О ПЕРКОЛЯЦИОННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ РАСХОДНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОРИСТОГО ТИТАНА

П. В. Москалев^{1,2}, В. Ф. Селиванов², А. С. Мягков¹, А. А. Краснов²

¹ Московский государственный технологический университет "СТАНКИН", Москва, Россия, 127055, Вадковский пер., 1 ² Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия, 394006, ул. 20-летия Октября, 84 E-mail: <u>moskaleff@mail.ru</u>; <u>almyagkov99@yandex.ru</u>

Распределение пор по размерам в общем случае является одной из наиболее трудноопределимых характеристик пористых структур оцениваемых, как правило, с применением косвенных физических методов [1, 2]. Исследуемая выборка была сформирована из образцов пористого титана, полученных прессованием с различной степенью уплотнения электролитического титанового порошка марок ПТЭК и ПТЭС. Работы по изготовлению и исследованию образцов проводились в Воронежском государственном техническом университете в 2023–2024 годах в рамках гранта РНФ (проект № 23-21-00376), первичные результаты этих исследований были представлены в наших работах [3–5].

Для оценки распределения пор по размерам использовалось сопоставление расходных характеристик для сухих и насыщенных дистиллированной водой образцов пористого титана. На рис. 1(а) показаны примеры таких расходных характеристик для образца с эффективной пористостью $\Pi_e = 0,394$. Аппроксимация расходной характеристики для сухого образца строилась на базе квадратичного полинома с нулевым свободным членом:

$$rac{Q_{0i}}{Q_c} = b_1 rac{P_i}{P_c} - b_2 \left(rac{P_i}{P_c}
ight)^2 + e_i, \ \$$
для $i = 1, 2, ..., n_0,$ (1)

где P_i , P_c — текущее и характерное значения дифференциального давления для образца, кПа; Q_{0i} , Q_c — текущее и характерное значения объемного расхода воздуха через сухой образец, дм³/мин; $b_{1,2}$ — компоненты вектора параметров модели (1), оцениваемые методом наименьших квадратов по выборке { $Q_{0i}(P_i)$ } объемом n_0 .

Аппроксимация расходной характеристики для насыщенного дистиллированной водой образца строилась как произведение полинома (1) и логистической функции:

$$\frac{Q_{1i}}{Q_c} = \frac{b_1 \frac{P_i}{P_c} - b_2 \left(\frac{P_i}{P_c}\right)^2}{1 + \exp\left(-\frac{\frac{P_i}{P_c} - b_3}{b_4}\right)} + e_i, \quad \text{для} \quad i = 1, 2, \dots, n_1,$$
(2)

где Q_{1i} — объемный расход воздуха через насыщенный дистиллированной водой образец, дм³/мин; $b_{3,4}$ — компоненты вектора параметров модели (2), оцениваемые нелинейным методом наименьших квадратов по выборке { $Q_{1i}(P_i)$ } объемом n_1 .

Отношение функций, описывающих аппроксимации (2) и (1) позволяет записать дополнительную функцию $q(P/P_c) = Q_1(P_i/P_c)/Q_0(P_i/P_c)$, описывающую переход между функциями (2) и (1) при увеличении относительного дифференциального давления на образце P/P_c :

$$q = 1/(1 + \exp(-(P/P_c - b_3)/b_4)).$$
(3)

Пример переходной функции (3) для исследуемого образца пористого титана показан на рис. 1(б). Сдвиговой параметр для этого образца можно оценить на уровне $b_3 \approx 0,238$, где $P/P_c = b_3$ соответствует точке перегиба переходной функции (3).



Рис. 1. Расходные характеристики для исследуемого образца пористого титана [4]: а) аппроксимации (1) и (2); б) переходная функция (3)

Как показано в [4], от дифференциального давления на образце P можно перейти к гидравлическим радиусам пор r, что позволяет получить оценки как для соответствующего параметру b_3 критического радиуса пор $r_c \approx 0,018$ мм, так и для соответствующего переходной функции (3) доверительного интервала $I_{0,95}(r) = (r_0; r_1) = (0,01; 0,04)$ мм. Принимая в качестве характерных размеров цилиндрического образца высоту его образующей и диаметр основания h = d = 16 мм, можно получить априорную оценку числа узлов, определяющих линейный размер расчетной сетки:

$$N = \frac{d}{2r_1k_1} = \frac{200}{k_1} \in [8; 13],\tag{4}$$

где *k*₁ ∈ [15; 25] – априорные оценки минимального числа пор по выделенной оси элементарного репрезентативного объема.

Одним из эффективных инструментов моделирования процессов одно- и многофазной фильтрации в пористых материалах является модели, основанные на математической теории перколяции [2]. По способу аппроксимации порового пространства среди перколяционных моделей можно выделить модели решеточной, континуальной и потенциальной перколяции. Модели решеточной перколяции, на локальном уровне, различаются по характеристикам окрестности узла перколяционной решетки (метрика и радиус окрестности), а на глобальном уровне — по характерным размерам моделируемой области, характеристикам случайной величины, взвешивающей узлы и/или связи перколяционной решетки и долям достижимых узлов и/или связей этой решетки.

Рассмотрим модель перколяции узлов на кубической решетке с линейным размером x = 11 узлов с (1, 0)-окрестностью, взвешенной бета-распределенной случайной величиной $S \sim \mathbf{B}(s_1, s_2)$, где параметры бета-распределения $s_1 = 0,88$ и $s_2 = 1,14$ выбраны для оптимальной аппроксимации при отображении функции (1) из интервала дифференциальных давлений $0 \le P \le P_c \approx 10,7$ кПа в интервал значений параметра перколяционной модели $0 \le p \le 1$. Для таких решеток будем рассматривать статистику образования кластеров, стягивающих решетку от верхней до нижней горизонтальных границ для различных значений параметра p.

Для аппроксимации оценок мощности перколяционных кластеров на ограниченных решетках $\{P_{xi}(p_i)\}$ будем использовать произведение интегральной функцией распределения $F_0(p|S)$ взвешивающей перколяционную решетку случайной величины S и некоторой переходной функции $F_x(p) = F_1(p)F_2(p)$, то есть:

$$P_{xi} = F_0(p_i)F_1(p_i)F_2(p_i) + e_i,$$
(5)

где $F_x(p)$ – асимметричная сигмоидная функция, представимая в виде

$$F_1(p) = \frac{1}{1 + \exp\left(-\frac{p - b_{10}}{b_{11}}\right)}, \qquad F_2(p) = 1 - \exp\left(-\frac{p - b_{20}}{b_{21}}\right), \tag{6}$$

где b_{10} , b_{20} – сдвиговые, а b_{11} , b_{21} – масштабные параметры аппроксимаций (5) и (6).



Рис. 2. Аппроксимации вида (5) и (6) для мощностей стягивающих кластеров $\{P_{xi}(p_i)\}$ и переходных функций $\{F_{xi}(p_i)\}$ на бета-взвешенных квадратных решетках

Для статистической оценки параметров моделей (5), (6) будем использовать функцию " $gsl_nls()$ " из пакета "gslnls", выпущенного под лицензией GNU GPL-3 для системы R [6]. Сводка результатов, полученных при оценке параметров модели (5) для исследуемого образца пористого титана, приведена в листинге 1.

Листинг 1. Оценка параметров модели (5) для исследуемого образца

```
> summary(fPx)
Formula: Px ~ pbeta(p, s[1], s[2]) * F1(p, b10, b11) * F2(p, b20, b21)
Parameters:
    Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
b10 0.2859400 0.0021060 135.78 < 2e-16 ***
b11 0.0325224 0.0008439 38.54 < 2e-16 ***
b20 0.1735621 0.0093556 18.55 4.51e-14 ***
b21 0.0991442 0.0041905 23.66 4.27e-16 ***
---
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Residual standard error: 0.002384 on 20 degrees of freedom
Number of iterations to convergence: 14
Achieved convergence tolerance: 5.607e-15</pre>
```

На основе приведенных статистических показателей качество показанных на рис. 2 аппроксимаций (5) и (6) можно охарактеризовать как хорошее. В то же время сопоставление параметров моделей (5) и (2) демонстрирует достаточно сложную структуру аппроксимации, необходимой для описания перколяционной модели при наблюдаемом сочетании параметров. В частности, заслуживает дополнительного исследования взаимосвязь апостериорных оценок сдвиговых и масштабных параметров функций (3) и (6) с репрезентативным объемом пористой среды: $b_{20} < b_3 < b_{10}$ и $b_{21} > b_4 > b_{11}$, а также поведение функции невязки при изменении доли достижимых узлов для решеток различного размера.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект № 23-21-00376).

Литература:

- [1] Плаченов Т. Г., Колосенцев С. Д. Порометрия. Л.: Химия, 1988.
- [2] Москалев П.В. Перколяционное моделирование пористых структур. М.: URSS, 2018. 320 с. EDN: <u>ZRJSWD</u>.
- [3] Москалев П. В., Онищенко Л. С. // Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики: сборник трудов Международной научной конференции. – Воронеж: Научно-исследовательские публикации, 2024. – С. 564-568. – EDN: <u>HVSMWR</u>.
- [4] Москалев П. В., Селиванов В. Ф., Бокарев Д. И. и др. // Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики: сборник трудов Международной научной конференции. – Воронеж: Научно-исследовательские публикации, 2024. – С. 569-572. – EDN: <u>AZQKPM</u>.
- [5] Москалев П. В., Селиванов В. Ф., Онищенко Л. С. и др. // Моделирование нелинейных процессов и систем: материалы VII Международной конференции. – М.: Янус-К, 2024. – С. 141-144. – EDN: <u>URTRWX</u>.
- [6] Chau J. gslnls: GSL Nonlinear Least-Squares Fitting. CRAN, 2024. DOI: <u>10.32614/CRAN.package.gslnls</u>.