

щих конвективное движение. Проведенные расчеты позволяют сделать вывод о том, что термокапиллярная конвекция существенным образом влияет как на положение поверхности раздела фаз, так и на ее форму. В целом форма фронта становится менее искривленной, но вблизи боковой поверхности появляется небольшое искривление, обусловленное локальным действием термокапиллярной конвекции. При этом наличие последней может привести как к увеличению ширины расплавленной зоны, так и к ее уменьшению в зависимости от теплового режима на торцах заготовки (рис. 3, а, 4, а). Основываясь на данных [7] и на полученных результатах по выяснению влияния конвекции на процесс бестигельной зонной плавки, можно утверждать, что развитая термокапиллярная конвекция, сглаживая поверхность раздела фаз, создает более благоприятное для технических целей напряженное состояние в растущей твердой фазе. При этом может вообще не возникнуть областей, в которых интенсивность сдвиговых напряжений превосходит критическое и приводит к существенному увеличению плотности дислокаций, либо такие области будут локализованы вдоль боковой поверхности образца. Необходимо, конечно, учитывать и изменение ширины расплавленной зоны, так как для этого параметра процесса существует критическое значение, определяющее область устойчивости процесса.

Авторы выражают признательность В. В. Кузнецову и О. М. Лаврентьевой за полезное обсуждение настоящей работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Дональд Д. К. Тепловой режим в условиях вакуумной плавки // Приборы для научных исследований.— 1961.— № 7.
2. Kobayashi N. Power required to form a floating zone and the zone shape // J. Crystal Growth.— 1978.— V. 43.— P. 417.
3. Анисютин Б. М. Численное исследование тепловой задачи для процесса бестигельной зонной плавки // Задачи гидромеханики и тепломассообмена со свободными границами: Межвуз. сб. науч. тр./Новосиб. гос. ун-т.— Новосибирск, 1987.
4. Славчев С. Г., Кожухарова Ж. Д. Численное моделирование термокапиллярной конвекции в нецилиндрической плавающей зоне кристалла // Численные методы и их приложения.— София, 1985.
5. Апанович Ю. В., Люмкис Е. Д. Моделирование процессов тепломассообмена при зонной перекристаллизации/Тр. III Всесоюз. конф. «Моделирование роста кристаллов».— Рига, 1990.
6. Якоб М. Вопросы теплопередачи.— М.: ИЛ, 1960.
7. Белова И. В. Расчет температуры и термоупругих напряжений в монокристаллах при бестигельной зонной плавке // Математическое моделирование. Прикладные задачи математической физики.— Рига, 1990.
8. Математическое моделирование конвективного тепломассообмена на основе уравнений Навье — Стокса/В. И. Полежаев, А. В. Бунэ, Н. А. Везеуб и др.— М.: Наука, 1987.
9. Хейгеман Л., Янг Д. Прикладные и итерационные методы.— М.: Мир, 1986.

г. Новосибирск

Поступила 4/XII 1992 г.,
в окончательном варианте — 11/I 1993 г.

УДК 548.01:66.065

А. И. Мошинский

ОБ ОДНОМ ПРЕДЕЛЬНОМ РЕЖИМЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПОЛИДИСПЕРСНОЙ СИСТЕМЫ ИЗ РАСТВОРОВ

Описание поведения полидисперсной системы частиц при наличии фазового перехода представляет интерес при исследовании ряда природных и технологических проблем. Примерами могут служить рост капель тумана при конденсации, обратный ему процесс — исчезновение капель из-за испарения, кристаллизация и растворение твердых частиц в растворе при

наличии определенного пересыщения (недосыщения) и т. п. Математические модели подобных процессов содержат общие элементы, вследствие чего часто при их анализе используют аналогичные алгоритмы.

Наиболее полное описание данного круга явлений дают методы механики гетерогенных сред [1—3]. Однако применение этого подхода сопряжено с определенными трудностями, а также требует привлечения некоторых замыкающих соотношений, что часто неконтролируемым образом сказывается на точности расчетов. Поэтому на практике широко распространен другой подход, связанный с введением функции распределения частиц по размерам. Знание функции распределения позволяет находить изменение во времени всех интересных для приложений величин: число частиц, их средний размер, удельную поверхность, полный объем всех частиц твердой фазы и др. Определенное представление о подходах к задачам данной нелинейной проблематики можно получить из [4—9]. Особенность процессов, анализируемых в цитированных работах, — отсутствие внешних источников и стоков частиц, что приводит к эволюции системы до тех пор, пока полностью не исчезнет пересыщение или другая (аналогичная) движущая сила процесса. При наличии ввода и(или) вывода вещества в сплошной и дисперсной фазах задача усложняется и приобретает новые качественные черты. Так, при некоторых условиях наблюдают потерю устойчивости стационарного состояния и развитие колебательных явлений [10—14]. В подобного рода задачах первостепенными становятся вопросы устойчивости процесса и динамики переходных явлений при внезапном изменении параметров.

В данной работе рассматривается предельное решение задачи кристаллизации при наличии ввода раствора, содержащего кристаллизуемый компонент, и вывода части кристаллов с потоком из системы.

1. Постановка задачи. При интенсивном перемешивании функция распределения частиц по размерам F будет зависеть только от размера кристалла r и времени τ . Основное уравнение баланса числа кристаллов запишем в виде

$$(1.1) \quad \partial F / \partial \tau + UG \partial (F/r^\alpha) / \partial r = -F(r, \tau) / \tau_1,$$

где скорость роста кристаллов принята в форме

$$(1.2) \quad dr/d\tau = UG/r^\alpha, \quad U = \text{const}, \quad \alpha = \text{const}.$$

Считаем скорость роста пропорциональной пересыщению раствора G , хотя принципиальных затруднений не вызвали бы и более сложные законы, применяемые на практике, в частности степенные.

В настоящей работе под пересыщением понимается величина разности между текущей и равновесной концентрациями выделяемого вещества в растворе, т. е. отсутствию пересыщения соответствует значение $G = 0$. Значение постоянной α зависит от режима массообмена кристаллов с несущей средой. Наиболее часто используют теоретически обоснованные законы кинетического роста кристаллов ($\alpha = 0$ [8, 11, 12]) и «диффузионного» ($\alpha = 1$ [13, 15, 16]).

По формуле (1.2) при отрицательном U можно описывать и растворение частиц. Изменение знака U повлечет за собой такую перестройку поля характеристик уравнения (1.1), которая приведет к ненужности дополнительного условия по переменной r . Это обстоятельство в целом упрощает анализ. Далее считаем, что $U > 0$. Отметим также, что приток частиц в систему (кроме механизма нуклеации) рассматривать не будем. Параметр τ_1 выражает характерное время переноса кристаллов через аппарат. Он равен отношению объема кристаллизатора к объемному расходу твердой фазы.

Второе уравнение, которое следует решать совместно с (1.1), выражает баланс целевого вещества в растворе и имеет вид

$$(1.3) \quad dG/d\tau = -\beta UG \int_0^{\infty} r^{2-\alpha} F(r, \tau) dr + \kappa (G_* - G) / \tau_1.$$

Постоянная β в (1.3) характеризует форму кристаллов, их плотность и т. п. Вариант ее определения приведен, например, в [14]. Скорость перехода вещества из раствора в твердую фазу определяется вторым слагаемым в

уравнении (1.3). Перенос растворенного вещества может происходить, вообще говоря, с другой скоростью. Это обстоятельство учитывает параметр κ , равный отношению расхода целевого вещества в растворе к расходу вещества в кристаллах. Величину G_* будем считать постоянной.

Уравнения (1.1), (1.3) дополняют начальные и граничное условия

$$(1.4) \quad F|_{t=0} = F^0(r), \quad G|_{t=0} = G^0, \quad F/r^m|_{r=0} = JG^m/(UG),$$

где JG^m — интенсивность нуклеации (J и m — постоянные). Здесь принята часто используемая на практике степенная форма закона для интенсивности возникновения частиц новой фазы. Введем безразмерные переменные и параметры:

$$(1.5) \quad f = F\beta\rho^4/G^0, \quad f^0 = F^0\beta\rho^4/G^0, \quad C = G/G_0, \quad C_* = G_*/G^0, \\ \tau_2 = \rho^{\alpha+1}/UG^0, \quad t = \tau/\tau_2, \quad \epsilon = \tau_2/\tau_1, \quad z = r/\rho$$

(ρ — масштаб для размера кристалла, который можно, например, определить из характера изменения начальной функции распределения $F^0(r)$). В переменных (1.5) задачу (1.1)—(1.4) запишем как

$$(1.6) \quad \partial f/\partial t + C\partial(f/z^\alpha)/\partial z = -\epsilon f(z, t);$$

$$(1.7) \quad dC/dt = -C \int_0^\infty z^{2-\alpha} f(z, t) dz + \epsilon\kappa(C_* - C);$$

$$(1.8) \quad f|_{t=0} = f^0(z), \quad C|_{t=0} = 1, \quad f/z^\alpha|_{z=0} = BC^n$$

$$(B = J\beta\rho^{\alpha+4}(G^0)^{m-2}/U, \quad n = m - 1).$$

Формулы (1.5) показывают, что задача (1.1)—(1.4) содержит два характерных времени: τ_1 и τ_2 . В зависимости от соотношений этих масштабов будут преобладать те или иные слагаемые в определенных временных интервалах. Здесь рассмотрим вариант $\epsilon \ll 1$ и построим решение задачи (1.6)—(1.8) при помощи метода малых возмущений [17].

2. Решение при масштабе времени τ_2 . Разыскивая решение проблемы в виде рядов

$$(2.1) \quad f = f_0(z, t) + \epsilon f_1(z, t) + \dots, \quad C = C_0(t) + \epsilon C_1(t) + \dots,$$

затем подставляя их в соотношения (1.6)—(1.8) и выделяя слагаемые одинакового порядка по ϵ , приходим в главном приближении по ϵ к задаче

$$(2.2) \quad \partial f_0/\partial t + C_0\partial(f_0/z^\alpha)/\partial z = 0;$$

$$(2.3) \quad dC_0/dt = -C_0 \int_0^\infty z^{2-\alpha} f_0(z, t) dz;$$

$$(2.4) \quad f_0|_{t=0} = f^0(z), \quad C_0|_{t=0} = 1, \quad f_0/z^\alpha|_{z=0} = BC_0^n.$$

Введем моментные характеристики функции f_0 (аналогичным образом и других функций) по формуле

$$(2.5) \quad \langle f_0 \rangle_t = \int_0^\infty z f_0(z, t) dz.$$

Легко видеть, что система (2.2), (2.3) имеет интеграл

$$(2.6) \quad 3C_0 + \langle f_0 \rangle_t = 3 + \langle f^0 \rangle_t = \text{const.}$$

Основное приближение по ϵ задачи (1.6)—(1.8) (система (2.2), (2.4), (2.6)) — характерная проблема периодической массовой кристаллизации, которая (при различных значениях параметров) неоднократно (см., например, [8, 9, 18]) рассматривалась в литературе. В цитированных и других работах были получены как точные, так и приближенные решения проблемы (2.2), (2.4), (2.6). Поэтому будем считать решение данной задачи (т. е. функцию f_0 и др.) известным.

Отметим ранее [9] установленный факт. Решение задачи, т. е. функция $f_0(z, t)$, при $t \rightarrow \infty$ стремится к равновесному значению $f_0(z, \infty)$. При этом

C_0 стремится к нулю. Что же касается функции C , то она не достигает нулевой отметки, а стремится к некоторой постоянной первого порядка по малому параметру ϵ . Функция распределения f имеет f_0 в качестве «промежуточного» предела. После выхода решения на $f_0(z, \infty)$ начинается более медленная эволюция функции f с характерным временем τ_1 или, по терминологии [17], изменения в системе происходят с «внешним временем» $T = \tau/\tau_1 = \epsilon t$. Таким образом, мы приходим к необходимости построения «внешнего» разложения для более полного описания решения задачи.

3. Стационарное решение. Сначала рассмотрим стационарное решение задачи (1.1), (1.3), (1.4). Это даст представление о порядках величин основных переменных, которые сформируются при достаточно больших значениях времени. Введем новые переменные:

$$(3.1) \quad \psi(\zeta, t) = f(z, t)/z^\alpha, \quad \zeta = z^{\alpha+1}/(\alpha+1).$$

Легко показать, что моменты функции f по переменной z и моменты функции ψ по ζ связаны соотношением [9]

$$(3.2) \quad \langle f \rangle_j = (\alpha+1)^{j/(\alpha+1)} \langle \psi \rangle_{j/(\alpha+1)}.$$

Стационарное уравнение (1.6) имеет интеграл

$$(3.3) \quad \psi_\infty(\zeta) = BC_\infty^n \exp(-\epsilon\zeta/C_\infty),$$

записанный в переменных (3.1), где для определения неизвестного значения пересыщения при равновесии C_∞ при помощи стационарного уравнения (1.7) получаем соотношение

$$(3.4) \quad C_\infty(1+\alpha)^\gamma \langle \psi \rangle_\gamma = B\Gamma(1+\gamma)(1+\alpha)^\gamma C_\infty^{n+\gamma+2} = \epsilon\kappa(C_* - C_\infty)$$

($\gamma = (2-\alpha)/(1+\alpha)$, $\Gamma(z)$ — гамма-функция Эйлера). Из (3.4) легко видеть, что, во-первых, при интересных для практики положительных значениях всех параметров это уравнение однозначно разрешимо относительно C_∞ . Во-вторых, при малых значениях ϵ величина C_∞ также мала и из (3.4) приближенно находим

$$(3.5) \quad C_\infty = \{\epsilon\kappa C_* / [B\Gamma(1+\gamma)(1+\alpha)^\gamma]\}^{1/(n+2+\gamma)}.$$

Данное выражение показывает порядок по ϵ величины C_∞ , а при подстановке в (3.3) также дает порядок для функции $\psi_\infty(\zeta)$.

4. Решение при масштабе времени τ_1 . Как было отмечено выше, решение системы (2.2) — (2.4) приводит к стремлению к нулю при $t \rightarrow \infty$ функции C_0 главного приближения, тогда как f_0 остается конечной величиной. Из уравнения для функции C_1

$$dC_1/dt = -C_0 \langle f_1 \rangle_{2-\alpha} - C_1 \langle f_0 \rangle_{2-\alpha} + \kappa(C_* - C_0)$$

можно ожидать (полное исследование приближения порядка ϵ проводить не будем), предполагая, что $dC_1/dt \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$, конечности C_1 при $t \rightarrow \infty$: $C_1 \rightarrow \kappa C_* / \langle f_0(z, \infty) \rangle_{2-\alpha}$, поэтому естественным порядком при временном масштабе τ_1 будет ϵ для разложения пересыщения и $O(1)$ по ϵ для функции распределения, как это следует из принципа сращивания [17].

Сделаем одно важное замечание. Уравнения (2.2) и полученное ниже (4.4) имеют гиперболический тип, и в силу этого в задачах кристаллизации влияние начального и граничного условий по переменным t и z и т. п. в известной степени распространяется каждое в своей области. Эти области разделены характеристикой, выходящей из начала координат $dz/dt = C$, $z|_{t=0} = 0$ (рис. 1). Аналогичные задачи обсуждаются, например, в [19]. Данная характеристика на рис. 1 обозначена λ , что будет использоваться в дальнейшем. На самом деле определенное «взаимодействие» решений друг с другом в каждой из этих областей все же имеет место посредством функции C , которая едина для всего объема двухфазной системы. Важно, что масштабы

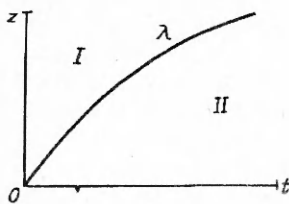


Рис. 1

величины f в каждой из двух областей определяются своим дополнительным условием. Если для решения п. 2 это было незаметно, поскольку там принято, что порядки начального и граничного условий одинаковы, то при переходе к временным масштабам τ_1 , когда $C = O(\epsilon)$, граничное условие (1.8) диктует следующий порядок для функции распределения: $f = O(\epsilon^n)$. Это относится только к области II на рис. 1, тогда как рассуждения предыдущего абзаца относятся к области I, и именно для нее осуществляется сращивание по временной переменной. Таким образом, приходим к необходимости основное приближение при временах порядка τ_1 строить в форме

$$(4.1) \quad C(T) = \epsilon C^*(T) + \dots, \quad f^* = \begin{cases} f_I^*(z, T) + \dots & \text{для зоны I,} \\ \epsilon^n f_{II}^*(z, T) + \dots & \text{для зоны II,} \end{cases}$$

где звездочка сверху помечает разложения при масштабе τ_1 . Подставляя (4.1) в (1.6)—(1.8), записанные при $T = \epsilon t$ в виде

$$(4.2) \quad \partial f / \partial T + (C/\epsilon) \partial (f/z^\alpha) / \partial z = -f(z, T);$$

$$(4.3) \quad dC/dT = - (C/\epsilon) \int_0^\infty z^{2-\alpha} f(z, T) dz + \kappa (C_* - C),$$

приходим в главном приближении к задаче

$$(4.4) \quad \partial f^* / \partial T + C^* \partial (f^*/z^\alpha) / \partial z = -f^*(z, T);$$

$$(4.5) \quad C^*(T) \int_0^\infty z^{2-\alpha} f^*(z, T) dz = \kappa C_* = C^*(T) \langle f^* \rangle_{2-\alpha};$$

$$(4.6) \quad f_I^*|_{T=0} = f_0(z, \infty), \quad f_{II}^*/z^\alpha|_{z=0} = B(C^*)^n.$$

Уравнение (4.3) в главном приближении приняло «стационарную» форму (4.5), и поэтому для C^* не нужно начальное условие. Начальное условие для уравнения (4.4) получено при помощи процедуры предельного сращивания [17]. Уравнение (4.4) записывается одинаково для областей I и II, поэтому нижние индексы там опущены. Момент $\langle f^* \rangle_{2-\alpha}$ будет состоять из двух частей:

$$(4.7) \quad \langle f^* \rangle_{2-\alpha} = \int_\lambda^\infty z^{2-\alpha} f_I(z, T) dz + \int_0^\lambda z^{2-\alpha} f_{II}(z, T) dz.$$

Здесь функция $\lambda(T)$ — та самая, разделяющая две области характеристика (см. рис. 1), которая определяется уравнением

$$(4.8) \quad d\lambda/dT = C^*, \quad \lambda|_{T=0} = 0.$$

Далее будем считать, что $C_* \neq 0$, иначе задача заметно упростится, поскольку из (4.5) получим $C^* = 0$, и уравнение (4.4), по существу, станет обыкновенным дифференциальным.

Задача (4.4)—(4.6) не является окончательной в том смысле, что ее решение не выходит на стационарный режим (3.3). Дело в том, что со временем значимость слагаемых в (4.7) меняется. Если на начальном этапе по времени вторым слагаемым (порядка ϵ^n) можно пренебречь, то далее механизм удаления частиц из системы (последнее слагаемое в (4.4)) приводит к заметному убыванию функции f_I^* . Это, так же как и рост нижнего предела $\lambda(T)$ в первом интегральном слагаемом (4.7), приводит к его уменьшению. Второе же слагаемое в (4.7) постепенно «подпитывается» за счет нуклеации, что выражает граничное условие (4.6). При достаточно больших значениях времени его роль становится доминирующей и именно решение в области II рис. 1 со временем переходит в решение для стационарного режима. Формулы (3.3) и (3.5) показывают, какие порядки основных переменных должны установиться при выходе на стационарное решение. Эти порядки не совпадают с выбранными в (4.1), т. е. соотношения (4.4)—(4.6) описывают промежуточную стадию развития процесса.

Если пренебречь решением в области I' как малым по сравнению с решением в области I и перейти к переменным типа (3.1) для f^* и z , то задача (4.4) — (4.6) запишется в виде

$$(4.9) \quad \partial \psi^* / \partial T + (d\lambda / dT) \partial \psi^* / \partial \zeta = -\psi^*;$$

$$(4.10) \quad \langle \psi^* \rangle_\gamma = \omega dT / d\lambda, \quad \omega = \kappa C_* / (1 + \alpha)^\gamma;$$

$$(4.11) \quad \psi^* |_{T=0} = \psi_0(\zeta, \infty) = f_0(z, \infty) / z^\alpha, \quad \psi^* |_{\zeta=0} = 0,$$

где использованы формулы (3.2) и (4.8). Функция распределения выражается после решения уравнения (4.9) (в котором временно функция $\lambda(T)$ считается известной) зависимостью

$$(4.12) \quad \psi^*(\zeta, T) = \exp(-T) \psi_0[\zeta - \lambda(T)] H[\zeta - \lambda(T)]$$

($H(z) = \begin{cases} 1, & z > 0, \\ 0, & z < 0 \end{cases}$ — функция Хевисайда). Вычисление момента порядка γ от функции ψ^* (4.12) и подстановка результата в (4.10) приводят к уравнению для определения зависимости $\lambda(T)$:

$$(4.13) \quad \omega dT / d\lambda = \exp(-T) \int_0^\infty [\zeta + \lambda(T)]^\gamma \psi_0(\zeta, \infty) d\zeta, \quad T|_{\lambda=0} = 0;$$

оно имеет следующее решение:

$$(4.14) \quad T = \ln \left\{ 1 + \frac{1}{\omega(1+\gamma)} \int_0^\infty \psi_0(\xi, \infty) [(\xi + \lambda)^{\gamma+1} - \xi^{\gamma+1}] d\xi \right\},$$

в чем можно убедиться непосредственной проверкой. Формулы (4.12) и (4.14) решают задачу (4.9) — (4.11) в параметрическом виде через параметр λ . Достаточно просто выглядит и выражение для моментов произвольного порядка j :

$$(4.15) \quad \langle \psi^* \rangle_j = \int_0^\infty \psi_0(\xi, \infty) (\xi + \lambda) d\xi \left\{ 1 + \frac{1}{\omega(1+\gamma)} \int_0^\infty \psi_0(\xi, \infty) \times \right. \\ \left. \times [(\xi + \lambda)^{\gamma+1} - \xi^{\gamma+1}] d\xi \right\}^{-1}.$$

Не конкретизируя классы функций $\psi_0(\zeta, \infty)$, на простейших примерах можно убедиться, что функция $\lambda(T)$ монотонно (монотонность очевидна из (4.13)) стремится к бесконечности со временем, что согласуется со сказанным ранее. При помощи (4.14) несложно также проследить эволюцию моментов (4.15) во времени.

Особенностью рассматриваемой задачи является то, что при одном и том же временном масштабе τ_1 происходит заметное изменение порядков по ϵ искомых величин. Имея целью получение основного приближения к решению проблемы, нет необходимости строить дополнительные разложения и т. п., достаточно в соответствующих уравнениях не делать предельного перехода $\epsilon \rightarrow 0$ в тех случаях, когда подобным образом упрощенные слагаемые в определенном диапазоне изменения параметров все же существенно проявляют себя. В данной задаче такая концепция приводит при временах порядка τ_1 к системе уравнений (4.9) — (4.11) при замене правой части граничного условия выражением $B(\epsilon C^*)^\alpha$. Эту систему можно записать единым уравнением для функции ψ , у которой, так же как и у величины C , для простоты записи далее звездочку сверху ставить не будем. Таким образом, задачу эволюции кристаллизуемой системы при временах порядка τ_1 запишем в виде

$$(4.16) \quad \partial \psi / \partial T + \omega \langle \psi \rangle_\gamma^{-1} \partial \psi / \partial \zeta = -\psi;$$

$$(4.17) \quad \psi |_{T=0} = \psi_0(\zeta, \infty), \quad \psi |_{\zeta=0} = B[\epsilon \omega / \langle \psi \rangle_\gamma]^\alpha.$$

Как и ранее, для функции распределения получаем выражение

$$(4.18) \quad \psi^*(\zeta, T) = \exp(-T) \psi_0 [\zeta - \lambda(T)] H[\zeta - \lambda(T)] + \\ + B\epsilon^n \int_0^T [C(x)]^n \delta[\zeta - \lambda(T) + \lambda(x)] \exp(x) dx.$$

Основное значение для замыкания задачи имеет момент порядка γ :

$$(4.19) \quad \langle \psi \rangle_\gamma = \exp(-T) \left\{ \int_0^\infty [\zeta + \lambda(T)]^\gamma \psi_0(\zeta, \infty) d\zeta + \right. \\ \left. + B\epsilon^n \int_0^T [C(x)]^\gamma [\lambda(T) - \lambda(x)]^\gamma \exp(x) dx \right\}.$$

Другие моменты также находятся из (4.19) заменой γ на соответствующий индекс.

Уравнение (4.19) в совокупности с соотношениями (4.5), (4.8) (или (4.10)) является основным уравнением задачи. Заметим, что (4.19) можно, используя (4.5) и (4.8), записать как одно уравнение для определения функции $\lambda(T)$. После того как эта функция найдена, решение представляется формулой (4.18), а любой интересующий момент — (4.19) (при замене γ на j).

Важно отметить, что момент порядка $\gamma + 1$ по ζ , т. е. третий, согласно (3.2), по z можно определить из соотношений (4.16), (4.17) и без решения системы (4.19), (4.3), (4.8). Действительно, умножив (4.16) на $\zeta^{1+\gamma}$ и проинтегрировав по ζ в пределах $(0, \infty)$, получим уравнение

$$d \langle \psi \rangle_{1+\gamma} / dT = \omega(\gamma + 1) - \langle \psi \rangle_{1+\gamma},$$

интегрирование которого дает

$$\langle \psi \rangle_{1+\gamma} = \omega(\gamma + 1) + [\langle \psi_0(\zeta, \infty) \rangle_{1+\gamma} - \omega(\gamma + 1)] \exp(-T).$$

Данное обстоятельство особенно интересно для практики, поскольку третий момент функции f пропорционален суммарному объему кристаллов. Иногда знание только этой величины и требуется.

Уравнение (4.19) заметно упрощается при целых γ . Покажем, что в этом случае решение всей задачи сводится к интегрированию нелинейной системы обыкновенных дифференциальных уравнений для моментов. Так, число кристаллов определяется уравнением, полученным интегрированием (4.16) по ζ в пределах $(0, \infty)$:

$$(4.20) \quad d \langle \psi \rangle_0 / dT = B\epsilon^n \omega^{n+1} / \langle \psi \rangle_\gamma^{n+1}.$$

Далее, легко заметить, что моменты с индексами, отличающимися на единицу, связаны дифференциальным соотношением

$$(4.21) \quad d \langle \psi \rangle_k / dT = \omega k \langle \psi \rangle_\gamma^{-1} \langle \psi \rangle_{k-1} - \langle \psi \rangle_k, \quad k \geq 1,$$

т. е. при целом γ , начиная с уравнения (4.21) при $k = \gamma$, последовательно переходим к уравнению с $k = \gamma - 1$ и т. д. вплоть до $k = 1$. Эти k уравнений вместе с (4.20) образуют замкнутую систему, начальные условия к которой получаются вычислением соответствующих моментов функции $\psi_0(\zeta, \infty)$ (4.17). После интегрирования данной системы из (4.5) находится пересыщение, а присутствующий в расчетных формулах параметр λ определяется простой квадратурой (4.8).

5. Устойчивость стационарного решения. Поскольку известно [10—12, 14], что процесс кристаллизации может протекать в автоколебательном режиме, остается открытым вопрос, является ли стационарное решение (3.3), (3.5) устойчивым. В данном случае, так как мы использовали предельное упрощение $\epsilon \rightarrow 0$ при переходе от (3.4) к (3.5), речь пойдет о временных возмущениях с характерным временем τ_1 , т. е. об устойчивости стационарного решения задачи (4.16), (4.17).

Подставим выражение $\psi = \psi_\infty(\zeta) + \hat{\psi}(\zeta) \exp(pT)$ в уравнение (4.16) и граничное условие (4.17). Считая возмущение решения $\hat{\psi}$ малым по срав-

нению с ψ_∞ , линеаризуем получившееся уравнение в окрестности ψ_∞ . Для определения возмущения ψ имеем задачу

$$p\dot{\psi} + \frac{\omega}{\langle \psi_\infty \rangle_\gamma} \frac{d\psi}{d\xi} - \frac{\omega \langle \psi \rangle_\gamma}{\langle \psi_\infty \rangle_\gamma^2} \frac{d\psi_\infty}{d\xi} = \hat{\psi}, \quad \hat{\psi}|_{\xi=0} = \frac{Bn (\omega \varepsilon)^n}{\langle \psi_\infty \rangle_\gamma^{n+1}} \langle \hat{\psi} \rangle_\gamma.$$

После несложных, но длинных выкладок приходим к уравнению для нахождения частотного параметра p :

$$(5.1) \quad (p+1)^{\gamma+2} + np = 1.$$

Очевидно, что одним из корней (5.1) является точка $p=0$. Она лежит на границе области устойчивости и не зависит от параметров γ и n . Возможная потеря устойчивости решения в данной точке связана с появлением в ней корня (5.1) второго порядка, что будет при $\gamma+2+n=0$. Это равенство не реализуется при обычно используемых на практике значениях $\gamma > 0$, $n > 0$, однако определенный интерес все же представляет для нисходящих ветвей ($n < 0$) функции, описывающей нуклеацию в связи с эффектом Таммана [14, 20]. При целых значениях γ уравнение (5.1) представляет собой классическую проблему определения корней полинома. По вопросам анализа положения этих корней в плоскости p , что актуально для задачи устойчивости стационарного решения, имеется ряд теорем и методов общего характера [21], часто не требующих вычисления самих корней полинома.

В более общей ситуации для определения границы области устойчивости подставим в (5.1) $p=iv$, где v вещественно, и отделим действительную и мнимую части получившегося выражения. В результате имеем два соотношения ($\varphi = \arctg v$):

$$(5.2) \quad \cos [(\gamma+2)\varphi] = \cos^{\gamma+2} \varphi, \quad n \operatorname{tg} \varphi + \operatorname{tg} [(\gamma+2)\varphi] = 0.$$

В силу вещественности коэффициентов в (5.1) и вытекающей из нее симметрии относительно смены знака Φ в выражениях (5.2) достаточно рассмотреть интервалы $v \geq 0$ или $\varphi \in (0, \pi/2)$.

В зависимости от значения параметра γ соотношения (5.2) будут давать несколько ветвей, которые разбивают всю плоскость (γ, n) на чередующиеся области устойчивости и неустойчивости стационарного решения. Физическое значение имеет достаточно ограниченное их число. Это связано как с положительностью параметров γ и n , так и с их изменением в ограниченных интервалах. Большинство работ по данной тематике содержат эти параметры не выходящими из диапазонов $\gamma \in (0, 5)$, $n \in (0, 15)$, хотя встречаются и варианты, когда $\alpha \rightarrow -1$, т. е. $\gamma \rightarrow \infty$.

Основной интерес представляет ветвь, имеющая линию $\gamma=1$ вертикальной асимптотой (рис. 2, кривая 1). Естественно, что речь может идти только о ветвях первого квадранта плоскости (γ, n) . В демонстративных целях на рис. 2 представлена еще одна ветвь (линия 2), существующая при $\gamma > 5$ ($\gamma=5$ — ее вертикальная асимптота). Она проходит в области достаточно

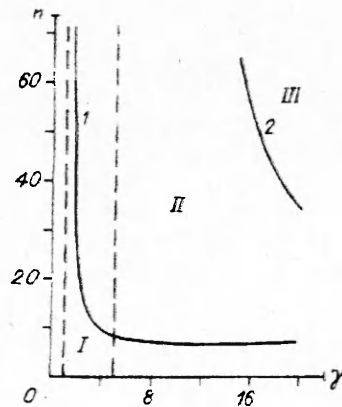


Рис. 2

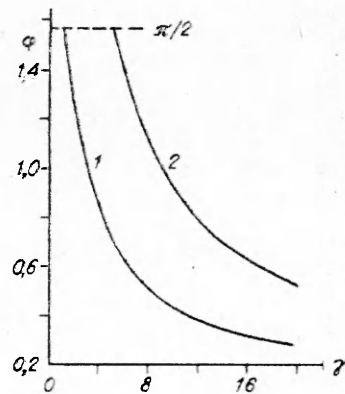


Рис. 3

больших с точки зрения приложений значений параметров. В нашей проблеме ее значение, по-видимому, невелико. Но в других задачах данной проблематики вполне может оказаться, что аналогичная ветвь уже должна быть принята во внимание при анализе устойчивости системы.

Кривые 1 и 2 разбивают первый квадрант плоскости (γ, n) на области устойчивости I и III и неустойчивости II. Другие кривые, определяющие линии смены устойчивости, выходят за пределы рис. 2. Отметим, что при $\gamma \rightarrow 1$ показатель степени n на первой линии рис. 2 имеет асимптотическое значение $n \cong (36/\pi^2)/(\gamma - 1)^2$, а при $\gamma \rightarrow \infty$ — $n \cong \gamma^{1/2}$. Последнее асимптотическое равенство пригодно для расчетов при γ порядка нескольких сотен, т. е. малополезно на практике. В приведенном на рис. 2 диапазоне изменения параметра γ появляется только незначительное возрастание n .

На рис. 3 представлены графики переменной φ , связанной с ν соотношением $\nu = \operatorname{tg} \varphi$. Номера кривых на рис. 3 соответствуют ветвям 1 и 2 рис. 2. Данные кривые позволяют определить частоту автоколебаний в момент их возникновения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Нигматулин Р. И. Основы механики гетерогенных сред. — М.: Наука, 1978.
2. Дорохов И. Н., Кафаров В. В., Кольцова Э. М. Уравнения термогидромеханики двухфазной полидисперсной среды с фазовыми переходами при непрерывном распределении частиц по размерам // ПМТФ. — 1978. — № 1.
3. Дорохов И. Н., Кафаров В. В., Кольцова Э. М. Уравнения термогидромеханики для описания процессов массовой кристаллизации из растворов и газовой фазы // ПМТФ. — 1981. — № 6.
4. Буйков М. В. Испарение полидисперсного тумана // Коллоидн. журн. — 1962. — Т. 24, № 4.
5. Бувич Ю. А. О кинетике массобмена полидисперсной системы частиц с окружающей средой // ПМТФ. — 1966. — № 1.
6. Лукин А. Я., Степанов А. М. Динамика формирования аэрозоля из пересыщенного пара // ПМТФ. — 1984. — № 3.
7. Мошинский А. И., Сибирев М. И. Массовая кристаллизация с учетом пульсаций скорости роста кристаллов // ПМТФ. — 1984. — № 6.
8. Берлинер Л. Б. Кинетика кристаллизации солей из пересыщенных растворов // ЖФХ. — 1974. — Т. 48, № 3.
9. Мошинский А. И. Некоторые случаи кристаллизации солей из растворов // ТОХТ. — 1984. — Т. 18, № 4.
10. Lie S. J., Shinnar R., Katz S. The stability and dynamic behavior of a continuous crystallizer with a fines trap // AIChE J. — 1971. — V. 17, N 6.
11. Anshus V., Ruckenstein E. On the stability of a well stirred isothermal crystallizer // Chem. Eng. Sci. — 1973. — V. 28, N 2.
12. Берлинер Л. Б., Горин В. Н. Исследование динамики непрерывного изотермического кристаллизатора // ТОХТ. — 1973. — Т. 7, № 5.
13. Бувич Ю. А., Мансуров В. В. К теории ударного кипения // ИФЖ. — 1984. — Т. 47, № 6.
14. Бувич Ю. А., Мансуров В. В., Наталуха И. А. Слабонелинейные автоколебания при кристаллизации в объеме // ИФЖ. — 1985. — Т. 49, № 2.
15. Литуновский Н. И., Тодес О. М. Кинетика роста кристаллов в области, лимитируемой скоростью молекулярной диффузии // ЖТФ. — 1953. — Т. 23, вып. 7.
16. Чернов А. А., Гиваргизов Е. И., Багдасаров Х. С. и др. Современная кристаллография. Т. 3. Образование кристаллов. — М.: Наука, 1980.
17. Коул Дж. Методы возмущений в прикладной математике. — М.: Мир, 1972.
18. Тодес О. М., Себалло В. А., Гольцикер А. Д. Массовая кристаллизация из растворов. — Л.: Химия, 1984.
19. Годунов С. К. Уравнения математической физики. — М.: Наука, 1971.
20. Кидияров Б. И. Кинетика образования кристаллов из жидкой фазы. — Новосибирск: Наука, 1979.
21. Лаврентьев М. А., Шабат Б. В. Методы теории функций комплексного переменного. — М.: Наука, 1973.

г. Санкт-Петербург

Поступила 20/IV 1992 г.,
в окончательном варианте — 18/XI 1992 г.