

2. Говорущенко Н.Я., Туренко А.Н. Системотехника проектирования транспортных машин. Учебное пособие. – Изд. 3-е, испр. и доп. – Харьков: ХНАДУ, 2004. – 208 с.
3. Говорущенко Н.Я., Туренко А.Н. Системотехника транспорта. Харьков: ХГАДТУ, 1998. – 468 с.
4. Туренко А.Н. Повышение эффективности торможения грузовых и пассажирских транспортных средств с пневматическим тормозным приводом. Харьков: ХГАДТУ, 1997. - 353 с.
5. Волошин Г.Я., Мартынов В.П., Романов А.Г. Анализ дорожно-транспортных происшествий. М.: Транспорт, 1987. – 240 с.
6. Джонс И.С. Влияние параметров автомобиля на дорожно-транспортные происшествия. Москва: Машиностроение, 1979. – 207 с.
7. Кашканов А.А. Оцінка гальмових моментів на колесах автомобіля за допомогою нечіткої логіки. // Вимірювальна техніка в технологічних процесах. 1999. № 1. с. 139 – 143.
8. Lotfi A. Zadeh. Fuzzy Sets. // Information and Control, 1965. № 8.
9. Борисов А.Н., Крумберг О.А., Федоров И.П. Принятие решений на основе нечетких моделей. Примеры использования. Рига: Зинатне, 1990. – 184 с.
10. Miller C. The Magic Number Seven Plus or Minus two: Some limits on our Capacity for Processing Information // Psychological Review, 1956. - № 63. – p. 81 – 97.

*Аналіз можливостей методу первапорації був би неповним без його математичного опису. В роботі представлено систему рівнянь, що описують процес первапорації бінарних сумішей*

*Ключові слова: математична модель, первапорація, суміш*

*Анализ возможностей метода первапорации был бы неполным без его математического описания. В работе представлена система уравнений, описывающая процесс первапорации бинарных смесей*

*Ключевые слова: математическая модель, первапорация, смесь*

*Analysis of the possibilities of the pervaporation would have been incomplete without its mathematical description. In this study the system of equations describing the process of pervaporation of binary mixtures is presented*

*Key words: mathematical model, pervaporation, mixture*

УДК 628.316.12

# МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ПЕРВАПОРАЦИИ ДЛЯ БИНАРНЫХ СМЕСЕЙ

**И. А. Буртная**

Кандидат технических наук, доцент\*  
Контактный тел.:(044) 241-68-83

**Д. В. Литвиненко\***

\*Кафедра биотехники и инженерии  
Контактный тел.: 067-292-28-44

E-mail: Dariya.Lytvynenko@meta.ua

Национальный технический университет Украины  
«Киевский политехнический институт»  
пр. Победы, 37, г. Киев, 03056

## Введение

Методы разделения жидких смесей и получения чистых веществ занимают значительное место в фармацевтической, пищевой и химической промышленности. За последние 50 лет, наряду с традиционными методами разделения, такими, как ректификация, дистилляция, сорбция и другие, стали широко применяться и изучаться методы разделения смесей при помощи полупроницаемых мембран. Среди этих методов помимо мембранной дистилляции, диализа и электродиализа, особое место занимает ещё недостаточно широко используемый процесс диффузионного испарения через мембрану - первапорация.

Основным достоинством этого процесса, вызывающим к нему большой интерес ученых, является возможность с его помощью разделять близкокипящие и азеотропные смеси, которые затруднительно или невозможно разделить традиционными методами.

Сегодня подавляющее число исследований в области первапорации направлено на изучение новых мембранных материалов и их модификацию. Однако, проблемы выбора мембранных материалов являются не единственными, сдерживающими развитие и внедрение в промышленность первапорации. Наряду с выбором мембранных материалов, актуальным вопросом является также изучение влияния различных технологических параметров на эффективность

разделения. Исследование материалов, касающихся процесса, показывает недостаточность его изучения, а существующие математические модели не могут быть применимы для всех случаев.

Анализ статей, посвященных разработке математической модели процесса, позволяет сделать вывод, что большинство из них посвящены математическому моделированию процесса переработки с выделением из рабочей (модельной) жидкости одного компонента [1, 2]. Большое число работ представляют модель растворения с последующим проникновением (диффузией) отдельного компонента через мембрану [2, 3].

### Модель переработки

Процесс переработки включает в себя три стадии:

- 1) селективная сорбция на входной поверхности мембраны;
- 2) селективная диффузия через мембрану;
- 3) десорбция в виде парообразной фазы на выходной поверхности.

В сложном процессе, каким является переработка, происходит тепло- и массоперенос. Мембрана действует как барьер между двумя фазами – жидкостью и паром, причём считается, что фазовый переход происходит на всём протяжении от входа в мембрану до образования пермеата в парообразном состоянии [4]. Перенос может быть описан с помощью механизма растворения–диффузии, в котором селективность определяется селективной сорбцией и/или селективной диффузией.

### Математическая модель

Зачастую переработку рассматривают как изотермический процесс, однако нужно учитывать, что, как и в направлении потока, перпендикулярно мембране так же развивается градиент температур. Далее представлена математическая модель неизотермической переработки.

Рассматриваем систему, форму канала которой считаем двумерной с высотой канала  $H$ , и шириной  $W$ , такими, что  $H/W \ll 1$  [5]. Считаем, что модель находится в устойчивом состоянии, делая такие допущения: профиль температур – равномерный, профиль скорости на входе в канал – полностью развит. Уравнения Навье-Стокса – определяющие уравнения для течения жидкости в щелевом канале и уравнение неразрывности, выраженные в безразмерном виде [5]:

$$\begin{aligned}
 u^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial u^*}{\partial y^*} &= -\frac{\partial p^*}{\partial x^*} + \frac{\partial}{\partial x^*} \left( \frac{2}{Re} \frac{\partial u^*}{\partial x^*} \right) + \frac{\partial}{\partial y^*} \left( \frac{2}{Re} \frac{\partial u^*}{\partial y^*} \right); \\
 u^* \frac{\partial v^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial v^*}{\partial y^*} &= -\frac{\partial p^*}{\partial y^*} + \\
 &+ \frac{\partial}{\partial x^*} \left( \frac{2}{Re} \frac{\partial v^*}{\partial x^*} \right) + \frac{\partial}{\partial y^*} \left( \frac{2}{Re} \frac{\partial v^*}{\partial y^*} \right);
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

$$\frac{\partial u^*}{\partial x^*} + \frac{\partial v^*}{\partial y^*} = 0,$$

где безразмерные переменные определяются как:

$$x^* = \frac{x}{L}; y^* = \frac{y}{H}; u^* = \frac{u}{u_0}; v^* = \frac{v}{u_0}; p^* = \frac{p}{\rho u_0^2};$$

$$Re = \frac{\rho u_0 d_h}{\eta},
 \tag{2}$$

где  $x$  и  $y$  – осевая и поперечная координаты;  $u$  и  $v$  являются компонентами вектора скорости в направлении  $x$  и  $y$ , соответственно;  $u_0$  – средняя скорость потока на входе в канал ( $x^*=0$ );  $p$  – давление;  $\rho$  – плотность;  $a = H/L$  – соотношение сторон;  $Re$  – число Рейнольдса;  $\eta$  – вязкость смеси;  $d_h = 2H$  (заметим, что  $d_h$  равно эквивалентному гидравлическому диаметру, когда  $W \gg H$ ).

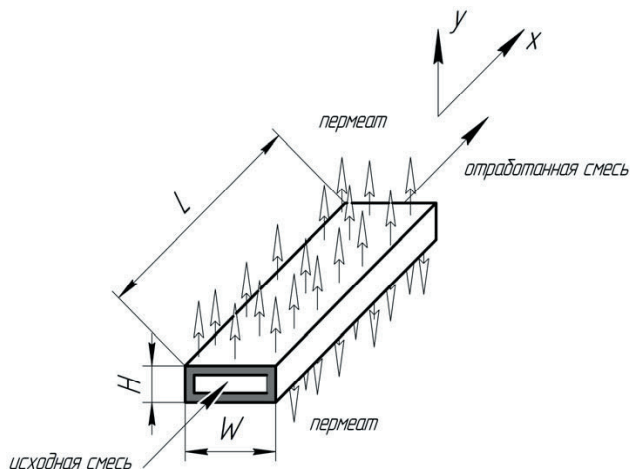


Рис. 1. Схема мембранного канала

Уравнения массопереноса для бинарной системы компонентов А и В могут быть записаны следующим образом:

$$\begin{aligned}
 u^* \frac{\partial C_A^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial C_A^*}{\partial y^*} &= \frac{\partial}{\partial x^*} \left( \frac{2}{Re Sc_A} \frac{\partial C_A^*}{\partial x^*} \right) + \frac{\partial}{\partial y^*} \left( \frac{2}{Re Sc_A} \frac{\partial C_A^*}{\partial y^*} \right); \\
 u^* \frac{\partial C_B^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial C_B^*}{\partial y^*} &= \\
 &= \frac{\partial}{\partial x^*} \left( \frac{2}{Re Sc_B} \frac{\partial C_B^*}{\partial x^*} \right) + \frac{\partial}{\partial y^*} \left( \frac{2}{Re Sc_B} \frac{\partial C_B^*}{\partial y^*} \right),
 \end{aligned}
 \tag{3}$$

где используются следующие безразмерные переменные:

$$C_A^* = \frac{C_A}{C_A^0}; C_B^* = \frac{C_B}{C_B^0}; Sc_i = \frac{\eta}{\rho D_i},
 \tag{4}$$

где  $C_A$  и  $C_B$  являются концентрациями компонентов А и В; начальные концентрации (при  $x^*=0$ ) обозначаются как  $C_A^0$  и  $C_B^0$ ; число Шмидта и коэффициенты взаимной диффузии двух компонентов обозначаются как  $Sc_i$  и  $D_i$  соответственно, где  $i = A$  или  $B$ . Отметим, что произведение  $Re \cdot Sc$  – это число Пекле для массопереноса.

Уравнение энергии в мембранном канале принимает следующий вид:

$$u^* \frac{\partial T^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial T^*}{\partial y^*} = \frac{\partial}{\partial x^*} \left( \frac{2}{\text{RePr}} \frac{\partial T^*}{\partial x^*} \right) + \frac{\partial}{\partial y^*} \left( \frac{2}{\text{RePr}} \frac{\partial T^*}{\partial y^*} \right), \tag{5}$$

где

$$T^* = \frac{T}{T_0}; \text{Pr} = \frac{\eta C_p}{\lambda}, \tag{6}$$

где  $T$  и  $T_0$  – локальная и начальная температуры (т. е. при  $x^* = 0$ );  $C_p$  и  $\lambda$  – теплоемкость и теплопроводность жидкости соответственно,  $\text{Pr}$  – число Прандтля; произведение  $\text{RePr}$  является числом Пекле для теплопередачи.

**Граничные условия**

Граничные условия определены при  $x^* = 0, x^* = 1, y^* = 0$  и  $y^* = 1$ . Считаем, что на входе в канал ( $x^* = 0$ ) профиль скорости имеет параболический вид [6]:

$$u^* = 4y^*(1 - y^*),$$

полагая, что образовался профиль полностью развитого ламинарного течения. На входе в мембрану концентрации растворенного вещества и растворителя –  $C_A^0$  и  $C_B^0$  соответственно, а температура и давление на входе в канал были установлены равномерными (величины  $T_0$  и  $p_0$  соответственно). Выше записанные условия при  $x^* = 0$  были выражены в безразмерной форме, как

$$v^* = 0; p^* = \frac{p_0}{\rho u_0^2} \equiv b; C_A^* = 1; C_B^* = 1; T^* = 1.$$

Отметим, что на выходе так же, как и входе, можно использовать альтернативный набор граничных условий для массо- и теплопереноса, что отвечает диффузии и конвекции:

$$\begin{aligned} -\frac{2}{\text{ReSc}_A} \frac{\partial C_A^*}{\partial x^*} + u^* C_A^* &= u^* C_A^{r*}; \\ -\frac{2}{\text{ReSc}_B} \frac{\partial C_B^*}{\partial x^*} + u^* C_B^* &= u^* C_B^{r*}; \\ -\frac{2}{\text{RePr}} \frac{\partial T^*}{\partial x^*} + u^* C^* &= u^* T_r^*, \end{aligned} \tag{7}$$

где на входе в канала ( $x^* = 0$ ),  $T_r^* = T_0^* = 1$  и  $C_i^{r*} = C_i^{0*} = 1$ , где  $i$  обозначает компоненту А или В.

На поверхности мембраны ( $y = 0$ ) применяется обычное условие прилипания на границе, то есть  $u = 0$  при  $y = 0$ , которое соответствует перворапии для непористых мембран. Составляющая скорости по  $y$ -координате  $v$  может быть выражена как:

$$v = -K \text{ при } y = 0 \text{ и } v = K \text{ при } y = H, \tag{8}$$

где

$$K = \frac{N_A + N_B}{C_A + C_B}, \tag{9}$$

где компоненты потока пермеата можно выразить как:

$$N_i = \frac{C_{mf,i} - C_{mp,i}}{R_{m,i}}, \tag{10}$$

в котором  $C_{mf,i}$  и  $C_{mp,i}$  –  $i$ -тые концентрации компонентов в мембране – на поверхности входа в мембрану и на границе мембрана-пермеат соответственно;  $R_{m,i}$  – сопротивление мембраны массопереносу  $i$ -тых компонентов. При условии наличия незначительного вакуума со стороны пермеата, разумно предположить, что  $C_{mf,i} \gg C_{mp,i}$ . Кроме того, если предположить, что на стороне входа в мембрану существует локальное термодинамическое равновесие, то получим, что концентрации компонентов в растворе связаны с их концентрациями в мембране (при  $y = 0$ ), таким образом, что  $C_{mf,i} \gg H_{m,i} C_i$ . Тогда уравнение (9) может быть выражено как:

$$K = \frac{\frac{C_A}{R_A} + \frac{C_B}{R_B}}{C_A + C_B},$$

где  $R_A$  и  $R_B$  – коэффициенты массосопротивления мембраны для компонентов А и В соответственно могут быть определены как  $R_i = 1/k_{m,i} H_{m,i}$ , где  $k_{m,i}$  – коэффициент массопереноса для «транспорта» через мембрану и  $H_{m,i}$  – это коэффициент распределения мембрана/раствор для  $i$ -тых компонентов. В данном моделировании сопротивление мембраны аппроксимировалось как  $k_{m,i} = D_{m,i}/\delta$ , где  $\delta$  – толщина мембраны и  $D_{m,i}$  – коэффициент диффузии  $i$ -того компонента внутри мембраны. Температурная зависимость диффузии и коэффициентов распределения может быть аппроксимирована как:

$$D_{m,i} = D_{m,i}^0 \exp\left(-\frac{E_D}{RT}\right); H_{m,i} = H_{m,i}^0 \exp\left(\frac{\Delta H_S}{RT}\right),$$

где  $E_D$  и  $\Delta H_S$  – энергия активации диффузии и энтальпия растворения  $i$ -того компонента в мембране соответственно, а  $D_{m,i}^0$  и  $H_{m,i}^0$  – соответствующие предэкспоненциальные множители.

Наконец, следует отметить, что уравнение (8) было представлено в безразмерной форме с помощью переменных, определенных в уравнениях (2), (4), (6).

На поверхности мембраны со стороны потока ( $y^* = 0$  и  $y^* = 1$ ) предполагаются следующие граничные условия для системы уравнений переноса массы (3):

$$\begin{aligned} -\frac{2}{\text{ReSc}_A} \frac{\partial C_A^*}{\partial y^*} + v^* C_A^* &= \frac{C_A^*}{u_0 R_A}; \\ -\frac{2}{\text{ReSc}_B} \frac{\partial C_B^*}{\partial y^*} + v^* C_B^* &= \frac{C_B^*}{u_0 R_B}, \end{aligned} \tag{11}$$

где члены правой стороны системы уравнений (11) представляют компоненту потока (согласно (10)).

Граничные условия теплопереноса на поверхности мембраны могут быть выведены из теплового баланса, который учитывает как заметный теплоперенос, так и теплоты парообразования. Соответственно, может быть получено следующее граничное условие:

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial y} + \rho C_p v T = \frac{\lambda_m}{\delta} (T - T_p) + \left( \frac{C_A}{R_A} \Delta h_A + \frac{C_B}{R_B} \Delta h_B \right) + \left( \frac{C_A}{R_A} + \frac{C_B}{R_B} \right) C_p^L T_p, \quad (12)$$

где  $\lambda_m$  - теплопроводность мембраны,  $T_p$  - температура пермеата,  $\Delta h_A$  и  $\Delta h_B$  - энтальпии испарения компонентов А и В соответственно, и  $C_p^L$  - теплоемкость пара пермеата.

Выше предложенное граничное условие теплоотдачи (12) может быть выражено в безразмерном виде, как

$$-\frac{2}{RePr} \frac{\partial T^*}{\partial y^*} + v^* T^* = D(T^* - T_p^*) + AC_A^* + BC_B^* + E \left( \frac{C_A^0}{R_A} C_A^* + \frac{C_B^0}{R_B} C_B^* \right) T_p^*, \quad (13)$$

где

$$A = \frac{2H}{\lambda T_0} \frac{1}{RePr} \frac{C_A^0 \Delta h_A}{R_A}; \quad B = \frac{2H}{\lambda T_0} \frac{1}{RePr} \frac{C_B^0 \Delta h_B}{R_B};$$

$$D = \frac{2H \lambda_m}{\lambda \delta} \frac{1}{RePr}; \quad E = \frac{2H C_p^L}{\lambda} \frac{1}{RePr}.$$

### Выводы

В работе представлена математическая модель, описывающая процесс первaporation бинарной смеси в канале прямоугольного сечения ( $W \gg H$ ).

В связи с малой изученностью процесса первaporation проведение исследований следует продолжать. Стоит задача разработки математической модели для описания процесса первaporation органических примесей из водного раствора с целью очистки сточных вод и проверки ее адекватности.

Необходимо также исследовать влияние технологических параметров на протекание процесса. Это позволит более эффективно применять процесс для разделения смесей.

### Литература

1. P.T.Sumesh, P.K.Bhattacharya. Analysis of phase change during pervaporation with single component permeation // ScienceDirect / Colloids and Surfaces: Physicochem. Eng. Aspects. – 2006. – 290. – p. 263-272.
2. Mario E.T. Alvarez, Elenise B.Moraes, Maria R.W. Maciel. Prediction and estimation techniques for modeling pervaporation process // 16<sup>th</sup> European Symposium on computer Aided Process Engineering and 9<sup>th</sup> International Symposium on Process System Engineering / Published by Elsevier B.V.– 2006. – p. 619-624.
3. Moraes, E.B.; Alvarez, M.E.T, Perioto, F.R. and Wolf-Maciel, M.R. Modeling and Simulation for Pervaporation Process: An Alternative for removing Phenol from Wastewater / Separation Process Development Laboratory / School of Chemical Engineering. University of Campinas, Brasil.
4. І.А.Буртна, Д.В.Литвиненко. Мембранна технологія очистки СТИЧНИХ вод від органічних домішок // Східно-Європейський журнал передових технологій / Екологія, 2010. – 6/10(48). – с.4-6.
5. Juan P.G. Villaluenga, Yoram Cohen. Numerical model of non-isothermal pervaporation in a rectangular channel / Journal of membrane science. – 2005. – 260. – p.119-130.
6. Касаткин А.Г. Основные процессы и аппараты химической технологии [Текст]/ Андрей Георгиевич Касаткин; издание восьмое, переработанное. – Москва: Химия, 1971.