

Конвективный теплоперенос в термостате при кристаллизации фосфатов из растворов

А.И. Федюшкин

ФГБУН Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН

E-mail: fai@ipmnet.ru

DOI:

Проведено математическое моделирование массопереноса при выращивании кристаллов октакальций фосфата $\text{Ca}_8\text{H}_2(\text{PO}_4)_6$ и гидроксиапатита $\text{Ca}_{10}(\text{OH})_2(\text{PO}_4)_6$ во время смешивания водных растворов CaCl_2 и $\text{KH}_2\text{PO}_4 + \text{K}_2\text{HPO}_4$ в буферном растворе KCl с учетом стехиометрического соотношения. Исследования проведены для условий невесомости, микрогравитации и нормальной гравитации. В работе показано влияние гравитации на характер переноса компонент реакции при кристаллизации фосфата кальция в термостатированных условиях.

Ключевые слова: кристаллизация из раствора, термостат, конвекция, микрогравитация, численное моделирование.

Фосфаты кальция составляют основу костного материала и широко используются в пищевой промышленности. Жизненно важный интерес к производству и свойствам фосфата кальция вызван вследствие оценки их влияния на деятельность желудочно-кишечного тракта и сердца человека.

Ранее проведенные эксперименты на Земле и в космосе по программе EURECA (1992-1993) по кристаллизации фосфатов кальция из растворов CaCl_2 и $\text{KH}_2\text{PO}_4 + \text{K}_2\text{HPO}_4$ показали, что размер кристаллов гидроксиапатита, выращенных в условиях невесомости, в десять - сто раз больше, чем у их земных аналогов [1-3]. Такое большое отличие в размерах, выращенных кристаллов, указывает на то, что массоперенос в космическом и земном эксперименте был различным.

Математическое моделирование основано на численном решении двумерных нестационарных нелинейных уравнений Навье-Стокса для несжимаемой жидкости в приближении Буссинеска и уравнений конвективного переноса тепла и массы для двух компонент роста, находящихся в растворе KCl . Образование фосфатов кальция моделировалось на основе химической реакции между компонентами с учетом выбора скоростей химической реакции и с учетом стехиометрического соотношения. Решение данной задачи осуществлялось с помощью конечно-разностного комплекса программ [5].

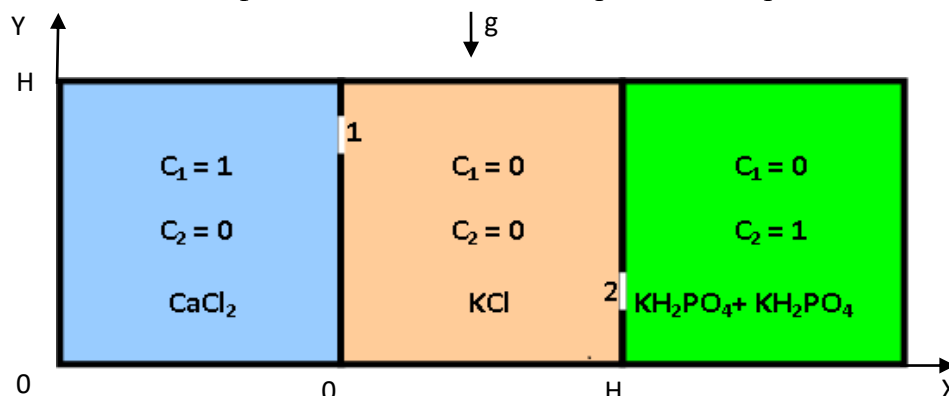
В данной работе рассмотрены всевозможные механизмы перемешивания растворов: за счет диффузии, тепловой, концентрационной и тепло-концентрационной конвекции с учетом химической реакции и баланса массы. Приводятся результаты параметрических расчетов для разных значений чисел Грасгофа (Gr), определяющих интенсивность конвекции, включая условия невесомости, микрогравитации и земные условия. Показано влияние гравитационных условий на динамику и характер образования фосфатов кальция [7].

Космические и земные эксперименты проходили в одинаковых и хорошо термостатированных резервуарах, состоящих из трех частей, заполненных различными растворами. Схема расположения резервуаров и начальные концентрации компонент кристаллизации и буферного раствора показаны на фиг. 1. Расчетная область математической модели являлся средним квадратом, изображенный на фиг. 1.

В левой части находится резервуар, содержащий CaCl_2 , в правой части находится резервуар, содержащий раствор $\text{KH}_2\text{PO}_4 + \text{K}_2\text{HPO}_4$, средняя камера полностью заполнена буферным раствором KCl . Средний резервуар является реактором, где и происходит образование фосфата кальция. После одновременного открытия на вертикальных стенках реактора отверстия "1" – слева и "2" – справа (фиг.1) происходит взаимодействие

растворов (CaCl_2) – компонента C_1 и ($\text{KH}_2\text{PO}_4 + \text{K}_2\text{HPO}_4$) – компонента C_2 с образованием продукта реакции – фосфата кальция – компонента C_3 .

В математической модели расчетной областью является средняя квадратная область, представленная на фиг. 1. Это область, где происходит кристаллизация фосфата



Фиг. 1. Схема расположения резервуаров и начальные концентрации реагентов в экспериментах [1-3] и в математической модели (средняя квадратная область – реактор и является расчетной в математической модели).

кальция из компонентов, поступающих из правого и левого резервуаров через мгновенно открывающиеся в начальный момент отверстия «1» и «2» фиг. 1.

В математической модели были приняты следующие предположения:

1) расчетная область является квадратной (со стороной равной H), вектор силы тяжести \mathbf{g} направлен параллельно оси Y (фиг. 1), теплофизические свойства растворов и кинетические свойства химической реакции в течение всего процесса предполагаются постоянными,

2) вхождение компонент реакции в реактор с раствором через отверстия «1» и «2» (фиг.1) происходит диффузионным способом,

3) химическая реакция происходит мгновенно при взаимодействии компонент в стехиометрическом соотношении 5/3,

4) не учитывается возможность образования нескольких модификаций фосфатов кальция, моделируется изменение концентраций C_1 и C_2 с образованием продукта кристаллизации - фосфата кальция с концентрацией C_3 ,

5) рассматривается влияние на конвективный массоперенос только компонент реакции, а осаждение и конвективный перенос фосфата кальция (образовавшихся кристаллов - продукта C_3) происходит пассивно, то есть, в данной модели характер и динамика конвективного течения в основном определяются тепловой конвекцией за счет тепловыделения и концентрационной конвекцией компонент кристаллизации (C_1 и C_2). Диффузией образовавшихся кристаллов C_3 пренебрегалось.

Математическая модель основана на решении системы двумерных нестационарных уравнений Навье-Стокса для несжимаемой жидкости в приближении Буссинеска и уравнений переноса тепла и массы, которые в декартовой системе координат, в безразмерном виде, в переменных: ψ - функция тока, ω - вихрь, T - температура, C_1 , C_2 , C_3 - концентрации, можно записать в следующем виде [4,5]

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\omega \quad (1)$$

$$\frac{d\omega}{dt} = \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} + \text{Gr} \frac{\partial T}{\partial x} + \text{Gr}_{1c} \frac{\partial C_1}{\partial x} + \text{Gr}_{2c} \frac{\partial C_2}{\partial x} \quad (2)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{\text{Pr}} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + f_1 \quad (3)$$

$$\frac{dC_1}{dt} = \frac{1}{Sc_1} \left(\frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_1}{\partial y^2} \right) + f_2 \quad (4)$$

$$\frac{dC_2}{dt} = \frac{1}{Sc_2} \left(\frac{\partial^2 C_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_2}{\partial y^2} \right) + f_3 \quad (5)$$

$$\frac{dC_3}{dt} = f_4 \quad (6)$$

Здесь и далее приняты следующие обозначения: $d/dt = \partial/\partial t + u\partial/\partial x + v\partial/\partial y$ - оператор полной производной по времени, x и y - горизонтальная и вертикальная координаты, t - время, $u = \partial\psi/\partial y$ и $v = -\partial\psi/\partial x$ - компоненты вектора скорости в направлении x и y , соответственно, T - температура, C_1 , C_2 , C_3 - концентрации. Задача характеризуется следующими безразмерными параметрами подобия: числами Грасгофа: $Gr = g\beta_T\Delta TH^3/\nu^2$, $Gr_{1c} = g\beta_{1c}\Delta C_1 H^3/\nu^2$, $Gr_{2c} = g\beta_{2c}\Delta C_2 H^3/\nu^2$, числом Прандтля $Pr = \nu/a$ и числами Шмидта: $Sc_1 = \nu/D_1$, $Sc_2 = \nu/D_2$, где ΔT , ΔC_1 , ΔC_2 , - характерные масштабы температуры и концентраций, g - ускорение силы тяжести, коэффициенты β_T , β_{1c} , β_{2c} - коэффициенты теплового и концентрационного расширения, ν - кинематической вязкости, a - температуропроводности, D_1 , D_2 - диффузии. В данной работе в уравнениях (1-6) в качестве масштабов длины, скорости и времени выбраны следующие значения: H (высота и ширина расчетной области), ν/H и H^2/ν . Поскольку продукт реакции C_3 образуется в результате химической реакции из компонент C_1 и C_2 в пропорции как 5/3, поэтому правые части уравнений (3) – (6) были взяты следующего вида:

$$\begin{aligned} f_1 &= k_1 \cdot \delta \cdot (5C_1 + 3C_2), f_2 = -k_2 \cdot \delta \cdot 5C_1, \\ f_3 &= -k_3 \cdot \delta \cdot 3C_2, f_4 = k_4 \cdot \delta \cdot (5C_1 + 3C_2) \end{aligned} \quad (7)$$

где k_i - константы, определяемые кинетикой химической реакции [6],

$$\delta = \begin{cases} 1 - \text{если } C_1 \cdot C_2 \neq 0 \\ 0 - \text{если } C_1 \cdot C_2 = 0 \end{cases} \quad (8)$$

Граничные условия имеют следующий вид:

На всех границах (кроме участков границы "1" и "2", см. фиг.1) приняты условия прилипания теплоизоляции и непроницаемости:

$$u = 0, v = 0, \partial T / \partial n = 0, \partial C_i / \partial n = 0, \quad (9)$$

где $i=1,2,3$; n - нормаль к границе,

для отверстия "1" на левой вертикальной границе области

$$(x=0, 0.68 < y < 0.81): C_1 = 1, \quad (10)$$

для отверстия "2" на правой вертикальной границе области

$$(x=1, 0.2 < y < 0.34): C_2 = 1. \quad (11)$$

Предполагается, что поступление компонент в реактор осуществляется диффузионным способом из отверстий "1" и "2" (фиг.1).

$$\text{Начальные условия: } u = 0, v = 0, T = 0, C_1 = 0, C_2 = 0, C_3 = 0 \quad (12)$$

На фиг. 1 указаны начальные условия концентраций в трех резервуарах в экспериментах, а также для расчетной области (средняя квадратная область). Моделирование осуществлялось с помощью 2D конечно-разностного пакета программ со скалярным и матричным «МАРЕНА» решением уравнений Навье-Стокса [4,5].

Отличие результатов космического и земного экспериментов наводят на мысль о том, что в экспериментах по выращиванию фосфата кальция, кроме диффузионного

механизма переноса компонент присутствовали и конвективные механизмы перемешивания, несмотря на термостатирование реакторов.

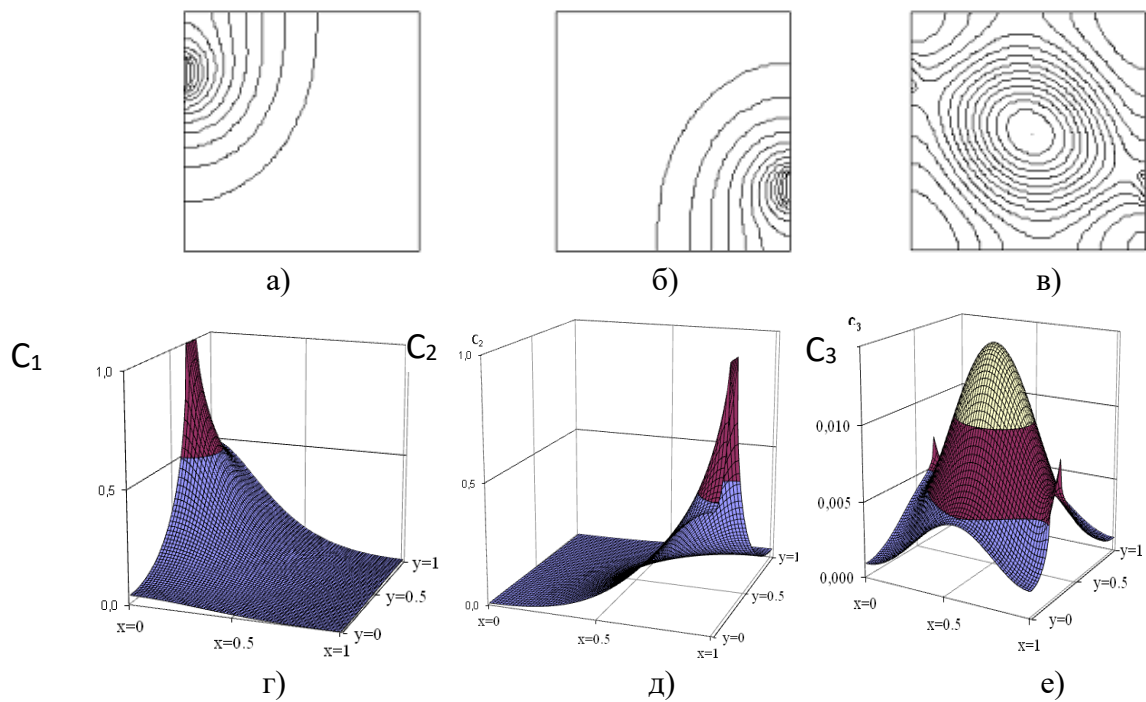
Механизмы появления конвективного переноса могут быть следующими: в процессе диффузионного проникновения компонент C_1 и (или) C_2 в реактор с буферным водным раствором могут возникать неоднородности плотности и появление концентрационной конвекции, а в результате кристаллизации при образовании фосфата кальция C_3 , возможно тепловыделение и появление тепловой конвекции.

В данной работе рассмотрены всевозможные конвективные варианты перемешивания, кроме термокапиллярного, поскольку реактор был полностью заполнен раствором, и в нем не было свободной жидкой поверхности. В работе приведены результаты параметрических численных расчетов переноса примеси с учетом диффузии, тепловой конвекции и концентрационной конвекции для следующих значений параметров: $k_1 = 1$, $k_2 = 1$, $k_3 = 1$, $k_4 = 1$, $Pr = 7$, $Sc_1 = Sc_2 = 25$. Параметрические расчеты были проведены для следующих диапазонов чисел Грасгофа: $0 \leq Gr \leq 10^7$, $0 \leq Gr_{1c} \leq 10^5$, $0 \leq Gr_{2c} \leq 10^5$, где число Gr - определяет интенсивность тепловой конвекции, числа Gr_{1c} , Gr_{2c} - определяют интенсивность концентрационных конвекций, вызванных первой и второй компонентами, соответственно. Влияния величин кинетических коэффициентов k_i на тепломассоперенос может быть значительным [6], но в данной работе это не исследовалось, хотя справочные значения этих величин сильно разнятся. Цель расчетов состояла в том, чтобы проиллюстрировать влияние конвективного перемешивания в термостате на динамику и характер образования фосфата кальция при разных гравитационных условиях (разных значениях чисел Грасгофа).

Диффузия

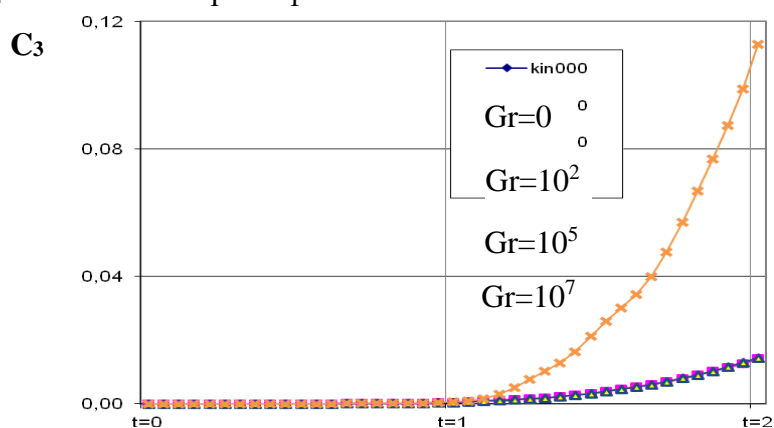
Рассмотрим случай, когда после открытия заслонок "1" и "2" компоненты реакции C_1 и C_2 диффузионным способом движутся навстречу друг другу, и при их встрече начинается реакция по образованию фосфата кальция C_3 . Безразмерное время, необходимое для того, чтобы компоненты C_1 и C_2 достигли друг друга (т.е. для достижения друг друга значениями их концентраций, на уровне тысячных долей), равно приблизительно $t=1$.

На фиг. 2а,б,в представлены изолинии концентраций C_1 , C_2 , C_3 для диффузионного случая (конвекция отсутствует: $Gr = Gr_{1c} = Gr_{2c} = 0$) для безразмерного момента времени $t=2$. На фиг. 2г,д,е для этого же случая представлены поля концентрации C_1 , C_2 , C_3 в виде проекций поверхности их значений (вертикальная координата). Такое представление концентрации позволяет видеть характер распределения значений концентрации во всей области. Диффузионное распределение концентрации C_3 имеет куполообразный характер. Эта поверхность поля значений концентрации имеет симметрию относительно линии, соединяющей участки на вертикальных границах с отверстиями "1" и "2" - места источников компонент реакции C_1 и C_2 . Концентрация C_3 медленно возрастает со временем и к моменту безразмерного времени $t=2$ принимает максимальное значение равное ~ 0.015 , которое расположено в центральной зоне реактора (фиг.2).



Фиг. 2. Изолинии концентраций для диффузионного режима. а, г) - концентрация первой компоненты C_1 ; б, д) - концентрация второй компоненты C_2 ; в, е) - концентрация фосфата кальция (продукта реакции) C_3 .

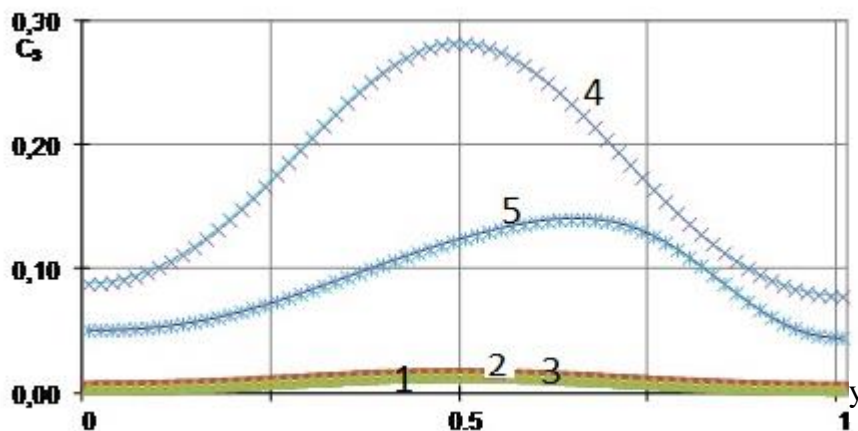
Тепловая конвекция. Возникновение тепловой конвекции в данной задаче имеет пороговый характер. То есть, до встречи компонент реакции C_1 с C_2 и образования фосфата кальция C_3 , их перенос осуществляется диффузионным способом. И только в процессе реакции между компонентами (C_1 , C_2) и образования C_3 возможно выделение скрытой теплоты кристаллизации и вследствие чего появление в растворе градиента температуры и тепловой конвекции. На фиг.3 представлены зависимости максимального значения продукта реакции концентрации C_3 от времени для разных чисел Грасгофа. Из данных зависимостей видно, что до безразмерного времени $t=1$ перенос является диффузионным для всех чисел Грасгофа.



Фиг. 3. Зависимости максимального значения концентрации C_3 от времени для разных чисел Грасгофа.

Следует отметить, что конвективный режим для чисел Грасгофа $0 \leq Gr \leq 10^3$, с точки зрения распределения концентрации фосфата кальция C_3 , практически не

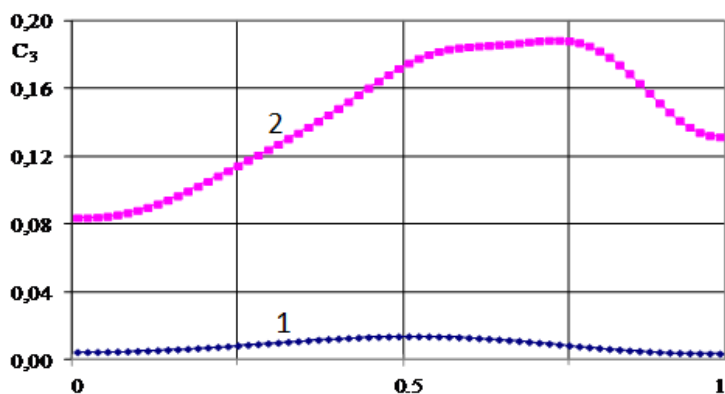
отличается от диффузионного режима, как при малых временах, так и при больших. Это видно из графиков распределения концентрации C_3 в среднем вертикальном сечении ($x=0.5$), представленных на фиг. 4 для безразмерного времени $t=2$ и разных чисел Грасгофа.



Фиг. 4. Распределение концентрации фосфата кальция C_3 в среднем вертикальном сечении ($x=0,5$) при наличии только тепловой конвекции в момент времени $t=2$ при разных числах Грасгофа (1- $Gr=0$, 2 - $Gr=10^2$. 3 - $Gr=10^3$. 4 - $Gr=10^5$. 5 - $Gr=10^7$).

На фиг. 4 представлены профили концентрации фосфата кальция C_3 в среднем вертикальном сечении для пяти значений числа Грасгофа: $Gr = 0, 10^2, 10^3, 10^5, 10^7$. Для первых трех значений Грасгофа вклад тепловой конвекции в массоперенос незначителен и поэтому на данном рисунке профили концентрации фосфата кальция C_3 практически совпадают. Кроме этого на фиг.4 видно, что максимальное значение C_3 нелинейно зависит от числа Грасгофа, то есть образование продукта реакции зависит не только от интенсивности конвективного перемешивания, но и от структуры конвективных потоков. Интенсивность тепловой конвекции зависит от времени и может иметь нестационарный характер. Результаты расчетов показали, что для данной задачи уже при числе $Gr = 10^5$ тепловая конвекция имеет нестационарный характер: вначале возникает вертикальная двухвихревая структура конвекции, которая при увеличении времени меняется на одновихревую и затем снова на двухвихревую, но уже горизонтальную структуру. Таким образом, может затрудняться (запираться) массоперенос для встречи компонент реакции C_1 с C_2 и образования фосфата кальция C_3 . Кроме этого данный процесс нестационарный и результаты моделирования показали сильную зависимость концентрации C_3 от времени, что видно на фиг.5, где представлены профили концентрации C_3 для двух моментов времени $t = 2$ и $t = 4$ при $Gr = 10^5$. Результаты численных расчетов показали, что тепловая конвекция интенсифицирует транспорт компонент реакции C_1 и C_2 друг к другу при $Gr > 10^3$. Интенсивность транспортировки компонент реакции при наличии только тепловой конвекции в данной задаче зависит от величины тепловыделения и продолжительности химической реакции, а также от структуры конвекции. Структура конвективного перемешивания может быть одновихревой и многвихревой. Образование многвихревых структур может замедлять транспорт компонент реакции друг к другу и уменьшать производительность продукта C_3 . В связи с этим важно отметить, что поля концентраций при больших значениях числа Грасгофа $Gr > 10^5$ при больших временах ($t > 1$) изменяются во времени и в пространстве

сложным образом, в отличие от диффузионного режима, и имеют максимум C_3 в зависимости от величины числа Грасгофа, например, как работе [8].



Фиг. 5. Распределение концентрации фосфата кальция в среднем вертикальном сечении ($x=0,5$) при наличии только тепловой конвекции ($Gr=10^5$) для двух моментов времени (линия 1 - $t=2$ и линия 2 - $t=4$).

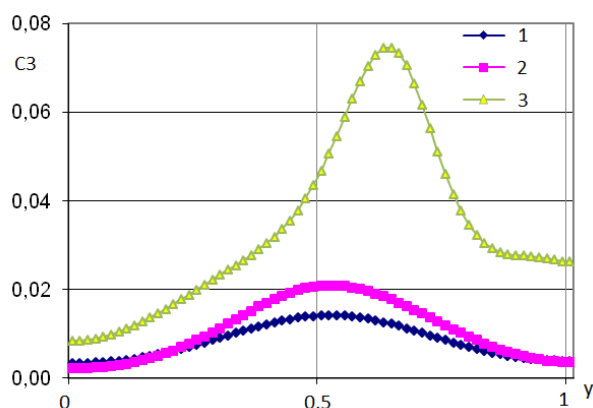
Концентрационная конвекция. В этом разделе рассмотрим случай концентрационной конвекции без учета тепловой конвекции ($Gr=0$). В отличие от тепловой конвекции концентрационная конвекция возникает сразу же после открытия шторок "1" и "2" и поступления в реактор компонент C_1 и C_2 . Возникновение конвекции (градиента плотности отличного от нуля) может быть вызвано изменением концентрации, как одного из компонент, так одновременным изменением концентрации обоих компонент. Другими словами, в данной задаче может быть два генератора концентрационной конвекции. Интенсивность концентрационной конвекции определяется значениями концентрационных чисел Грасгофа Gr_{1C} и Gr_{2C} , величины которых в общем случае не совпадают.

В случае, когда границы реактора с участками поступления компонент C_1 и C_2 ("1" и "2") расположены не перпендикулярно вектору силы тяжести (или главному вектору микро-перегрузки), концентрационная конвекция появляется при любом значении концентрационного числа Грасгофа, отличном от нуля. В космическом полете вектор микро-ускорений меняется, поэтому интенсивность конвекции будет отслеживать эти изменения.

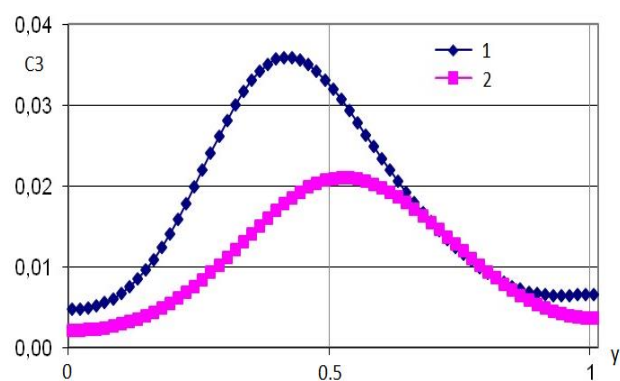
Когда величина одного из концентрационных чисел Грасгофа равна нулю, а величина другого не превышает 10^5 в области образуется одновихревое конвективное течение с направлением движения по часовой стрелке при $Gr_{1C} \neq 0$ и $Gr_{2C} = 0$, и против часовой стрелке при $Gr_{1C} = 0$ и $Gr_{2C} \neq 0$. С увеличением величины концентрационного числа Грасгофа поле концентрации, за счет наличия конвекции, стратифицируется по вертикали, и вихревая структура конвективного течения стремится к горизонтальному расположению, в отличие от случая тепловой конвекции. При числах Грасгофа отличных от нуля ($Gr_{1C} \neq 0$ и $Gr_{2C} \neq 0$) вертикальное концентрационное расслоение усугубляется, что уменьшает транспорт друг к другу компонент C_1 и C_2 , необходимых для химической реакции и образования фосфата кальция C_3 .

Профили концентрации фосфата кальция C_3 в среднем вертикальном сечении ($x=0,5$) для трех значений концентрационного числа Грасгофа $Gr_{1C}=10^2$, 10^3 и 10^5 представлены на фиг. 6. Сравнение кривых фиг.6 показывает, что с увеличением

концентрационного числа Грасгофа интенсивность переноса реагентов увеличивается и, как следствие, увеличивается количество фосфата кальция C_3 .



Фиг. 6. Профили концентрации фосфата кальция C_3 в среднем вертикальном сечении ($x=0.5$) для трех значений концентрационного числа Грасгофа (линия 1 - $Gr_{1C}=10^2$, линия 2 - $Gr_{1C}=10^3$ и линия 3 - $Gr_{1C}=10^5$).

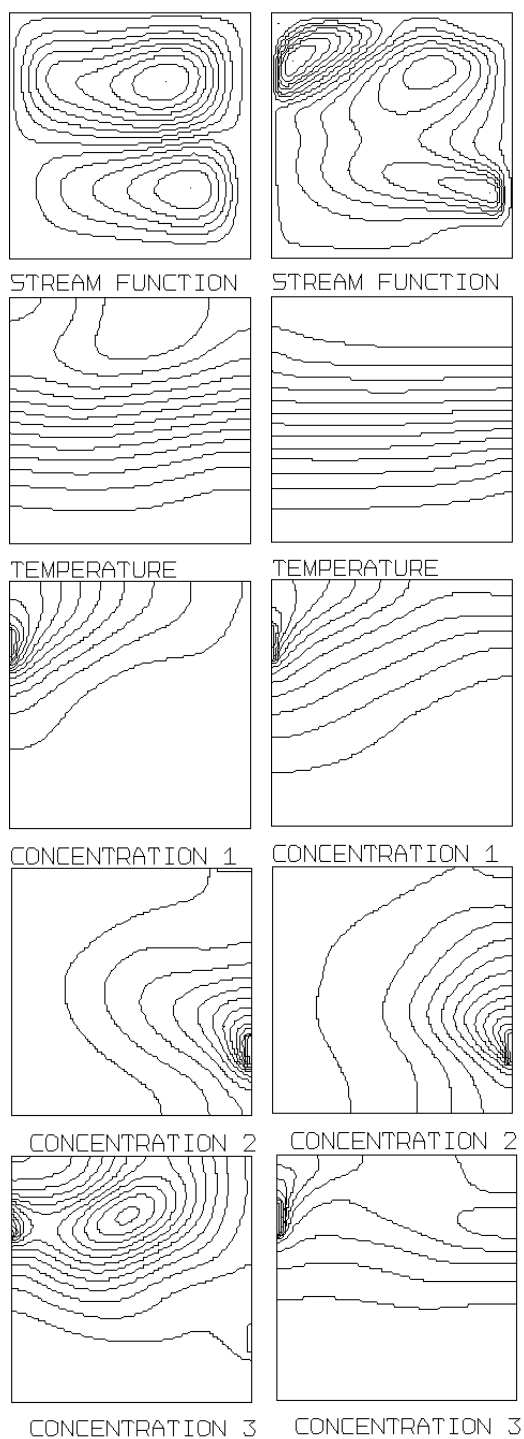


Фиг. 7. Профили концентрации C_3 в среднем вертикальном сечении ($x=0.5$) для термо-концентрационной конвекции (линия 1 - $Gr=10^5$, $Gr_{2C}=10^3$ и линия 2 - $Gr=10^5$, $Gr_{1C}=10^3$).

Термо-концентрационная конвекция. Рассмотрим общий случай, когда присутствуют одновременно тепловая и концентрационная конвекция. Данный случай конвективного течения в литературе иногда называют двойной диффузией, изучению которой посвящено много работ, например, конвективному перемешиванию морской воды. Одновременное наличие тепловой и концентрационной конвекции интенсифицирует конвективное течение и в земных условиях увеличивает стратификацию примеси в растворе вследствие образования многовихревого слоистого характера конвективного течения. При конвективном перемешивании возможно наличие слоистых конвективных структур, усугубляющих расслоение компонент в объеме реактора и затрудняющих перенос компонент реакции друг к другу из-за многовихревой структуры течения, например, например, как это показано на фиг. 8.

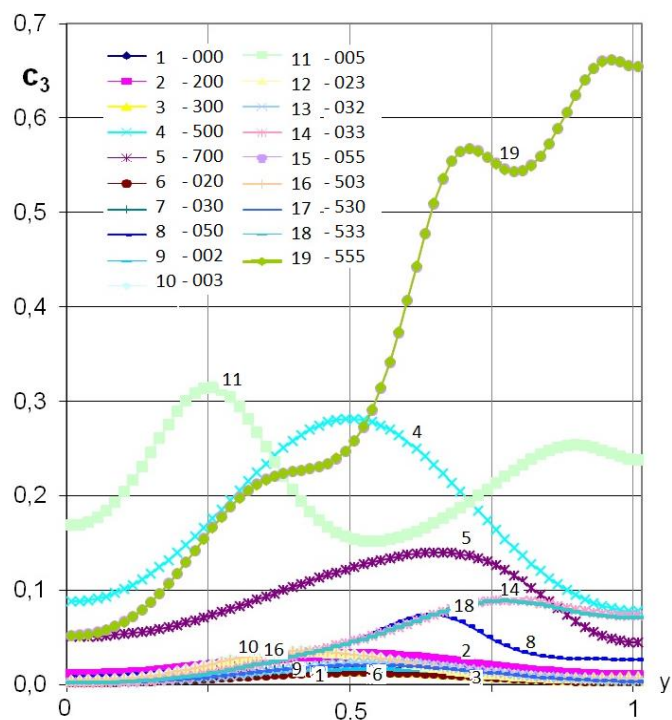
На фиг. 7 показаны профили концентрации фосфата кальция C_3 в среднем вертикальном сечении ($x=0.5$) для термо-концентрационной конвекции, когда присутствует тепловая и концентрационная конвекция, вызванная неоднородностью только одной из компонент, т.е. либо $Gr=10^5$, $Gr_{2C}=10^3$ либо $Gr=10^5$, $Gr_{1C}=10^3$. В сравнении со случаем только тепловой конвекции (фиг.7), показывает, что учет концентрационной конвекции изменяет распределение фосфата кальция C_3 .

Структура полей скоростей течения, температур и распределения концентраций для термо-концентрационной конвекции для случаев наличия неоднородностей обоих компонент (C_1 и C_2) представлены на фиг.8.



Фиг. 8. изолинии функции тока, изотермы и линии равных концентраций при термо-концентрационной конвекции (слева - $Gr=10^5$, $Gr_{1C}=10^3$, $Gr_{2C}=10^3$, справа - $Gr=10^7$, $Gr_{1C}=10^5$, $Gr_{2C}=10^5$).

фосфата кальция C_3 в зависимости от гравитационных условий для момента времени $t=2$. Процесс кристаллизации происходит дальше, чем $t=2$ и поэтому влияние конвекции на производительность фосфата кальция C_3 может быть еще больше, чем показано на фиг.9.



Фиг. 9. Профили концентрации фосфата кальция C_3 в среднем вертикальном сечении ($x=0.5$) для разных значений числа Грасгофа ($Gr=10^k$, $Gr_{1C}=10^n$, $Gr_{2C}=10^m$, где показатели степеней указаны в надписях линий « knm »).

На фиг.9 изображены изолинии функции тока, изотермы и линии равных концентраций при термо-концентрационной конвекции для двух вариантов расчета: слева $Gr=10^5$, $Gr_{1C}=10^3$, $Gr_{2C}=10^3$, справа $Gr=10^7$, $Gr_{1C}=10^5$, $Gr_{2C}=10^5$. Результаты показывают влияние гравитационных условий на образование и характер распределения фосфата кальция, который существенно отличается от диффузионного характер распределения, как изображено на фиг. 1.

На фиг. 9 приводятся кривые для разных значений чисел Грасгофа, поэтому приняты следующие обозначения кривых $_{knm}$, что соответствует следующим значениям чисел Грасгофа: $Gr=10^k$, $Gr_{1C}=10^n$, $Gr_{2C}=10^m$. На фиг. 9 показан итоговый график с профилями концентрации C_3 в среднем вертикальном сечении ($x=0.5$) для разных комбинаций тепловой, концентрационной и термо-концентрационной конвекции. Зависимости на фиг. 9 показывают разнообразие распределения

Выводы

Результаты численного моделирования показали возможные механизмы переноса компонент реакции их перемешивания и осаждения продукта реакции, имеющие место в экспериментах при выращивании фосфата кальция на Земле и в условиях микрогравитации. Кроме диффузии; рассмотрена тепловая конвекция, вызванная выделением скрытой теплоты кристаллизации; концентрационная конвекция, вызванная наличием градиентов плотности из-за неоднородного распределения компонентов раствора; а также совместное действие термо-концентрационной конвекции. Сравнение результатов численного моделирования процесса тепломассопереноса при кристаллизации фосфата кальция из раствора с экспериментальными данными [1-3] показали конвективный характер переноса компонент реакции и динамику образования фосфата кальция с учетом указанных конвективных явлений переноса.

Показано, что времена транспортировки при конвективном перемешивании меньше, чем при диффузии, но скорость и масса образования фосфата кальция зависит не только от времени и интенсивности конвекции, но и от структуры конвективного перемешивания, поскольку многовихревая структура конвекции может «запирать» перенос компонент реакции. Показано, что при конвективном перемешивании возможно наличие слоистых конвективных структур, усугубляющих расслоение компонент в объеме реактора и затрудняющих перенос компонент реакции друг к другу из-за многовихревой структуры конвективного течения раствора.

Литература

1. Lundager Madsen H.E., Christensson F., Polyak L.E., Suvorova E.I., Kliya M.O., Chernov A.A. Calcium Phosphate Crystallization Under Terrestrial and Microgravity Conditions // J.Crystal Growth. 1995. V. 152. P. 191-202.
2. Lundager Madsen H.E., Christensson F., Chernov A.A., Polyak L.E., Suvorova E.I. Crystallization of Calcium Phosphate in Microgravity // Adv.Space Res. 1995. V. 16. P. 65-68.
3. Suvorova E.I., Christensson F., Lundager Madsen H.E., Chernov A.A. Terrestrial and Space-grown HAP and OCP Crystals: Effect of Growth Conditions on Perfections and Morphology // J.Crystal Growth. 1998. V.186. P. 262-274.
4. Полежаев В.И., Белло М.С., Везуб Н.А., Дубовик К.Г., Лебедев А.П., Никитин С.А., Павловский Д.С., Федюшкин А.И. Конвективные процессы в невесомости. - М.: Наука, 1991, 240с.
5. А.И. Федюшкин. Исследование матричного метода решения уравнений конвекции. Комплекс программ «МАРЕНА». Препринт № 471, М.: ИПМ АН СССР, 1990, 32с.
6. Штиллер В. Уравнение Аррениуса и неравновесная кинетика. — М.: Мир, 2000. 176 с.
7. Федюшкин А.И. Влияние гравитации на массоперенос при кристаллизации фосфатов кальция из растворов в термостатированных условиях. — Препринт №1092, М.: ИПМех РАН, 2015, 27 с., ISBN 978-5-91741-135-4.
8. В.И. Полежаев, А.И.Федюшкин. Гидродинамические эффекты концентрационного расслоения в замкнутых объемах // Известия АН СССР, Механика жидкости и газа, 1980, №. 3, С. 11-18.