

УДК 66.03+536

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССА ГРАНУЛИРОВАНИЯ РАСПЛАВОВ НА ОХЛАЖДАЕМЫХ ПОВЕРХНОСТЯХ

© 2022 г. Ю. А. Таран^{a, b, *}

^aМИРЭА – Российский технологический университет
(Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова), Москва, Россия

^bМосковский политехнический университет, Москва, Россия

*e-mail: taran_yu@mirea.ru

Поступила в редакцию 11.08.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 15.08.2022 г.

Для экологически безопасных, ресурсо-энергосберегающих процессов гранулирования кристаллизацией капель расплавов на охлаждаемых поверхностях предложено математическое описание. Оно включает процессы кристаллизации, энантиотропные полиморфные превращения, охлаждение, с учетом переменных по поверхности гранул условий отвода теплоты, усадочные явления, кинетические параметры и переменные коэффициенты модели, а также учитывает в отличие от ранее предложенных нами моделей не только радиальный, но и продольный перенос теплоты и динамику межфазных границ. Усовершенствован итерационный локально-одномерный алгоритм численного решения с подвижными узлами на межфазных границах на шести точечной, неявной, нелинейной, устойчивой консервативной конечно разностной схеме. Методом скоростной термографии подтверждена адекватность модели ходу реального процесса. В качестве научно-практической иллюстрации предложенного проведены вычислительные эксперименты и анализ работы ленточных, валковых, дисковых кристаллизаторов применительно к ряду промышленных продуктов: азотсодержащих минеральных удобрений, щелочей, серы, нитрата калия, ацетонанила, шлаков фосфорных печей и других. Предложенное математическое описание в рамках формальной аналогии процессов со структурной перестройкой исходной системы может быть применено как для “классических” фазовых превращений (кристаллизация–плавления, энантиотропные полиморфные превращения) так и для некоторых формально аналогичных им процессов таких, как переходы гель–золь.

Ключевые слова: кристаллизация, гранулирование, полиморфные превращения, ленточные, валковые, дисковые, кристаллизаторы

DOI: 10.31857/S0040357122060173

ВВЕДЕНИЕ

Наиболее экологически безопасным процессом гранулирования расплавленных веществ является кристаллизация их капель на охлаждаемых поверхностях. Процесс можно организовать с замкнутой по хладагенту схемой, утилизирував теплоту гранулирования с использованием тепловых насосов или других способов “съема” теплоты [1]. Включение в технологическую схему теплового насоса более эффективно при гранулировании из расплавов веществ, кристаллизующихся и претерпевающих энантиотропные полиморфные превращения при высоких (~200–400°C) температурах (нитрат калия, щелочи, аммиачная селитра, шлаки и другие) [1, 2]. Важными преимуществами данной технологии являются реализация замкнутой по потоку хладагента схемы, утилизация теплоты превращения, ста-

бильное качество гранулированного продукта (высокая статическая прочность, гладкая поверхность, монодисперсность, обеспечиваемая применением современного оборудования, например, ротационных диспергаторов фирмы “Sandvik”) [1–5]. Для токсичных, технологически опасных, высокотемпературных малотоннажных продуктов процесс безальтернативен [5–7]. Используемые в промышленности валковые (все), дисковые (в основном) и ленточные (иногда) аппараты выпускаются с замкнутой полостью для хладагента, что позволяет легко организовать замкнутый цикл по хладагенту. “Съем” теплоты, превращения и отсутствие контакта продукта с хладагентом обеспечивает экологическую и технологическую безопасность [1]. Эти аппараты являются многофункциональными, в промышленности они широко использовались, как кри-

сталлизаторы для получения чешуированного продукта (при наличии “насечки”) в виде плиток [8, 9]. Так же они используются, как грануляторы для кристаллизации капель расплавов на охлаждаемых поверхностях [1, 2, 5–7, 9]. Известны способы использования этих аппаратов для глубокой очистки веществ по технологии непрерывной зонной плавки [10–12] или фракционирования совмещенного с гранулированием.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССА

Реализация таких разработок требует детального рассмотрения процессов кристаллизации полиморфных превращений, охлаждения, усадочных явлений, динамики межфазных границ и температурных полей при переменных по поверхности и во времени условиях отвода теплоты от лежащей на охлаждаемой поверхности несферической гранулы. Тепло – и массообменные процессы в подобных системах и их математическое описание рассмотрены в [13–16]. Начиная расчет процесса, каплю расплава считали сферической без сегмента, объем которого определяли по краевому углу смачивания $\varphi_{см}$ расплавом охлаждающей поверхности. Полагали, что условия переноса теплоты между кристаллизующейся каплей расплава и охлаждающей поверхностью кондуктивные (граничные условия IV рода), а “свободная” поверхность капли обменивается теплотой с окружающей средой конвективно (в граничных условиях III рода). С учетом симметрии задачи:

$$c_j(t)\rho_j(t)\frac{\partial t(r_i, \theta_i, \tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{r_i^2} \left[\frac{\partial}{\partial r_i} \left(\lambda_i(t) r_i^2 \frac{\partial t(r_i, \theta_i, \tau)}{\partial r_i} \right) \right] + \frac{1}{r_i^2 \sin \theta_i} \left[\frac{\partial}{\partial \theta_i} \left(\lambda_j(t) \sin \theta_i \frac{\partial t(r_i, \theta_i, \tau)}{\partial \theta_i} \right) \right], \quad (1)$$

$0 \leq \theta \leq \pi; \quad 0 \leq r_i \leq R_i.$

Уравнение переноса теплоты в плоской стенке аппарата:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\lambda_{ст}(t) \frac{\partial t(x, z, \tau)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\lambda_{ст}(t) \frac{\partial t(x, z, \tau)}{\partial z} \right] - c_{ст}(t)\rho_{ст}(t) \frac{\partial t(x, z, \tau)}{\partial \tau} = 0. \quad (2)$$

Начальные условия

$$t(r_i, \theta_i, 0) = t_{жн} = \text{const}; \quad 0 \leq r_i \leq R_i; \\ 0 \leq \theta_i \leq \pi; \quad r_{\xi, j, i}(\theta_i, 0) \equiv R_i + 0; \quad r_{\Pi, i}(\theta_i, 0) \equiv 0; \quad (3) \\ t(x, z, 0) = t(x, z, \tau_{охл}) \vee t_c.$$

Условия начала фазового превращения (игнорируя не сферичность капли при контакте со стенкой):

$$2\pi \int_{\tau_{j,i}}^{\tau_{инд j,i}} \int_{r_{j,i}}^{R_i} \int_0^{\theta_{j,i}} w_{эj}(t(r_i, \theta_i, \tau)) r_i^2 \sin \theta_i d\theta_i dr_i d\tau = 1; \quad (4)$$

$$t(r_{j,i}, \theta_{j,i}, \tau_{j,i}) = t_{фj},$$

$$t(x_{k,i}, \theta_{k,i}, \tau_{инд k,i}) = t_k. \quad (5)$$

Условие на границе сосредоточенной усадочной поры радиусом $r_{\Pi j, i}$

$$\overline{\text{grad}t}(r_{\Pi j, i}, \theta_{j,i}, \tau) = 0;$$

$$V_{\Pi i}(\tau) = V_{кi}(\tau) \frac{\rho_k(t_{фк}) - \rho_j(t_{фк})}{\rho_j(t_{фк})}; \quad (6)$$

$$\frac{S_{\Pi i}(\tau)\sigma(\tau)}{V_{\Pi i}(\tau)} \rightarrow \text{мин.}$$

Объем распределенной усадочной пористости $V_{\text{пр}, j, i}(\tau)$ в виде трещин, возникающих при термической усадке:

$$V_{\text{пр}, j, i}(\tau) = V_{j, i}(\tau) \frac{\overline{\rho_j} - \rho_j(t_{фj})}{\rho_j};$$

$$\overline{\rho_j} = \frac{1}{V_{j, i}(\tau)} 2\pi \int_{r_{j+1, i}}^{r_{j, i}} \int_0^{\pi} \rho_j(r_i, \theta_i, \tau) r_i^2 \sin \theta_i d\theta_i dr_i = f(\tau); \quad (7)$$

$$\rho_j = f(t); \quad t = (r_i, \theta_i, \tau).$$

Объем распределенной усадочной пористости, возникающей при полиморфном превращении $j - j + 1$ (суммируется по всем $1 - J$ превращениям, которые претерпевает кристаллическая фаза):

$$V'_{\text{пр}, j+1, i}(\tau) = V_{j+1, i}(\tau) \frac{\rho_{j+1}(t_{фj}) - \rho_j(t_{фj})}{\rho_j(t_{фj})}. \quad (8)$$

Условия на межфазных (кристаллизации и энантиотропных полиморфных превращений) границах:

$$t_j(r_{\xi j, i}, \theta_{j, i}, \tau) = t_{j+1}(r_{\xi j, i}, \theta_{j, i}, \tau) < t_{фj}. \quad (9)$$

Граница раздела фаз смещается по нормали к границе со скоростью:

$$v_{\Lambda j} = \frac{d\xi_{j, i}(\theta, \tau)}{d\tau} \bar{n}_{j, i} \quad (10)$$

– проекция вектора скорости движения межфазной границы в пространстве $\theta_{j, i}$ и τ на единичный вектор нормали $\bar{n}_{j, i}$ к поверхности раздела фаз $j - j + 1$, (т.е. к локально-изотермической поверхности).

Зная вектор $\overline{\text{grad}t}(r_{j, i} = \xi_{j, i}(\theta, \tau), \theta_{j, i}, \tau)$ в этой области фазовой границы:

$$\begin{aligned} \overline{\text{grad} t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{j,i}, \tau)} &= \\ = \frac{\partial t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau))}{\partial r_i} \bar{i}_r + \frac{1}{r_i} \frac{\partial t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau))}{\partial \theta_i} \bar{i}_\theta, \end{aligned} \quad (11)$$

где $\bar{i}_r, \bar{i}_\theta$ – единичные векторы в пространстве координат (r_i, θ_i) (этот вектор ортогонален к локаль-

но изотермической поверхности), из него можно получить единичный вектор нормали $\bar{n}_{j,i}$ к поверхности раздела между j и $j+1$ фазами. Для этого делим вектор $\overline{\text{grad} t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{j,i}, \tau)}$ на модуль вектора $|\overline{\text{grad} t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{j,i}, \tau)}|$, т.е. его скалярную составляющую (длину):

$$\bar{n}_{j,i} = \frac{\frac{\partial t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{j,i}, \tau)}{\partial r_i} \bar{i}_r + \frac{1}{r_i} \frac{\partial t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{j,i}, \tau)}{\partial \theta_i} \bar{i}_\theta}{\left[\left(\frac{\partial t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{j,i}, \tau)}{\partial r_i} \right)^2 + \left(\frac{1}{r_i} \frac{\partial t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{j,i}, \tau)}{\partial \theta_i} \right)^2 \right]^{1/2}} = \frac{\overline{\text{grad} t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{j,i}, \tau)}}{|\overline{\text{grad} t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{j,i}, \tau)}|. \quad (12)$$

Косинус угла между вектором скорости перемещения межфазной границы $d\bar{\xi}_{j,i}(\theta, \tau)/d\tau$: $\bar{v}_{\Lambda,j} = \frac{d\bar{\xi}_{j,i}(\theta, \tau)}{d\tau} = \frac{\partial \bar{\xi}_{j,i}(\theta, \tau)}{\partial \tau} \bar{i}_\xi + \frac{\partial \bar{\xi}_{j,i}(\theta, \tau)}{\partial \theta_{j,i}} \frac{\partial \theta_{j,i}}{\partial \tau} \bar{i}_\theta$ и единичным вектором нормали $n_{j,i}$ к межфазной поверхности $j-j+1$ равен:

$$\begin{aligned} \cos \left(\bar{n}_{j,i}, \frac{d\bar{\xi}_{j,i}(\theta, \tau)}{d\tau} \right) &= \frac{1}{\left[\left(\frac{\partial t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{j,i}, \tau)}{\partial r_i} \right)^2 + \left(\frac{1}{r_i} \frac{\partial t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{j,i}, \tau)}{\partial \theta_i} \right)^2 \right]^{1/2}} \times \\ &\times \frac{1}{\left[\left(\frac{\partial \bar{\xi}_{j,i}(\theta, \tau)}{\partial \tau} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{\xi}_{j,i}(\theta, \tau)}{\partial \theta_{j,i}} \frac{\partial \theta_{j,i}}{\partial \tau} \right)^2 \right]^{1/2}} \times \\ &\times \left(\frac{\partial \bar{\xi}_{j,i}(\theta, \tau)}{\partial \tau} \frac{\partial t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{j,i}, \tau)}{\partial r_i} \bar{i}_r + \frac{\partial \bar{\xi}_{j,i}(\theta, \tau)}{\partial \theta_{j,i}} \frac{\partial \theta_{j,i}}{\partial \tau} \frac{1}{r_i} \frac{\partial t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{j,i}, \tau)}{\partial \theta_i} \bar{i}_\theta \right). \end{aligned} \quad (13)$$

Проекция $\bar{v}_{\Lambda,j}$ линейной скорости движения фронта на единичный вектор нормали к этой поверхности $\bar{n}_{j,\tau}$ равна:

$$\begin{aligned} v_{\Lambda,j} = \frac{d\bar{\xi}_{j,i}(\theta, \tau)}{d\tau} \bar{n}_{j,i} &= \left[\left(\frac{\partial \bar{\xi}_{j,i}(\theta, \tau)}{\partial \tau} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{\xi}_{j,i}(\theta, \tau)}{\partial \theta_{j,i}} \frac{\partial \theta_{j,i}}{\partial \tau} \right)^2 \right]^{1/2} \cos \left(\bar{n}, \frac{d\bar{\xi}_{j,i}(\theta, \tau)}{d\tau} \right) \times \\ &\times \frac{1}{\left[\left(\frac{\partial t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{j,i}, \tau)}{\partial r_i} \right)^2 + \left(\frac{1}{r_i} \frac{\partial t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{j,i}, \tau)}{\partial \theta_i} \right)^2 \right]^{1/2}} \times \\ &\times \left(\frac{\partial \bar{\xi}_{j,i}(\theta, \tau)}{\partial \tau} \frac{\partial t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{j,i}, \tau)}{\partial r_i} \bar{i}_r + \frac{\partial \bar{\xi}_{j,i}(\theta, \tau)}{\partial \theta_{j,i}} \frac{\partial \theta_{j,i}}{\partial \tau} \frac{1}{r_i} \frac{\partial t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{j,i}, \tau)}{\partial \theta_i} \bar{i}_\theta \right) \times \\ &\times \frac{1}{|\overline{\text{grad} t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{j,i}, \tau)}| \left(\frac{d\bar{\xi}_{j,i}(\theta, \tau)}{d\tau} \overline{\text{grad} t(r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{j,i}, \tau)} \right). \end{aligned} \quad (14)$$

Сам вектор перемещения границы раздела фаз по нормали к поверхности межфазной границы $\bar{v}_{\Lambda,j}$ равен произведению проекции ли-

нейной скорости движения фронта $v_{\Lambda,j}$ (скалярная величина) на единичный вектор нормали к межфазной границе $\bar{n}_{j,i}$:

$$v_{\Lambda,j} = \frac{d\xi_{j,i}(\theta, \tau)}{d\tau} \bar{n}_{j,i} \bar{n}_{j,i} = \frac{1}{|\text{grad } t(r_{ji} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{ji}, \tau)|} \left(\frac{d\xi_{j,i}(\theta, \tau)}{d\tau} \overline{\text{grad } t(r_{ji} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{ji}, \tau)} \right) \times \frac{\overline{\text{grad } t(r_{ji} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{ji}, \tau)}}{|\text{grad } t(r_{ji} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{ji}, \tau)|} = \frac{\overline{\text{grad } t(r_{ji} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{ji}, \tau)}}{|\text{grad } t(r_{ji} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{ji}, \tau)|^2} \left(\frac{d\xi_{j,i}(\theta, \tau)}{d\tau} \overline{\text{grad } t(r_{ji} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{ji}, \tau)} \right). \quad (15)$$

Баланс теплоты на подвижных границах кристаллизации и полиморфных превращений:

$$\bar{q}_{j+1,i} = \bar{q}_{j,i} + r_{j+1} \rho_{j+1} \bar{v}_{\Lambda,j}, \quad (16)$$

где r_{j+1} – теплота $j + 1$ фазового превращения; $q_{j+1,i}, q_{j,i}$ – удельные потоки теплоты у межфазной j, i границы в соответствующие фазы, ρ_{j+1} плотность $j + 1$ фазы.

При кондуктивном переносе теплоты в фазах удельные потоки в них равны:

$$\bar{q}_{j+1,i} = \lambda_{j+1}(t) \overline{\text{grad } t_{j+1}(r_{ji} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{ji}, \tau)}, \quad (17)$$

$$q_{j,i} = \lambda_j(t) \text{grad } t_j(r_{ji} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{ji}, \tau). \quad (18)$$

Тогда условие Стефана на межфазных границах имеет вид:

$$\lambda_{j+1}(t) \overline{\text{grad } t_{j+1}(r_{ji} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{ji}, \tau)} - \lambda_j(t) \overline{\text{grad } t_j(r_{ji} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{ji}, \tau)} = r_{\Phi,j+1} \rho_{j+1} \left(\frac{d\xi_{j,i}(\theta, \tau)}{d\tau} \overline{\text{grad } t_{j+1}(r_{ji} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{ji}, \tau)} \right) \frac{\overline{\text{grad } t_j(r_{ji} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{ji}, \tau)}}{|\text{grad } t_j(r_{ji} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{ji}, \tau)|^2} = v_{\Lambda,j} r_{\Phi,j+1} \rho_{j+1}; \quad (19)$$

$$v_{\Lambda,j} = \begin{cases} 0, r_{\xi_{j,i}}(\theta, \tau) = \xi_{j,i}(\theta, \tau) = R_i + 0; \tau < \tau_{\text{инд}}; \\ f_{\Lambda}(\Delta t_3) = f_{\Lambda}[t_{\Phi j} - t(r_{ji} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{ji}, \tau)], \\ r_{j,i} = \xi_{j,i}(\theta, \tau) < R_i; \tau \geq \tau_{\text{инд}}. \end{cases} \quad (20)$$

Условие устойчивости плоской межфазной границы имеет вид:

$$-\lambda_j(t) \overline{\text{grad } t_j(\tau_{ji} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{ji}, \tau)} \leq C \lambda_{j+1}(t) \lambda_{j+1}(t) \overline{\text{grad } t_{j+1}(\tau_{ji} = \xi_{j,i}(\theta, \tau), \theta_{ji}, \tau)}, \quad (21)$$

где C – постоянная, определенная в [1, 9].

Условие не появления новых центров новообразований в метастабильной области перед фазовой границей имеет вид, если считать, что коэффициент теплоотдачи разный в области контакта гранулы со стенкой и на свободной поверхности гранулы:

$$2\pi \int_0^{\tau_{j,i}} \int_{r_{j,i}}^{\theta_{j,i}} \int_0^{\theta_{j,i}} \omega_{3,j} [t(r_i, \theta_i, \tau)] r_i^2 \sin \theta_i d\theta_i dr_i d\tau < 1; \quad (22)$$

$$t(r_{j,i}, \theta_{j,i}, \tau) \leq t_{\Phi,j}; \quad \tau_{v,j}(\theta_i) = \int_{r_{j,i}}^{\theta_{j,i}} \frac{dr_i(\theta_i)}{v_{\Lambda,j}}.$$

Если считать, что поверхность контакта капли расплава со стенкой мала, а коэффициент теплоотдачи постоянен по поверхности гранулы и равен его величине для свободной поверхности, то

условие не появления новых центров в метастабильной области имеет вид:

$$4\pi \int_0^{\tau_{j,i}} \int_{r_{j,i}}^{\theta_{j,i}} \omega_{3,j} [t(\tau_i, \tau)] r_i^2 dr_i d\tau < 1; \quad (23)$$

$$t(r_{j,i}, \tau) \leq t_{\Phi,j}; \quad \tau_{v,j} = \int_{r_{j,i}}^{\theta_{j,i}} \frac{dr}{v_{\Lambda,j}}.$$

Условие на внешней границе капли имеет вид:

$$\alpha_{c,i}(\theta_{i,\tau}) [t(R_i, \theta_i, \tau) - t_c(r_B, \tau)] = -\lambda_j(t) \text{grad } t_j(R_i, \theta_i, \tau); \quad \varphi_{\text{см}} \leq \theta_{j,i} \leq \pi, \quad (24)$$

где $\varphi_{\text{см}}$ – краевой угол смачивания расплавом продукта охлаждаемой поверхности.

Условие на границе капли расплава и плоской стенки имеет вид:

$$-\lambda_{\text{ст}}(t) \text{grad } t_{\text{ст}}(x', \theta, \tau) = -\lambda_j(t) \text{grad } t_j(R_j, \theta_{j,i}, \tau); \quad 0 \leq \theta_{j,i} \leq \varphi_{\text{см}}; \quad (25)$$

$$0 \leq x' \leq R_i \sin \varphi_{\text{см}}; \quad R_i' = R_i \cos \theta_{j,i}.$$

Условия на охлаждаемой внутренней поверхности стенки аппарата имеют вид:

$$\alpha_C(\tau) [t(x'', \delta_{CT}, \tau) - t_C] = -\lambda_{CT}(t) \frac{\partial t(x, \delta_{CT}, \tau)}{\partial n}; \quad (26)$$

$$0 \leq x \leq \delta/2,$$

где δ – шаг между гранулами, “выкладываемыми” роторным диспергатором по шестиграннику (четырёхугольнику).

Условие на охлаждаемой поверхности, не контактирующей с гранулами, имеет вид:

$$\alpha_C(\tau) [t(x'', 0, \tau) - t_C] = -\lambda_{CT}(t) \frac{\partial t(x'', 0, \tau)}{\partial n}; \quad (27)$$

$$R_i \sin \varphi_{cm} \leq x'' \leq \delta/2.$$

Система уравнений (1)–(27) замкнута и может быть решена численными методами.

МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ПРЕДЛОЖЕННОГО МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ

В работе использовали консервативный, неявный, абсолютно устойчивый, нелинейный, решаемый лишь итерационно на n -временном слое разностный аналог системы (1)–(27):

$$(c\rho)_{j,n}^S \frac{T_{j,x,y,n}^{S+1} - T_{j,x,y,n-1}}{\Delta\tau} = \quad (28)$$

$$= \lambda_{j,n}^S \Lambda_{r_i}^2 T_{j,x,y,n}^{S+1} + \lambda_{j,n}^S \Lambda_{\varphi_i}^2 T_{j,x,y,n}^S,$$

$$(c_{CT}\rho_{CT})_n^S \frac{T_{m,l,n}^{S+1} - T_{m,l,n-1}}{\Delta\tau} = \quad (29)$$

$$= \lambda_{CT,n}^S \Lambda_z^2 T_{m,l,n}^{S+1} + \lambda_{CT,n}^S \Lambda_{x_i}^2 T_{m,l,n}^S,$$

где S – номер итерации; Λ^2 – разностный аналог оператора второй производной по соответствующим координатам.

Начальные условия:

$$T_{j,x,y,0} = t_C; r_{\zeta_i,j,i}(x, y, 0) = R_i + 0;$$

$$r_{\Pi_j,i}(x, y, 0) = 0; \quad x = 0, 1, 2 \dots X, \quad y = 0, 1, 2 \dots Y, \quad (30)$$

$$T_{m,l,0} = T_{m,l,n_{охл}} \vee t_C; \quad m = 0, 1, 2 \dots M;$$

$$l = 0, 1, 2 \dots L; \quad Mx = \delta/2; \quad Lz = \delta_{CT}; n_{охл} \tau = \tau_{охл}.$$

Условие начала фазового превращения имеет вид:

$$\frac{2}{3} \pi \sum_{n=n_1}^{n_2} \sum_{y=0}^Y \sum_{x=x_1}^X [\cos \Delta\theta_i y - \cos \Delta\theta_i (y+1)] \times$$

$$\times (r_{i,x+1,y,n}^3 - r_{i,x,y,n}^3) w_{3j}(T_{j,x,y,n}^{S+1}) \Delta\tau = 1, \quad (31)$$

$$n_1 = \tau(t_{\Phi_j}, R_i) / \Delta\tau; \quad n_2 = \tau_{инд,j,i} / \Delta\tau;$$

$$Y = \pi / \Delta\theta_i; \quad x_1 = r_i(t_{\Phi_j}, \theta_i, \tau) / \Delta r_i; \quad X = R_i / \Delta r_i.$$

Условие на границе сосредоточенной усадочной полости имеет вид:

$$\Lambda_{r_i} T_{j,x,y,n}^{S+1} = 0; \quad V_{\Pi_i,n}^{S+1} = V_{\kappa_i,n}^{S+1} \frac{\rho_{\kappa}(t_{\Phi_k}) - \rho_j(t_{\Phi_k})}{\rho_j(t_{\Phi_k})}, \quad (32)$$

$$\frac{S_{\Pi_i,n} \sigma_n}{V_{\Pi_i,n}} \rightarrow \text{мин.}$$

Объем распределенной усадочной пористости за счет образования трещин при термической усадке кристаллической фазы определяется зависимостями:

$$V_{\Pi j,i,n}^{S+1} = V_{j,i,n}^{S+1} \frac{\bar{\rho}_{j,i,n} - \rho_j(t_{\Phi_j})}{\bar{\rho}_{j,i,n}};$$

$$\bar{\rho}_{j,i,n} = \frac{1}{V_{j,i,n}^{S+1}} \frac{4}{3} \pi \sum_{x=x_2}^{x_1} (r_{j,i,x,n}^3 - r_{j+1,i,x,n}^3) \rho_{j,x,n}^{S+1}; \quad (33)$$

$$\rho_{j,x,n}^{S+1} = f(T_{j,x,n}^{S+1}).$$

Объем распределенной усадочной пористости за счет появления трещин при полиморфных превращениях определяется зависимостями:

$$V'_{\Pi j+1,i,n} = V_{j+1,i,n} \frac{\rho_{j+1}(t_{\Phi_j}) - \rho_j(t_{\Phi_j})}{\rho_j(t_{\Phi_j})}. \quad (34)$$

Условия на межфазных границах (кристаллизации и полиморфных превращений)

$$T_{j,x,y,n}^{S+1} = T_{j+1,x,y,n}^{S+1} < t_{\Phi_j}; \quad r_{j,i,y,n}^{s+2} = \Delta r_i x;$$

$$\theta_{i\zeta_i,j,i,n} = \Delta\theta_i y. \quad (35)$$

Граница раздела фаз смещается по нормали к границе со скоростью:

$$v_{\Lambda_j} = \Lambda_{\tau} \xi_{j,i,x,y,n} \bar{n}_{j,i}; \quad (36)$$

– разностный аналог проекции вектора скорости движения межфазной границы в пространстве x , y на единичный вектор нормали \bar{n}_i к поверхности раздела фаз $j - j_H$, (т.е. к локально изотермической поверхности).

Градиент сеточной функции температуры в конкретной области границы $j, j+1$ можно представить в виде:

$$\text{grad} T_{j,i,x_{\xi},y,n} = \Lambda_{r_i} T_{j,i,x_{\xi},y,n} \bar{i}_r +$$

$$+ \frac{1}{r_{j,i,x_{\xi},y,n}} \Lambda_{\varphi_i} T_{j,i,x_{\xi},y,n} \bar{i}_{\varphi} = \bar{\Lambda} \text{grad} T_{j,i,x_{\xi},y,n}, \quad (37)$$

где $\bar{i}_r, \bar{i}_{\varphi}$ – единичные вектора в сеточном пространстве x, y .

Этот вектор ортогонален к локально-изотермическому, линейно интерполированному участку межфазной границы. Из него получили единичный вектор нормали $\bar{n}_{j,i}$ к элементу кусочно-аппроксимированной межфазной границы, деля вектор градиента сеточной функции температуры

у межфазной границы на его модуль. Единичный вектор нормали к аппроксимированной межфаз-

ной границе $\bar{n}_{j,i}$ в конечно-разностной форме можно определить:

$$\bar{n}_{j,i} = \frac{\bar{\Lambda}_{r_i} T_{j,i,x\xi,y,n} \bar{i}_r + \frac{1}{r_{j,i,x\xi,y,n}} \bar{\Lambda}_{\varphi_i} T_{j,i,x\xi,y,n} \bar{i}_\theta}{\left[(\bar{\Lambda}_{r_i} T_{j,i,x\xi,y,n})^2 + \left(\frac{1}{r_{j,i,x\xi,y,n}} \bar{\Lambda}_{\varphi_i} T_{j,i,x\xi,y,n} \right)^2 \right]^{1/2}} = \frac{\bar{\Lambda} \text{grad} T_{j,i,x\xi,y,n}}{|\bar{\Lambda} \text{grad} T_{j,i,x\xi,y,n}|}. \quad (38)$$

Косинус угла между вектором скорости смещения межфазной границы:

и единичным вектором нормали $\bar{n}_{j,i}$ к межфазной поверхности можно определить:

$$\bar{\Lambda}_\tau \xi_{j,i,x,y,n} = \Lambda_\tau \xi_{j,i,x,y,n} \bar{i}_\xi + \Lambda_\varphi \xi_{j,i,x,y,n} \Lambda_\tau \varphi_{j,i} \bar{i}_\varphi; \quad (39)$$

$$\cos(\bar{n}, \bar{\Lambda}_\tau \xi_{j,i,x,y,n}) = \frac{1}{\left([\bar{\Lambda}_{r_i} T_{j,i,x\xi,y,n}]^2 + \left[\frac{1}{r_{j,i,x\xi,y,n}} \bar{\Lambda}_{\varphi_i} T_{j,i,x\xi,y,n} \right]^2 \right)^{1/2}} \times \left[(\Lambda_\tau \xi_{j,i,x,y,n})^2 + (\Lambda_\varphi \xi_{j,i,x,y,n} \Lambda_\tau \varphi_{j,i} \bar{i}_\varphi)^2 \right]^{1/2} \times \Lambda_\tau \xi_{j,i,x,y,n} \bar{\Lambda}_{r_i} T_{j,i,x\xi,y,n} + \Lambda_\varphi \xi_{j,i,x,y,n} \Lambda_\tau \varphi_{j,i} \bar{i}_\varphi \frac{1}{r_{j,i,x\xi,y,n}} \bar{\Lambda}_{\varphi_i} T_{j,i,x\xi,y,n}. \quad (40)$$

Проекция $v_{\Lambda,j}$ линейной скорости движения фазового фронта на единичный вектор к поверх-

ности раздела фаз $\bar{n}_{j,i}$, рассчитывается с использованием разностного аналога:

$$v_{\Lambda,j} = \Lambda_\tau \xi_{j,i,x,y,n} \bar{n}_{j,i} = [(\Lambda_\tau \xi_{j,i,x,y,n})^2 + (\Lambda_\varphi \xi_{j,i,x,y,n} \Lambda_\tau \varphi_{j,i})^2]^{1/2} \cos(\bar{n}_{j,i}, \Lambda_\tau \xi_{j,i,x,y,n}) = \left((\bar{\Lambda}_{r_i} T_{j,i,x\xi,y,n})^2 + \left(\frac{1}{r_{j,i,x\xi,y,n}} \bar{\Lambda}_{\varphi_i} T_{j,i,x\xi,y,n} \right)^2 \right)^{-1/2} \left(\Lambda_\tau \xi_{j,i,y,n} \bar{\Lambda}_{r_i} T_{j,i,x\xi,y,n} + \Lambda_\varphi \xi_{j,i,x,y,n} \Lambda_\tau \varphi_{j,i} \frac{1}{r_{j,i,x\xi,y,n}} \bar{\Lambda}_{\varphi_i} T_{j,i,x\xi,y,n} \right) = \frac{1}{[\bar{\Lambda} \text{grad} T_{j,i,x\xi,y,n}]} (\bar{\Lambda}_\tau \xi_{j,i,y,n} \bar{\Lambda} \text{grad} T_{j,i,x\xi,y,n}). \quad (41)$$

Вектор скорости движения фазовой границы по нормали к ее поверхности $\bar{n}_{j,i}$ $\bar{v}_{\Lambda,j}$ равен величине ее проекции на нормаль $v_{\Lambda,j}$ (скалярная величина) на единичный вектор нормали к межфазной поверхности $\bar{n}_{j,i}$, записанный через разностные аналоги производных по r_i, θ_i :

$$\bar{v}_{\Lambda,j} = v_{\Lambda,j} \bar{n}_{j,i} = \Lambda_\tau \xi_{j,i,y,n} \bar{n}_{j,i} \bar{n}_{j,i} = \frac{1}{[\bar{\Lambda} \text{grad} T_{j,i,x\xi,y,n}]} (\bar{\Lambda}_\tau \xi_{j,i,y,n} \bar{\Lambda} \text{grad} T_{j,i,x\xi,y,n}) \times \frac{\bar{\Lambda} \text{grad} T_{j,i,x\xi,y,n}}{[\bar{\Lambda} \text{grad} T_{j,i,x\xi,y,n}]} = \frac{\bar{\Lambda} \text{grad} T_{j,i,x\xi,y,n}}{[\bar{\Lambda} \text{grad} T_{j,i,x\xi,y,n}]^2} (\bar{\Lambda}_\tau \xi_{j,i,y,n} \bar{\Lambda} \text{grad} T_{j,i,x\xi,y,n}). \quad (42)$$

Тепловой баланс удельных потоков теплоты у межфазной границы (условие Стефана), записанный в разностной форме, имеет вид:

$$\lambda_{j+1,n}^s \bar{\Lambda} \text{grad} T_{j+1,i,x,y,n}^{s+1} - \lambda_{j,n}^s \bar{\Lambda} \text{grad} T_{j,i,x,y,n}^{s+1} = r_{\Phi,j+1}^s \rho_{j+1}^s \left(\frac{\Delta \xi_{ijyn}^{s+2}}{\Delta \tau} \bar{\Lambda} \text{grad} T_{j,i,x,y,n}^{s+1} \right) \times \frac{\bar{\Lambda} \text{grad} T_{j,i,x,y,n}^{s+1}}{[\bar{\Lambda} \text{grad} T_{j,i,x,y,n}^{s+1}]^2} = v_{\Lambda,j}^{s+2} r_{\Phi,j+1}^s \rho_{j+1}^s, \quad (43)$$

$$v_{\Lambda,j}^{s+2} = v_{\Lambda,j} = \begin{cases} 0, & r_{\xi_{ijyn}^{s+2}} = R_i + 0; \quad n\Delta\tau < \tau_{\text{инд}} \\ f_1 [t_{\Phi,j} - T_{j,x,y,n}^{s+1}], & r_{j,x,y,n}^{s+2} < R_i; \quad n\Delta\tau \geq \tau_{\text{инд}}, \end{cases} \quad (44)$$

где f_1 – функциональная зависимость линейной скорости роста фазы от термодинамического стимула (например, переохлаждения фазы).

Разностный аналог условия устойчивости межфазной границы имеет вид:

$$c\lambda_{j+1,n}^s \Lambda \text{grad} T_{j+1,x,y,n}^{S+1} \geq -\lambda_{jn}^s \Lambda \text{grad} T_{j,i,x,y,n}^{S+1} \quad (45)$$

Условие возникновения новых центров фазового превращения в метастабильной области перед межфазной границей:

$$\frac{2}{3} \pi \sum_{n=0}^{n_3} \sum_{y=0}^Y \sum_{x=x_1}^{x_{ij,y}} [\cos \Delta\theta_{i,y} - \cos \Delta\theta_i (1+y)] \times \\ \times [r_{i,x+1,y,n}^3 - r_{i,x,y,n}^3] w_{zj} (T_{j,x,y,n}^{S+1}) \Delta\tau < 1, \quad (46)$$

$$n_3 = \frac{r_{ij,i,y,n}^{S+2} - r_{i,y,n}^{S+2}(t_{\Phi j})}{V_{\Lambda j}}; \quad x_{ij,i,y} = r_{ij,i,y,n}^{S+2} / \Delta r_i.$$

Условие на внешней границе капли:

$$\alpha_{c'}(y,n) [T_{j,X,y,n}^{S+1} - t_{c'}] = -\lambda_{j,n}^s \Lambda_r T_{j,X,y,n}^{S+1}; \quad (47) \\ y' < y \leq Y; \quad y' = \frac{\Phi_{\text{см}}}{\Delta\theta_i}.$$

Условие на границе капля – стенка аппарата (гранулятора):

$$-\lambda_{\text{СТ},n}^s \Lambda_z T_{m',0,n}^{S+1} = -\lambda_{j,n}^s \Lambda_r T_{j,X',y,n}^{S+1}; \quad (48) \\ 0 \leq y \leq y'; \quad 0 \leq m' \leq M; \\ X' = \frac{R_i \cos \Phi_{\text{см}}}{r_i}; \quad M' = \frac{R_i \sin \Phi_{\text{см}}}{x}.$$

Условие на охлаждаемой поверхности, не контактирующей с гранулами:

$$\alpha_{c',i}(n) [T_{m'',0,n}^{S+1} - t_{c'}] = -\lambda_{\text{СТ},n}^s \Lambda_z T_{m'',0,n}^{S+1}; \quad (49) \\ M' < m'' \leq M.$$

Условие на внутренней охлаждаемой поверхности, омываемой хладоагентом:

$$\alpha_c(n) [T_{m',L,n}^{S+1} - t_c] = -\lambda_{\text{СТ},n}^s \Lambda_z T_{m',0,n}^{S+1}; \quad (50) \\ 0 < m \leq M.$$

АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ПОСТАВЛЕННОЙ ЗАДАЧИ

Учитывая, что математическое описание процесса имеет нелинейности I, II и III рода [17] и носит достаточно сложный характер, его решали численно [18–20]. Неявный (использовали в зависимости от удобства решения шести точечный (Кранка–Николсона) и трех точечный шаблоны), консервативный, устойчивый, нелинейный конечно-разностный аналог, решаемый лишь итерационно [17, 18]. С учетом этого предложена и использовалась локально-одномерная нелинейная итерационная на каждом шаге по времени схема решения с “подвижными узлами сетки”, отслеживающими положение межфазных фронтов после вычислений градиентов значе-

ний сеточной функции у подвижных границ, направлений, скорости перемещения последних, с совпадением с допустимой погрешностью материальных балансов, образующейся с учетом теплового баланса на границе новой фазы и “отсекаемой” переместившейся границей области старой фазы, с учетом всех видов усадки, контролем устойчивости межфазной границы и с оценкой вероятности зарождения центров новой фазы в метастабильном объеме старой фазы. Локально-одномерный сектор, отслеживающий изменение сеточной функции температуры и положения межфазных границ по радиусу (в пределах шага по углу $\Delta\theta$) перемещался по угловой координате θ шагами $\Delta\theta$ с учетом симметрии задачи в пределах $0 \leq \theta \leq \pi$. Т.е. на каждой итерации в пределах шага по времени можно учитывать изменения всех теплофизических коэффициентов, граничных условий и геометрии границ (от поверхности капли, межфазных границ до границы и формы сосредоточенной осадочной полости). Этот алгоритм, в отличие от предложенных и апробированных на практике ранее [1, 9, 21], кроме радиального переноса теплоты, учитывает продольный по углу θ тепловой поток и обеспечивает уточненный расчет положений межфазных границ. Он особенно значим в условиях резкого изменения условий отвода теплоты по поверхности, претерпевающей фазовые превращения, капли расплава. При оценочных расчетах отмечена экономичность алгоритма. Например, погрешность численного расчета, оцениваемая по методу Рунге [18–20], не превышала $5\% \pm 1\%$ с вероятностью 95% при разбивке пространственно-временного континуума на 10 шагов по координатам при 3–5 итерациях на каждом шаге по времени с использованием простых ускоряющих алгоритмов [20, 22]. Известным методом [18, 20] аппроксимировали граничные условия. На каждой итерации в пределах шагов по времени синхронизировали параметры пространственно-временных сеток в капле и охлаждающей стенке.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Адекватность вычислительного эксперимента физическому подтверждали сравнением с данными скоростного термического анализа (СТА). Каплю расплава выдавливали на рамку с 3-мя расположенными друг под другом термопарами Au–Au–Pt диаметром 0.05 мм, (т.о. один королек $d = 0.01$ мм термопары оказывался вблизи свободной поверхности капли, другой – в центре, третий – около границы с охлаждаемой поверхностью (проточная ячейка из нержавеющей стали 50×51 мм $\delta = 10$ мм).

Положение королек термопар контролировали с помощью оптико-вычислительной системы, описанной в [1]. Работу проводили с распла-

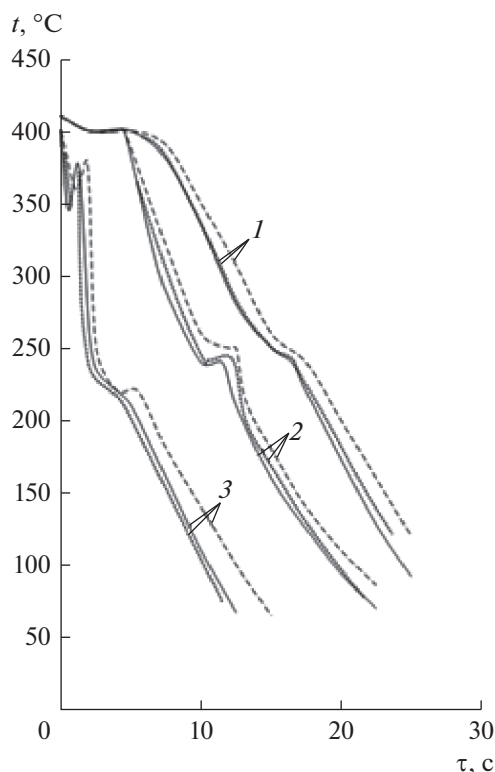


Рис. 1. Изменение во времени температур в кристаллизующейся на охлаждаемой поверхности капле расплава КОН: 1 – в центре; 2 – на внешней, не контактирующей с охлаждаемой поверхностью, поверхности; 3 – на внешней, контактирующей с охлаждаемой поверхностью, поверхности капли расплава. Сплошные линии – эксперимент СТА; штриховые линии – расчет по зависимостям [1], игнорирующим продольный перенос теплоты; пунктирные линии – расчет, учитывающий радиальный и продольный перенос теплоты ($R_i = 2$ мм; $\delta_{ст} = 1$ мм; $\lambda_{ст} = 16$ Вт/(м К); $\epsilon = 0.7$; $\alpha_{с.1} = 15$ Вт/(м² К); $\alpha_{с.2} = 250$ Вт/(м² К); $t_c = 20^\circ\text{C}$; $t_{жн} = 35^\circ\text{C}$).

вами ряда крупнотоннажных промышленных продуктов, которые условно разделили на вещества с высокой температурой кристаллизации (KNO_3 , NaOH , KOH , NH_4NO_3 , шлак доменных печей) и вещества с умеренной температурой кристаллизации (карбамид, сера, ацетонанил, ряд других органических веществ). Большинство расплавов были оптически прозрачными, поэтому динамику процесса наблюдали с помощью оптико-вычислительной системы [1, 12]. Фиксировали температуру в 3-х вышеназванных точках (рис. 1). Обращали внимание на продолжительность индукционного периода $\tau_{инд}$, который фиксировался оптико-расчетной системой [1] и термограммой рис. 1 (по времени появления верши-

ны пика на термограмме вблизи охлаждаемой поверхности). Процесс всегда начинался у охлаждаемой поверхности (на стальной полированной поверхности он был систематически на 15–20% короче, чем рассчитанный по уравнению (5) для гомогенного зародышеобразования. Такая близость ко времени гомогенного зародышеобразования наблюдалась в случае, если охлаждающая поверхность была полированная, промывалась, сушилась, обезжиривалась. При учете в расчетах радиального и продольного потоков теплоты совпадение расчета и эксперимента по предложенному математическому описанию было лучшим, чем при игнорировании продольного переноса теплоты, как полагали в ранее предложенных нами моделях [1, 9]. Хорошее согласование, термограмм и расчета, а также полученных экспериментально и рассчитанных по математической модели (1)–(27) размеров и формы усадочной поры, распределенной усадочной пористости дало основание полагать, что оценки устойчивости межфазной границы, механизма превращения (последовательный), определения скоростей зарождения и роста кристаллов (кинетических параметров превращения), теплообмена (параметров переноса при превращении) и описания в целом, адекватны ходу реального процесса.

ПРАКТИЧЕСКОЕ ПРИМЕНЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Применительно к вышеназванным веществам (в качестве примера на рис. 1–5 приедены данные по КОН) были проведены расчеты процесса, когда отвод тепла с внешней стороны близок к его интенсивности на охлаждаемой поверхности (обдув снаружи продукта, испарительное охлаждение, аппарат без кожуха и т.д.). Процесс производительный, но не всегда допустим и экологически опасен (рис. 2). Процесс, когда с внешней стороны гранул отвод теплоты минимален (аппарат закрыт кожухом), с позиций экологии и безопасности предпочтителен, но производительность ниже (рис. 3). Заметна разница в динамике параметров кристаллизующейся капли (положений межфазных границ, полей температур, структуры усадочной полости). При расчете процесса и при оценке качества гранул – это надо учитывать (рис. 2, рис. 3).

Схема процесса гранулирования отверждением капель расплава или кристаллизации (чешуирование) на охлаждаемых поверхностях с использованием теплоты гранулирования с применением теплового насоса включает валковые, ленточные, дисковые и другие кристаллизаторы, запитывае-

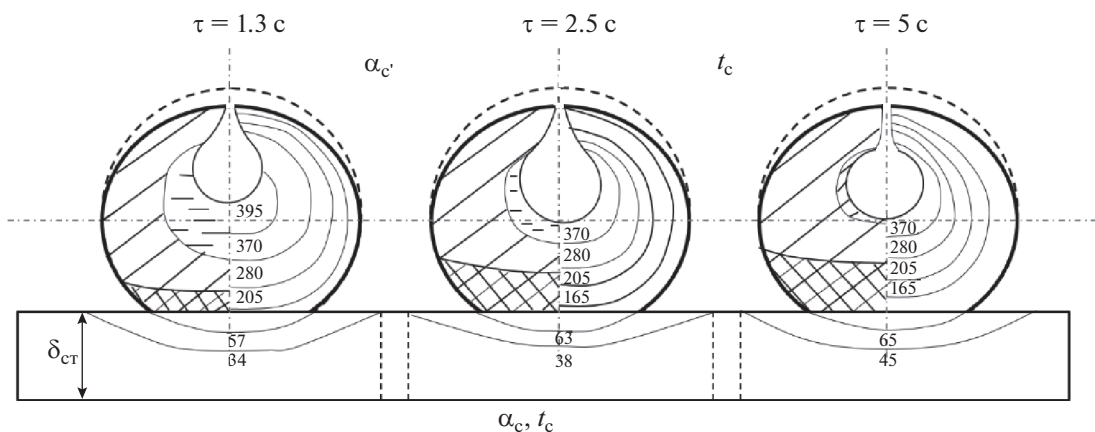


Рис. 2. Зависимость положения межфазной границы (заштрихована кристаллическая фаза модификация I(β) – косая редкая штриховая; II(α) – косая частая штриховая) при кристаллизации капли расплава КОН на стальной ленте ленточного кристаллизатора в различные моменты времени при двухстороннем воздушном охлаждении ($R_1 = 1.5$ мм; $\delta_{ст} = 1$ мм; $\lambda_{ст} = 16$ Вт/(м К); $\varepsilon = 0.7$; $\alpha_{с'} = 150$ Вт/(м² К); $\alpha_c = 250$ Вт/(м² К); $t_c = 20^\circ\text{C}$; $t_{жн} = 415^\circ\text{C}$).

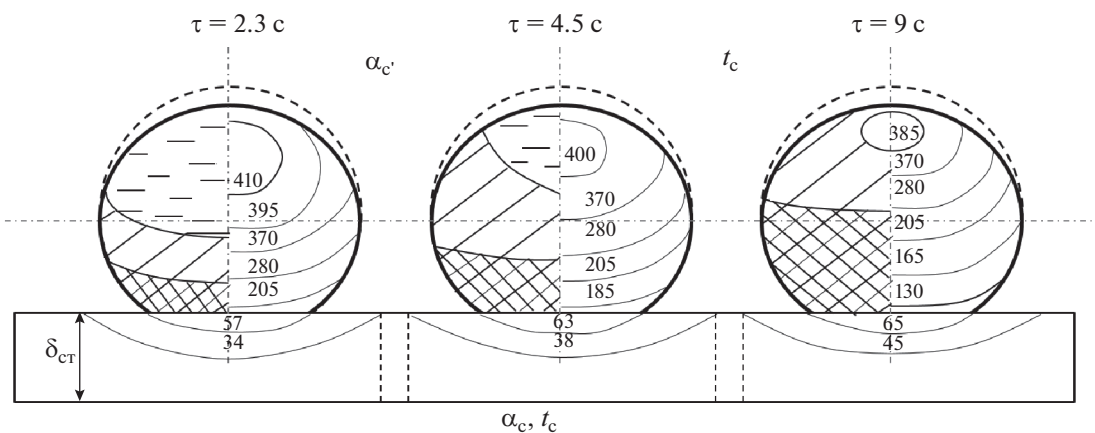


Рис. 3. Зависимость положения межфазной границы (заштрихована кристаллическая фаза модификация I(β) – косая штриховая; II(α) – двойная косая штриховая) и изотерм (цифры у кривых – значения температуры в $^\circ\text{C}$) при кристаллизации капли расплава КОН на стальной ленте ленточного кристаллизатора в различные моменты времени ($R_1 = 1.5$ мм; $\delta_{ст} = 1$ мм; $\lambda_{ст} = 16$ Вт/(м К); $\varepsilon = 0.7$; $\alpha_{с'} = 15$ Вт/(м² К); $\alpha_c = 250$ Вт/(м² К); $t_c = 20^\circ\text{C}$; $t_{жн} = 415^\circ\text{C}$).

мые расплавом с последующим срезанием ножом чешуированного продукта. В случае гранулирования расплав “выкладывается” в виде капель ротационным монодисперсным гранулятором на охлаждаемую распыляемой форсункой водой поверхность. Горячие, со степенью кристалличности $\eta \sim 0.7$, предотвращающей их комкование [1, 9, 23] гранулы поступают в охладитель с псевдооживленным слоем, охлаждающий их воздухом до температуры затаривания $\sim 50^\circ\text{C}$. Возможна схема капсулирования не успевших закристаллизоваться, но уже не комкующихся $\eta = 0.6\text{--}0.7$ гранул, полимерными оболочками, образующимися из растворов полимеров (мономеров с инициато-

рами полимеризации) [24, 25] или их “догранулирования” с удалением воды (растворителя) из связующего за счет аккумулированной в гранулах теплоты – один из вариантов предлагаемой технологии “fattening” [26]. Особенно интересен этот процесс для веществ, кристаллизующихся при высоких температурах. В нашем случае KNO_3 , NaOH , KOH , NH_4NO_3 , шлаки фосфорных и металлургических печей. Нами показано [1], что процесс можно использовать для гранулирования расплавов и более низкотемпературных веществ: карбамид, сера, NPK, NP, NS, NЦ, НК-удобрения, средства защиты растений, коагулянты, тугоплавкие парафины и др.

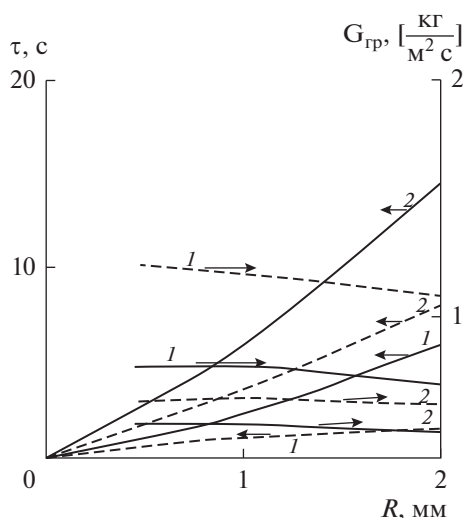


Рис. 4. Зависимости времени полной кристаллизации и соответствующей удельной производительности гранулятора – сплошные линии и аналогичные зависимости для степени кристалличности гранул $\eta = 0.7$ – штриховые линии от радиуса капель расплава КОН (1 – при наличии кожура $\alpha_{c'} = 15 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \text{ К})$; $\alpha_c = 250 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \text{ К})$; 2 – при внешнем охлаждении $\alpha_{c'} = \alpha_c = 250 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \text{ К})$; $t_c = t_{c'} = 80^\circ\text{C}$; $\varepsilon = 0.5$; $\varphi_{\text{см}} = 60^\circ$).

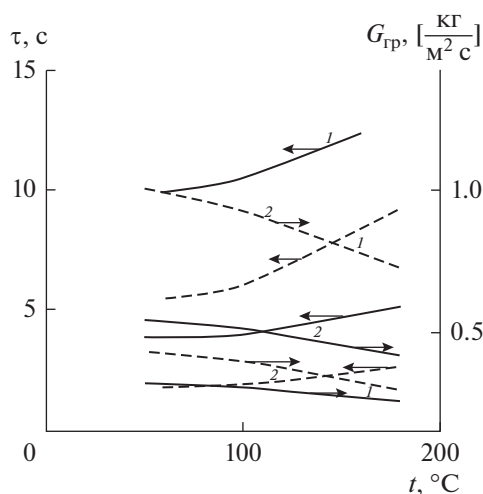


Рис. 5. Зависимости времени полной кристаллизации и соответствующей удельной производительности гранулятора – сплошные линии и аналогичные зависимости для степени кристалличности гранул $\eta = 0.7$ – штриховые линии от радиуса капель расплава КОН (1 – при наличии кожура $\alpha_{c'} = 15 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \text{ К})$; $\alpha_c = 250 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \text{ К})$; 2 – при внешнем охлаждении $\alpha_{c'} = \alpha_c = 250 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \text{ К})$; $R_i = 1.5 \text{ мм}$; $\varepsilon = 0.5$; $\varphi_{\text{см}} = 60^\circ$).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для экологически безопасных ресурсосберегающих процессов гранулирования кристаллизации капель расплава на охлаждаемых поверхностях с энергосбережением за счет использования теплоты гранулообразования с применением тепловых насосов рассмотрены принципиальные схемы с замкнутыми потоками хладагента.

Поскольку для технологического расчета и выбора необходимой аппаратуры нужен детальный анализ стадии гранулирования и охлаждения продукта, математические описания этого процесса дополнены учетом продольного переноса теплоты и двухмерного движения межфазных и усадочных границ в условиях переменных по поверхности гранул условий охлаждения. Предложен и апробирован алгоритм решения этой двухмерной задачи локально-одномерным численным методом конечных разностей с “ловлей” в узел сетки положений межфазных и усадочных границ и итерационным уточнением нелинейности I, II, III рода на каждой итерации “внутри” каждого временного шага.

Адекватность предложенного математического описания ходу реального процесса подтверждена сравнением расчетов с данными скоростного термического анализа, положением и объемом усадочной полости, экспериментальным определением наиболее вероятной продолжительности индукционного периода.

Работа проведена с крупнотоннажными веществами, кристаллизующимися при высоких температурах (около 200°C и выше) KNO_3 , NaOH , KOH , NH_4NO_3 , NPK , NP , NS , NЦ , НК -удобрения, шлаки и веществами с температурами фазового перехода менее 150°C – карбамид, сера, ацетонанил и др.

Статья подготовлена в рамках выполнения базовой части государственного задания ФГАОУ ВО “Московский политехнический университет” (проект АААА-А20-120092190052-9).

ОБОЗНАЧЕНИЯ

i	пространственная координата, м
j	номера фаз (название фаз)
q	удельный поток тепла, $\text{Вт}/\text{м}^2$
R, r	радиус гранулы, м
S	номер итерации
t	температура, град
V	объем, м^3
α	коэффициент теплоотдачи, $\text{Вт}/(\text{м}^2 \text{ К})$
Δ	приращение физической величины
δ	толщина (линейный размер), м

$\delta_{\text{ст}}$	толщина стенки кристаллизатора, м
$\epsilon = V_n/V$	коэффициент объемной пористости
η	степень превращения
λ	коэффициент теплопроводности, Вт/(м К)
c	теплоемкость, Дж/кг
ξ	координата подвижной межфазной границы, м
ρ	плотность, кг/м ³
σ	поверхностное натяжение, дж/м ²
τ	время, с
v_{Δ}	линейная скорость, м/с
$\Phi_{\text{см}}$	краевой угол смачивания, °
w_z	скорость зародышеобразования, [м ³ с] ⁻¹
Δ^2	разностный аналог оператора второй производной по соответствующим координатам
\vee	или
\wedge	и

ИНДЕКСЫ

г	газовая фаза
ж	жидкость (расплав)
з	зарождение
инд	индукционный
к	кристаллическая фаза, конечное значение параметра
кр	кристаллизация
н	начальное значение параметра
охл	охлаждение
П	порошок, полость
ПР	распределенная пористость
ПЗ	переходная зона
С	среда, охлаждающая (нагревающая) среда
СТ	стенка
ф	фаза
п	нормаль

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Таран Ю.А. Разработка и анализ процессов гранулирования расплавов с использованием экологически безопасных энергосберегающих схем: дис. ... канд. техн. наук. М.: МИТХТ, 2011.
2. Таран Ю.А. Mathematical description of phase transformations and their formally analogous processes for engineering design // Theor. Found. Chem. Eng. 2020. V. 54 I. 3. P. 431–445 [Таран Ю.А. Математическое описание фазовых и формально аналогичных им превращений для инженерных расчетов // Теор. основы хим. технол. 2020. Т. 54. № 3. С. 309–324.]
3. Бесков В.С., Гетманцев В.С., Гетманцев С.В. Гранулирование на ленточном формователе коагулянта для водоочистки // Хим. промышленность сегодня. 2008. № 9. С. 50–53.
4. Процессы и аппараты химической технологии. Общий курс // Под ред. Айнштейна В.Г. Санкт-Петербург: Лань, 2019.
5. Пестова Г.С., Рычков Г.С., Сырнев Б.В. Метод грануляции расплава фторида бериллия. Ч.1. Диспергирование // Цветные металлы. 2006. № 5. С. 54–57.
6. Пестова Г.С., Рычков Г.С., Сырнев Б.В. и др. Метод грануляции расплава фторида бериллия. Ч. 2. Охлаждение // Цветные металлы. 2006. № 6. С. 62–67.
7. Пестова Г.С., Рычков Г.С., Сырнев Б.В. и др. Метод грануляции расплава фторида бериллия. Ч. 3. Установка грануляции фторида бериллия // Цветные металлы. 2007. № 6. С. 69–71.
8. Классен П.В., Гришаев И.Г. Шомин И.П. Гранулирование. М.: Химия, 1991.
9. Таран А.Л. Теория и практика процессов гранулирования расплавов и порошков: Дис. ... докт. техн. наук. М.: МИТХТ, 2001.
10. Холин А.Ю., Таран А.Л. Способ кристаллизационной очистки веществ полунепрерывной зонной плавкой и аппарат для его осуществления (варианты). Пат. 2308555 РФ. 2005.
11. Таран Ю.А., Холин А.Ю. Таран А.Л. Кристаллизатор полунепрерывной зонной плавки. Пат. 24392213 РФ. 2012.
12. Таран Ю.А., Холин А.Ю. Crystal nucleation and growth rates in single-component and binary melts under conditions of growth in a polycrystalline layer and in the case of single crystals // Theor. Found. Chem. Eng. 2011. V. 45. I. 3. P. 272–283. [Таран Ю.А., Холин А.Ю. Исследование кинетики скорости зарождения и роста кристаллов в однокомпонентных и бинарных расплавах при их росте в поликристаллическом слое и в случае одиночных кристаллов. // Теор. основы хим. технол. 2011. Т. 45. № 2. С. 1–12.]
13. Koshelova M.K., Meshalkin V.P., Dorniyak O.R. Mathematical modeling of heat and mass transfer in the drying of granules used as a support for a nickel catalyst // Theor. Found. Chem. Eng. 2021. V. 55. P. 410–416. [Кошелева М.К., Мешалкин В.П., Дорняк О.Р. Математическое моделирование тепло- и массопереноса при сушке гранул носителя для никелевого катализатора. // Теор. основы хим. технол. 2020. Т. 54. № 2. С. 163–175.]
14. Флисюк О.М., Марцупевич Н.А., Шининов Т.Н. Гранулирование порошкообразных материалов в скоростном грануляторе // Мат. методы в технике и технологиях. 2016. № 2(84). С. 69–70.
15. Pokusaev B.G., Vyazmin A.V., Zakharov N.S., Khrantsov D.P., Nekrasov D.A. Unsteady Mass Transfer of Nutrients in Gels with Channels of Different Spatial Structures // Theor. Found. Chem. Eng. 2020. V. 54. I. 2. P. 277–288 [Покусаев Б.Г., Вязьмин А.В., Захаров Н.С., Храпцов Д.П., Некрасов Д.А. Нестационарный массоперенос питательных веществ в ге-

- лях с каналами различной пространственной структуры // Теор. основы хим. технол., 2020. Т. 54. № 2. С. 163–175.]
16. *Polyanin A.D., Sorokin V.G., Vyazmin A.V.* Reaction-Diffusion Models with Delay: Some Properties, Equations, Problems, and Solutions // Theor. Found. Chem. Eng. 2018. V. 52. P. 334–348. [*Полянин А.Д., Сорокин В.Г., Вязьмин А.В.* Нелинейные реакционно-диффузионные модели с запаздыванием: некоторые свойства, уравнения, проблемы и решения // Теорет. основы хим. технологии. 2018. Т. 52. С. 334–348.]
 17. *Тихонов А.Н., Арсенин В.Я.* Методы решений некорректных задач. М.: Наука. Главная редакция физико-матем. литературы, 1986.
 18. *Самарский А.А.* Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971.
 19. *Самарский А.А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1983.
 20. *Самарский А.А.* Введение в численные методы. М.: Наука, 1982.
 21. *Таран А.Л., Долгалев Е.В., Таран Ю.А.* Решение многомерных задач с фазовыми превращениями на локально-одномерном разностном аналоге // Математические методы в технике и технологиях ММТТ–20: сборник трудов XX Международной научной конференции. Изд-во ЯПУ, 2007. Т. 1. С. 150–154.
 22. *Химмельблау Д.М.* Прикладное нелинейное программирование. М.: Мир, 1975.
 23. *Протодьяконов И.О., Марцулевич Н.А., Марков А.В.* Явления переноса в химической технологии. Л.: Химия, 1981.
 24. *Таран А.Л., Олевский В.М., Шмелев С.Л.* и др. Способ получения водоустойчивых гранул. Пат. 2038346 РФ. 1995.
 25. *Taran, Yu. A. Taran A.L.* Revamping Equipment and Technology of Existing Granulating Plants to Improve the Quality of Granulated Products // Chemical and Petroleum Engineering. 2016. V. 51. I. 9–10. P. 581–5891 [*Таран Ю.А., Таран А.Л.* Аппаратурно-технологическое оформление реконструкции существующих производств гранулированных продуктов с целью повышения их качественных показателей // Хим. и нефтегаз. машиностроение. 2015. № 9. С. 3–8.]
 26. *Taran Yu.A., Morozov R.V., Taran A.L.* Calculation of process of finish-granulation by fattening technology with random granule-wise distribution of finish-granulating flow // Chemical and Petroleum Engineering. 2017. V. 53 I. 5–6 P. 355–363 [*Таран Ю.А., Морозов Р.В., Таран А.Л.* Расчет процесса догранулирования по технологии “fattening” со случайным распределением по гранулам догранулирующего потока // Хим. и нефтегаз. машиностроение. 2017. № 6. С. 3–8.]