

НАГЛЯДНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕНДРИТНЫХ СТРУКТУР

Осташков В.Н., Скоробогатова Н.В.

Тюменский государственный нефтегазовый университет

В статье рассматривается дидактический комплекс вопросов, лежащих в основе обучения студентов математическим методам наглядного моделирования на примере исследования процесса выделения твердых углеводородов при кристаллизации из нефтяных фракций. В основе наглядного моделирования применительно к учебному процессу лежат три составляющих: физическая, математическая и дидактическая.

Введение

В настоящей статье на примере исследования процесса выделения твердых углеводородов при кристаллизации из нефтяных фракций рассматривается дидактический комплекс вопросов, лежащих в основе обучения студентов специальностей 250400 «Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов» и 250100 «Химическая технология органических веществ» математическим методам наглядного моделирования в рамках спецкурса по избранным вопросам математики. В основе наглядного моделирования применительно к учебному процессу лежат три составляющих:

- физическая (рассматривается в предметной области исследовательская проблема, как происходит рост парафиновых образований во время кристаллизации в нефти),
- математическая (строится и изучается численная модель, дающая представление о механизмах и причинах роста кристаллов),
- дидактическая (на занятиях в малой группе у студентов формируется понимание физической и математической моделей, знание свойств математической модели и умение интерпретировать полученные результаты в терминах физической модели).

В соответствии с этим рассмотрим более подробно методологические аспекты моделирования вообще и наглядного моделирования в частности.

Наглядное моделирование

В современных условиях проблема обучения будущих инженеров моделированию технологических или природных процессов приобретает особую значимость. Это вызвано следующими обстоятельствами [1, с.5]:

– *во-первых, увеличивается объём информации, сообщаемой студентам, что приводит к необходимости внесения качественных изменений в содержание образования;*

– *во-вторых, ширится прогресс интеграции наук, требующий умения согласованно применять знания из различных дисциплин.*

Моделирование является одним из составных компонентов наглядно-модельного обучения. В процессе обучения формируется модель существенных признаков объекта изучения, адекватных поставленной цели. Наглядно-модельное обучение включает в себя как построение модели (схемы, кода, заместителя), так и формирование адекватного результата внутренних действий обучаемых в процессе учебной деятельности. Предпочтение отдается «наглядной» модели как опоре на устойчивые ассоциации, простые геометрические формы, психологические законы восприятия и нейрофизиологические механизмы памяти. Модель должна отражать суть понятия, формы или метода исследования. Еще с начала XX столетия целый ряд психологов (О.Зельц, М. Вертгеймер, М.Бунге и др.) подчеркивали существенность процесса визуализации исследовательской ситуации как важного этапа решения задачи.

Компонентный состав концепции наглядно-модельного обучения как педагогического процесса формирования новых знаний:

- целеполагание (теоретический, практический, методический модуль);
- представление модели объекта или динамического процесса;
- оперирование знаково-символическими средствами (материальными, перцептивными, идеальными);
- знаково-символическая деятельность (моделирование, схематизация, кодирование, замещение) и управление;
- создание условий устойчивости перцептивного образа и представления;
- адекватность априорной модели результату внутренних действий обучаемого (перцептивному образу) [8, с. 234].

Понятия модели и моделирования наиболее распространены в сфере обучения, в научных исследованиях, в проектно-конструкторских работах, в серийном техническом производстве. Чаще всего термин «модель» используют для обозначения:

- устройства, воспроизводящего строение или действие какого-либо другого устройства (уменьшенное, увеличенное или в натуральную величину);
- аналога (чертежа, графика, плана, схемы, описания и т.д.) какого-либо явления, процесса или предмета.

К недостаткам термина «модель» следует отнести его многозначность. В словарях можно найти до восьми различных значений данного термина, из которых в научной литературе наиболее распространены два:

- модель как аналог реального объекта;
- модель как образец будущего изделия.

Важную роль при разработке моделей играют гипотезы, т.е. определенные предсказания, предположительные суждения о причинно-следственных связях явлений, основанные на некотором количестве опытных данных, наблюдений, догадок. Формулирование и проверка правильных гипотез основывается, как правило, на аналогиях.

Аналогия — это представление о каком-либо частном сходстве двух объектов, причем такое сходство может быть как существенным, так и не существенным. Существенность сходства или различия двух объектов условна и зависит от уровня абстрагирования, определяемого конечной целью исследования. Уровень абстрагирования зависит от набора учитываемых параметров объекта исследования.

Под моделью понимают такой материальный или мысленно представляемый объект, который в процессе познания (изучения) замещает объект-оригинал, сохраняя некоторые важные для данного исследования типичные его черты. Процесс построения и использования модели называется *моделированием*.

Если результаты моделирования удовлетворяют исследователя и могут служить основой для прогнозирования поведения или свойств исследуемого объекта, то говорят, что модель адекватна объекту. При этом адекватность модели

зависит от целей моделирования и принятых критериев. Учитывая заложенную при создании неполноту модели, можно утверждать, что идеально адекватная модель принципиально невозможна.

Хорошо построенная модель, как правило, доступнее, информативнее и удобнее для исследования, нежели реальный объект.

Рассмотрим основные цели, преследуемые при моделировании в научной сфере. Самым важным и наиболее распространенным предназначением моделей является их применение при изучении и прогнозировании поведения сложных процессов и явлений. Следует учитывать, что некоторые объекты и явления вообще не могут быть изучены непосредственным образом. Многие эксперименты неосуществимы в силу своей дороговизны или рискованности для человека и/или среды его обитания.

Модель должна адекватно отражать основные, главные черты исследовательской деятельности студентов и должна быть описана математически. Кроме того, необходимо учесть роль каждого определяющего структуру элемента, его функции и характеристики. Исходя из системного подхода, при исследовании наглядного моделирования в обучении следует выявить структуру этого процесса, так как именно она и должна быть формализована при построении модели познавательной деятельности студентов. Изучение этой структуры невозможно без знания специфики учебного процесса и особенностей методики применения средств и видов наглядного обучения, без использования практического опыта имеющихся в педагогике подходов и методик. После изучения ориентировочной основы и структуры наглядного моделирования необходимо проектировать систему организации и управления исследовательской деятельностью студентов в условиях рефлексии и совместной работы в малых группах.

Системная реализация в процессе исследовательского обучения математике всех видов наглядного моделирования выступает фактором формирования целостных образов математических объектов, неотъемлемым этапом имитации научного познания в обучении студентов, а значит, и значительно способствует усвоению математических знаний и развитию когнитивных способностей и математического мышления.

Наглядное моделирование — это формирование адекватного категории диагностично поставленной цели, устойчивого результата внутренних действий обучаемого в процессе моделирования существенных свойств, отношений, связей и взаимодействий при непосредственном восприятии приемов знаково-символической деятельности с отдельными знаниями или упорядоченными наборами знаний [8, с. 230].

Выявление сущности каждого компонента наглядного моделирования в обучении математике предполагает поиск, познание и раскрытие закономерностей эффективного ее функционирования, создания условий для комфортной совместной деятельности преподавателя и ученика, получение диагностируемого адекватного результата внутренних действий обучаемого.

Физическая модель

Депарафинизацией называется процесс удаления из нефтяных фракций твердых углеводородов, выкристаллизовывающихся из раствора при понижении температуры. К числу углеводородов, выделяющихся в кристаллическом состоянии из нефтяных фракций, относятся высокомолекулярные парафиновые углеводороды, а также нафтеновые, нафтеноароматические и ароматические углеводороды с длинными алкильными цепями нормального и слаборазветвленного строения.

Изучение состава углеводородов, кристаллизующихся из различных нефтяных фракций при их охлаждении, показало, что углеводороды распределяются во фракциях следующим образом:

- в низкокипящих фракциях нефти содержатся преимущественно нормальные парафиновые углеводороды;
- с повышением температуры кипения во фракциях постепенно снижается содержание нормальных парафиновых углеводородов и увеличивается количество парафиновых углеводородов изостроения и циклических с длинными алкильными цепями;
- в высококипящих (остаточных) фракциях преимущественно содержатся циклические углеводороды (главным образом нафтеновые и в значительном количестве ароматические) с длинными алкильными цепями [4].

Наряду с монокристаллическими образованиями при кристаллизации твердых углеводородов из растворов могут образоваться как скопления из монокристаллов, так и дендритные структуры. Дендриты имеют рыхлую геометрию и при фильтрации задерживают много жидкой фазы. Дендритная кристаллизация наблюдается обычно при охлаждении неочищенных, содержащих смолы нефтепродуктов.

Для построения математической модели процесса кристаллизации заметим, что он, как известно, начинается с выделения из пересыщенного раствора зародышей кристаллов. Последующая кристаллизация протекает при дальнейшем охлаждении раствора на уже образовавшихся зародышах. Для получения в процессе кристаллизации крупных кристаллов важно, чтобы количество зародышей, образующихся в первый момент, было невелико, так как распределение вновь выделяющихся кристаллов твердых углеводородов при охлаждении раствора на слишком большом числе зародышей приведет к образованию мелких кристаллов. Количество зародышей зависит от скорости охлаждения раствора: чем выше скорость охлаждения, тем больше кристаллических зародышей образуется в растворе и тем меньшим будет размер образовавшихся кристаллов. Из этого следует, что одним из основных условий образования крупных кристаллов является скорость охлаждения раствора.

Кроме того, мы будем исходить из того, что скорость роста кристаллов (в г/сек) на образовавшихся центрах кристаллизации определяется уравнением И.И. Андреева:

$$v = \frac{dx}{dt} = kS(x - x') \quad (1)$$

где $\frac{dx}{dt}$ — количество вещества, выкристаллизовавшегося в единицу времени;

k — коэффициент, зависящий от диффузии молекул, достигших насыщения (d), и средней длины диффузионного пути (δ); $k = d / \delta$;

S — поверхность выделившейся твердой фазы;

x — концентрация пересыщенного раствора;

x' — растворимость зародышей кристаллов при данной степени их дисперсности.

Математическая модель

Изучение формирования кластеров путем агрегации отдельных частиц играет важную роль во многих областях естествознания [2]. В коллоидах и аэрозолях кластеры обнаруживают геометрическую скейлинговую структуру с многими вполне определенными характерными масштабами [7]. Исходный пункт для теоретического исследования был найден с помощью численного моделирования. До сих пор не известно, *почему* кластеры являются фракталами, но приходит понимание того, *как* реализуется их фрактальная структура и *как* их фрактальная размерность связана с физикой процесса.

Для моделирования процесса кристаллизации в растворах необходимы новые численные методы и модели. Модель ограниченной диффузией агрегации (ДОВА) Сандера [7] представляется особенно пригодной для изучения эффектов нелокального поля диффузии.

В последнее время внимание исследователей привлекло необратимое объединение частиц в кластеры. Стало понятно, что именно кластеризация является одним из способов возникновения фракталов в необратимых процессах.

Для того чтобы по достоинству оценить модель ДОВА, лучше всего рассмотреть начавшую складываться в последние годы общую феноменологию других кинетических процессов, сопровождающихся переходом из равновесного состояния в неравновесное. Обычно мы можем выделить три динамических режима (конвекция Рэлея — Бенара [3] служит хорошим примером):

- 1) режим, близкий к равновесному;
- 2) образование структур;
- 3) хаотический режим.

В задаче Рэлея — Бенара они соответствуют режимам теплопроводности, образованию конвективных валиков и турбулентности. Эти же режимы удастся обнаружить и в процессах, ограниченных диффузией. Это обстоятельство позволяет понять существенные особенности модели ДОВА, которая до сих пор, несмотря на свою предельную простоту, упорно сопротивлялась попыткам аналитического объяснения.

Связь между ДОВА и затвердеванием в виде дендритов известна уже в течение некоторого времени [2]. В дальнейшем мы рассмотрим ее более

подробно, а пока достаточно сказать, что диффузию скрытой теплоты от растущего кристалла мы отождествляем с движением случайно блуждающих частиц к кластеру. Ясно, что неравновесный кристалл, форма которого определяется построением Вульфа, соответствует режиму «1». Изящные формы снежинок соответствуют режиму «2». Неупорядоченный, хаотический рост кристалла, отождествляемый с ДОА, доведенной до конечного предела, служит примером режима «3» и порождает фрактальные структуры. Наиболее точным из известных нам экспериментальных примеров ДОА является электролитическое осаждение металлов на небольшой электрод.

В целях большей наглядности и уменьшения машинного времени целесообразно построить сначала двумерную модель кристаллизации. При этом будем исходить из предположения, что скорость охлаждения высокая, по крайней мере, достаточная для того, чтобы пренебречь растворимостью x' в (1). Такое же допущение мы сделаем при построении и трехмерной модели (именно она наиболее удобна для прямого сравнения с экспериментами).

С помощью численного моделирования следует изучить сначала модель вида «частица — кластер», а затем более сложную модель «кластер — кластер», которые были предметом интенсивных исследований в 80-х годах прошлого столетия. Таким образом, перед студентами ставится 4 задачи: изучить 2- и 3-мерные модели «частица — кластер», «кластер — кластер».

Модель «частица — кластер» очень проста: совершающие случайное блуждание частицы парафина в результате аккреции образуют кластер, приходя поодиночке издали и присоединяясь либо к точечному центру кристаллизации, либо к ранее аккретировавшим в кластер частицам. Интенсивные компьютерные исследования показали [2, 7], что в результате такого процесса образуются сложные разветвленные фракталы.

Адекватность такой модели основана на возникшем в последнее время достаточно ясном понимании того, что дендриты, подобные образующимся при кристаллизации, или при пробоях диэлектрических материалов, или в минералах типа псиломелана (рис. 1), тождественны дендритам, вырастающих при ДОА.



Рисунок 1. Псилометан

Цвет: черный, буро-черный.
Блеск: металлический, матовый, смолистый.
Прозрачность: непрозрачный.
Черта: черная, бурая.
Твердость: 4—6, хрупкий.
Плотность: 4,4—4,7.
Излом: неровный, шероховатый.
Сингония: моноклинная.
Форма кристаллических выделений:
тонкокристаллические агрегаты,
гроздьевидные, желвакообразные, рыхлые
землистые массы; псиломелан встречается
также в виде скелетных кристаллов —
дендритов на поверхностях скола пород.
Класс симметрии: призматический — $2/m$.
Отношение осей: $3,319 : 1 : 4,809$; $b = 92^\circ 30'$.
Спайность: Отсутствует.
П. тр.: Не плавится.
Поведение в кислотах: растворяется в HCl.

Правила моделирования

Модель «частица — кластер» (рис. 3) на квадратной решетке размером $L \times L$, $L = 10 \div 1000$, при этом должны выполняться следующие правила:

- 1) первоначально имеется единственный точечный зародыш, который представляет собой центральную клетку решетки;
- 2) частица определяется как квадратная клетка с единичной стороной; частица стартует из случайной клетки на краю решетки и совершает случайное блуждание по решетке до тех пор, пока она не соприкоснется одной из частиц кластера или группы соседствующих частиц;
- 3) процесс прекращается, как только кластер достигает в своем росте края решетки.

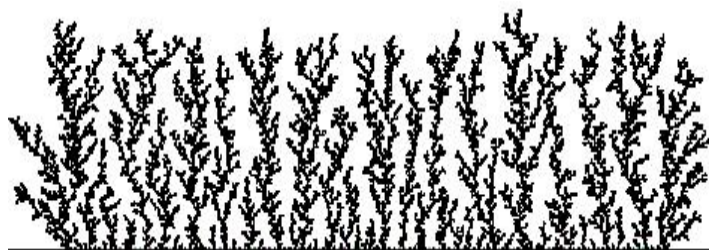


Рисунок 2. Модельные дендриты

Первое правило моделирует рост только одного кластера. Правило 2) допускает только древовидные кластеры и не разрешает появление петель. Заключительное правило необходимо для остановки численного моделирования.

Применение нашей модели обладает рядом достоинств. Численный метод прост и эффективен. Модель позволяет легко воспроизводить сравнительно сложные геометрии. Кроме того, флуктуации, всегда присутствующие в любой термодинамической системе (и играющие важную роль в процессе роста), естественно, могут быть включены через случайные блуждания частиц. Наконец, модель может быть легко модифицирована с тем, чтобы учесть различные экспериментальные условия. Например, эффекты анизотропного поверхностного натяжения или наложенный на систему градиент температуры могут быть непосредственно воспроизведены в модели.

Дендритный рост

Для воспроизведения дендритного роста мы использовали модель ДОА с одной затравочной частицей в центре квадратной решетки. При этом присоединение частицы может быть слабым — одна-единственная связь с кластером, средним — 2 связи, сильным — 3 связи. Число связей мы определим как число вершин частицы, соприкасающиеся с кластером. Легко доказать, что в этой модели число связей не может превышать 3.

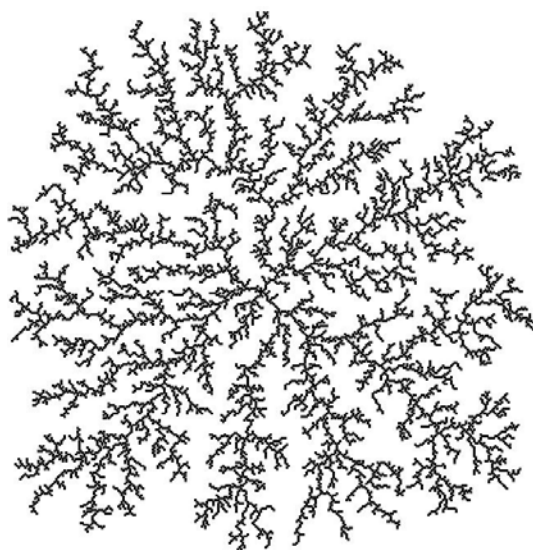


Рисунок 3. Кластер в модели ДОА

Фрактальную размерность D_0 (ее еще называют клеточной размерностью [5]) множества X численно определяется следующим. Покроем X квадратной решеткой, у которой сторона клетки равна ε . Затем подсчитаем число $N(\varepsilon)$ клеток, покрывающих X . Тогда, по определению,

$$\dim_M X = D_0 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln N(\varepsilon)}{\ln \varepsilon^{-1}}.$$

Для двумерного случая фрактальная размерность дендритов близка к 1,7. Это означает, что масса агрегата возрастает как $L^{1,7}$, где L — линейный размер, а средняя плотность изменяется как $L^{1,7}/L^2 = L^{-0,3}$, т.е. убывает, в полном соответствии с внешним видом подобных форм роста. В трехмерной ДОА фрактальная размерность обычно находится вблизи 2,5. [Любопытно заметить, во-первых, что Леонардо да Винчи эмпирическим путем пришел к выводу: «Совокупная толщина всех ветвей дерева на любой высоте равна толщине ствола (ниже их)» [5, с. 224]. Это означает, что для ветвей настоящего дерева диаметр d до ветвления и диаметры d_1, d_2 после разветвления удовлетворяют соотношению:

$$d^\Delta = d_1^\Delta + d_2^\Delta,$$

где $\Delta = 2$. Согласно Бенуа Мандельброту [5, с. 230], Мюррей установил опытным путем, что вес ветви пропорционален ее диаметру, возведенному в степень $M \sim 2,5$. По мнению же самого Мандельброта, $M = 2 + \Delta/3$. Во-вторых, как доказано в статье [6], множество всех 2-граней бесконечной кубической решетки 3-мерного пространства имеет размерность 2,5.]

При ДОА отдельные частицы после некоторых случайных блужданий оседают на агрегате, порождая случайные фракталы, которые моделируют рост парафиновых дендритов в нефти. Для них характерна древовидная структура с многочисленными «фьордами» на многих размерных масштабах. Причина образования подобных структур при ДОА заключается в том, что блуждающая частица оседает, как правило, вблизи выступа фрактала, а не в глубине фьорда. Вероятность проникновения в глубокий фьорд чрезвычайно мала.

5	3	4	
3		1	4
3			3
5	3	3	5

Рисунок 4. Вероятность прикрепления частицы к выступам кластера намного выше, чем к точкам внутри изгиба

Для вычисления вероятности прикрепления частицы с кластером заметим, что частица, будучи квадратом, может иметь с кластером одну, две или три общих вершины. На рис. 4 изображен кластер из трех частиц — клеток с координатами (1; 1), (1; 2), (2; 1), окрашенных в темный цвет. Блуждающая частица может присоединиться к этому кластеру, попав в одну из 12 белых клеток. Число одношаговых путей, по которым частица может попасть в белую клетку, записано внутри клетки. Среди 12 белых клеток имеется 5 угловых — (0; 0), (3; 0), (3; 2), (2; 3), (0; 3), 6 срединных — (1; 0), (2; 0), (3; 1), (1; 3), (0; 2), (0; 1), 1 фьорд — (2; 2). Угловые клетки имеют 1 связь с кластером, срединные — 2 связи, фьорд — 3 связи. Поскольку всего имеется 42 одношаговых маршрута, ведущих в белые клетки извне, то вероятности p_k того, что частица попадет в белую клетку с k связями, равны:

$$p_1 = 23/42 \approx 0,5476, \quad p_2 = 12/42 \approx 0,2857, \quad p_3 = 1/42 \approx 0,0238.$$

Мы видим, что соединиться с кластером внутри фьорда у частицы мало шансов. Это означает, что в реальной кристаллизации внутри фьорда концентрация парафиновых частиц меньше, так как многие из них уже присоединились к кластеру. В окрестности же выступов концентрация высокая, так как пока мало частиц из этой окрестности присоединились к дендриту.

Внешнее сходство между пселомелановым дендритом на рис. 1 и формами ДОА на рис. 2 не случайно. Оба процесса описываются уравнением Лапласа $\nabla\phi = 0$ из теории потенциала, причем градиент потенциала соответствует полю диффузии в ДОА, а поверхность кластера ДОА — эквипотенциальной поверхности. При таком подходе к ДОА можно предположить, что частицы будут с большей вероятностью прилипать к тем местам кластера, где высок градиент потенциала, т.е. вблизи выступов. «Рост» молнии или парафинового дендрита

происходит, как правило, в направлении наибольшего градиента потенциала. Глубокие же фьорды наших узоров на рис. 2 и 3 хорошо экранированы и поэтому либо растут очень медленно, либо не растут вовсе. Такое соответствие между теорией потенциала и фрактальным ростом было полностью подтверждено тщательными измерениями и численными решениями потенциального уравнения [9].

Литература

1. Бродский Я.С., Павлов А.П. О содержании математического образования в средних специальных учебных заведениях // Методические рекомендации по преподаванию математики. Вып. 11: Метод. Пособие для преподавателей средн. спец. учеб. заведений / А.Д. Мышкис, Я.С. Бродский, А.Л. Павлов и др.; под ред. Я.С. Бродского. – М.: Высшая школа, 1989. — С. 11 – 26.
2. Вичек Т. Формирование структур отвердевания в моделях агрегации / Фракталы в физике. Труды VI международного симпозиума по фракталам в физике (МЦТФ, Триест, Италия, 9 – 12 июля 1985). — М.: Мир, 1988.— С. 345 – 349.
3. Гетлинг А.В. Конвекция Рэлея — Бенара. Структуры и динамика.— М.: Эдиториал УРСС, 1999.— 248 с.
4. Казакова Л.П. Твердые углеводороды нефти. — М.: Химия, 1986.— 176 с.
5. Мандельброт Б.Б. Фрактальная геометрия природы.— М.: Институт компьютерных исследований, 2002.— 656 с.
6. Осташков В.Н., Кортаева В.А. Фрактальная размерность неограниченных множеств// Биниология, симметрология и синергетика в естественных науках: Матер. междунар. конф.— Тюмень: ТюмГНГУ, 2001.— С. 115–118.
7. Сандер Л. Континуальная ДОА: случайный фрактальный рост, порождаемый детерминистической моделью / Фракталы в физике. Труды VI международного симпозиума по фракталам в физике (МЦТФ, Триест, Италия, 9 – 12 июля 1985). — М.: Мир, 1988.— С. 336 – 344.
8. Подготовка учителя математики: инновационные подходы: Учеб. пособие / под ред. В.Д. Шадрикова.— М.: Гардарики, 2002.— 383 с.
9. Niemeyer L., Pietronero L., Wiesmann H.J. Response dimension of dielectric breakdown. // Phys. Rev. Lett.— 1984.— V. 52.— P. 1033–1040.