

УДК 621.74

**АНАЛОГИЗАЦИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ
ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ЛИТЬЯ
ПРИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ И АДСОРБЦИИ**

©Хорошилов О. Н., Оболенская Т. А., Лазаренко В. И.

Украинская инженерно-педагогическая академия

В статье методом аналогизации построены математические модели кристаллизации и адсорбции в технологических процессах химической, пищевой промышленности и литейного производства.

Доказано, что аналитическое решение сформулированных задач будет одинаковым для всех аналогизированных процессов.

Ключевые слова: аналогизация, математическая модель, литье, кристаллизация, абсорбция.

Хорошилов О. М., Оболенська Т. О., Лазаренко В. І. «Аналогізація математичного опису технологічного процесу при кристалізації та адсорбції».

У статті методом аналогізації побудовані математичні моделі кристалізації та адсорбції в технологічних процесах хімічної, харчової промисловості та ливарного виробництва.

Доведено, що аналітичне рішення сформульованих задач буде однаковим для усіх аналогізованих процесів.

Ключові слова: аналогізація, математична модель, литво, кристалізація, абсорбція.

Khoroshilov O. N., Obolenskaya T. A., Lazarenko V. I. “Analogization of mathematical description of technological process during crystallization and adsorption”

The mathematical models of crystallization and adsorption in technological processes of chemical, food industry and casting production are built by analogization method in the article.

It is proved, that analytical solution of formulated problems are the same for all analogized processes.

Key words: analogization, mathematical model, casting, crystallization, adsorption.

1. Постановка вопроса

При использовании методов аналогизации выбирается уже готовая математическая модель процесса, близкого к данной задаче. Использование методов процесса, близкого к данной задаче. Использование методов аналогизации открывает возможность перенесения на рассматриваемый процесс (в данном случае литье) уже известных, полученных ранее результатов, анализа механизма процесса, использование средств и способов его интенсификации и оптимизации, что и показано на примере математического описания процессов при кристаллизации и адсорбции.

2. Анализ последних публикаций по данному вопросу

В настоящее время научной основой интенсификации технологических процессов является установление новых физических эффектов [1]. Особое внимание уделяется эффекту

температуры кристаллов, эффекту бифуркационных процессов при кристаллизации, эффект увеличения интенсивности массопереноса в пограничном слое вокруг кристалла температурными колебаниями, под действиями которых возникает дополнительный градиент концентрации [2].

Высокие скорости и нагрузки при работе машины и приборов являются атрибутами современного машиностроения. При этом предъявляются высокие требования к качеству исходных материалов и заготовок, в том числе и отливок для обеспечения надежности и долговечности машин. Удельный вес отливок в некоторых машинах может достигать от 40 % до 80 %.

3. Основной материал

Проблема энергосбережения является одной из основных глобальных проблем современности. Немаловажным фактором является то, что производство отливок обходится дешевле, чем производство поковок или сварных заготовок. Методом литья можно получить отливки с различной конфигурацией, необходимыми физико-механическими свойствами, что способствует их широкому распространению.

В последнее время введены такие показатели технологического процесса литья, как «удельная масса» (вес на единицу мощности машины), методы контроля за поведением жидкого металла в различные периоды плавки, разливки и кристаллизации, т.е. в периоды, когда закладываются и формируются основные свойства отливки [3]. Однако физико-химические процессы, происходящие в литейном производстве, настолько сложны, что требуют особого внимания для их анализа. Для решения этой проблемы применима методика аналогизации, а именно: определенные группы технологических процессов различных отраслей промышленности, отличающиеся между собой по физической природе имеют один и тот же механизм действия, которому соответствует и идентичная математическая модель процесса, раскрывающая физические эффекты процесса, элементарные процессы, из которых он складывается, метод его интенсификации и расшивки лимитирующих стадий.

Математическая модель процесса также позволяет разработать метод его расчета и создание оптимальных режимов осуществления.

Все это для соответствующих групп процессов, имеющих одинаковый механизм, достигается специальными приемами, так называемым методом математического моделирования, который назван аналогизацией [4]. Используя этот метод, разрабатываемый процесс расчленяется на элементарные процессы, подбирается подобный по структуре тестовый процесс, который может быть совсем иной физической природы, подбираются аналоги параметров тестового и разрабатываемого процесса и фактически составление математической модели процесса в этом случае сводится к перефразированию математической модели тестового процесса.

В истории техники известно немало предложений и идей по улучшению технологических процессов, которые не были реализованы в промышленных масштабах вследствие того, что их изучение не было завершено созданием уравнений для инженерных расчетов, без которых невозможно преодоление барьера масштабного перехода, осуществление моделирования, перенос данных с лабораторных аппаратов на аппараты промышленные.

Поэтому очевидна важность научных исследований, позволяющих установить количественные соотношения между параметрами процессов и дать их математическое описание, на котором будет базироваться методика инженерных расчетов. Возникла необходимость в создании общей теории интенсификации технологических процессов позволяющей на основе широких научных обобщений решать частные прикладные задачи. Очень сильным и эффективным средством получения новых результатов является метод аналогизации. Аналогизация- это термин выражающий: установленные аналогии путем сопоставления определенных признаков, свойствами характеристик сравнимых объектов; умозаключение по аналогии – перенесение знаний, полученных из рассмотрения какого-либо объекта, на менее изученный, сходный по существенным свойствам, качеству объекта; инструмент научных обобщений; специальную процедуру, выполняемую по определенному алгоритму.

Аналогизация позволяет использовать уже готовый разработанный ранее математический аппарат и осуществить перенос результатов из области одного процесса на другой, найти аналоги, новые эффекты, установить новые эффективные режимы и предложить методы интенсификации.

Рассмотри, в частности, процесс кристаллизации в процессе литья. Этому процессу можно найти аналоги в химической промышленности, пищевой и т.д., т.е. создать адсорбционную модель кристаллизации, используя вариационный метод в построении математических моделей. Суть этого метода состоит в том, что на основе физической сущности процесса записывается функционал, отражающий совместное действие основных сил, минимум потенциальной энергии, минимум энергии деформации, минимум работы внешних и внутренних сил с учетом кинетической энергии, потенциальной энергии, энергии химических превращений, гельмгольцевской свободной энергии, энтальпии рассматриваемой системы, а также, с учетом необратимого превращения механической энергии во внутреннюю, вязкой диссипации теплоотвода. От составленного таким образом функционала берут вариацию, после чего он распадается на ряд уравнений Эйлера, которые и представляют математическую модель процесса в дифференциальных уравнениях. Этот метод, применяемый в теории упругости и реализуемый с помощью расчетных схем Ритца и Галеркина, может найти широкое применение и в разработке теории процессов в литейном деле, пищевой и химической промышленности.

Располагая таблицей аналогов аналогизированных процессов, их физическими и математическими моделями, конечными формулами для полей режимных параметров и численными значениями интегралов, можно без особого труда провести инженерные расчеты. В результате получим поля распределения вдоль потока и во времени: в процессе адсорбции-величины адсорбции и концентрации в растворе; в процессе кристаллизации и растворения – количество выкристаллизовавшегося вещества и растворенного и т.д.

Особого внимания заслуживают при аналогизационном анализе установление режимов ведения процесса с высокой интенсивностью, перенос экспериментальных данных по режимной интенсификации и применению интенсифицирующих воздействий, снижающих сопротивление переноса с одного процесса, для которого они исследованы на другой, для которого такие исследования не проводились.

Рассмотрим модель кристаллизации в потоке, которую приблизим к модели адсорбции металла из раствора. При кристаллизации в отливке последовательно или частично одновременно протекают следующие процессы: охлаждение в жидком состоянии (снятие перегрева), переохлаждение, образование зародышей и рост кристаллов [5]. Считаем, что кристаллы достаточно мелки и равномерно распределены в потоке, их концентрация «размазана» по потоку и определяется выражением

$$C_k(x,t) = \frac{V_k(x,t) \cdot \rho}{V_{жс}} \cdot \frac{\rho_k}{\rho}, \quad (1)$$

где $V_k(x,t)$ – объем кристаллов в объеме раствора $V_{жс}$.

Интенсивность процесса кристаллизации определяется коэффициентом массообмена β , который вычисляется на основе интегральных представлений.

Пусть на входе раствор поступает с концентрацией C^* и кристаллов еще не содержит.

Зададим пересыщение раствора $\Pi = \frac{C_{жс}(x,t)}{C_n(x,t)}$, где $C_{жс}$ и C_n – фактическая

концентрация кристаллизующегося вещества, соответствующая насыщению при заданной температуре $T(t)$. Пресыщение создается охлаждением раствора ($T(t) = var$). Связь между концентрациями кристаллического вещества $C_k(x,t)$ и кристаллизующегося вещества в растворе $C_{жс}(x,t)$ очевидна (рис. 1).

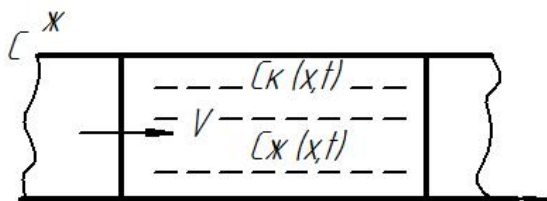


Рис. 1

В любой момент времени t и b в любом месте канала x выполняется равенство

$$C^{жс} = C_k(x,t) + C_{жс}(x,t), \quad (2)$$

если предположить, что ни раствор, ни вещество по каналу не поступают.

Концентрация кристаллического выкристаллизовавшегося вещества в жидкой фазе (масса кристаллов), отнесенная к массе раствора, будет зависеть от величины пресыщения раствора, которое в данном процессе регулируется величиной температуры.

$$\frac{C_k(x,t)}{C_{жс}(x,t)} = \gamma \left[\frac{C_{жс}(x,t)}{C_n(x,t)} - \frac{C_n(x,t)}{C_n(x,t)} \right] = \gamma [\Pi - 1] \quad (3)$$

где γ – коэффициент пропорциональности.

Задав закон изменения температуры $T(x, t)$, получим закон изменения концентрации насыщения, учитывая, что

$$C_n(x,t) = \alpha [T(x,t)]^n \quad (4)$$

при прямой растворимости веществ и

$$C_n(x,t) = \frac{\alpha}{[T(x,t)]^n} \quad (5)$$

при обратной растворимости.

При постоянном пресыщении из (3) получим

$$\frac{C_{жс}(x,t)}{C_n(x,t)} = \Pi; \quad C_n(x,t) = \frac{1}{\Pi} C_{жс}(x,t) \quad (6)$$

Подставляя (6) в (3) получим

$$C_k(x,t) = \gamma C_{жс}(x,t) \left(1 - \frac{1}{\Pi}\right) \quad (7)$$

Связь между концентрацией кристаллического вещества (выкристаллизовавшегося из раствора) $C_k(x,t)$ и кристаллизующегося вещества в растворе $C_{жс}(x,t)$, а также связь с концентрацией насыщения $C_n(x,t)$ при заданной температуре определяется выражениями

$$C_k(x,t) = \gamma_1 C_{жс}(x,t) \quad (8)$$

$$C_k(x,t) = \gamma_2 C_{жс}(x,t) \quad (9)$$

где $\gamma_1 = \gamma \left(1 - \frac{1}{\Pi}\right); \quad \gamma_2 = \gamma(\Pi - 1)$

Таким образом, в отличие от методов получения изотерм сорбции, в которых зависимость между количеством сорбции и равновесной концентрацией $\alpha = f(C_p)$ устанавливают при постоянной температуре методом аналогизации процессов сорбции и кристаллизации.

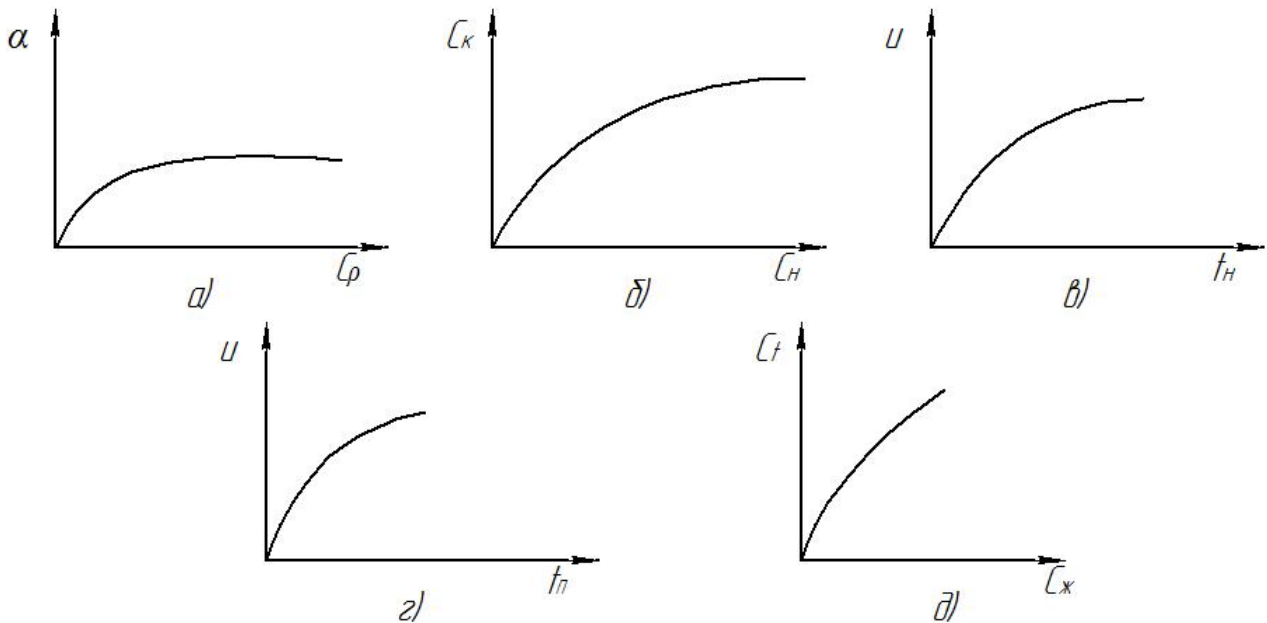


Рис. 2 – Изопараметриссы различных аналогизированных процессов: а – изотерма сорбции $\alpha = f(C_p)$, $T = const$; б – изогидрата кристаллизации $C_k = f(C_n)$,

$\Pi = const$; в – изохарактеристика сушки $\frac{m_L}{C_p} = f(t_n)$; $\Delta t_{неp} = const$;

г – изопараметрисса процесса сушки $u = f(t_n)$, $\Pi_1 = const$ или $\Pi_u = const$;

д – изопараметрисса адсорбции $C_t = f(C_{жс})$, $H = const$

Идентичные зависимости можно получить для процесса кристаллизации между концентрацией кристаллического выкристаллизовавшегося вещества $C_k(x,t)$ и кристаллизующегося вещества в растворе $C_{жс}(x,t)$, но уже в условиях изотермичности

течения процесса (как при сорбции), а в условиях изогидратности, т.е. при постоянном коэффициенте пересыщения $\Pi = const$.

Изотерме сорбции в процессе адсорбции $\alpha = f(C_p)$ при $T = const$ будет соответствовать изогидрата кристаллизации $C_{жк} = f(C_n)$ при $\Pi = const$ в процессе кристаллизации (рис. 2).

Рассмотрим процесс массообмена в растворе при кристаллизации и адсорбции.

Уравнение кинетики адсорбции

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = \beta(C - C_p) \quad (10)$$

Уравнение материального баланса без учета сечений, занятых адсорбентом $\partial = \frac{\sigma}{1 - \sigma}$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial \alpha}{\partial t} + V \frac{\partial c}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (11)$$

при соизмеримости продольного молекулярного и конвективного переноса, или

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial \alpha}{\partial t} + V \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad (12)$$

в случае преобладания конвективного переноса.

Здесь $C = C(x, t)$ - концентрация адсорбируемого вещества в растворе, находящегося в порах адсорбента на расстоянии x от начала адсорбционного слоя адсорбента в момент времени t , $\alpha = a(x, t)$ - количество адсорбируемого вещества, поглощенного единицей объема адсорбента в сечении x в момент времени t ; V - скорость движения потока раствора вдоль оси x , принимаемая постоянной; β - коэффициент массообмена.

Система уравнений (10) - (12) является незамкнутой, для ее замыкания привлекается еще одно уравнение, связывающее равновесную концентрацию C_p с величиной адсорбции a , называемое изотермой адсорбции и характеризующее природу адсорбента и адсорбируемого вещества [6, 7].

$$a = f(C_p) = \kappa_1 c_p - \varepsilon_1 c_p^2 \quad (13)$$

откуда с точностью до 2-го порядка

$$C_p = \gamma \alpha - \varepsilon \alpha^2$$

Очевидно, уравнение кинетики массообмена при кристаллизации в подобных рассмотренных при адсорбции физических условиях примет вид

$$\frac{\partial C_k(x, t)}{\partial t} = \beta [C_{жк}(x, t) - C_n(x, t)], \quad (14)$$

а уравнение материального баланса при кристаллизации в потоке вид

$$\frac{\partial C_{жк}(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial C_k(x, t)}{\partial t} + V \frac{\partial C_{жк}(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (15)$$

совершенно аналогичный уравнению (12)

В качестве замыкающего уравнения вместо уравнения изотермы при адсорбции при кристаллизации используется уравнение изогидрата (9). Таким образом, кристаллизация из раствора в потоке описывается системой дифференциальных уравнений, идентичной с той системой, которая описывает адсорбцию

Адсорбція

$$\begin{aligned}\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial a}{\partial t} + V \frac{\partial c}{\partial x} &= 0; \\ \frac{\partial a}{\partial t} &= \beta(c - c_p); \\ a &= f(C_p);\end{aligned}\tag{16}$$

Кристаллізація

$$\begin{aligned}\frac{\partial C_{жк}}{\partial t} + \frac{\partial C_{к}}{\partial t} + V \frac{\partial C_{жк}}{\partial x} &= 0. \\ \frac{\partial C_{к}}{\partial t} &= \beta(C_{жк} - C_{н}) \\ C_{к} &= f(C_{н})\end{aligned}\tag{17}$$

Аналоги очевидні

$$C \rightarrow C_{жк}; a \rightarrow C_{к}; C_p \rightarrow C_{н}; \beta \rightarrow \beta; V \rightarrow V$$

Выводы

1. Математические модели аналогизированных процессов, построенные на основе общей физической модели, преследуют одну и ту же цель и позволяют получить решение одной и той же задачи для различных физических процессов.

2. Целью для заданной общей физической модели аналогизированных процессов является определение поля распределения концентрации соответствующих компонентов в пространстве (по координате x вдоль потока) и во времени t .

3. Удобство аналогизации состоит в том, что аналитическое решение сформированных задач будет одним и тем же для всех аналогизированных процессов.

Список использованных источников:

1. Федоткин И. М. Физико-математические основы интенсификации процессов и аппаратов пищевой и химической технологии / И. М. Федоткин. – Кишинев : Штиинца, 1987. – 264 с.
2. Богорош А. Т. Накипеобразование и пути его снижения в сахарной промышленности / А. Т. Богорош, И. М. Федоткин, И. С. Гулый. – М. : Легкая и пищевая промышленность, 1983. – 192 с.
3. Цаплин А. И. Теплофизика внешних воздействий при кристаллизации стальных слитков на машинах непрерывного литья / А. И. Цаплин. – Екатеринбург: Из-во УрО РАН, 1995. – 238 с.
4. Федоткин И. М. Математическое моделирование технологических процессов / И. М. Федоткин. – К. : Вищ. шк., 1988. – 416 с.
5. Иванов И. А. Кинетический фазовый переход при кристаллизации / И. А. Иванов, А. В. Дуб // Десятая Всерос. науч. конф. студентов физиков и молодых ученых : тез. доп. – М. : Изд-во АСФ России, 2004. – Т. 1. – С.177-179.
6. Федоткин И. М. Интенсификация теплообмена в аппаратах пищевых производств : дис. ... д-ра техн. наук И. М. Федоткин ; Киев. технол. ин-т пищевой пром-сти. – К., 1969. – 67 с.
7. Исследование кинетики процессов 1 сатурации и условий ее оптимизации : докл. на 11-й Международной конференции и технологии сахара в Лодзи (Польша) / Л. П. Рева, И. М. Федоткин, В. М. Логвин, В. А. Шестаковский, В. Е. Яковенко. – К. : КТИПП, 1973. – 27 с.

Стаття надійшла до редакції 21 січня 2014 р.