УДК 536.24.001.57:536.42

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНВЕКТИВНО-ДИФФУЗИОННОГО ПЕРЕНОСА ЧЕРЕЗ СЕЛЕКТИВНУЮ ПОВЕРХНОСТЬ РАСТВОРА

В.М. ЛЕКАРЕВ

Кубанский государственный технологический университет
350072, Российская Федерация, г. Краснодар, ул. Московская, 2;
электронная почта: LVM_12@mail.ru

В работе дана формулировка краевой задачи конвективно-диффузионного массопереноса в растворе. Получено аналитическое решение для случая стационарной конвекции в изотермическом приближении. Обсуждаются перспективы применения этих решений.
Ключевые слова: математическое моделирование, массоперенос, конвекция, диффузия, кристаллизация, раствор.

Явления переноса и массообмена в растворах, ограниченных селективной поверхностью, широко распространены в природных и технологических процессах. Физико-математическое моделирование таких процессов основывается на дифференциальном уравнении конвективно-диффузионного массопереноса, дополненного краевыми условиями.

Рассмотрим двухкомпонентный раствор, ограниченный плоской полупроницаемой (селективной) поверхностью (поверхность испарения или мембрана), которая полностью задерживает растворенный компонент и пропускает растворитель. Координатную ось x направим перпендикулярно к селективной поверхности вглубь раствора, совместив начало отсчета ($x = 0$) с поверхностью раствора. Концентрацию раствора в начальный момент времени (t=0) полагаем однородной по всему объему раствора и равной величине c_0. Температуру раствора считаем неизменной, так как коэффициент температуропроводности значительно превосходит по величине коэффициент диффузии. Рассмотрим режим стационарной конвекции, когда скорость V движения раствора через селективную поверхность не изменяется (V= const).

Условие непрерывности для растворенного нелетучего компонента (при отсутствии его источников и стоков) записывается уравнением: $\frac{dc}{dt} = -div(\vec{j}_D)$, где $\frac{dc}{dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + \vec{\mathrm{V}} \cdot \vec{\nabla} \mathrm{c}$. Согласно закону Фика диффузионный поток $\vec{j}_D$ пропорционален градиенту концентрации раствора: $\vec{j}_D = -D \cdot \vec{\nabla} c$, где $\vec{\nabla}$ - оператор градиента; D – коэффициент диффузии в растворе. Таким образом, получаем уравнение конвективно-диффузионного массопереноса в растворе

$$\frac{\partial c}{\partial t} - V \cdot \frac{\partial c}{\partial x} - D \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0 \qquad (1)$$

с начальным условием

$$c(x,0) = c_0 . \qquad (2)$$

Непроницаемость селективной поверхности (x=0) для растворенного компонента приводит к отсутствию его общего потока $\vec{j}_0 = \vec{j}_C + \vec{j}_D$=0 через эту поверхность (конвективный поток $\vec{j}_C = \vec{\mathrm{V}} \cdot c$ имеет направление противоположное диффузионному потоку $\vec{j}_D = -D \cdot \vec{\nabla} c$). Это утверждение является формулировкой граничного условия на селективной поверхности раствора (x=0):

$$\left.\frac{\partial c}{\partial x}\right|_{x=0} = -\frac{V}{D} \cdot c(0,t) . \qquad (3)$$

Краевую задачу, описанную системой уравнений {(1), (2), (3)}, можно дополнить условием материального баланса для летучего компонента (растворителя), поток которого $j_P = V \cdot \rho_p$, где ρ_p - плотность растворителя в растворе определяется уравнением состояния раствора: ρ_p=$\rho_p(c)$.

Решением сформулированной краевой задачи {(1), (2), (3)} является искомая функция $c(x,t)$ концентрационного поля в растворе, которую определим посредством следующих преобразований переменных к безразмерному виду:

$$X = x/(D/V)\,; \;\; T = t/(D/V^2)\,; \;\; \mathrm{C} = \frac{\mathrm{c}}{\mathrm{c}_0} .$$

Решение такой задачи находим на основе решения задачи Коши и окончательно получаем выражение для поля концентрации:

$$C(X,T)=\frac{1}{2}\cdot e^{-X}\cdot(1-X+T)\cdot Erfc\left(\frac{X-T}{2\sqrt{T}}\right)+\frac{1}{2}\cdot Erfc\left(-\frac{X+T}{2\sqrt{T}}\right)+\sqrt{\frac{T}{\pi}}\cdot e^{-\left(\frac{X+T}{2\sqrt{T}}\right)^2},$$

где функция Erfc(z) выражается через интеграл вероятности

$$Erfc(z)=1-Erf(z)=1-\frac{2}{\sqrt{\pi}}\cdot\int_0^Z e^{-\alpha^2}\cdot d\alpha.$$

На поверхности испарения (X = 0) достигается наибольшее значение концентрации в данный момент времени:

$$C(0,T)=(1+\frac{T}{2})\cdot Erfc\left(-\frac{\sqrt{T}}{2}\right)+\sqrt{\frac{T}{\pi}}\cdot e^{-T/4}.$$

Последняя функция имеет асимптоту: C(0,T)=T+2 для T>>1. Следовательно, стационарное значение концентрации раствора не достигается даже асимптотически за сколь угодно большое время. В таком случае, возрастающая концентрация раствора за некоторый промежуток времени $t_К$ достигнет критической величины $с_к>с_н$ ($с_н$ - концентрация насыщенного раствора), когда начнется процесс кристаллизации в области пересыщенного раствора.

Найденная функция для поля концентрации C(X,T) может быть использована для определения законов движения изоконцентрационных поверхностей.

Рассмотренные процессы массопереноса в растворах, ограниченных селективной поверхностью, можно описать в терминах диффузионного потока $\vec{j}_D$, конвективного потока $\vec{j}_C$ и общего потока $\vec{j}_0=\vec{j}_C+\vec{j}_D$, которые удобно представить в безразмерном виде. Общий поток в безразмерном виде: $J_0=\frac{|\vec{j}_D|-|\vec{j}_C|}{V\cdot c_0}$. Выражение для общего потока принимает вид:

$$J_0=-\frac{1}{2}\cdot\left[Erfc\left(-\frac{X+T}{2\sqrt{T}}\right)-e^{-X}\cdot Erfc\left(\frac{X-T}{2\sqrt{T}}\right)\right].$$

На поверхности Х=0 общий поток $J_0\big|_{x=0} = 0$, что подтверждает граничное условие (3) непроницаемости селективной поверхности раствора (X = 0) для растворенного компонента.

Полученные результаты актуальны для оперативного прогнозирования сроков достижения критических значений концентрации в растворах и для научно обоснованных расчетов производительности фильтров и оптимальных режимов технологических процессов массопереноса.

MODELING ON THE CONVECTIVE DIFFUSIVE TRANSFER THROUGH SELECTIVE SURFACE OF THE SOLUTION

V.M. LEKAREV

Kuban State Technological University,
2, Moskovskaya st., Krasnodar, Russian Federation, 350072;
e-mail: LVM_12@mail.ru

The paper presents the formulation of the boundary value problem on the convective diffusive transfer in the solution. The analytical solution of this problem for the case of the stationary convection in an isothermal approximation is given. The applications of these solutions are suggested.
Key words: mathematical modeling, masstransfer, convection, diffusion, crystallization, solution.