, k)$  и освобождение этого элемента:

$$a_{ijk}(t + 1) = a_{i,j+1,k}(t), \quad a_{i,j+1,k}(t) = 0. \quad (5)$$

Если в элементе  $(i, j, k)$  уже находятся компоненты  $A$  и  $B$ , то необходимо проверять, какая часть объема элемента еще свободна и будет ли достаточно места, чтобы весь материал из элемента  $(i, j + 1, k)$  вошел в свободную часть. Если весь материал не помещается в элемент  $(i, j, k)$ , то часть материала остается в верхней ячейке  $(i, j + 1, k)$ :

$$a_{ijk}(t + 1) = \begin{cases} a_{i,j+1,k}(t) + a_{ijk}(t), \\ a_{i,j+1,k}(t) = 0, \\ \text{если } V_{i,j+1,k} + V_{ijk} \leq 1, \\ Va_{i,j+1,k}(t) + a_{ijk}(t), \\ a_{i,j+1,k}(t) = (1 - V)a_{i,j+1,k}(t), \\ \text{если } V_{i,j+1,k} + V_{ijk} > 1, \end{cases} \quad (6)$$

$$V = (1 - V_{ijk}) / V_{i,j+1,k}.$$

Вторая компонента преобразуется по такому же закону.

Активные слои устройства горизонтального смешивания  $G (j = \Lambda + 1, \Lambda + 2, \dots, \Lambda + g - 1)$  работают сле-

дующим образом: если на него приходят компоненты  $(a_{ijk}, b_{ijk})$ , то часть их поступает в элемент, расположенный непосредственно под узлом, часть разбрасывается на соседние узлы:

$$\begin{aligned} a_{ijk}(t+1) &= \sum_{s=1}^{i_1} \sum_{r=1}^{k_1} P_{isrk} a_{s,j+1,r}(t), \\ b_{ijk}(t+1) &= \sum_{s=1}^{i_1} \sum_{r=1}^{k_1} P_{isrk} b_{s,j+1,r}(t). \end{aligned} \quad (7)$$

В слоях  $j = \Lambda + g, \dots, J-1$  происходит простое смещение материала вниз

$$\begin{aligned} a_{ijk}(t+1) &= a_{i,j+1,k}(t), \\ b_{ijk}(t+1) &= b_{i,j+1,k}(t). \end{aligned} \quad (8)$$

Так как через границу смесителя притока нового материала не происходит, то полагаем, что в точках  $(i, j, k)$  на дне ячеек

$$\begin{aligned} a_{ijk}(t+1) &= 0, \\ b_{ijk}(t+1) &= 0. \end{aligned} \quad (9)$$

При достаточно больших значениях  $t \geq T$  оператор перехода (4)–(9) становится тождественным, т.е.  $a_{ijk}(t+1) = a_{ijk}(t)$ ,  $b_{ijk}(t+1) = b_{ijk}(t)$  для всех  $i, j, k$ . Это означает, что весь материал скопился в нижней части контейнера и контейнер необходимо переворачивать. Алгоритм перехода из  $W$  в  $V$  аналогичен описанному выше.

Пронумеруем последовательно циклы смешивания:  $N = 0, 1, 2, \dots$ . За один цикл над материалом совершается некоторая последовательность операций, такая что при  $N = 0, 1, 2, \dots$  все частицы находятся в емкости-накопителе  $V$  в покое и образуют под действием своего веса определенную упаковку. После некоторого числа циклов  $N \geq N^*$  решение выходит на стационарное  $a_{ijk}(N+1) = a_{ijk}(N)$ ,  $b_{ijk}(N+1) = b_{ijk}(N)$ .

Рассмотрим вопрос о способах оценки качества смеси. Соотношение компонентов в произвольных точках смеси — величина случайная. Чтобы оценивать качество смешивания, выделяем один компонент, называемый ключевым. По степени распределения ключевого компонента в материале можно судить о качестве смеси. Здесь материал  $A$  выбран в качестве ключевого компонента. Вычислялись две оценки качества смеси после окончания каждого цикла:

$$\begin{aligned} K_c &= \max_{i,j,k \in V} |a_{ijk} - a^0|, \\ K_L &= \frac{1}{\sqrt{M_V}} \sqrt{\frac{b^0}{a^0} \sum_{i,j,k \in V} (a_{ijk} - a^0)^2}. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь  $M_V$  — число узлов, принадлежащих накопителю  $V$ . Первая оценка самая жесткая — по наиболее неоднородному элементу, вторая оценка — в среднем по объему. Однородному состоянию  $a_{ijk} = a^0$ ,  $b_{ijk} = b^0 = 1 - a^0 \geq a^0$  отвечают значения  $K_c = K_L = 0$ . Значения

$a^0, b^0$  легко определяются по заданному начальному распределению компонентов. Коэффициент в оценке  $K_L$  выбран так, чтобы в исходном состоянии, если материалы  $A$  и  $B$  полностью разделены, значения  $K_c = K_L = b^0$ . Расчеты прекращались при достижении стационарного распределения компонентов.

### 3. Обсуждение результатов

Рассмотрим основные результаты численных расчетов. Пусть каждая внутренняя точка активного слоя  $1/9$  материала пропускает вниз и по  $1/9$  разбрасывает в соседние ячейки

$$\begin{aligned} P_{i-1,i,k,k+1} &= P_{i,i,k,k+1} = P_{i+1,i,k,k+1} = \\ &= P_{i-1,i,k,k} = P_{i,i,k,k} = P_{i+1,i,k,k} = \\ &= P_{i-1,i,k,k-1} = P_{i,i,k,k-1} = P_{i+1,i,k,k-1} = 1/9, \quad (11) \\ i &= 2, \dots, i_1 - 1, k = 2, \dots, k_1 - 1. \end{aligned}$$

Из условия однородности (2) следует, что стенка в идеальном устройстве должна работать вполне определенным образом, а именно:  $2/9$  материала, поступившего на нее, должно смещаться вниз и  $1/9$  — во внутрь контейнера:

$$\begin{aligned} P_{i+1,i,1,1} &= P_{i,i,1,1} = P_{i-1,i,1,1} = P_{i+1,i,k_1,k_1} = \\ &= P_{i,i,k_1,k_1} = P_{i-1,i,k_1,k_1} = 2/9, \\ P_{i+1,i,1,2} &= P_{i,i,1,2} = P_{i-1,i,1,2} = P_{i+1,i,k_1,k_1-1} = \\ &= P_{i,i,k_1,k_1-1} = P_{i-1,i,k_1,k_1-1} = 1/9, \\ i &= 2, \dots, i_1 - 1, \quad (12) \\ P_{1,1,k,k+1} &= P_{1,1,k,k} = P_{1,1,k,k-1} = P_{i_1,i_1,k,k+1} = \\ &= P_{i_1,i_1,k,k} = P_{i_1,i_1,k,k-1} = 2/9, \\ P_{2,1,k,k+1} &= P_{2,1,k,k} = P_{2,1,k,k-1} = P_{i_1-1,i_1,k,k+1} = \\ &= P_{i_1-1,i_1,k,k} = P_{i_1-1,i_1,k,k-1} = 1/9, \\ k &= 2, \dots, k_1 - 1. \end{aligned}$$

В угловых точках вниз смещается  $4/9$  материала и внутрь — по  $1/9$ :

$$\begin{aligned} P_{1,1,1,1} &= P_{1,1,k_1,k_1} = P_{i_1,i_1,1,1} = P_{i_1,i_1,k_1,k_1} = 4/9, \\ P_{i_1-1,i_1,1,2} &= P_{i_1-1,i_1,k_1,k_1-1} = \\ &= P_{2,1,k_1,k_1-1} = P_{i_1-1,i_1,k_1,k_1-1} = 1/9. \end{aligned} \quad (13)$$

Пусть начальная засыпка является горизонтальной, т.е. нижняя половина накопителя заполнялась одним материалом, верхняя — другим. Материал  $A$  расположен в накопителе  $V$ , начиная со слоя  $j_1$  по слой  $j_2 - 1$ , материал  $B$  — со слоя  $j_2$  по слой  $J$ . Рассмотрим сначала шахматное размещение глубины ячеек в части  $W$ :

$$\begin{aligned} h_{ik} &= \begin{cases} 1, & \text{если } i+k = 2n, \\ j_0, & \text{если } i+k = 2n+1, \end{cases} \quad (14) \\ n &= 1, \dots, [(i_1 + k_1)/2], \end{aligned}$$

где квадратные скобки означают целую часть числа.

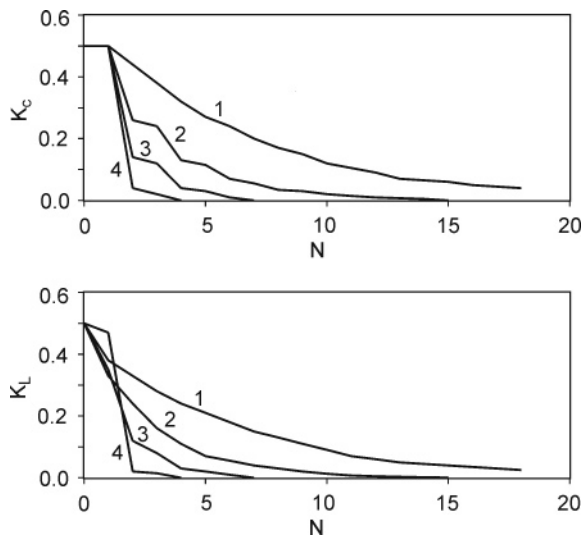


Рис. 2. Изменение качества смеси в зависимости от количества циклов:  $j_0 = 2$  (1); 3 (2); 4 (3); 5 (4)

Ниже представлены результаты численных расчетов, полученные при следующих значениях параметров:  $i_1 = 5$ ,  $k_1 = 5$ ,  $j_1 = 45$ ,  $j_2 = 47$ ,  $J = 48$ ,  $\Lambda = 30$ ,  $a_0 = b_0 = 0.5$ . Остальные значения параметров варьировались. Ширина ячеек принята равной глубине самой мелкой ячейки.

Для контроля процесса смешивания вычислялся также тангенс максимального угла ската  $\alpha(t)$  для каждого шага внутри цикла:

$$\begin{aligned} \operatorname{tg}\alpha(t) = & \\ = \max_{i, k} & \left( \sum_{j=\Lambda+g}^J (a_{i,j,k}(t) + b_{i,j,k}(t) - a_{i,j,k+1}(t) - b_{i,j,k+1}(t)), \right. \\ & \left. \sum_{j=\Lambda+g}^J (a_{i+1,j,k}(t) + b_{i+1,j,k}(t) - a_{i+1,j,k+1}(t) - b_{i+1,j,k+1}(t)) \right). \end{aligned} \quad (15)$$

Когда материал накапливается в емкости, то поверхность материала не является горизонтальной. Если угол ската будет достаточно большим, то материал начнет ссыпаться, что может вызвать его сегрегацию. Поэтому важно контролировать величину угла ската. В численной реализации процесса смешивания возможность перемещения материала вниз по откосу не учитывается.

Выясним, как влияет на процесс смешивания степень разрежения смеси в пространстве — величина  $h_{\max} = j_0$ , которая равна отношению наибольшей и наименьшей глубин ячеек. Увеличение  $h_{\max}$  приводит к тому, что наибольший угол ската и время каждого цикла увеличиваются. Если  $h_{\max} \rightarrow 1$ , то глубины всех ячеек выравниваются и эффективность устройства вертикального перемешивания стремится к нулю. При начальной горизонтальной засыпке вертикальное переме-

шивание необходимо. Поэтому при  $h_{\max} \rightarrow 1$  время полного смешивания  $N^* \rightarrow \infty$ .

Возникает вопрос, как изменится кинетика данного процесса, если ввести устройство вертикального перемешивания. На рис. 2 представлены графики зависимости оценок качества смеси  $K_c, K_L$  от количества циклов для различных значений  $h_{\max}$  ( $g = 6$ ). Оказывается смесь, по-прежнему, будет стремиться к однородному состоянию, но время смешивания изменится. Как видно на рис. 2, с увеличением  $h_{\max}$  количество циклов  $N^*$ , необходимых для перехода смеси к однородному состоянию, уменьшается до  $N^* = 5$ , которое достигается, начиная с  $h_{\max} = 5$ . В связи с этим дальнейшее увеличение глубины ячеек сказывается на поведении свободной поверхности материала внутри цикла (увеличивается  $\alpha_{\max} = \max_t \operatorname{tg}\alpha(t)$ ), а на количество циклов до полного смешивания не влияет.

Для перехода начальной вертикальной засыпки к однородному состоянию вертикального перемешивания не требуется. Расчет показывает, что при  $h_{ik} = 1$  ( $i = 1, \dots, i_1$ ,  $k = 1, \dots, k_1$ ) одно устройство горизонтального перемешивания переводит смесь в однородное состояние. Как видно на рис. 3, уменьшение количества активных слоев устройства  $G$  приводит к увеличению времени смешивания до 33 циклов. Введение устройства вертикального перемешивания при вертикальной начальной засыпке почти не изменяет поведения кривых  $K_c, K_L$ , и число циклов  $N^*$ , необходимых для смешивания, остается практически постоянным при увеличении значения  $h_{\max}$ .

Введем следующую оценку, характеризующую суммарную величину ступенек между ячейками, контактирующими по грани:

$$\Sigma = \sum_{k=1}^{k_1} \sum_{i=1}^{i_1-1} |h_{i+1,k} - h_{ik}| + \sum_{i=1}^{i_1} \sum_{k=1}^{k_1-1} |h_{i,k+1} - h_{ik}|. \quad (16)$$

Естественно предположить, что размещение ячеек должно быть таким, чтобы суммарная величина ступенек между ячейками была наибольшей. Для проверки проводились численные расчеты для следующего спектра глубин ячеек

$$S = 1, \dots, 25. \quad (17)$$

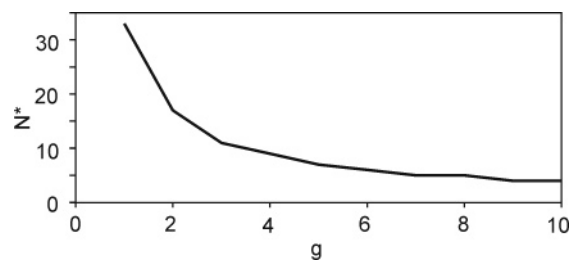


Рис. 3. Полное время смешивания в зависимости от числа активных слоев

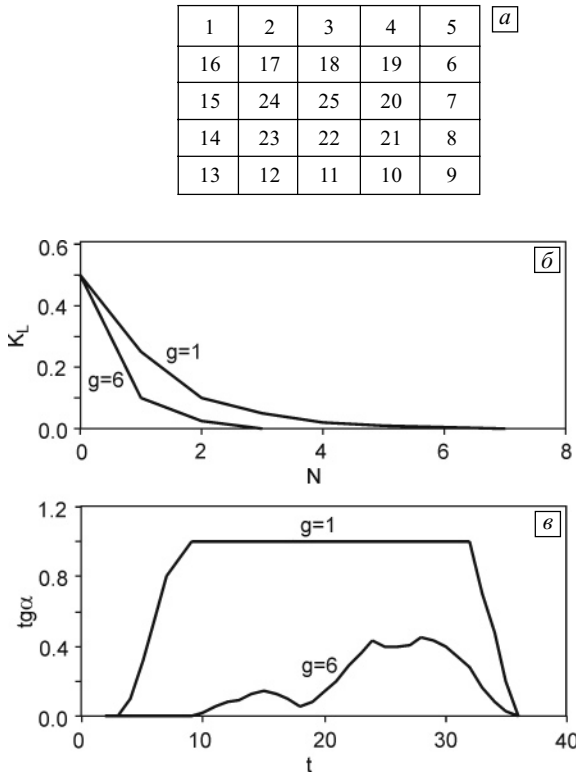


Рис. 4. Схема расположения разноглубинных ячеек (а); качество смеси в зависимости от количества циклов (б); изменение тангенса максимального угла ската в зависимости от времени (в)

Увеличение  $h_{\max}$  от 5 до 25 (размещение ячеек спектра (17) представлено на рис. 4, а) по сравнению с рис. 2 привело к уменьшению времени полного смешивания до 4 (рис. 4, б). Посмотрим, как влияет на процесс количество слоев в устройстве горизонтального смешивания. С ростом числа активных слоев происходит уменьшение наибольшего угла ската смеси (рис. 4, в) и количества циклов  $N^*$  (рис. 4, б). Влияние расположения ячеек и соответственно параметра  $\Sigma$  на величину  $N^*$  представлено на рис. 5 ( $g=1$ ). Данный пример показывает, что для одного и того же спектра (17) с ростом  $\Sigma$  количество циклов  $N^*$  убывает.

Предположим теперь, что устройство горизонтального смешивания имеет внутренние дефекты, например, условия (11)–(13) заменяются на следующие:

$$\begin{aligned}
 p_{i-1,i,k,k+1} &= p_{i,i,k,k+1} = p_{i+1,i,k,k+1} = \\
 &= p_{i-1,i,k,k} = p_{i+1,i,k,k} = p_{i-1,i,k,k-1} = \\
 &= p_{i,i,k,k-1} = p_{i+1,i,k,k-1} = 1/9 + \delta, \\
 p_{i+1,i,1,2} &= p_{i,i,1,2} = p_{i-1,i,1,2} = p_{i+1,i,k_1,k_1-1} = \\
 &= p_{i,i,k_1,k_1-1} = p_{i-1,i,k_1,k_1-1} = 1/9 + \delta, \\
 p_{2,1,k,k+1} &= p_{2,1,k,k} = p_{2,1,k,k-1} = p_{i-1,i_1,k,k+1} = \\
 &= p_{i-1,i_1,k,k} = p_{i-1,i_1,k,k-1} = 1/9 + \delta,
 \end{aligned}$$

13	6	19	7	14
5	24	1	23	8
20	4	25	2	18
12	21	3	22	9
16	11	17	10	15

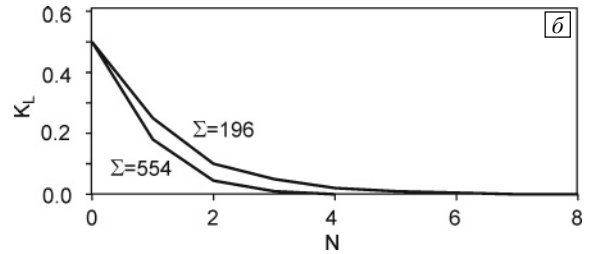


Рис. 5. Схема расположения разноглубинных ячеек (а); изменение качества смеси в зависимости от количества циклов (б)

$$\begin{aligned}
 p_{i+1,i,1,1} &= p_{i-1,i,1,1} = p_{i+1,i,k_1,k_1} = \\
 &= p_{i-1,i,k_1,k_1} = 2/9 + 2\delta, \\
 p_{i,i,k,k} &= 1/9 - 8\delta, \\
 p_{1,1,k,k+1} &= p_{1,1,k,k-1} = p_{i_1,i_1,k,k+1} = \\
 &= p_{i_1,i_1,k,k-1} = 2/9 + 2\delta, \\
 p_{1,1,k,k} &= p_{i_1,i_1,k,k} = p_{i,i,k_1,k_1} = \\
 &= p_{i,i,1,1} = 2/9 - 7\delta, \\
 i &= 2, \dots, i_1 - 1, \quad k = 2, \dots, k_1 - 1, \\
 p_{i-1,i_1,1,2} &= p_{i-1,i_1,k_1,k_1-1} = 1/9 + \delta, \\
 p_{2,1,k_1,k_1-1} &= p_{i-1,i_1,k_1,k_1-1} = 1/9 + \delta, \\
 p_{1,1,1,1} &= p_{1,1,k_1,k_1} = p_{i_1,i_1,1,1} = \\
 &= p_{i_1,i_1,k_1,k_1} = 4/9 - 5\delta.
 \end{aligned} \tag{18}$$

Здесь  $\delta$  — величина возмущения ( $\delta \neq 0$ ), и, по-прежнему,  $p_{isrk} = q_{isrk}$ . Подобные дефекты могут появиться при изготовлении или неточной настройке устройства  $G$  или вследствие неудачного выбора параметров внешних воздействий. В этих случаях смесь также стремится к однородному состоянию. Меняется только стационарный профиль свободной поверхности.

Рассмотрим роль стенок. Выясним, что будет, если стенки смесителя работают слишком пассивно (не отбрасывают внутрь достаточно материала) или активно (отбрасывают слишком далеко или много материала). Граничные значения элементов матрицы перехода будут иметь следующий вид:

$$\begin{aligned}
 p_{i+1,i,1,2} &= p_{i,i,1,2} = p_{i-1,i,1,2} = p_{i+1,i,k_1,k_1-1} = \\
 &= p_{i,i,k_1,k_1-1} = p_{i-1,i,k_1,k_1-1} = 1/9 - \delta_1, \\
 p_{2,1,k,k+1} &= p_{2,1,k,k} = p_{2,1,k,k-1} = p_{i-1,i_1,k,k+1} = \\
 &= p_{i-1,i_1,k,k} = p_{i-1,i_1,k,k-1} = 1/9 - \delta_1,
 \end{aligned}$$

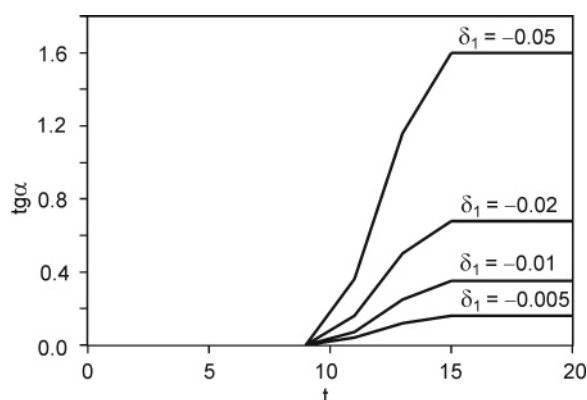


Рис. 6. Изменение тангенса максимального угла ската в зависимости от времени

$$\begin{aligned}
 P_{i+1,i,1,1} &= P_{i+1,i,k_1,k_1} = P_{i,i,1,1} = P_{i,i,k_1,k_1} = \\
 &= P_{i-1,i,1,1} = P_{i-1,i,k_1,k_1} = 2/9 + \delta_1, & (19) \\
 P_{1,1,k,k+1} &= P_{i_1,i_1,k,k+1} = P_{1,1,k,k} = P_{i_1,i_1,k,k} = \\
 &= P_{1,1,k,k-1} = P_{i_1,i_1,k,k-1} = 2/9 + \delta_1, \\
 i &= 2, \dots, i_1 - 1, \quad k = 2, \dots, k_1 - 1, \\
 P_{2,1,1,1} &= P_{2,1,k_1,k_1} = P_{i_1-1,i_1,1,1} = \\
 &= P_{i_1-1,i_1,k_1,k_1} = P_{1,1,1,2} = P_{1,1,k_1,k_1-1} = \\
 &= P_{i_1,i_1,1,2} = P_{i_1,i_1,k_1,k_1-1} = 2/9 - \delta_1, \\
 P_{1,1,1,1} &= P_{1,1,k_1,k_1} = P_{i_1,i_1,1,1} = P_{i_1,i_1,k_1,k_1} = 4/9 + 3\delta_1.
 \end{aligned}$$

Если стенка пассивная (в пределе — все пришедшие к стенке частицы смещаются вдоль нее ( $\delta_1 > 0$ )), то у стенок материал будет накапливаться, если стенка активная ( $\delta_1 < 0$ ), то, наоборот, будет происходить отток материала от стенок. На рис. 6 представлены графики  $\text{tg}\alpha(t)$  при различных значениях возмущения условий  $\delta_1$  ( $g = 6, j_0 = 3$ ). Чем больше  $\delta_1$ , тем больше угол наклона смеси возле стенок. И в случае активной стенки, и в случае пассивной стенки состояние материала

стремится к однородному, а свободная поверхность — к стационарному состоянию. Эти примеры показывают, что путем создания искусственной неоднородности узла горизонтального смешивания можно получать любые профили свободной поверхности материала, причем отклонения профиля от горизонтального того же порядка, что и величина возмущения.

#### 4. Выводы

Таким образом, расчет кинетики процесса смешивания в трехмерной постановке позволяет сделать следующие выводы: 1) точная реализация исходных принципов смешивания приводит к идеальному качеству смешивания; 2) малые отклонения от идеальных условий, которые могут быть в реальном устройстве, приводят либо к малым отклонениям во времени смешивания (без влияния на ее качество), либо к малым отклонениям в качестве смеси (есть устойчивость); 3) последнее открывает возможности для создания реальных устройств, реализующих принципы идеального перемешивания.

Работа выполнена в рамках Интеграционного проекта № 191 СО РАН и УрО РАН.

#### Литература

1. Панин В.Е., Гриняев Ю.В., Елсукова Т.Ф., Иванчин А.Г. Структурные уровни деформации твердых тел // Изв. вузов. Физика. — 1982. — Т. 25. — № 6. — С. 5–27.
2. Панин В.Е. Современные проблемы пластичности и прочности твердых тел // Изв. вузов. Физика. — 1998. — № 1. — С. 7–34.
3. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов. — В 2-х т. / Под ред. В.Е. Панина. — Новосибирск: Наука. — 1995. — Т. 1. — 298 с. — Т. 2. — 320 с.
4. Панин В.Е. Международному журналу «Физическая мезомеханика» — пять лет // Физ. мезомех. — 2003. — Т. 6. — № 4. — С. 5–7.
5. Псахье С.Г., Коростелев С.Ю., Смолин А.Ю., Дмитриев А.И., Шилько Е.В., Моисеенко Д.Д., Татаринцев Е.М., Алексеев С.В. Метод подвижных клеточных автоматов как инструмент физической мезомеханики материалов // Физ. мезомех. — 1998. — Т. 1 — № 1. — С. 95–108.
6. Ревуженко А.Ф. Механика сыпучей среды. — Новосибирск: ЗАО ИПП «Офсет», 2003. — 373 с.