

UDC 532.13

## CLUSTER AND ASSOCIATE MODEL TEMPERATURE DEPENDENCE OF VISCOSITY OF WATER AND HEAVY WATER

A.M. Makasheva, Ya.A. Bugaeva, V.P. Malyshev

Chemical and metallurgical institute named after Zh. Abishev, Karaganda  
[cia\\_hmi@mail.ru](mailto:cia_hmi@mail.ru)

**Key words:** cluster associate, temperature, dynamic viscosity, water, heavy water.

**Abstract.** The authors have developed cluster and associate model of viscous fluid flow based on the Boltzmann distribution and derived from the concept of randomized particles. Viscous flow is seen as the destruction of the associates by overcoming the forces of Van der Waals attraction between the clusters, which in principle does not contradict the existing notions of viscous flow. The proposed equation can be defined as a generalized semi-empirical, because preserving the fundamental involvement in the Boltzmann distribution, it is used in reference value.

Check the model developed on the reference data held by the dynamic viscosity of water and heavy water. The resulting equations for these specified substances adequately represent this relationship in the full range of the liquid state.

On the functional nature of the model a natural decrease is evidence of in the degree of association of clusters with increasing temperature in both cases. Although heavy water, it is somewhat less than usual, and it is also a logical view of the greater difficulty of aggregation heavy particles as compared with the light.

The advantage of cluster and associate model is the ability to predict the behavior of viscosity in low temperatures and high temperatures up to boiling point.

УДК 532.13

## КЛАСТЕРНО-АССОЦИАТНАЯ МОДЕЛЬ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ВЯЗКОСТИ ВОДЫ И ТЯЖЁЛОЙ ВОДЫ

А.М. Макашева, Я.А. Бугаева, В.П. Мальшев  
Химико-металлургический институт имени Ж. Абишева  
[cia\\_hmi@mail.ru](mailto:cia_hmi@mail.ru)

**Ключевые слова:** кластер, ассоциат, температура, динамическая вязкость, вода, тяжелая вода.

**Аннотация.** Авторами разработана кластерно-ассоциатная модель вязкого течения жидкости, основанная на распределении Больцмана и выведенная из концепции хаотизированных частиц. Вязкоетечение рассматривается как разрушение ассоциатов путем преодоления сил ван-дер-ваальсового притяжения между кластерами, что в принципе не противоречит существующим представлениям о вязком течении. Предлагаемое уравнение можно определить как обобщённое полуэмпирическое, поскольку, сохраняя причастность к фундаментальному распределению Больцмана, в нём используются реперные значения.

Проверка разработанной модели проведена на справочных данных по динамической вязкости воды и тяжелой воды. Полученные уточненные уравнения для этих веществ адекватно отображают данную зависимость в полном диапазоне жидкого состояния.

О функциональном характере модели свидетельствует и закономерное понижение степени ассоциации кластеров по мере повышения температуры в обоих случаях. Хотя для тяжелой воды она несколько меньше, чем для обычной, и это также является закономерным ввиду большей трудности агрегирования тяжелых частиц в сравнении с легкими.

Преимущество кластерно-ассоциатной модели состоит в возможности прогнозирования поведения

вязкости как в области низких температур, так и высоких вплоть до температуры кипения.

### Введение

Авторами концепции хаотизированных частиц [1] разработана кластерно-ассоциатная модель динамической вязкости ( $\eta$ , Па·с), основанная на распределении Больцмана и выведенная из концепции хаотизированных частиц, в которой вязкое течение рассматривается как разрушение ассоциатов путем преодоления сил ван-дер-ваальсового притяжения между кластерами, что в принципе не противоречит существующим представлениям о вязком течении:

$$\eta = \eta_1 (T_1/T)^{a_2} (T_2/T)^b, \quad (1)$$

где  $\eta_1$ ,  $\eta_2$  – реперные точки динамической вязкости при соответствующих температурах  $T_1$ ,  $T_2$ ;  $a$  – степень ассоциации кластеров,  $b$  – мера понижения степени ассоциации кластеров. При этом для идентификации показателя  $b$  необходимо иметь третью реперную точку  $\eta_3$ ,  $T_3$

$$a = a_2 (T_2/T)^b, \quad (2)$$

$$a_3 = \frac{\ln(\eta_3/\eta_1)}{\ln(T_1/T_3)}, \quad (3)$$

$$b = \frac{\ln(a_3/a_2)}{\ln(T_2/T_3)}. \quad (4)$$

Все реперные точки целесообразно выбирать соответственно в начале, середине и в конце экспериментального массива  $\eta_i$ ,  $T_i$ . В этом случае можно, не обрабатывая весь экспериментальный массив, ограничиться расчетом  $a_2$ ,  $a_3$  и  $b$  с дальнейшим введением необходимых величин в модель (1) и вычислением  $\eta$  для сопоставления со всеми экспериментальными значениями по коэффициенту корреляции.

Уравнение (1) можно определить как обобщённое полуэмпирическое, поскольку, сохраняя причастность к фундаментальному распределению Больцмана, в нём используются реперные значения.

Проверка уравнения (1) была проведена для всех простых веществ в монографии [1].

### Расчётная часть

Вода представлена следующими сведениями в работе [2]: температура плавления –  $T_m = 273$  К, и температура кипения –  $T_b = 373$  К, которые были использованы для дальнейших расчетов.

Рассмотрим температурную зависимость вязкости для представленного массива при описании их предлагаемой кластерно-ассоциатной моделью.

Из приведённого справочного массива данных  $\eta_i$ ,  $T_i$ , выбраны в качестве реперных точек  $T_1 = 273$  К,  $\eta_1 = 1,792$  мПа·с;  $T_2 = 313$  К,  $\eta_2 = 0,656$  мПа·с;  $T_3 = 373$  К,  $\eta_3 = 0,284$  мПа·с. По этим точкам с помощью формул (2)–(4) рассчитаны значения  $a_2 = 7,350$ ,  $b = 1,251$  и в соответствии с моделью (1) получено расчётное уравнение вязкости

$$\eta = 1,79 \left( \frac{273}{T} \right)^{7,350} (313/T)^{1,251}, \text{ мПа·с.} \quad (5)$$

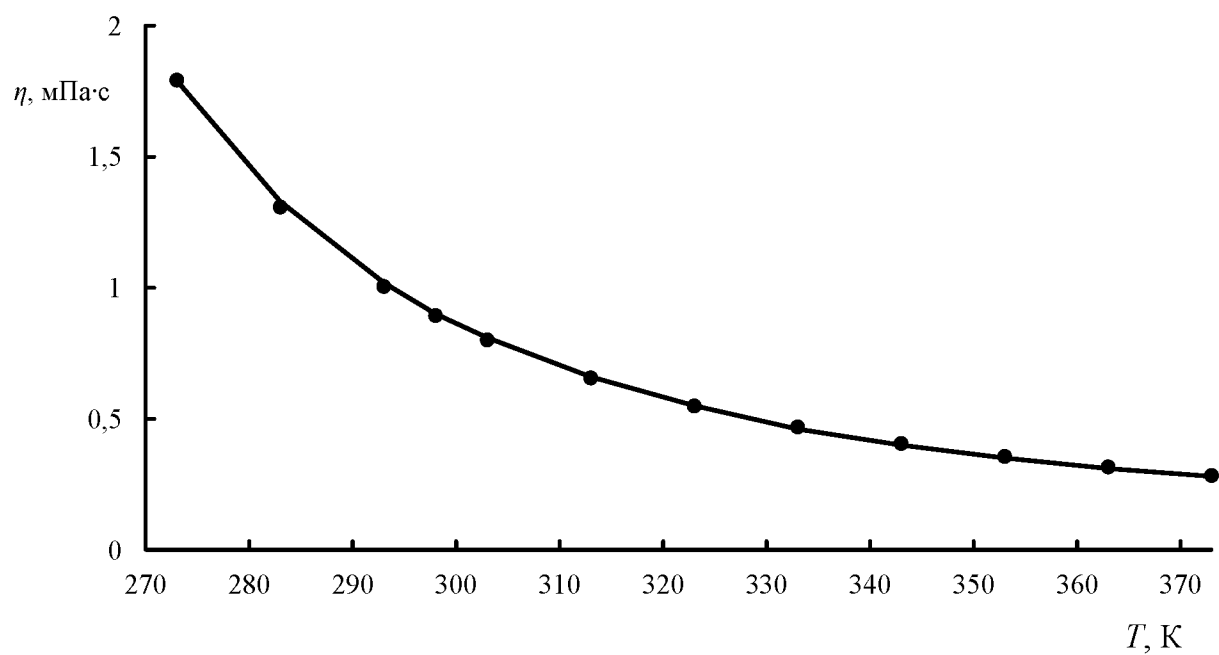
Результаты расчёта по этому уравнению вместе с вычислениями температурной зависимости степени ассоциации (2)

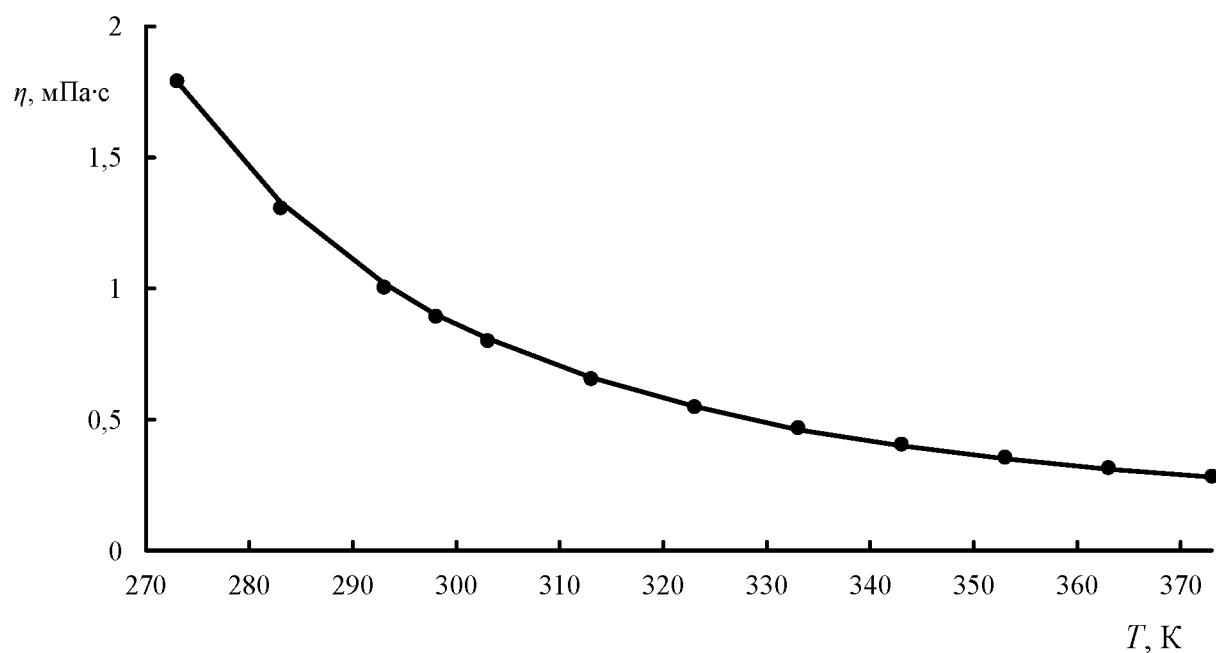
$$a = 7,350 (313/T)^{1,251} \quad (6)$$

приведены в таблице 1 и на рисунках 1 и 2 в сопоставлении со справочными данными по вязкости из [2].

Таблица 1 – Справочные [2] и рассчитанные по (5) данные по динамической вязкости воды

$T, K$	$\eta[2], \text{мПа}\cdot\text{с}$	$\eta(5), \text{мПа}\cdot\text{с}$	$a(6)$
$T_m = 273$	1,792	1,792	8,72
283	1,308	1,328	8,34
293	1,005	1,019	7,98
298	0,894	0,903	7,82
303	0,801	0,807	7,65
313	0,656	0,656	7,35
323	0,549	0,546	7,07
333	0,469	0,464	6,8
343	0,406	0,401	6,55
353	0,356	0,353	6,32
363	0,316	0,315	6,11
$T_b = 373$	0,284	0,284	5,9





Точки – справочные данные [2], линия – по уравнению (5)

Рисунок 1 – Зависимость динамической вязкости воды от температуры

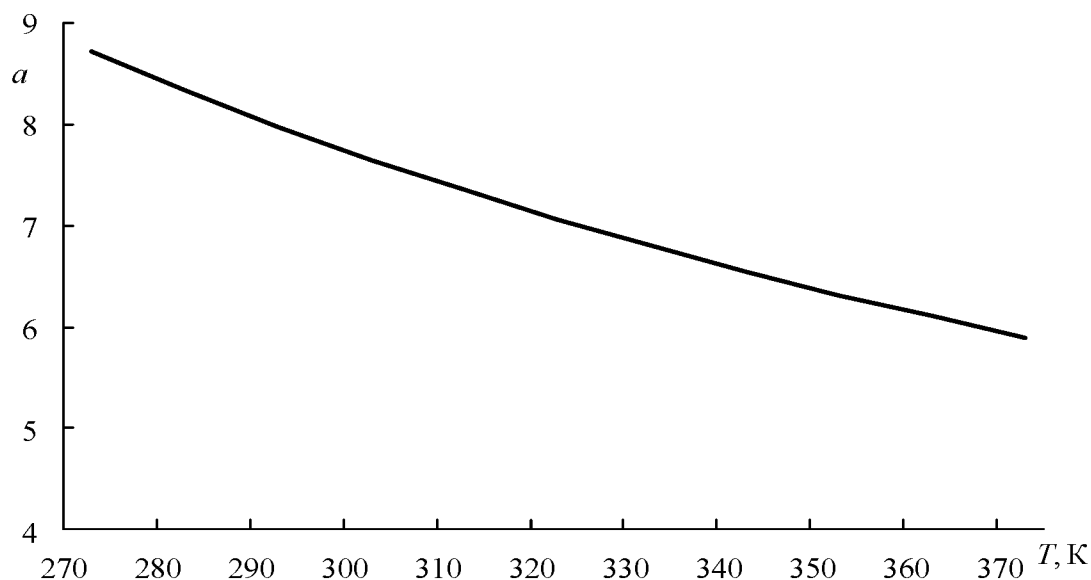


Рисунок 2 – Зависимость степени ассоциации кластеров воды от температуры

Судя по табличным и графическим данным, предлагаемая модель (5) полностью согласуется со справочными величинами в рассматриваемых диапазонах. Это указывает на функциональный характер модели (1), что подтверждается статистическими характеристиками сравнения по коэффициенту нелинейного множественной корреляции:  $R = 0,9999$  при  $t_R = 23178,19 \gg 2$  [6,7].

О функциональном характере модели свидетельствует и закономерное понижение степени ассоциации кластеров по мере повышения температуры.

Ранее в [8] была предложена кластерно-ассоциатная модель для воды, детально проанализировано жидкое состояние вещества и найдено распределение кластеров по числу входящих в них кристаллоподвижных частиц как функции от их общей доли при различных температурах, но не было данных для тяжелой воды.

Данные по тяжелой воде представлены следующими сведениями в работе [2] –  $T_m = 277$  К,  $T_b = 374$  К, которые и были использованы для дальнейших расчетов.

Из приведённого справочного массива данных  $\eta_i, T_i$ , выбраны в качестве реперных точек  $T_1 = 303$  К,  $\eta_1 = 0,969$  мПа·с;  $T_2 = 333$  К,  $\eta_2 = 0,552$  мПа·с;  $T_3 = 373$  К,  $\eta_3 = 0,323$  мПа·с. По этим точкам с помощью формул (2)-(4) рассчитаны значения  $a_2 = 5,96$ ,  $b = 1,06$  и в соответствии с моделью (1) получено расчётное уравнение вязкости

$$\eta = 0,969 \left( \frac{303}{T} \right)^{5,96(333/T)^{1,06}}, \text{ мПа}\cdot\text{с.} \quad (7)$$

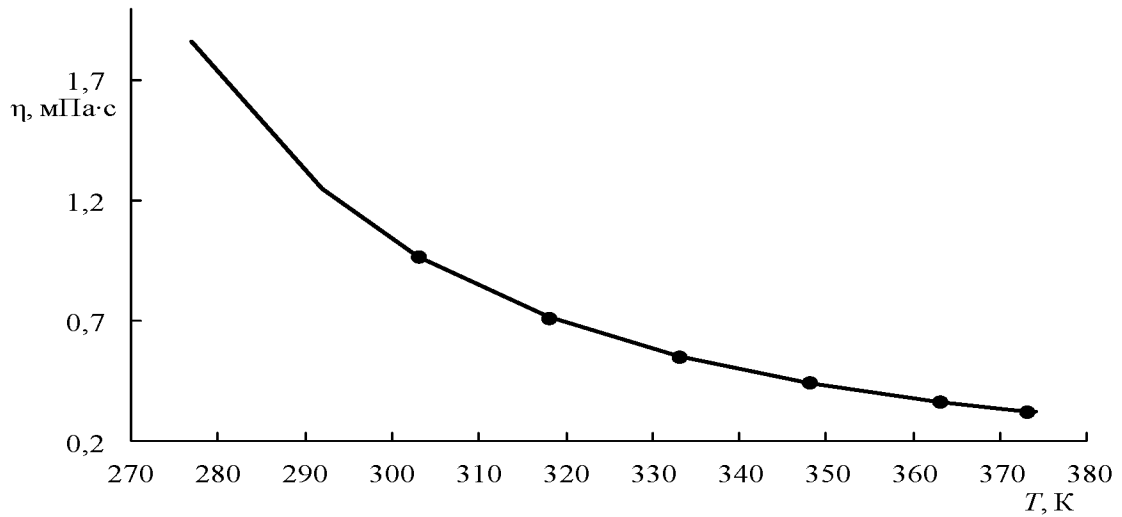
Результаты расчёта по этому уравнению вместе с вычислениями температурной зависимости степени ассоциации (2)

$$a = 5,96(333/T)^{1,06} \quad (8)$$

приведены в таблице 2 и на рисунках 3 и 4 в сопоставлении со справочными данными по вязкости из [2].

Таблица 2 – Справочные [2] и рассчитанные по (7) данные по динамической вязкости тяжелой воды ( $D_2O$ )

$T, \text{ К}$	$\eta[3], \text{ мПа}\cdot\text{с}$	$\eta(7), \text{ мПа}\cdot\text{с}$	$a \text{ (8)}$
$T_m = 277$	-	1,856	7,24
292	-	1,248	6,85
303	0,969	0,969	6,59
318	0,713	0,716	6,26
333	0,552	0,552	5,96
348	0,445	0,441	5,69
363	0,365	0,363	5,44
373	0,323	0,323	5,29
$T_b = 374$	-	0,320	5,27



Точки– справочные данные [2], линия – по уравнению (5)

Рисунок 3 – Зависимость динамической вязкости тяжёлой воды от температуры

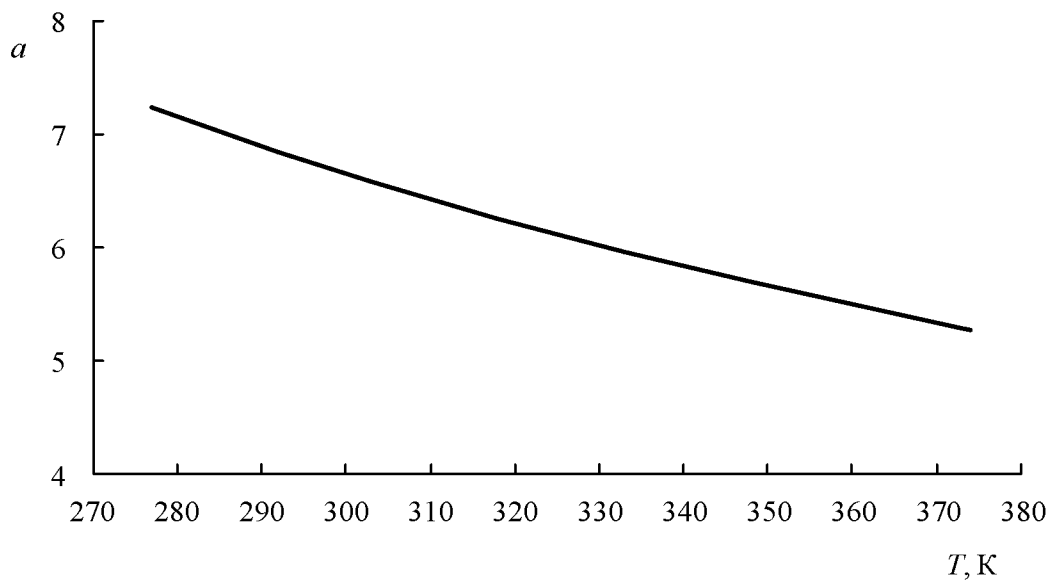


Рисунок 4 – Зависимость степени ассоциации кластеров тяжёлой воды от температуры

Судя по табличным и графическим данным, предлагаемая модель (7) полностью согласуется со справочными величинами в рассматриваемых диапазонах. Это указывает на функциональный характер модели (1), что подтверждается статистическими характеристиками сравнения по

коэффициенту нелинейного множественной корреляции:  $R = 0,9998$  при  $t_R = 4220,803 \gg 2$  [6,7].

Что касается степени ассоциации кластеров, то для тяжелой воды она несколько меньше, чем для обычной, и это также является закономерным ввиду большей трудности агрегирования тяжелых частиц в сравнении с легкими.

### Выводы

Преимущество кластерно-ассоциатной модели состоит в возможности прогнозирования поведения вязкости как в области низких температур, так и высоких вплоть до температуры кипения.

Кластерно-ассоциатная модель температурной зависимости динамической вязкости воды и тяжелой воды позволяет использовать ее во всем диапазоне жидкого состояния с надежной экстраполяцией как в область температуры кипения, так и плавления.

Есть возможность также непосредственной обработки всего экспериментального массива данных для идентификации модели (1), что повысит степень ее адекватности [9].

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Мальшев В.П., Бектурганов Н.С., Турдукожаева А.М. Вязкость, текучесть и плотность веществ как мера их хаотизации. – М.: Научный мир, 2012. – 288 с.
- [2] Рабинович В.А., Хавин З.Я. Краткий химический справочник. – Л.: Химия, 1977. – С. 56.
- [3] Некрасов Б.В. Основы общей химии. – Т. 2. – М.: Химия, 1973. – С. 9.
- [4] Ефимов А.И. и др. Свойства неорганических соединений. Справочник. – Л.: Химия, 1983. – С. 104-105.
- [5] Карапет'янц М.Х., Дракин С.И. Общая и неорганическая химия. – М.: Химия, 1981. – 636 с.
- [6] Налимов В.В. Теория эксперимента. – М.: Наука, 1977. – 207 с.
- [7] Рузинов Л. П. Статистические методы оптимизации химических процессов. – М.: Химия, 1972. – 486 с.
- [8] Мальшев В.П., Турдукожаева А.М., Сулейменов Т., Кажикенова А.Ш. Кластерно-ассоциатная модель воды в отображении концепцией хаотизированных частиц // Доклады НАН РК. – 2013. – № 5. – С. 37-44.
- [9] Федорович Я.А., Мальшев В.П., Макашева А.М., Кажикенова А.Ш. Метод полной аппроксимации экспериментальных данных к кластерно-ассоциатной модели динамической вязкости// КИМС. – 2014. - №4. – С. 61-66.

### REFERENCES

- [1] Malyshev V.P., Bekturganov N.S., Turdukozhaeva A.M. *M.: Nauchnyjmir*, 2012, 288 (in Russ).
- [2] Rabinovich V.A., Havin Z.Ja. *L.: Himija*, 1977, 56(in Russ).
- [3] Nekrasov B.V. *M.: Himija*, 1973, 2, 9(in Russ).
- [4] Efimov A.I. i dr. *L.: Himija*, 1983, 104-105(in Russ).
- [5] Karapet'janc M.H., Drakin S.I. *M.: Himija*, 1981, 636(in Russ).
- [6] Nalimov V.V. *M.: Nauka*, 1977, 207(in Russ).
- [7] Ruzinov L. P. *M.: Himija*, 1972, 486 (in Russ).
- [8] Malyshev V.P., Turdukozhaeva A.M., Sulejmenov T., Kazhikenova A.Sh. *Doklady NAN RK*, 2013, 5, 37-44(in Russ).
- [9] Fedorovich Ja.A., Malyshev V.P., Makasheva A.M., Kazhikenova A.Sh. *KIMS*, 2014, 4, 61-66(in Russ).

### СУ ЖӘНЕ АУЫР СУДЫҢ ТЕМПЕРАТУРАЛЫҚ ТӘУЕЛДІЛІГІНІҢ ТҮТҚЫРЛЫҚ КЛАСТЕРЛІК-АССОЦИАТТЫ ҮЛГІСІ

А.М. Макашева, Я.А. Бугаева, В.П. Мальшев  
Ж.Әбішеватындағы химия-металлургия институты  
[eia\\_hmi@mail.ru](mailto:eia_hmi@mail.ru)

**Түйін сөздер:** кластер, ассоциат, температура, динамикалық тұтқырлық, су, ауыр су.

**Аннотация.** Больцманның үлестіруне негізделген және хаотизацияланған бөлшектердің концепциясынан шығарылған сұйықтық ағысының тұтқырлығынан кластерлік-ассоциатты үлгісі жасалған. Тұтқыр ағысы кластерлер арасындағы ван-дер-вальдық тартылыс күшін еңсеру жолымен ассоциаттарды қирату сияқты қаралады, өйткені ол негізінде тұтқыр ағысы туралы бар ұсыныстарға қайшы келмейді. Ұсынылатын теңдікті жалпыланған жартылай эмпириялық сияқты анықтауға болады, сондықтан да онда қада белгілерінің мағынасы Больцманның фундаментальды таратуының қатысын сақтай отырып пайдаланылады.

Ұсынылған үлгіні тексеру су және ауыр су динамикалық тұтқырлық бойынша барлық анықтамалық деректерде жүзеге асырылған. Анықталып алынған теңдеулер үшін осы заттардың толық сұйық күйіндегі ауқымының тәуелділігі теңбе-тең бейнелеген.

Екі жағдайда да температураның жоғарлау деңгейіне қарай ассоциатты кластерлер дәрежесінің төмендеуі заңды және үлгінің функционалдық сипатын дәлелдейді. Алайда жай суға қарағанда, ауыр су үшін ол бірнеше есе кіші және жеңіл бөлшектерді ауыр бөлшектермен салыстырғанда агрегаттаудың үлкен қиындықтары болғандықтан заңды.

---

Кластерлі-ассоциатты үлгінің басымдылығы жоғары қайнау және төмен температура ауданында тұтқырлық тәртібінің тұжырымдау мүмкіндігінен тұрады.

#### **Сведения об авторах**

1. Макашева Астра Мундуковна – доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории энтропийно-информационного анализа Химико-металлургического института им. Ж. Абишева, член-корр. Международной академии информатизации.

Адрес: Республика Казахстан, 100009,  
г. Караганда, ул. Ермакова, 63, ХМИ  
Тел.: (7212) 43-31-65  
Факс: (7212) 43-31-61  
e-mail: [eia\\_hmi@mail.ru](mailto:eia_hmi@mail.ru)

2. Бугаева Яна Алексеевна – магистрант Карагандинского государственного технического университета, лаборант лаборатории энтропийно-информационного анализа Химико-металлургического института им. Ж. Абишева.

Адрес: Республика Казахстан, 100009,  
г. Караганда, ул. Ермакова, 63, ХМИ  
Тел.: (7212) 43-31-65  
Факс: (7212) 43-31-61  
e-mail: [eia\\_hmi@mail.ru](mailto:eia_hmi@mail.ru)

3. Мальшев Виталий Павлович – доктор технических наук, профессор, академик Международной академии информатизации, заведующий лабораторией энтропийно-информационного анализа Химико-металлургического института им. Ж. Абишева.

Адрес: Республика Казахстан, 100009,  
г. Караганда, ул. Ермакова, 63, ХМИ  
Тел.: 8 (7212) 43-31-65  
Факс: 8 (7212) 43-31-61  
e-mail: [eia\\_hmi@mail.ru](mailto:eia_hmi@mail.ru)

*Поступила 09.09.2015 г.*