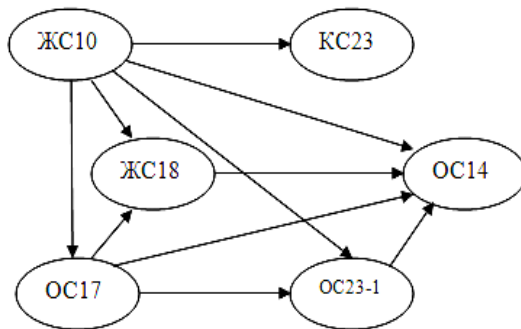




• допустимая последовательность варки цветных стекол в керамическом тигле при условии их конгруэнтного плавления.

В результате расчета по разработанным алгоритмам получены: спектры оптических плотностей (рис.1) и пропускания (рис.2), а так же ор-граф допустимой последовательности варки цветных стекол (рис.3).



**Рис. 3. Граф допустимой последовательности варки цветного стекла по коэффициенту пропускания**

Разработанные алгоритмы при незначительной модификации могут быть так же применены для определения концентрации глушителей и люминофоров в цветных стеклах.

#### Библиографические ссылки

1. Коцик, И. Окрашивание стекла / И. Коцик, И. Небреженский, И. Фандерлик. М.: Стройиздат, 1983. 211 с.
2. Булатов, М.И. Практическое руководство по фотометрическим методам анализа / М.И. Булатов, И.П. Калинин. Л.: Химия, 1972. 407 с.

УДК 66.071.6

А.Д. Поветкин, Х.К. Чан, Э.М. Кольцова

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

#### **МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЯВЛЕНИЙ, ПРОТЕКАЮЩИХ В ПОРЕ, НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

Under study is the model that describes the transportation of gas in small sized pores. There are two types of mass-transport occurring inside the pore: Knudsen diffusion and molecular diffusion. The movement and interaction of molecules are described through the model of hard spheres. Molecules move according to the laws of classical mechanics and interact with



each other, as well as with the wall, on the basis of the absolutely elastic collision. The diffusion coefficients calculated by this way give the correct order and ensure the accuracy, comparable to precision in the calculation of the Knudsen formula.

Рассматривается модель, описывающая перенос газа в порах малого размера. При этом учитывается два типа переноса вещества, происходящие внутри поры: диффузия Кнудсена и молекулярная диффузия. Движение и взаимодействие молекул описывается с помощью модели твердых сфер. Молекулы движутся по законам классической механики и взаимодействуют друг с другом, а также со стенкой, по принципу абсолютно-упругого удара. Рассчитанные таким образом коэффициенты диффузии дают верный порядок и обеспечивают точность, сопоставимую с точностью при расчете по формуле Кнудсена.

Моделирование процессов, происходящих в пористых структурах мембран, позволяет намного более эффективно использовать эти технологии, за счет того, что при проведении опытов с моделью намного удобнее подбирать оптимальные параметры для технологического процесса.

Данная модель описывает перемещение вещества в порах малого диаметра порядка сотен нанометров и при давлениях порядка сотых долей атмосфер. При таких размерах пор перенос вещества происходит как за счет столкновения молекул друг с другом (молекулярная диффузия), так и за счет соударений молекул со стенкой поры (диффузия Кнудсена), причем второй тип преобладает, так как вероятность соударения молекул друг с другом при низком давлении довольно мала. Расчет количества молекул в поре производится после задания начальных условий: длина, диаметр поры, температура, давление газа и его молекулярная масса. Средняя скорость молекул газа рассчитывается из распределения Максвелла-Больцмана. После вычисления средней скорости молекул газа, каждой молекуле присваивается определенная скорость с учетом вероятности из распределения Максвелла.

Для описания движения и взаимодействия молекул применяется модель твердых сфер. Молекулы движутся по законам классической механики и взаимодействуют друг с другом, а также со стенкой, по принципу абсолютно-упругого удара. Этот метод является достаточно точным приближением реального поведения молекул, так как при соударении соблюдается закон сохранения энергии (если не происходит химической реакции, энергия молекул не может измениться, и суммарная кинетическая энергия системы постоянна).

Таким образом, учитываются оба типа диффузии, молекулярная и Кнудсена, а также появляется возможность определить коэффициент диффузии по формуле

$$D = \frac{\langle l \rangle^2}{6t},$$

где  $D$  – коэффициент диффузии,  $\langle l \rangle$  – средняя длина пробега,  $t$  – время пробега.

Эти данные легко извлечь в процессе моделирования, так как известны параметры движения каждой отдельной частицы.

В качестве входных параметров необходимы только характеристики молекулы вещества (размер, масса) и данные о геометрии поры. При этом



получаемый коэффициент диффузии для поры цилиндрической формы близок к коэффициенту, получаемому при расчете по формуле Кнудсена:

$$D = \frac{2}{3} r \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}},$$

где  $D$  – коэффициент диффузии,  $r$  – радиус поры,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $T$  – температура,  $M$  – молекулярная масса газа.

Модель позволяет провести расчет для геометрии пор, отличной от цилиндрической, а также для смеси из нескольких веществ, причем есть возможность наблюдать кинетику химических реакций между этими веществами (в том числе с поверхностью поры в качестве носителя катализатора), если при столкновении молекул соответственно реакции менять типы молекул и их кинетические энергии в соответствии с тепловым балансом.

Также в модель может быть введен расчет сил межмолекулярного взаимодействия различных типов. Так, для расчета сил Ван-Дер-Ваальса может быть применен потенциал Леннарда-Джонса

$$U(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

где  $U(r)$  – потенциал Леннарда-Джонса,  $r$  – расстояние между центрами частиц,  $\varepsilon$  – глубина потенциальной ямы,  $\sigma$  – расстояние, на котором энергия взаимодействия становится равной нулю.

Эта формула достаточно точно описывает притяжение молекул на дальних расстояниях и отталкивание на ближних (за счет перекрытия электронных облаков). Кроме того, она проста в вычислении, так как для расчета силы необходимо всего несколько простых арифметических действий. Для расчета сил электростатического взаимодействия (если в моделируемой системе есть заряженные частицы) можно применить закон Кулона, который также требует довольно мало вычислительных ресурсов.

$$F_{12} = k \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{r_{12}^2},$$

где  $F_{12}$  – сила, с которой заряд 1 действует на заряд 2,  $k$  – коэффициент пропорциональности,  $q_1, q_2$  – величина зарядов,  $r_{12}$  – расстояние между зарядами.

Для решения уравнений движения используется скоростной алгоритм Верле, являющийся аппроксимацией классического уравнения движения Ньютона и позволяет точно и быстро находить координаты и скорости частиц.

Модель довольно проста в реализации на компьютере и хорошо сочетается с технологиями параллельного программирования.

Преимущество использования технологии параллельного программирования заключается в том, что в данном моделировании необходимо проводить множество однотипных операций над всеми частицами (проверка на столкновения, численное решение уравнений движения и т. д.). Для такой задачи хорошо подходят решения на основе принципа SIMD (single instruction, multiple data), когда вычислительное устройство выполняет опе-

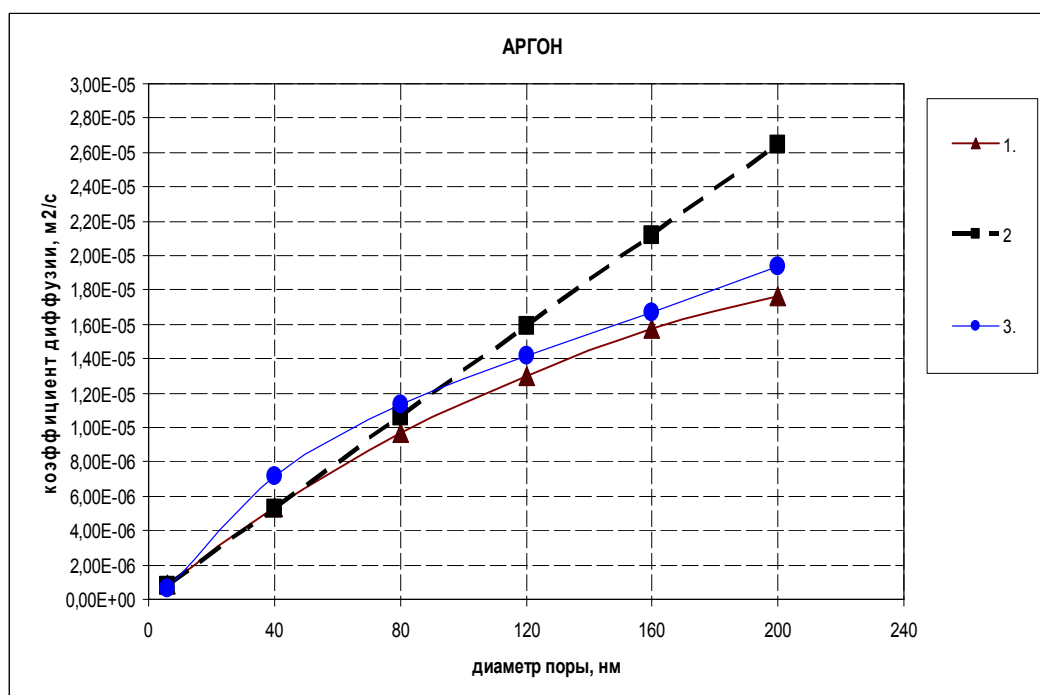


рации сразу над несколькими элементами данных за один такт. На этом принципе построена и используемая в данной реализации технология NVidia CUDA.

**Данные для расчета коэффициента диффузии аргона в поре**

Температура, К	298
Давление на входе в пору, атм	0,02
Диаметр поры, нм	6, 40, 80, 120, 160, 200
Длина поры, мкм	2
Молярная масса газа, г/моль	40
Диаметр газа, ангстрем	2

Наиболее ресурсоемкой задачей являлась проверка частиц на столкновение друг с другом. Для системы из N частиц необходимо выполнить  $N*(N-1)$  проверок, чтобы полностью учесть вероятные столкновения.



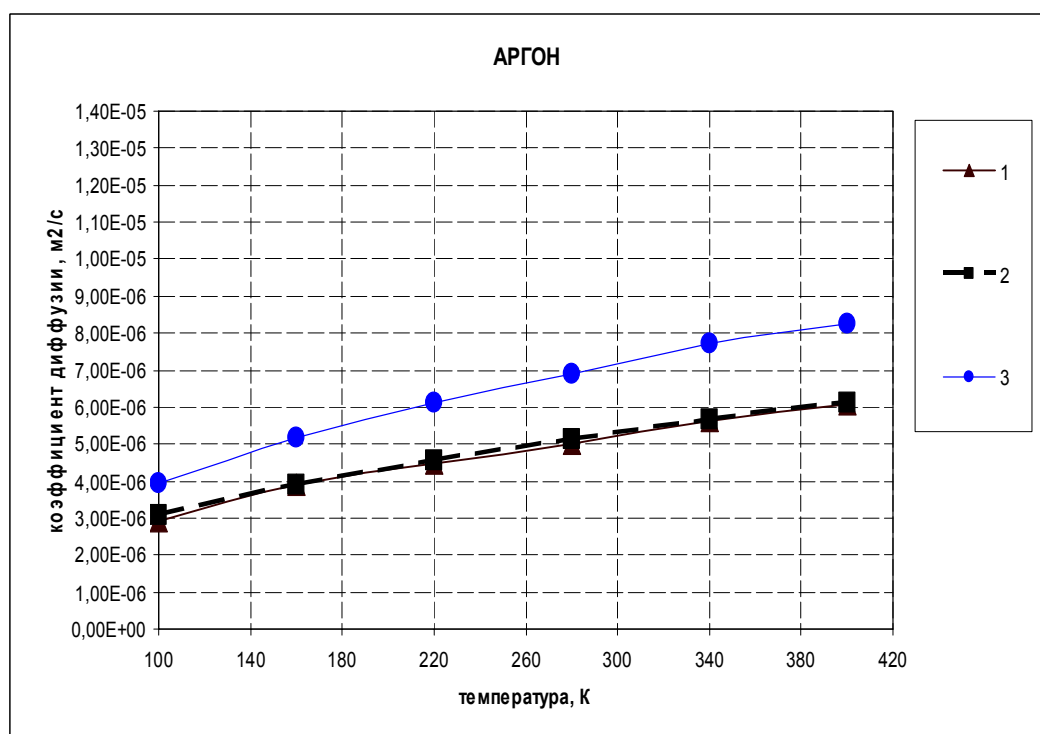
**Рис. 1. Зависимость коэффициента диффузии от диаметра поры**

В расчетах количество частиц исчисляется десятками тысяч, и для ускорения расчета в работе был применен метод сканирования по пространству (проверялись только находящиеся в относительной близости друг к другу частицы). Применение параллельного программирования позволяет проводить во много раз больше таких проверок по сравнению с однопоточной версией за одно и то же время, и таким образом позволяет получить более точные результаты. Такой же эффект достигается и на других этапах



расчета, таких, как решение уравнений движения или сбор статистики о параметрах частиц.

Приводятся графики зависимости коэффициента диффузии от температуры и диаметра поры (см. рис. 1, 2). Расчет проводился для газа аргона при параметрах, указанных в таблице. На графиках линия 1 соответствует расчету в многопоточной версии программы (на Nvidia CUDA), линия 2 – расчету по формуле Кнудсена, линия 3 – расчету в однопоточной версии (с более грубой проверкой на столкновения).



**Рис. 2. Зависимость коэффициента диффузии от температуры**

*Работа выполнена в рамках государственного контракта с Министерством образования и науки Российской Федерации № 16.513.11.3039 и гранта РФФИ № 11-08-91159 ГФЕН<sub>а</sub>.*

#### Библиографические ссылки

1. S.E. Albo. Multiscale modeling of transport and residence times in nanostructured membranes./ S.E. Albo, L.J. Broadbelt, R.Q. Snurr. // AICHE Journal, 2006. Vol. 52. No 11.
2. Subrata Roy. Modeling gas flow through microchannels and nanopores./ Subrata Roy, Reni Raju, Helen F. Chuang, Brett A. Cruden, M. Meyyappan. // Journal of applied physics, 2003. Vol. 93. No 8.
3. Таненбаум, Э. Архитектура компьютера. 5-е изд./ Э.Таненбаум. СПб.: Питер, 2007. 844 с.