

УДК 66.087

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ЭЛЕКТРО-МАССОБМЕННЫХ ПРОЦЕССОВ НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА СУБСТАНЦИИ

© 2023 г. Л. В. Равичев^а, *, С. И. Ильина^а, В. Я. Логинов^а, В. И. Быков^а, А. А. Титов^а

^аРоссийский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

*e-mail: ravichevly@list.ru

Поступила в редакцию 02.07.2023 г.

После доработки 11.07.2023 г.

Принята к публикации 23.07.2023 г.

При изучении процессов электродиализного разделения при пульсирующем токе была выявлена проблема отсутствия математического описания электро-массообменных процессов, учитывающего нестационарные токовые режимы. Основной проблемой описания электро-массообменных процессов является наличие двух движущих сил — градиента электрического потенциала и градиента концентраций. Целью настоящей работы является создание критериального уравнения переноса заряда, полученного по аналогии с выводами уравнений переноса субстанции. В результате было получено уравнение конвективной электропроводности, выражающее в общем виде распределение плотности заряда в движущемся потоке. Полученное уравнение позволило вывести критерии электрического подобия — электрические числа Пекле и Прандтля. Приведено сопоставление размерностей полученных электрических чисел и классических. С помощью полученных чисел выведено число Нуссельта для электро-массообменных процессов, которое учитывает перенос вещества как за счет градиента концентрации так за счет разности потенциалов, а также влияние на процесс электродиализного разделения рабочей и предельной плотности тока и геометрических параметров аппарата.

Ключевые слова: электро-массообменные процессы, электродиализ, математическое описание, уравнение переноса субстанции

DOI: 10.31857/S0040357123050196, **EDN:** MIBTJO

ВВЕДЕНИЕ

Химическая промышленность — одна из важнейших отраслей народного хозяйства, позволяющая решать проблемы во всех сферах экономики, например, производство удобрений для сельского хозяйства, красок и лаков для легкой промышленности, разработка новых материалов и покрытий для автомобильной промышленности и космических проектов.

К основным недостаткам химической промышленности можно отнести загрязнение химическими предприятиями окружающей среды отходами производства, энергоемкость и существенные затраты на подготовку пресной воды.

В связи с этим развитие химической промышленности связано с внедрением технологий, уменьшающих или исключающих вредные факторы химического производства.

Одним из главных этапов синтеза химико-технологических систем является расчет и подбор аппаратов, в которых протекают определенные процессы. Помимо химических реакций процессы химической технологии принято делить на:

- механические;
- гидромеханические;
- теплообменные;
- массообменные.

Необходимо отметить:

1. Большинство рассматриваемых процессов являются сопряженными так, например, на протекание теплообменных и массообменных процессов существенно влияет гидродинамика потоков.

2. В приведенном выше перечне не выделены процессы, протекающие под действием разности электрических потенциалов, однако, такие процессы (или сопряженные с ними) также нашли свое применение в химической промышленности.

МЕТОДЫ РАСЧЕТА ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

В настоящее время существует множество различных методов расчетов протекания химико-технологических процессов.

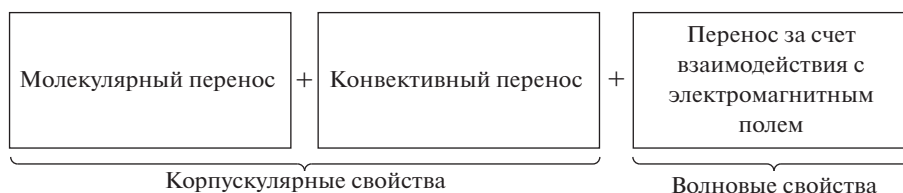


Рис. 1. Составляющие переноса субстанции.

Развитие компьютерной техники позволяет быстро решать сложные задачи моделирования. Однако в основе построения математических моделей используются те же принципы, что и несколько десятилетий назад. К таким методам относится и использование теории подобия. На основании базовых уравнений выделяются критерии подобия, определяющие протекание процесса и далее составляются уравнения, устанавливающие соотношения между рассматриваемыми критериями. В данном методе выделяются следующие этапы:

1. Нахождение базового уравнения для выделения безразмерных критериев.
2. Установление зависимости между критериями.
3. Определение граничных условий адекватности критериальных уравнений.

Критериальные уравнения широко используются для расчетов гидромеханических, тепловых и массообменных процессов. Критерии, используемые в этих случаях, получают путем преобразований балансовых уравнений или базовых уравнений переноса — уравнений Навье—Стокса, Фурье—Кирхгофа, уравнений конвективной диффузии, а также последующей их модификации (например, перемножением или делением известных критериев и т.д.)

Анализ вышеупомянутых уравнений переноса показал, что все они могут быть получены из уравнения переноса субстанции

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = -\operatorname{div} \bar{q} + \gamma. \quad (1)$$

Плотность притока может быть обусловлена, например, влиянием поля или образованием продуктов химической реакции [1, 2].

Дальнейшие выводы сводятся к определению вида переноса субстанции (материи), где плотность потока $\bar{q}$ складывается из переноса на молекулярном и конвективном уровне, а также при выводе уравнения Навье—Стокса учитывается поле сил тяжести (учет этот происходит за счет составляющей внешних сил — плотность притока γ). Необходимо отметить, что при выводе уравнения Фурье—Кирхгофа, поток тепла за счет теплового излучения не учитывается, а при выводе уравнений конвективной диффузии величина γ принимается равной 0. В то же время основные постула-

ты гласят о корпускулярно-волновом характере материи, из чего следует, что в целом перенос субстанции должен иметь обязательно три составляющие, а именно: перенос на молекулярном уровне, перенос на конвективном уровне и влияние поля.

Итак, если схематично изобразить виды переноса субстанции, то получится следующая картина (рис. 1):

Теперь рассмотрим известные уравнения переноса субстанции.

Перенос импульса — уравнение Навье—Стокса отражает все составляющие. Поле обусловлено силой тяжести — гравитационное поле.

Перенос тепла — уравнение Фурье—Кирхгофа объединяет молекулярный и конвективный перенос, но математически не затрагивает описание поля. Тепловое излучение обусловлено электромагнитными волнами.

Перенос массы — уравнение конвективной диффузии так же рассматривает молекулярный и конвективный перенос. Очевидно, что, как и в случае с переносом импульса, процессы протекают в поле сил тяжести. Необходимо отметить, что этот очевидный факт не нашел явного математического отражения.

Однако субстанция (или материя) помимо массы и энергии имеет и другие виды — одним из которых является электрический заряд.

Так как заряд является видом материи, то, с учетом того, что потенциалом переноса является плотность заряда, для его переноса уравнение (1) может быть преобразовано в

$$\frac{\partial \rho_v}{\partial \tau} = -\operatorname{div} \bar{J}_q + \gamma_q. \quad (2)$$

Перенос заряда — на молекулярном уровне перенос заряда описывается законом Ома и имеет вид, аналогичный законам Ньютона, Фурье, Фика. Влияние электромагнитного поля описывается уравнениями Максвелла. Математическое описание конвективного переноса заряда в отечественной и зарубежной литературе представлено фрагментарно. Однако очевидно, что явление конвективного переноса заряда необходимо учитывать при описании процессов электромассо- и электротеплообмена.

Исходя из утверждения о единстве подходов к описанию переноса всех видов субстанции, можно получить уравнение конвективной электропроводности по аналогии с уравнениями конвективной теплопроводности и конвективной диффузии.

Итак, выразим вышеизложенное в виде соответствующих уравнений:

$$\bar{J}_q = \bar{J}_{qm} + \bar{J}_{qk}. \quad (3)$$

На молекулярном уровне плотность потока заряда описывается уравнением электропроводности:

$$\bar{J}_{qm} = -\sigma \frac{\partial U}{\partial n}. \quad (4)$$

На конвективном уровне плотность заряда описывается следующим уравнением:

$$\bar{J}_{qk} = \bar{\omega} \cdot \rho_v \quad (5)$$

$$\bar{J}_{qk} \text{ имеет размерность } \left[\frac{\text{м Кл}}{\text{с м}^3} \right] = \left[\frac{\text{Кл}}{\text{с м}^2} \right].$$

Принимая $\gamma_q = 0$ уравнение (2) можно преобразовать к виду

$$\frac{\partial \rho_v}{\partial \tau} = -\text{div} \left(-\sigma \frac{\partial U}{\partial n} + \bar{\omega} \rho_v \right). \quad (6)$$

Такой же подход был использован в работах [1–4], однако, уравнения конвективной электропроводности в работах этих авторов не приводятся, и необходимые математические модели строятся на основании критериев электрического подобия, полученных методом аналогии с критериями гидродинамического и теплового подобия [3–5]. Этот подход, несомненно, имеет право на существование, однако, не дает логической завершенности в математическом описании переноса заряда.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Нами было проведено преобразование уравнения (6) по аналогии с уравнением Фурье–Кирхгофа.

С учетом того, что отношение заряда к напряжению – есть емкость системы:

$$C = \frac{q}{U}. \quad (7)$$

Напряжение можно выразить через плотность заряда:

$$U = \frac{\rho_v V}{C} = \frac{\rho_v m}{C \rho} = \frac{\rho_v}{C_m \rho}. \quad (8)$$

Далее, подставляя полученное уравнение (8) в уравнение электропроводности (4), получаем уравнение плотности потока заряда на молекулярном уровне

$$\bar{J}_{qm} = -\sigma \text{grad}(\rho_v / C_m \rho) = -\frac{\sigma}{C_m \rho} \text{grad} \rho_v. \quad (9)$$

Тогда запишем

$$\frac{\partial \rho_v}{\partial \tau} + \text{div} \bar{\omega} \rho_v = b \text{div} \text{grad} \rho_v, \quad (10)$$

а с учетом математических преобразований

$$\frac{\partial \rho_v}{\partial \tau} + \rho_v \text{div} \bar{\omega} + \bar{\omega} \text{grad} \rho_v = b \nabla^2 \rho_v. \quad (11)$$

Полученное уравнение учитывает перенос заряда в различных средах (как в неразрывных, так и при наличии кавитации).

Если поток неразрывен ($\text{div} \bar{\omega} = 0$), уравнение (11) имеет вид

$$\frac{\partial \rho_v}{\partial \tau} + \omega_x \frac{\partial \rho_v}{\partial x} + \omega_y \frac{\partial \rho_v}{\partial y} + \omega_z \frac{\partial \rho_v}{\partial z} = \frac{\sigma}{C_m \rho} \nabla^2 \rho_v, \quad (12)$$

или

$$\frac{\partial \rho_v}{\partial \tau} = b \nabla^2 \rho_v, \quad (12a)$$

где, обозначив $\frac{\sigma}{C_m \rho} = b$, можно определить b как “коэффициент зарядопроводности”, названный по аналогии с коэффициентом температуропроводности,

$$\left[\frac{\text{См/м}}{\frac{\text{Кл}}{\text{В кг}} \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}} \right] = \left[\frac{\frac{\text{Кл}}{\text{с}}}{\frac{\text{Кл}}{\text{м}^2}} \right] = \left[\frac{\text{м}^2}{\text{с}} \right].$$

Полученное уравнение (12) является уравнением конвективной электропроводности, которое выражает в общем виде распределение плотности заряда в движущемся потоке. Нетрудно заметить, что вид уравнения (12) аналогичен уравнению конвективной теплопроводности Фурье–Кирхгофа и уравнению конвективной диффузии, что соответствует приведенной схеме (рис. 1) и еще раз подтверждает единство явлений переноса субстанций различного вида. Это подтверждается также тем, что коэффициент зарядопроводности b имеет ту же размерность, что и коэффициенты диффузии и кинематической вязкости.

Как и другие дифференциальные уравнения (Навье–Стокса, Фурье–Кирхгофа, конвективной диффузии) уравнение (12) может быть решено численными методами или использовано как основное для получения математических моделей. На практике для описания процессов переноса заряда чаще используют напряжение. Так как плотность тока ρ_v зависит от напряжения U , то можно сделать вывод, что слагаемое $\frac{\partial \rho_v}{\partial \tau}$, включающее частную производную напряжения по

Таблица 1. Сопоставление размерностей классического и электрического критерия Прандтля

Классический критерий Прандтля $Pr = \frac{C_p \mu}{\lambda}$		$\leftrightarrow$	Электрический критерий Прандтля $Pr_q = \frac{C_m \mu}{\sigma}$	
обозначение	размерность		обозначение	размерность
C_p	$\frac{\text{Дж}}{\text{кг К}} \rightarrow \frac{\text{Вт с}}{\text{кг К}}$	$\leftrightarrow$	C_m	$\frac{\Phi}{\text{кг}} \rightarrow \frac{\text{Кл}}{\text{В кг}}$
λ	$\frac{\text{Вт}}{\text{м К}}$	$\leftrightarrow$	σ	$\frac{1}{\text{Ом м}} \rightarrow \frac{\text{Кл}}{\text{В с м}}$
μ	$\text{Па с} \rightarrow \frac{\text{кг}}{\text{м с}}$	$\leftrightarrow$	μ	$\text{Па с} \rightarrow \frac{\text{кг}}{\text{м с}}$

времени $\frac{\partial U}{\partial \tau}$, так как $\frac{\partial p_v}{\partial \tau} = C_m \rho \frac{\partial U}{\partial \tau}$, характеризует параметры переменного тока.

Из уравнения (12) можно получить числа Пекле и Фурье. Электрическое число Пекле можно выразить как

$$\frac{b p_v}{l^2} \sim \frac{\omega p_v}{l} \Rightarrow \frac{\omega p_v l^2}{l b p_v} = \frac{\omega l}{b} = Re_q. \quad (13)$$

Электрическое число Фурье соответственно будет иметь вид

$$\frac{b p_v}{l^2} \sim \frac{\rho_v}{\tau} \Rightarrow \frac{b p_v \tau}{l^2 \rho_v} = \frac{b \tau}{l^2} = Fo_q. \quad (14)$$

На практике широко используемым критерием является число Прандтля, которое рассчитывается как отношение числа Пекле к числу Рейнольдса

$$Pr_q = Re_q / Re = \frac{\omega l}{b} \frac{\mu}{\omega l \rho} = \frac{\mu}{b \rho} = \frac{\mu C_m \rho}{\sigma \rho} = \frac{\mu C_m}{\sigma}. \quad (15)$$

Анализируя размерности (табл. 1), можно заметить сопоставимость размерностей переменных, входящих в критерий Прандтля.

Таким образом, выражения для расчета электрических чисел, полученные из уравнения конвективной электропроводности, совпадают с выражениями, полученными методом аналогий и применяемыми при составлении математических описаний [3–5]. Кроме того, в этом случае более ясен физический смысл получаемых критериев. Электрическое число Прандтля (Pr_q) характеризует проводящие свойства материала, а электрическое число Фурье характеризует влияние переменного тока на процесс переноса заряда.

Полученные критерии электрического подобия могут быть использованы как для описания процессов переноса заряда, так и для сопряженных процессов, таких как электромассообменных или электротеплообменных. Например, для электромассообменных процессов можно записать

$$Nu_D = Sh = f(Fo, Fo_q, Fo_D, Re, Pr, Pr_q, Pr_D, i/i_{lim}, l/d, \dots). \quad (16)$$

Также, в зависимости от режима течения жидкости, в уравнении (16) может быть включено число Фруда (Fr).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Обобщая вышесказанное, можно сделать вывод, что, так как материя может переноситься на молекулярном и макроуровнях, а также полем, уравнение переноса субстанции может быть преобразовано в аналогичные уравнения переноса импульса (Навье–Стокса), тепла (Фурье–Кирхгофа), массы и заряда. Так как базовые постулаты справедливы для всех явлений переноса, а, следовательно, и для конвективной электропроводности, то уравнение (12) может являться базовым для получения критериев электрического подобия, а для определения вида критериальных уравнений, включающих электрические числа подобия, необходимо четко и однозначно установить начальные и граничные условия протекания процесса.

ОБОЗНАЧЕНИЯ

C	емкость, Φ
C_m	удельная емкость, $\Phi/\text{кг}$
C_p	удельная теплоемкость, $\text{Дж}/\text{кг К}$
$\overline{J_q}$	поток заряда, $\text{Кл}/\text{м}^3 \text{ с}$
U	напряжение, В
b	коэффициент зарядопроводности, м/с
d	диаметр, м
i	плотность тока, $\text{А}/\text{м}^2$
l	линейный размер, м
m	масса, кг
q	заряд, Кл

$\bar{q}$	плотность потока
γ	плотность притока
γ_q	плотность притока заряда, Кл/м ³ с
μ	вязкость, Па с
ρ	плотность, кг/м ³
ρ_v	плотность заряда, Кл/м ³
σ	удельная электропроводность, См/м
τ	время, с
φ	потенциал переноса
$\tilde{\omega}$	скорость, м/с
Fo	число Фурье
Nu	число Нуссельта
Pr	число Прандтля
Re	число Рейнольдса
Sh	число Шервуда

ИНДЕКСЫ

D	диффузионное число
K	конвективный уровень

M	молекулярный уровень
q	электрическое число
lim	предельное значение

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Жакин А.И.* Электрогидродинамика // Успехи физических наук, 2012. Т. 182. № 5. С. 495–520. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0182.201205b.0495>
2. *Саранин В.А.* Электрогидродинамика: Равновесия, зарядка и конвекция жидких масс в электрических полях: дис. Док. Тех. Наук: 01.02.05 // Саранин Владимир Александрович. – Глазов, 1999.
3. *Ильин В.А., Пономарева Л.А.* Электроконвекция слабопроводящей жидкости в высокочастотном электрическом поле // Вестник пермского университета. 2013. № 3(25). С. 28–36.
4. *Ильин В.А., Куршина Е.В.* Исследование модели электроконвекции идеального диэлектрика в конденсаторе с твердыми границами // Вестник пермского университета. 2009. № 1(27). С. 3–6.
5. *Гросу Ф.П., Болога М.К., Болога А.М.* Особенности теплообмена в условиях электрической конвекции // Электронная обработка материалов. 2010. № 4. С. 41–55.