

ПРИМЕНЕНИЕ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ РАЗРЯДОВ МЕЖДУ МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ ШАРИКАМИ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ¹

И.С. Надеждин, А.Г. Горюнов (Томск)

В настоящее время активное развитие получили электрохимические методы очистки водных источников [1]. Одним из таких методов является очистка воды с помощью электроэррозионной обработки металлических шариков в очищаемой воде. Так как это новый и малоизученный метод, существует необходимость в разработке адекватной математической модели процесса для оптимизации данного метода и разработки системы управления. Электроэррозионный метод очистки воды является сложным физико-химическим процессом, протекание которого можно условно разделить на три стадии: распространение электрических разрядов между металлическими шариками в очищаемой воде; выделение продуктов эрозии из шариков, подвергшихся воздействию электрических разрядов и химическое взаимодействие продуктов эрозии и растворенных в воде примесей с дальнейшим образованием осадка.

Фактически математическая модель электроэррозионного процесса очистки воды состоит из математических моделей каждой из перечисленных стадий. Математические модели второй и третьей стадий представлены в [2]. Целью настоящего исследования является разработка математической модели процесса распространения электрических разрядов между металлическими шариками в очищаемой воде.

Разработка математической модели распространения электрических разрядов между металлическими шариками в водном растворе

Согласно представленному описанию процесса [3] между металлическими шариками загрузки, расположенными между двумя электродами в аппарате, имеется водяная пленка. Основываясь на представленное описание процесса было сделано предположение о том, что траектория распространения электрических разрядов определяется расположением металлических шариков и водных прослоек между ними. Шарики и водяные прослойки между ними, находясь в межэлектродном пространстве (МП), представляют собой условно упорядоченную структуру из активных сопротивлений, которые и определяют путь от потенциального электрода к заземленному. МП было представлено как цепь из параллельно-последовательно соединенных резисторов (рис. 1). Сопротивление шариков ($R_{шар}$) определяется их составом и диаметром. Сопротивление воды ($R_{в.п.}$) – толщиной водных прослоек между шариками, а также её загрязненностью.

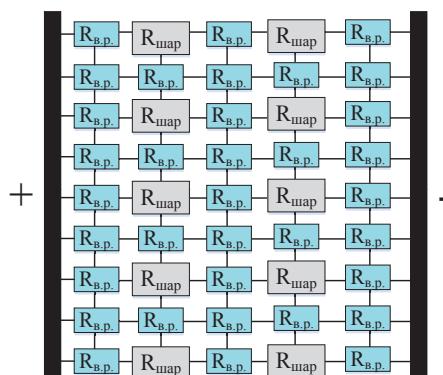
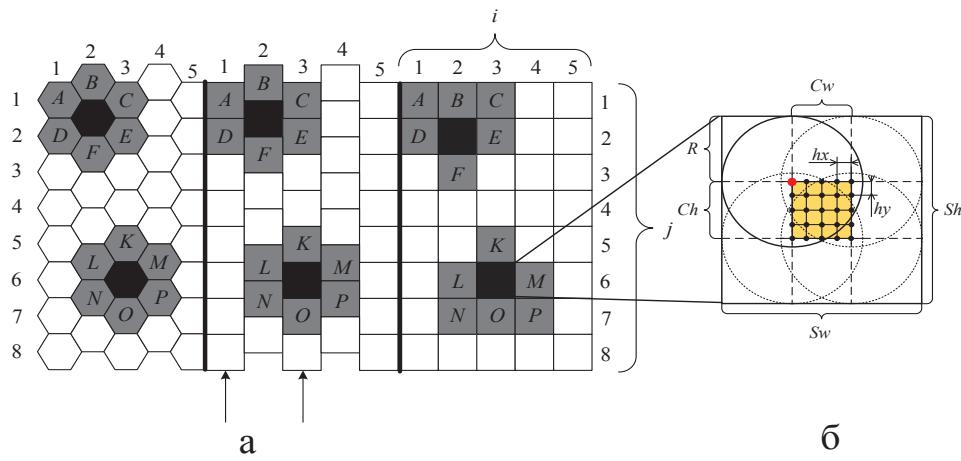


Рис. 1. Резистивная схема замещения межэлектродного пространства

¹ Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-31-00085 мол_а.

Для моделирования процессов в такой системе не подходят классические методы моделирования с использованием дифференциальных уравнений (ДУ), так как в ней невозможно использовать усредненные макропараметры, описывающие динамику системы в целом, а функции, описывающие распределение характеристик процесса по координатам межэлектродного пространства, должны иметь многочисленные разрывы. Кроме того, аппарат ДУ не позволяет моделировать случайный характер распределения шаров в МП. Следовательно, для моделирования распространения электрических разрядов необходимо использовать иной подход к моделированию, принципиально отличный от ДУ. Альтернативой ДУ были выбраны вероятностные клеточные автоматы (ВКА), широко применяемые для динамического моделирования сложных физико-химических процессов [4]. Проанализировав расположение шариков в МП аппарата, для разбиения МП на ячейки была выбрана гексагональная решетка.

Базой модели является трехмерная гексагональная решетка, равномерно разбивающая МП на ячейки ВКА. Для работы с гексагональной решеткой необходимо выполнить преобразование гексагональной решетки в прямоугольную, как продемонстрировано на рис. 2а. Вероятностный характер распространения электрических разрядов между шариками является следствием случайности расположения шариков в МП, а также результатом изменения положения шариков под действием электрических разрядов. При этом шарики не перемещаются произвольным образом по объему аппарата, а претерпевают смещения малой величины относительно своих положений в четкой структуре гексагональной решетки. Величина этих смещений определяется плотностью расположения шариков в слое загрузки. То есть центр шариков после каждого импульса занимает новое произвольное положение в некоторой ограниченной зоне из некоторого числа возможных положений, как показано на рис. 2б.

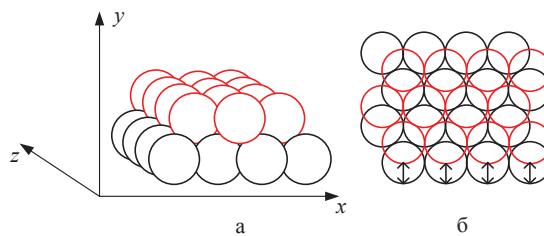


а) преобразование гексагональной решетки; б) схема размещения шарика в ячейке автомата
Рис. 2. Расположение металлических шариков в слое загрузки

Такое преобразование выполняется для каждого слоя металлической загрузки, что позволяет реализовать объемную гексагональную решетку, максимально приближенную к реальной структуре расположения шариков в МП.

Размер и количество ячеек решетки рассчитывается в зависимости от массы загрузки, размеров шариков и аппарата. Стоит отметить характерные особенности расположения шариков в трехмерной гексагональной решетке (рис. 3). Координаты четного слоя смещены по длине z относительно нечетного на расстояние равное половине длины ячейки S_l. Координаты центров шариков в нечетных рядах одного слоя смещены по ширине x на величину, равную половине ширины ячейки S_w. Координата по длине z каждого последующего ряда увеличивается на величину, равную высоте правильного треугольника с ребром, равным

длине ячейки Sl. Высота каждого последующего слоя отличается от предыдущего на постоянное значение. Это значение является высотой правильного тетраэдра, образуемого шариками.



а) общий вид; б) вид сверху

Рис. 3. Первый (черный) и второй (красный) слои загрузки

Координаты центров шариков определяются по следующим формулам:

$$\begin{aligned} x_{i,j,k}^0 &= qx + \frac{d}{2} + Sw \cdot k, \\ y_{i,j,k}^0 &= \frac{d}{2} + \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot Sh \cdot j, \\ z_{i,j,k}^0 &= qz + \frac{d}{2} + \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot Sl \cdot i, \end{aligned} \quad (1)$$

где $x_{i,j,k}^0, y_{i,j,k}^0, z_{i,j,k}^0$ – координаты центра шара по ширине, высоте и длине соответственно, м; k, j, i – порядковые номера (индексы) шара по ширине, высоте и длине соответственно; qx, qz – смещения, определяемые по формулам (2), м.

$$qx = \begin{cases} \frac{Sw}{2}, k = 1, 3, 5 \dots \\ 0, k = 2, 4, 6 \dots \end{cases} \quad \text{è} \quad qz = \begin{cases} \frac{Sl}{2}, j = 2, 4, 6 \dots \\ 0, j = 1, 3, 5 \dots \end{cases} \quad (2)$$

Переход от детерминированного клеточного автомата к вероятностному осуществляется за счет того, что диаметр шарика загрузки меньше любого из размеров ячейки. Поэтому центр шарика может занять любое положение в некотором объеме, образуемом крайними положениями центра шарика, когда он своей поверхностью касается двух любых плоскостей ячейки. На рис. 2б на примере двумерной решетки изображена схема размещения центра шарика диаметром R, в ячейке размерами Sw×Sh. Красной точкой обозначено место центра шарика в строго определенной гексагональной решетке. Крайние положения шарика в углах решетки образуют зону, на которой изображены возможные положения центра шарика. Размеры зоны возможного положения центра шарика рассчитываются по уравнениям (3):

$$\tilde{N}w = Sw - d_{\phi}, \tilde{N}h = Sh - d_{\phi}, \tilde{N}l = Sl - d_{\phi} \quad (3)$$

где Cw, Ch, Cl – размеры зоны возможного положения центра шарика по ширине, высоте и длине аппарата соответственно, м.

Координаты шарика в этой зоне – по уравнениям (4):

$$\begin{aligned} \Delta x_{i,j,k} &= \left(\frac{V}{maxV} \right) \cdot Cw, \\ \Delta y_{i,j,k} &= \left(\frac{V}{maxV} \right) \cdot Ch, \\ \Delta z_{i,j,k} &= \left(\frac{V}{maxV} \right) \cdot Cl, \end{aligned} \quad (4)$$

где $\Delta x_{i,j,k}, \Delta y_{i,j,k}, \Delta z_{i,j,k}$ – координаты центра шара по ширине, высоте и длине в зоне возможного положения центра шарика соответственно, м; maxV – число возможных позиций шара по координате; V – случайное число от 1 до maxV.

Сумма координаты шарика в гексагональной решетке и его координаты в зоне возможного положения центра шарика определяет конечную координату шарика в ВКА:

$$\begin{aligned}x_{i,j,k} &= x_{i,j,k}^0 + \Delta x_{i,j,k} \\y_{i,j,k} &= y_{i,j,k}^0 + \Delta y_{i,j,k} \\z_{i,j,k} &= z_{i,j,k}^0 + \Delta z_{i,j,k}\end{aligned}\quad (5)$$

По имеющимся координатам центров шариков по длине $z_{i,j,k}$ определяется напряженность электрического поля для каждого шарика (6).

$$E_{i,j,k} = \frac{U}{wl} \left(1 - e^{-\frac{-31,93 \cdot L^{0,0204}}{z_{i,j,k}}} \right) \quad (6)$$

где U – напряжение импульсов, В; L – длина межэлектродного пространства, мм; $z_{i,j,k}$ – координата центра шара длине; wl – толщина водной прослойки между шариками, мм.

Распределение напряженности определяет направление электрического разряда в загрузке, а также максимальную длину электрического разряда в межэлектродном пространстве: разряд между шариками происходит только при выполнении условия:

$$E_{i,j,k} > E_{kp}, \quad (7)$$

где E_{kp} – напряженность пробоя воды при атмосферном давлении, рассчитываемая по формуле Мартина [5].

Путь распространения разряда по загрузке определяется в соответствии с законами эволюции системы:

- разряд может развиваться только в направлении уменьшения напряженности электрического поля;
- разряд проходит только через те клетки, напряженность поля в которых больше критической напряженности E_{kp} ;
- разряд переходит на ближайший шар в окружении.

Проверка адекватности разработанной математической модели

Математическая модель реализована на языке C++ в среде Qt Creator 2.5.2. Экспериментальные исследования и моделирование производилось при загрузке аппарата в один слой железных шариков диаметром $d=6$ мм. Такой вариант загрузки позволяет зафиксировать траектории электрических разрядов, что невозможно для объемной загрузки аппарата. На рис. 4 изображены результаты эксперимента и результаты работы модели.

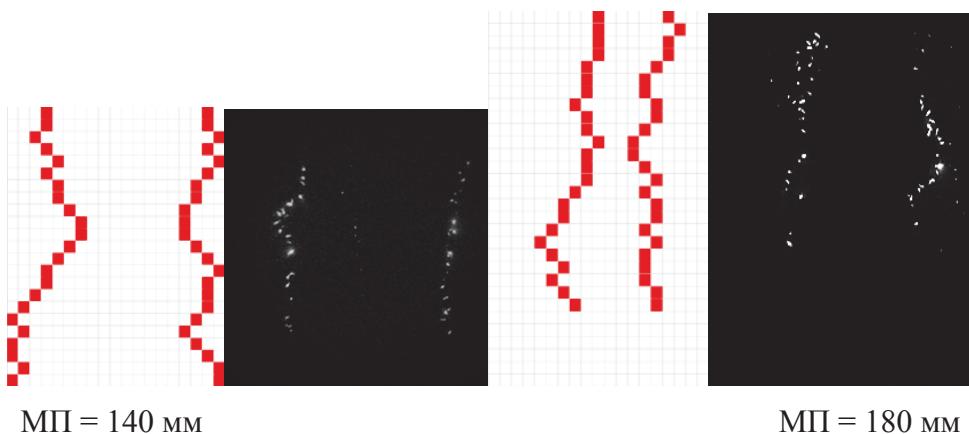


Рис. 4. Сравнение фотографий экспериментов с результатами моделирования при разном МП

Для проверки адекватности разработанной модели было произведено порядка 30 экспериментов, для каждого МП. По имеющимся экспериментальным данным были рассчитаны вероятности возникновения разного числа разрядных траекторий для МП длиной 140 и 180 мм. В таблице 1 представлены полученные результаты.

Таблица 1

Вероятности возникновения разного числа разрядных траекторий

Количество разрядных траекторий	Длина межэлектродного расстояния, мм			
	140		180	
	Вероятность возникновения, %		Вероятность возникновения, %	
	Модель	Эксперимент	Модель	Эксперимент
1	1,5	3,3	2,1	1,7
2	44,2	42,6	71,2	65,9
3	42,7	39,9	20	26,7
4	11,1	11,5	6,6	5,6
≥5	0,5	2,7	0,1	0,1
$S, \%$	2,16		4,31	

Для численной оценки точности моделирования были рассчитаны среднеквадратичные отклонения вероятностей появления разного числа разрядных траекторий по результатам моделирования от экспериментальных данных. Значения этих отклонений составили $S_{140} = 2,16\%$ и $S_{180} = 4,31\%$. Предложенная математическая модель распространения электрических разрядов между металлическими шариками в водном растворе с достаточной точностью описывает экспериментальные данные (отклонение менее 5%).

Заключение

Как видно на рис. 4 при увеличении МП до 180 мм энергии подаваемых электрических импульсов не хватает, и разрядные траектории не достигают заземленного электрода, а его роль выполняет часть шариков загрузки. Таким образом, возникает необходимость в определении оптимальной величины, подаваемых электрических импульсов, которая позволит увеличить количество обрабатываемых шариков при минимальном энергопотреблении. Для решения этой задачи планируется применить разработанную математическую модель, тем самым снизив энергопотребление данного метода водоочистки и повысив его эффективность.

Литература

1. Яворовский Н.А., Соколов В.Д., Сколубович Ю.Л., Ли И.С. 2000. Очистка воды с применением электроразрядной обработки. Водоснабжение и санитарная техника. 1. С. 12–14.
2. Nadezhdin I.S., Papasidero D., Goryunov A.G., Manenti F. 2016. Optimisation of EDM process for water purification. Chemical Engineering Transactions. 52. С. 325–330.
3. Даниленко Н.Б., Савельев Г.Г., Юрмазова Т.А., Яворовский Н.А. 2007. Химические реакции при действии импульсных электрических разрядов на активную металлическую загрузку в растворе солей хрома. Журнал прикладной химии. 80. С. 88–93.
4. Тоффоли Т., Марголос М. 1991. Машины клеточных автоматов. М.: Мир. 284 с.
5. Ушаков В.Я. 1975. Импульсный электрический пробой жидкостей. Томск.: Изд-во Томского университета. 256 с.