УДК 66.01.011

В.А. Логачева

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ КРИСТАЛЛОВ В ПРОЦЕССЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ[1]

Кристаллизация – один из самых распространенных в природе и в технике процессов. С помощью массовой кристаллизации получают более 200 000 различных веществ.

Этот процесс представляет собой сложное физико-химическое явление, включающее большое число быстро протекающих нестационарных нелинейных элементарных процессов, протекающих при больших градиентах концентрации и температуры.

Для описания процессов, происходящих по нуклеационному механизму (в том числе и кристаллизации), в настоящее время часто используют теории Джонсона и Мела, Аврами и Колмогорова. Аналитические решения в рамках этих теорий получены только для простейших случаев, таких, как нуклеация с постоянной или непрерывно изменяющейся скоростью в свободном пространстве. Для более сложных условий, а также в присутствии пространственных ограничений для роста в последнее время используют моделирование с использованием численных методов решения (метод Монте-Карло, метод клеточного автомата).

Однако моделирование численными методами позволяет получить дискретные поля, в отличие от непрерывных полей при моделировании поля аналитическими решениями систем дифференциальных уравнений в частных производных. При этом повышается качество расчетов характеристик процесса.

Важной характеристикой процесса кристаллизации является температура, так как она влияет и на скорость образования зародышей, и на скорость их роста.

Знание температурного поля в процессе кристаллизации позволяет определить такие характеристики, как тепловые потоки (определяют интенсивность процесса), температурные градиенты (определяют качественные показатели), интегральные теплоты, позволяющие определить количество вещества, совершающего фазовый переход.

В данной работе получено аналитическое решение нестационарной задачи теплопроводности для растущего кристалла, имеющего форму параллелепипеда методом конечных интегральных преобразований. Данное решение позволяет последовательно просчитать квазистационарные температурные поля для каждого элементарного временного интервала с учетом изменения размера кристалла, температуры окружающей среды, коэффициента массоотдачи и теплофизических характеристик.

При решении задачи принято допущение: рассматривается малый промежуток времени, в течение которого размеры кристалла и теплофизические характеристики считаются постоянными.

Нестационарное температурное поле кристалла в форме параллелепипеда описывается следующей системой уравнений:

1. Уравнение Фурье–Кирхгофа, с учетом распределенного внутреннего источника тепла (этим источником является теплота фазового перехода)

$$\frac{\partial t(x,y,z,\tau)}{\partial \tau} = a^2\left(\frac{\partial^2 t(x,y,z,\tau)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 t(x,y,z,\tau)}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 t(x,y,z,\tau)}{\partial z^2}\right)+ \\ +S(x,y,z,\tau), \qquad 0\le x\le l,\ \ 0\le y\le s,\ \ 0\le z\le h,\ \ \tau>0; \tag{1}$$

2. Начальные условия

$$t(x,y,z,0)=f(x,y,z)\ ; \tag{2}$$

3. Граничные условия:

$$\lambda\frac{\partial t(0,\ y,\ z,\ \tau)}{\partial x}-\alpha_1\left(t(0,\ y,\ z,\ \tau)-t_{c1}\right); \tag{3}$$

$$\lambda\ \frac{\partial t(l,y,z,\ \tau)}{\partial x}+\alpha_2\left(t(l,y,z,\tau)-t_{c2}\right)=0\ ; \tag{4}$$

$$\lambda\ \frac{\partial t(x,0,z,\ \tau)}{\partial y}-\alpha_3\left(t(x,0,z,\tau)-t_{c3}\right)=0\ ; \tag{5}$$

$$\lambda\ \frac{\partial t(x,v,z,\tau)}{\partial y}+\alpha_4\left(t(x,v,z,\tau)-t_{c4}\right)=0\ ; \tag{6}$$

---

[1] Работа выполнена под руководством д-ра техн. наук, проф. Е.Н. Туголукова.

$$\lambda \frac{\partial t(x,y,0,\tau)}{\partial z} + \alpha_5 \left(t(x,y,0,\tau) - t_{c5} \right) = 0 ; \qquad (7)$$

$$\lambda \frac{\partial t(x,y,h,\tau)}{\partial z} + \alpha_6 \left(t(x,y,h,\tau) - t_{c6} \right) = 0 , \qquad (8)$$

где $t(x, y, z, \tau)$ – искомое температурное поле как функция пространственных координат кристалла и времени; a, λ – соответственно коэффициенты температуропроводности и теплопроводности кристалла; α_i, t_{ci} – соответственно коэффициенты теплоотдачи и температуры окружающей среды со стороны наружных поверхностей кристалла.

Решение задачи (1) – (8) выполнено методом конечных интегральных преобразований по трем пространственным координатам последовательно и имеет вид

$$t(x,y,z,\tau) = t_c + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{W_n(x) K_m(y) L_k(z) G_{n,m,k}(\tau)}{N_n D_m E_k} , \qquad (9)$$

где $W(x)$, $K(y)$, $L(z)$ являются решениями вспомогательных задач с однородными граничными условиями:

$$W_n(x) = \sin(\mu_n x + \varphi_n) ; \qquad (10)$$

$$K_m(y) = \sin(\mu_m y + \varphi_m) ; \qquad (11)$$

$$L_k(z) = \sin(\mu_k z + \varphi_k) ; \qquad (12)$$

$G(\tau)$ – изображение функции:

$$G_{n,m,k}(\tau) = \left(\tilde{F} + \int_0^{\tau} \tilde{S}(\tau) \exp\left(a^2 \left(\mu_n^2 + \mu_m^2 + \mu_k^2 \right) \tau \right) d\tau \right) \exp\left(-a^2 \left(\mu_n^2 + \mu_m^2 + \mu_k^2 \right) \tau \right) ;$$

(13)

$$\tilde{S}(\tau) = \int_0^h \int_0^s \int_0^l S(x,y,z,\tau)\, W_n(x) K_m(y) L_k(z)\, dx\, dy\, dz ; \qquad (14)$$

$$\tilde{F} = \int_0^h \int_0^s \int_0^l F(x,y,z)\, W_n(x) K_m(y) L_k(z)\, dx\, dy\, dz ; \qquad (15)$$

N, D, E – функции, используемые для обратного перехода во вспомогательных задачах:

$$N_n = \frac{1}{2\mu_n} \left(\mu_n l + \sin(\varphi_n) \cos(\varphi_n) - \sin(\mu_n l + \varphi_n) \cos(\mu_n l + \varphi_n) \right) ; \qquad (16)$$

$$D_m = \frac{1}{2\mu_m} \left(\mu_m s + \sin(\varphi_m) \cos(\varphi_m) - \sin(\mu_m s + \varphi_m) \cos(\mu_m s + \varphi_m) \right) ; \qquad (17)$$

$$E_k = \frac{1}{2\mu_k} \left(\mu_k h + \sin(\varphi_k) \cos(\varphi_k) - \sin(\mu_k h + \varphi_k) \cos(\mu_k h + \varphi_k) \right) . \qquad (18)$$

Числа μ, φ определяются из граничных условий

$$\varphi = a\,\mathrm{tg}\left(\frac{B\mu}{\gamma} \right) ; \qquad (19)$$

причем μ определяются как последовательные положительные корни уравнения

$$\gamma \sin(\mu l + \varphi) + B \mu \cos(\mu l + \varphi) = 0 . \qquad (20)$$

Таким образом, разработана математическая модель температурных полей кристаллов в процессе кристаллизации, имеющих форму параллелепипеда. С помощью данной модели можно рассчитать не только температурное поле растущего кристалла, но и температурное поле окружающего его пространства.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кафаров, В.В. Системный анализ процессов химической технологии. Кн. 4. Процессы массовой кристаллизации из растворов и газовой среды / В.В. Кафаров, И.Н. Дорохов, Э.М. Кольцова. – М. : Наука, 1983. – 368 с.

2. Кафаров, В.В. Математическое моделирование основных процессов химической технологии / В.В. Кафаров, М.Б. Глебов. – М. : Высшая школа, 1991. – 399 с.

3. Туголуков, Е.Н. Решение задач теплопроводности методом конечных интегральных преобразований / Е.Н. Туголуков. – Тамбов : Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2005. – 116 с.

4. Туголуков, Е.Н. Математическое моделирование технологического оборудования многоассортиментных химических производств / Е.Н. Туголуков. – Тамбов : Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2003. – 100 с.

Кафедра «Автоматизированное проектирование технологического оборудования»