

А. А. Ермаков (д.т.н., проф.), С. А. Ермаков (д.т.н., проф.), Л. А. Мостов (вед. инж.),
И. С. Мельник (инж.), З. Р. Русина (ст. преп.), Е. А. Шевченко (асп.)

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАССОПЕРЕДАЧИ В УСЛОВИЯХ САМОПРОИЗВОЛЬНОЙ МЕЖФАЗНОЙ КОНВЕКЦИИ

Уральский федеральный университет, кафедра машин и аппаратов химической технологии
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 28; тел. (343)3754428, e-mail: anatolerm@yandex.ru

A. A. Ermakov, S. A. Ermakov, L. A. Mostov, I. S. Melnik, Z. R. Rusinova, E. A. Shevchenko

MODELING OF MASS TRANSFER AT CONDITIONS OF SPONTANEOUS INTERFACIAL CONVECTION

Ural Federal University

28, Mira Str., 620002, Ekaterinburg, Russia; ph. (343) 3754428, e-mail: anatolerm@yandex.ru

Представлена полуэмпирическая модель массопередачи в условиях самопроизвольной межфазной конвекции на плоской границе раздела фаз. В рамках модели массопередачу можно представить в виде совокупности большого числа конвективных ячеек на межфазной границе. Модель позволяет оценить средний линейный размер и среднюю скорость вращения конвективных ячеек на межфазной границе и на основе этих данных спрогнозировать кинетические закономерности массопередачи в условиях СМК. Для этого используются известные физико-химические параметры экстракционных систем (вязкость и плотность принимающей и отдающей фаз, поверхностная активность переносимого вещества и т.д.). Показано применение модели на нескольких экстракционных системах.

Ключевые слова: гидродинамическая неустойчивость; жидкостная экстракция; конвекция Марангони; математическое моделирование; самопроизвольная межфазная конвекция.

Интенсификация массопередачи при экстракции органических соединений — актуальная задача химической технологии. Одним из способов интенсификации является проведение массопередачи в условиях самопроизвольной межфазной конвекции (СМК). При этом вследствие влияния различных факторов (градиента температуры, концентрации, природы растворителей и растворимых веществ и так далее) на межфазной границе возникает градиент межфазного натяжения, способствующий увеличению коэффициента массопередачи в системе жидкость-жидкость¹.

The article contains semi-empiric model of mass transfer in conditions of spontaneous interfacial convection on the planar interfacial boundary. A mass transfer is presented as a set of a large number of convective cells in this model. The model allows to evaluate the average linear size and the average rotation speed of the convective cells on the interfacial boundary and to predict the kinetic regularities of mass transfer in conditions of the spontaneous interfacial convection. Physical and chemical parameters of extraction systems (viscosity and density of the receiving and giving phases, surface activity of the transferred substance and so on) are used for this purpose. The application of the model on several extraction systems is shown.

Key words: convection; convective instability; liquid-liquid extraction; mathematical modeling; spontaneous interfacial Marangoni convection.

Для описания процесса предложена ячеистая модель², в основу которой положено представление о том, что процесс массопередачи в условиях самопроизвольной межфазной конвекции представляет собой совокупность конвективных ячеек, о чем свидетельствуют многочисленные экспериментальные данные.

Согласно модели, для оценки среднего линейного размера ячейки можно использовать формулу:

$$l = \frac{\nu}{V_s} \quad (1)$$

где ν — кинематическая вязкость отдающей фазы;
 l — линейный размер ячейки;
 V_s — скорость вращения ячейки.

Дата поступления 21.03.19

Для расчета скорости циркуляции ячейки на межфазной границе применена формула:

$$V_s = \frac{b}{\eta_1 + \eta_2} \cdot \frac{\partial \sigma}{\partial c} \cdot \Delta c \quad (2)$$

где b – полуэмпирический коэффициент, характеризующий конкретную экстракционную систему;

η_1 и η_2 – показатели кинематических вязкостей отдающей и принимающей фаз соответственно, $\text{м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$;

$\frac{\partial \sigma}{\partial c}$ – поверхностная активность переносимого вещества, $\text{Н} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{кмоль}^{-1}$;

Δc – движущая сила, равная разности концентраций переносимого вещества в отдающей фазе на границе раздела фаз и в глубине фазы, $\text{кмоль} \cdot \text{м}^{-3}$.

Для расчета величины массового потока вещества, $j_{\text{СМК}}$, переносимого в режиме СМК, использована формула:

$$j_{\text{СМК}} = \frac{b^2}{\eta_1 + \eta_2} \cdot \frac{\partial \sigma}{\partial c} \cdot S_c \cdot \frac{1}{2} \cdot (\Delta c)^2 \quad (3)$$

где S_c – критерий Шмидта.

Зная массовый поток, из уравнения (3) можно рассчитать коэффициент b :

$$b = \sqrt{\frac{(\eta_1 + \eta_2) \cdot S_c^2}{\Delta c^2 \cdot \frac{\partial \sigma}{\partial c}} \cdot j_{\text{СМК}}} \quad (4)$$

$$j_{\text{СМК}} = \int_{t_2}^{t_1} \frac{L \cdot \beta_{\text{СМК}} \cdot e^{-\beta_{\text{СМК}} \cdot s \cdot t} \cdot (L \cdot \beta_{\text{СМК}} \cdot s \cdot e^{-\beta_{\text{СМК}} \cdot s \cdot t} + M \cdot \beta_{\partial} \cdot s \cdot e^{-\beta_{\partial} \cdot s \cdot t})}{(L \cdot e^{-\beta_{\text{СМК}} \cdot s \cdot t} + M \cdot e^{-\beta_{\partial} \cdot s \cdot t}) - \frac{C_{\text{нач}}}{K_p + 1}} dt \quad (7)$$

где K_p – коэффициент распределения переносимого вещества;

$\frac{C_{\text{нач}}}{K_p + 1}$ – константа, зависящая от начальной концентрации и коэффициента распределения.

$$b = \sqrt{\frac{(\eta_1 + \eta_2) \cdot S_c^2}{\Delta c^2 \cdot \frac{\partial \sigma}{\partial c}} \cdot \int_{t_1}^{t_2} \frac{L \cdot \beta_{\text{СМК}} \cdot e^{-\beta_{\text{СМК}} \cdot s \cdot t} \cdot (-L \cdot \beta_{\text{СМК}} \cdot s \cdot e^{-\beta_{\text{СМК}} \cdot s \cdot t} - M \cdot \beta_{\partial} \cdot s \cdot e^{-\beta_{\partial} \cdot s \cdot t}) \cdot (1 + \frac{1}{K_p})}{(L \cdot e^{-\beta_{\text{СМК}} \cdot s \cdot t} + M \cdot e^{-\beta_{\partial} \cdot s \cdot t}) \cdot (1 + \frac{1}{K_p}) - \frac{C_{\text{нач}}}{K_p}} dt} \quad (8)$$

Двухэкспоненциальная функция^{3,4} была использована нами для описания зависимости концентрации вещества в отдающей фазе от времени:

$$C(t) = L \cdot e^{-\beta_{\text{СМК}} \cdot s \cdot t} + M \cdot e^{-\beta_{\partial} \cdot s \cdot t} \quad (5)$$

Формула коэффициента массопередачи^{4,5} имеет вид:

$$K_M = \frac{dC(t)}{dt} \cdot \frac{1}{s \cdot c(t)}, \quad (6)$$

где L, M – начальные концентрации в режимах СМК и «диффузионном» соответственно, $\text{кмоль} \cdot \text{м}^{-3}$;

$\beta_{\text{СМК}}$ – коэффициент интенсивности режима СМК, $\text{м} \cdot \text{с}^{-1}$;

β_{∂} – коэффициент интенсивности «диффузионного» режима, $\text{м} \cdot \text{с}^{-1}$;

$C_{\text{нач}}$ – начальная концентрация переносимого вещества, $\text{кмоль} \cdot \text{м}^{-3}$;

s – удельная межфазная поверхность, м^{-1} ;

t – время, с.

Методом численного интегрирования нами рассчитан массовый поток в режиме СМК как произведение коэффициента массопередачи в режиме СМК на движущую силу (7).

Таким образом, подставив (7) в (4), получим выражение для полуэмпирического коэффициента (8).

Параметры исследованных систем, входящие в уравнение (8), определены нами в лабораторных условиях и приведены в табл. 1.

Таблица 1

Физико-химические параметры исследованных систем

№	Экстракционная система	C_0 , кмоль·м ⁻³	η_1 , Па·с	η_2 , Па·с	$\rho_{1,2}$, кг·м ⁻³	$\frac{d\sigma}{dc}$, Н·м ² ·кмоль ⁻¹	$D_{1,2}$, м·с ⁻¹
1	Четыреххлористый углерод – уксусная кислота – вода	0.3	$9.7 \cdot 10^{-4}$	$1.0 \cdot 10^{-3}$	1590	$1.6 \cdot 10^{-2}$	$1.4 \cdot 10^{-9}$
2	Бензол – уксусная кислота – вода	3.0	$6.5 \cdot 10^{-4}$	$1.0 \cdot 10^{-3}$	879	$3.7 \cdot 10^{-3}$	$2.0 \cdot 10^{-9}$
3	Бензол – пропионовая кислота – вода	1.5	$6.5 \cdot 10^{-4}$	$1.0 \cdot 10^{-3}$	879	$5.1 \cdot 10^{-3}$	$1.8 \cdot 10^{-9}$
4	Четыреххлористый углерод – пропионовая кислота – вода	0.7	$9.7 \cdot 10^{-4}$	$1.0 \cdot 10^{-3}$	1590	$1.2 \cdot 10^{-2}$	$1.3 \cdot 10^{-9}$
5	Керосин – пропионовая кислота – вода	1.1	$9.7 \cdot 10^{-4}$	$1.0 \cdot 10^{-3}$	700	$6.2 \cdot 10^{-3}$	$1.3 \cdot 10^{-9}$

По формуле (4) нами рассчитан коэффициент b , а затем по формулам (1) и (2) проведена оценка параметров ячеек на межфазной границе. Внутри каждой системы для различных начальных концентраций переносимого вещества коэффициент b имеет примерно одинаковые значения. Это говорит о достоверности и надежности модели. Расчетные параметры для некоторых систем приведены в табл. 2.

На рис. 1 представлена зависимость величины скорости циркуляции ячейки, рассчитанной по формуле (1), от начальной концентрации уксусной кислоты при массопередаче из четыреххлористого углерода в воду.

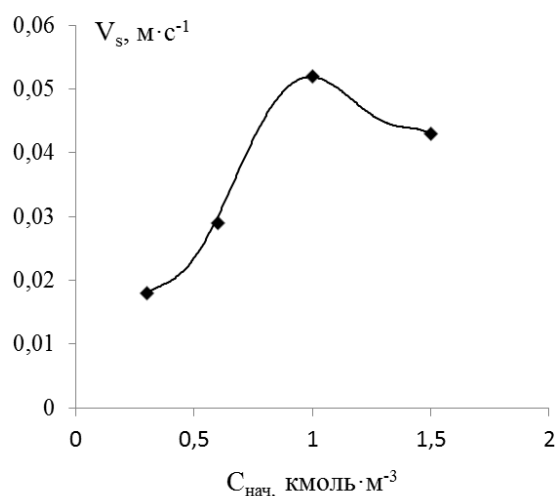


Рис. 1. Зависимость величины скорости циркуляции ячейки от начальной концентрации уксусной кислоты. Массопередача уксусной кислоты из четыреххлористого углерода в воду

Из рис. 1 видно, что с возрастанием начальной концентрации уксусной кислоты скорость циркуляции ячейки возрастает, затем идет ее снижение, вероятно, обусловленное повышением вязкости отдающей фазы из-за увеличения концентрации в ней уксусной кислоты.

На рис. 2 представлена зависимость среднего размера ячейки, рассчитанного по уравнению (2), от начальной концентрации уксусной кислоты.

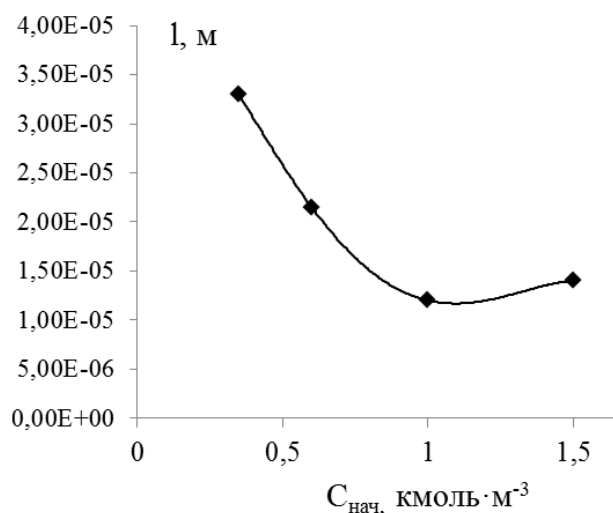


Рис. 2. Зависимость величины среднего размера ячейки от начальной концентрации уксусной кислоты. Массопередача уксусной кислоты из четыреххлористого углерода в воду

Из рисунка видно, что средний размер ячейки снижается с увеличением начальной концентрации уксусной кислоты.

Для большинства исследованных систем в данной работе скорость циркуляции конвективных ячеек является величиной порядка нескольких сантиметров в секунду (не более 5-6). При этих скоростях размеры конвективных ячеек порядка десятков мкм (не более 50 мкм).

Таким образом, из проведенных экспериментов следует, что:

- каждая отдельно взятая экстракционная система характеризуется полуэмпирическим коэффициентом b , определяющим ее гидродинамические параметры;
- с помощью полуэмпирической модели проведена оценка величин скорости и среднего размера конвективных ячеек на межфазной границе для пяти экстракционных систем;
- внутри одной системы наблюдаются следующие закономерности: чем меньше величина среднего размера ячейки и больше величина скорости ее вращения, тем интенсивнее массоперенос в режиме СМК.

Таблица 2

Расчетные параметры для различных систем

№	Экстракционная система	b	Скорость вращения ячейки, $\text{м} \cdot \text{с}^{-1}$	Размер ячейки, м
1	Четыреххлористый углерод – уксусная кислота – вода	$1,3 \cdot 10^{-2}$	$1,8 \cdot 10^{-2}$	$3,3 \cdot 10^{-5}$
2	Бензол – уксусная кислота – вода	$9,6 \cdot 10^{-3}$	$2,5 \cdot 10^{-2}$	$3,0 \cdot 10^{-5}$
3	Бензол – пропионовая кислота – вода	$7,6 \cdot 10^{-3}$	$2,4 \cdot 10^{-2}$	$3,1 \cdot 10^{-5}$
4	Четыреххлористый углерод – пропионовая кислота – вода	$9,8 \cdot 10^{-3}$	$2,3 \cdot 10^{-2}$	$2,6 \cdot 10^{-5}$
5	Керосин – пропионовая кислота – вода	$1,6 \cdot 10^{-2}$	$3,2 \cdot 10^{-2}$	$4,3 \cdot 10^{-5}$

Литература

1. Ермаков А.А., Ермаков С.А., Русинова З.Р., Мостов Л.А., Мельник И.С., Шевченко Е.А. Обнаружение и характеристики самопроизвольной межфазной конвекции // Баш. хим. ж.— 2018.— Т.25, №1.— С.33-37.
2. Головин А.А., Ермаков А.А., Рабинович Л.М. Модель массопередачи при экстракции в условиях спонтанной межфазной конвекции // Доклады АН СССР.— 1989.— Т.305, №4.— С.921-925
3. Стенин Л.А., Ермаков С.А. Моделирование кинетики массопередачи в условиях самопроизвольной межфазной конвекции на плоской границе раздела фаз // Вестник ТГТУ.— 2010.— Т.16, №4.— С.837-840.
4. Мостов Л.А., Ермаков С.А., Ермаков А.А., Артамонова Н.А. Кинетика массопереноса йода в условиях самопроизвольной межфазной конвекции через плоскую границу раздела фаз // ЖПХ.— 2011.— Т.84, №12.— С.1968-1971.
5. Мостов Л.А., Ермаков С.А., Ермаков А.А. Идентификация режимов массопереноса вещества в условиях самопроизвольной межфазной конвекции в системе жидкость-жидкость // Известия вузов. Химия и химическая технология.— 2012.— Т.55, №1.— С.111-114.

References

1. Ermakov A.A., Ermakov S.A., Rusinova Z.R., Mostov L.A., Melnik I.S. Shevchenko E.A. *Obnaruzhenie i kharakteristiki samoproizvol'noi mezhfaznoi konveksii* [Detection and characteristics of spontaneous interfacial convection]. *Bashkirskii khimicheskii zhurnal* [Bashkir Chemical Journal], 2018, vol.25, no.1, pp. 33-37.
2. Golovin A.A., Ermakov A.A. Rabinovich L.M. *Model' massoperedachi v usloviyakh samoproizvol'noi mezhfaznoi konveksii* [Mass transfer model under conditions of spontaneous interfacial convection]. *Doklady Akademii nauk SSSR* [Reports of the USSR Academy of Sciences], 1989, vol.305, no.4, pp.921-925.
3. Stenin L.A., Ermakov S.A. *Modelirovanie kinetiki massoperedachi v usloviyakh samoproizvol'noi mezhfaznoi konveksii* [Modeling of mass transfer kinetics under conditions of spontaneous interfacial convection on a planar interface]. *Vestnik TGTU* [Vestnik TSTU], 2010, vol.16, pp.837-840.
4. Mostov L.A., Ermakov S.A., Ermakov A.A., Artamonova N.A. *Kinetika massoperenosa ioda v usloviyakh samoproizvol'noi mezhfaznoi konveksii cherez ploskuyu granitsu razdela faz* [Kinetics of mass transfer of iodine under conditions of spontaneous interfacial convection through a planar interface] *Zhurnal prikladnoi khimii* [Russian Journal of Applied Chemistry], 2011, vol.84, no.12, pp.1968-1971.
5. Mostov L.A., Ermakov S.A., Ermakov A.A. *Identifikatsiya rezhimov massoperenosa veshchestva v usloviyakh samoproizvol'noi mezhfaznoi konveksii v sisteme zhidkost'-zhidkost'* [Identification of mass transfer modes of a substance under conditions of spontaneous interfacial convection in a liquid-liquid system]. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedenii. Khimiya i khimicheskaya tekhnologiya* [News of higher educational institutions. Chemistry and Chemical Technology], 2012, vol.55, no.1, pp.111-114.