

УДК 519.711.2:533.15

**Осипова Л.Э.** – кандидат технических наук, доцент

E-mail: osipovalilija@mail.ru

**Казанский государственный архитектурно-строительный университет**

Адрес организации: 420043, Россия, г. Казань, ул. Зеленая, д. 1

**Низамов И.И.** – аспирант

E-mail: nizyama@yandex.ru

**Казанский национальный исследовательский технологический университет**

Адрес организации: 420045, Россия, г. Казань, ул. К. Маркса, д. 68

### Исследование диффузии в многокомпонентных газовых смесях

#### **Аннотация**

Проведен анализ математического описания процесса диффузии в многокомпонентных газовых смесях. Показаны преимущества матричных моделей. На основе матричных уравнений многокомпонентной диффузии разработана математическая модель, учитывающая динамику развития процесса в трубке Стефана. Модель была реализована методом конечных разностей в Excel совместно с универсальным моделирующим пакетом Cham Cad. Адекватность математической модели подтверждена сравнением полученных значений профилей концентраций компонентов с результатами, опубликованными в литературе. Рекомендованы матричные уравнения многокомпонентной диффузии, пригодные для перехода к уравнениям массоотдачи.

**Ключевые слова:** многокомпонентная диффузия, массоотдача, матричная модель, прибор Стефана, эквимолярный процесс, динамика.

#### **Введение**

Проектирование аппаратов очистки вентиляционного воздуха предполагает проведение расчетов разнообразных массо- и теплообменных процессов, в которых необходимо учитывать многокомпонентность среды и особенности конкретных процессов, в первую очередь связанные с диффузионными явлениями.

В основе описания многокомпонентного массопереноса практически всегда лежат уравнения диффузии, а переход от уравнений диффузии к уравнениям массоотдачи реализуется с использованием каких-либо из теорий массопередачи [1, 2].

В последние годы появился ряд работ [3-6], посвященных исследованию многокомпонентной диффузии (МКД) в газовых смесях. Механизм переноса массы в многокомпонентных системах достаточно сложен. Так, при МКД наличие (или отсутствие) собственного градиента концентраций для рассматриваемого компонента далеко не полностью определяет механизм его переноса. Поэтому при МКД возникают такие явления, как диффузионный барьер, осмотическая и реверсивная диффузия [7].

#### **Теоретический анализ процесса диффузии**

Теоретические исследования МКД, как правило, базируются на использовании уравнения Стефана-Максвелла, которое, в свою очередь, получено из решения уравнения Больцмана. Это уравнение для изотермических и изобарических условий является достаточно строгим приближением, вполне удовлетворяющим требованиям практики. В качестве важнейшего допущения при выводе уравнения выступало условие независимости бинарных коэффициентов молекулярной диффузии от состава газовой смеси. Как теоретические, так и экспериментальные данные подтверждают справедливость данного допущения.

Процесс МКД в  $m$  – компонентной идеальной газовой смеси описывается при этом следующей системой дифференциальных уравнений Стефана-Максвелла:

$$-\frac{P}{RT} \frac{dy_i}{dl} = \sum_{j \neq i}^m \frac{N_j y_j - N_i y_i}{D_{ij}}. \quad (1)$$

Для стационарной (установившейся) диффузии при постоянном давлении независимыми в системе уравнений (1) являются только  $(m-1)$  уравнений, так как  $\sum_{i=1}^m \frac{dy_i}{dl} = 0$ .

Одновременно система уравнений (1) содержит  $m$  неизвестных потоков  $N_i$ . Поэтому решение системы может быть достигнуто только при наложении дополнительных условий, которые обычно задаются в виде связи между отдельными потоками и имеют вид:

$$\sum_{i=1}^m N_i = N_c. \quad (2)$$

На практике наиболее широко в качестве частных случаев рассматриваются варианты эквимолярной диффузии ( $N_c = 0$ ) и диффузии контролируемого газа (газовой смеси) через слой инертных газов ( $\sum N_{im} = 0$ ). В обоих случаях удается исключить из рассмотрения поток одного (нескольких) компонентов и понизить размерность системы уравнений (1) до  $(m-n)$ . Однако и в этом случае, невзирая на кажущуюся простоту системы уравнений (1), их аналитическое решение приводит к весьма громоздким выражениям для обоих вариантов постановки задачи [3-7] уже для трехкомпонентных смесей ( $m=3$ ). При этом уравнения (1) разрешаются или относительно профилей концентраций, или относительно потоков, хотя в работе [3] приводится оригинальный прием комбинированного решения обоих вариантов постановки задачи. Использование аналитических решений для моделирования процессов диффузии в смесях с числом компонентов более 3-х представляет скорее теоретический, чем практический интерес.

В практических приложениях (прежде всего для перехода от уравнений диффузии к уравнениям массопередачи) удобнее применять решения, выполненные относительно потоков, при этом наибольший интерес представляют матричные методы описания диффузии.

Отмеченные недостатки аналитических приемов решения системы уравнений (1), а также запросы практического приложения результатов, инициировали развитие методов расчета многокомпонентной диффузии, основанных на использовании феноменологических уравнений [8]:

$$(N) = -\frac{P}{RT} [D] \left( \frac{dy}{dl} \right). \quad (3)$$

Элементы квадратной матрицы в (3) получили название «практических» коэффициентов диффузии, а выражения для их определения находятся совместным решением уравнений (1) и (3). Анализ известных решений показывает [8], что практические коэффициенты диффузии зависят не только от бинарных коэффициентов диффузии и от концентраций диффундирующих компонентов, но и от соотношения между диффузионными потоками. Это обстоятельство также ограничивает область практического использования известных решений, поскольку соотношение между диффузионными потоками в большинстве случаев может быть определено только после расчета самих потоков.

Использование системы уравнений (3) практически снимает ограничения, накладываемые на решения количеством компонентов смеси, и существенно упрощает переход от уравнений диффузии к уравнениям массоотдачи путем линеаризации уравнений диффузии [9-11].

Сама по себе структура уравнения Стефана-Максвелла (1) не накладывает ограничений на условия связи между потоками (2), что принципиально допускает использование этого уравнения для описания любых произвольных вариантов протекания процессов диффузии. В этой универсальности заключается как сила, так и определенная слабость самого уравнения Стефана-Максвелла. Действительно под изобарической и изотермической диффузией понимается смещение молекул одного сорта относительно молекул другого сорта при наличии разности их концентраций между рассматриваемыми сечениями. Поэтому по определению диффузия протекает только относительно центра масс измерительной системы и принципиально является эквимолярной. Это относится и к определению самих коэффициентов взаимной

диффузии  $D_{ij}$ . В то же время сам центр масс измерительной системы может смещаться относительно контрольной поверхности, которая в условиях проведения эксперимента (например, в трубке Стефана) остается неподвижной. Данный вид переноса определяется конвективным механизмом течения среды относительно лабораторной системы координат («Стефановский» поток). Связь между рассматриваемыми видами диффузии выражается известным уравнением:

$$N_i = N_i^D + N_i^K = N_i^* + N_c y_i. \quad (4)$$

Под эквимолярной составляющей общего диффузионного потока  $N_i^*$  следует понимать тот поток, который имел бы место при тех же градиентах концентраций, но в эквимолярном процессе ( $N_c = 0$ ). При неэквимолярной диффузии фактические потоки компонентов  $N_i$  будут отличаться от  $N_i^*$  на какую-то величину  $\Delta N_i$ :

$$N_i = N_i^* + \Delta N_i. \quad (5)$$

Подставив (5) в (1) и в (2), получим:

$$\sum_{i \neq j}^m \frac{\Delta N_i y_j - \Delta N_j y_i}{D_{ij}} = 0 \text{ и} \quad (6)$$

$$\sum_{i=1}^m \Delta N_i = N_c. \quad (7)$$

Из (6) и (7) следует, что  $\Delta N_i = N_c y_i$ , что легко проверяется подстановкой. Как видим, предлагаемый подход позволяет исследовать любой вид диффузии путем сведения произвольного диффузионного процесса к эквимолярному. Уравнение (3) записывается в этом случае в виде:

$$(N) = -\frac{P}{RT} [D^*] \left( \frac{dy}{dl} \right) + N_c (y|_{l=0}), \quad (8)$$

причем элементы матрицы практических коэффициентов диффузии оказываются в этом случае не зависящими от соотношения между диффузионными потоками, поскольку этот эффект учтен при введении в структуру уравнения диффузии (1) конвективного члена.

Для частного случая бинарной диффузии одного компонента через слой инертного газа ( $N_2 = 0$ ;  $N_c = N_1$ ) уравнение (8) сводится к широко известному выражению, используемому для определения коэффициентов взаимной бинарной диффузии:

$$N_1 = -\frac{P}{RT} D_{12}^* \frac{dy_1}{dl} + N_1 y_{1f} \quad (9)$$

или

$$N_1 (1 - y_{1f}) = N_1^*. \quad (10)$$

Из уравнений (9)-(10) видно, что эквимолярная диффузия идет «труднее», чем неэквимолярная. Это объясняется наложением на процесс чисто диффузионного переноса 1-го компонента при неэквимолярной диффузии сопутствующего Стефановского потока, причем этот эффект зависит от концентрации инертного компонента на контрольной поверхности. Важно, что для обоих видов диффузии коэффициент переноса  $D_{12}^*$  остается одним и тем же (эквимолярным).

К настоящему времени разработано несколько методов расчета элементов матрицы уравнения (3). В большинстве случаев нормирование общего диффузионного потока относительно каких-либо эталонных (например, эквимолярных) условий не проводится [8, 10, 12]. Поэтому элементы матрицы уравнения (3) оказываются зависящими не только от концентраций, но и от самого суммарного (конвективного) потока или от соотношений между отдельными потоками, а также от концентраций дифундирующих компонентов на контрольной поверхности. Это обстоятельство существенно осложняет использование (3), поскольку во многих практически важных случаях закономерности формирования суммарного потока не определены. Также широкое распространение на практике получил метод описания диффузии, основанный на использовании «эффективных»

коэффициентов диффузии. В этом случае в квадратной матрице уравнения (3) присутствуют только диагональные члены, что существенно упрощает описание процесса. Однако условие Дамкелера должно, естественно, выполняться и в этом случае. Данный подход в некоторых случаях может давать вполне удовлетворительные результаты [3], однако в общем случае он представляется неоправданно грубым.

Оригинальный метод расчета эквимолярной массопередачи в многокомпонентных смесях был предложен в работе [13]. Применительно к уравнениям эквимолярной диффузии это решение имеет вид:

$$N_i^* = -\frac{P}{RTl} \sum_{j \neq i}^m D_{ij}^* (y_{i|l=0} - y_{j|l=0}). \quad (11)$$

Сопоставление (11) с аналитическим решением уравнений Стефана-Максвелла, полученным Туром с принятием определенных допущений для эквимолярной диффузии в трехкомпонентной газовой смеси [7], показывает, что (11) удовлетворяет только одному из двух уравнений Тура. Поэтому (11) являются приближенными решениями, хотя они и

удовлетворяют условию Дамкелера  $\left( \sum_{i=1}^m N_i^* = 0 \right)$ . Проведенный анализ уравнения (11) показывает, что при его выводе использовано допущение о линейности профилей концентраций всех диффундирующих компонентов в диффузационном слое. Система уравнений (11) легко приводится к виду (8), в котором элементы матрицы практических коэффициентов эквимолярной диффузии рассчитываются по уравнениям:

$$D_{ii}^* = \sum_{j \neq i}^m D_{ij} y_j \quad (12)$$

$$D_{ij}^* = -y_i D_{ij}, \quad (13)$$

причем при расчете элементов матрицы практических коэффициентов диффузии по уравнениям (12) и (13) могут использоваться концентрации, соответствующие любому сечению диффузационного слоя, в том числе и граничного, что следует из принятого условия линейности профилей концентраций.

Все вышерассмотренные решения были получены для стационарного режима протекания диффузии. В то же время экспериментальные способы изучения процесса диффузии характеризуются достаточным разнообразием аппаратурного оформления и существенной нестационарностью условий исследования, что может оказывать влияние на результаты обработки опытных данных. Так, широкое распространение в практике исследования диффузии в газах получил прибор (трубка) Стефана. Прибор представляет собой трубку с запаянным концом, в которую заливается исследуемая жидкость, состоящая из испаряющихся и диффундирующих через слой инертного газа компонентов. Сам прибор помещается в термо- и баростаты, а открытый конец трубы обдувается исследуемым инертным газом. Массовый поток диффундирующего компонента определяется при этом по количеству жидкости, испаряющейся за определенное время с поверхности раздела «газ-жидкость» и отходящей из прибора. При этом на открытом конце трубы концентрация пара поддерживается на значении, близком к нулю. Это достигается за счет создания поперечного потока инертного газа, обдувающего открытый конец трубы. Расход обдувочного газа не должен создавать заметных возмущений ламинарному течению среды внутри трубы. При такой организации эксперимента непосредственно у поверхности раздела фаз концентрация пара определяется условиями парожидкостного равновесия, т.е. давлением и температурой насыщенных паров испаряемой жидкости. При этих условиях для бинарной смеси профиль концентраций в трубке оказывается линейным, а коэффициент бинарной диффузии определяется из (9-10).

В случае многокомпонентной диффузии процесс существенно осложняется. Различие в коэффициентах бинарной диффузии для всех пар, составляющих многокомпонентную смесь, приводит к тому, что при тех же самых условиях проведения эксперимента профили концентраций компонентов по высоте трубы становятся нелинейными [4].

Для прибора Стефана в одномерном пространстве уравнения неразрывности для

многокомпонентной системы записываются в виде:

$$C \frac{\partial y_i}{\partial t} = - \frac{\partial N_i}{\partial l}. \quad (14)$$

Из (14) видно, что процесс формирования профиля концентраций в трубке будет развиваться во времени. Продолжительность нестационарного периода зависит при этом от длины трубы, от физико-химических свойств компонентов исследуемой системы и от термодинамических параметров состояния самой системы. Как отмечается в [3], суммирование левой и правой частей уравнения (14) по всем компонентам при допущении о постоянстве  $C$  позволяет сделать вывод о том, что суммарный поток не зависит от координаты и является функцией только времени. В любой момент времени и для любого сечения трубы в условиях эксперимента (изобарическая и изотермическая диффузия) выполняется условие  $N_c = N_c|_{l=0}$ . Специальные исследования нестационарных режимов показали [14], что в период нестационарности профили концентраций претерпевают существенные изменения. В частности, в начальный период времени градиенты концентраций, а значит, и сами диффузионные потоки имеют максимальные значения, которые постепенно снижаются (релаксируют) до некоторых стационарных значений. Представляется, что при обработке экспериментальных данных эти обстоятельства целесообразно учитывать.

### Экспериментальная часть

С использованием матричных уравнений многокомпонентной диффузии (8), (12), (13) была разработана математическая модель, учитывающая динамику развития процесса в трубке Стефана и адаптированная к общепринятым условиям проведения эксперимента в приборе (одномерная постановка задачи). Модель была реализована методом конечных разностей в пакете Excel.

При разработке модели учтены следующие положения:

- трубка Стефана разбивается на  $k$  областей (ячеек) с высотой  $\Delta l$  (шаг интегрирования по координате);
- в пределах шага интегрирования по координате профиль концентраций принимается линейным;
- процесс диффузии в период каждого цикла расчета рассматривается как квазистационарный;
- шаг интегрирования по времени выбирается из условия обеспечения устойчивости решения: смещение фронта движения суммарного потока в каждой ячейке при интегрировании процесса по временной координате должно с заданной точностью соответствовать шагу интегрирования по пространственной координате (равен высоте ячейки);
- координата заполнения трубы диффундирующими средой (или вытеснения инертного компонента) как для каждой отдельной ячейки, так и для трубы в целом определяется выражением:  $H_{pp} = \int_0^t N_c dt$ ;
- элементы матрицы коэффициентов многокомпонентной диффузии (12), (13) для каждой ячейки рассчитываются с использованием концентраций компонентов на входе в ячейку;
- общий материальный баланс замыкается на выходе из последней верхней ячейки, граничащей с внешней областью, в соответствии с заданными граничными условиями ( $y_{in} = 1$ );
- дополнительно в модели была реализована связь Excel с универсальным моделирующим пакетом Chem Cad, что позволяло при необходимости (в случае заметных изменений состава исследуемой жидкости по времени эксперимента) проводить пересчет граничных концентраций диффундирующих компонентов на поверхности раздела фаз «газ-жидкость».

Проверку адекватности модели провели с использованием экспериментальных данных, приведенных в литературе [15]. В [3] отмечается, что данный материал является практически единственным источником, в котором опубликованы результаты измерения профилей концентраций, образующихся при диффузии двухкомпонентной смеси газов (ацетон, метанол) через слой инертного компонента (воздух). Это обстоятельство

объясняет интерес, проявленный к обсуждаемому источнику рядом исследователей [3-6]. Следует отметить, что исследование профилей концентраций в рассмотренных работах проведено только для стационарного режима работы прибора.

В соответствии с условиями проведения эксперимента для модели определены граничные условия:

- концентрации компонентов на поверхности раздела фаз «газ-жидкость», определенные из условия термодинамического равновесия системы, считаются постоянными ( $y_1 = 0,319$ ;  $y_2 = 0,528$ ;  $y_3 = 0,153$ ) [15], т.е. пересчет граничных концентраций в рамках данного исследования не проводился;

- для верхнего сечения трубки Стефана принято  $y_1 = 0$ ;  $y_2 = 0$ ;  $y_3 = 1$ .

Параметры, характеризующие условия проведения опыта, приняты в соответствии с данными [15]:  $P = 0,9935$  бар;  $T = 328,5$  К;  $l = 0,238$  м;  $C = 37$  моль/м<sup>3</sup>;  $D_{12}^* = 8,48 \times 10^{-6}$  м<sup>2</sup>/с;  $D_{13}^* = 13,7 \times 10^{-6}$  м<sup>2</sup>/с;  $D_{23}^* = 19,9 \times 10^{-6}$  м<sup>2</sup>/с;  $N_1 = 1,781 \times 10^{-3}$  моль/м<sup>2</sup>с;  $N_2 = 3,186 \times 10^{-3}$  моль/м<sup>2</sup>с.

Дополнительно вносим допущения:

- в начальный момент времени система полностью заполнена инертным компонентом (воздухом);
- растворимостью воздуха в исследуемой жидкости пренебрегаем ( $N_{3f} = 0$ ).

Предлагаемая модель позволяет для каждого момента времени рассчитывать мольные потоки и концентрации, складывающиеся в каждом сечении трубы в результате диффузии испаряющихся компонентов через слой инертного газа, а также рассчитывать время выхода процесса на стационарный режим (потоки по высоте трубы устанавливались на постоянных значениях с точностью до 0,1 %). Потоки и профили концентраций, определенные для стационарных режимов, сравнивались с опытными данными и с известными решениями. Вся информация по потокам и профилям концентраций с целью визуализации динамики развития процесса отображалась на графиках.

### Обсуждение результатов

После запуска модели в трубке Стефана начинается процесс вытеснения инертного газа из ячеек диффундирующими средой. В начальный момент времени, вследствие высоких градиентов концентраций, в нижнем сечении трубы наблюдаются максимальные значения потоков (в том числе и  $N_c$ ), а из верхнего среза трубы интенсивно вытесняется инертный газ. С течением времени потоки  $N_1$  и  $N_2$  релаксируют к некоторым стационарным значениям, а поток воздуха  $N_3$  уменьшается также до стационарного значения, близкого к нулю. Количество ячеек (участков интегрирования), на которое разбивалась трубка, подбиралось таким образом, чтобы расчетные значения потоков в результате интегрирования практически (с точностью до 0,5 %) не зависели от дальнейшего увеличения числа участков интегрирования. Аналогичным образом подбирался и шаг интегрирования по времени. Для анализа точности расчетов было произведено сравнение расчетных значений потоков диффундирующих компонентов после выхода системы на стационарное состояние с экспериментальными данными [15]. Результаты сравнения представлены в таблице.

Таблица

**Сопоставление расчетных значений потоков (модель) с экспериментальными данными [15]**

Потоки	$N_1$ , моль/(м <sup>2</sup> с)	$N_2$ , моль/(м <sup>2</sup> с)	$N_3$ , моль/(м <sup>2</sup> с)	$N_c$ , моль/(м <sup>2</sup> с)
Расчет (модель)	0,001814	0,003329	0	0,005143
Эксперимент [15]	0,001781	0,003186	0	0,004967
Погрешность, %	1,85	4,49	–	3,54

Как видим, значения потоков, рассчитанные по предлагаемой модели, в пределах точности эксперимента совпадают с экспериментальными данными.

На рис. 1 показан процесс формирования стационарного профиля концентраций для 1-го (ацетон) и 3-го (воздух) компонентов по мере развития процесса. Для 2-го компонента (метанол) профиль качественно соответствует профилю по 1-му компоненту. Как видим, в начальный момент времени наблюдается максимальная нелинейность профилей

концентраций. Более того, можно отметить, что по мере развития процесса имеет место качественное изменение профилей. Это объясняется непрерывной трансформацией мольных потоков по всем компонентам системы в процессе выхода процесса на стационарный режим. Стационарный режим для принятых условий эксперимента (геометрия прибора, параметры состояния исследуемой системы) устанавливается в приборе через 15-20 минут. Увеличение числа участков интегрирования по продольной координате свыше 10 практически не влияет на точность конечного результата.

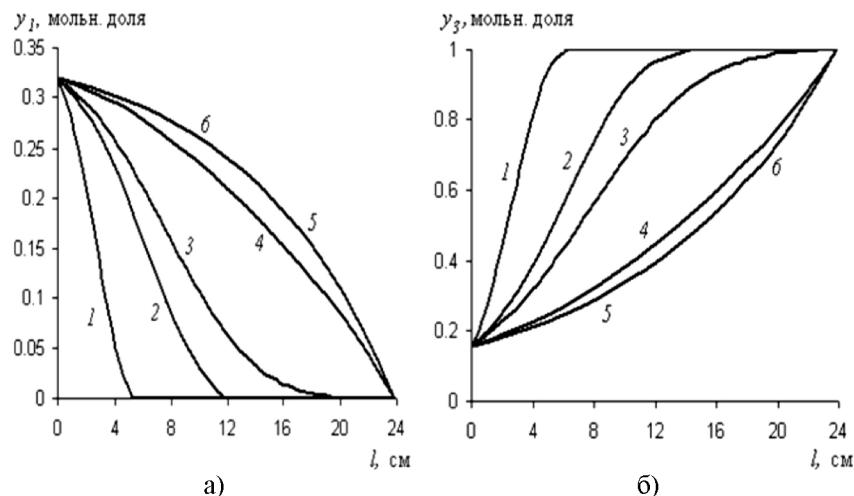


Рис. 1. Изменение профилей концентраций ацетона (а) и воздуха (б) в трубке Стефана с течением времени: 1 – через 10 сек.; 2 – через 50 сек.; 3 – через 100 сек.; 4 – через 400 сек.; 5 – через 1000 сек. и 6 – через 10000 сек. от начала опыта

После выхода системы на стационарное состояние сформировавшиеся профили концентраций сравнили с экспериментальными данными (рис. 2). Сюда же для сравнения наложены профили концентраций, рассчитанные по приближенному уравнению Тура [1] и по комбинированному методу В.В. Дильмана [3].

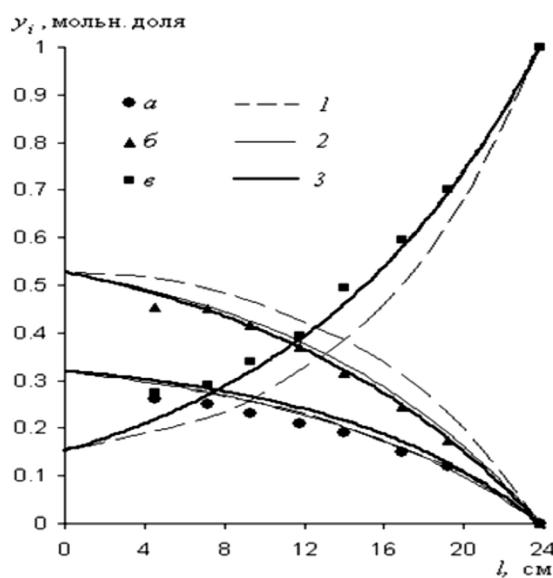


Рис. 2. Сравнение профилей концентраций в трубке Стефана, полученных опытным путем [2] (точки), с расчетными данными (линии), определенными разными методами:  
1 – по приближенному уравнению Тура [1];  
2 – по уравнениям, полученным комбинированным методом [3];  
3 – по матричной модели;  $\alpha$  – ацетон,  $\beta$  – метанол,  $v$  – воздух

Как видим, результаты расчета процесса трехкомпонентной диффузии по комбинированному методу Дильмана и по матричной модели практически совпали. Эти результаты вполне удовлетворительно согласуются и с опытными данными [15]. Следует отметить, что аппроксимационные решения Тура, которые зачастую трактуются как эталонные решения, согласуются с опытом существенно хуже.

### Список обозначений

$C$  – мольная плотность газовой смеси, кг-моль/ $m^3$ ;  $D$  – коэффициент бинарной диффузии,  $m^2/c$ ;  $N$  – поток вещества, кг-моль/( $m^2 \cdot c$ );  $P$  – давление, Па;  $R$  – универсальная газовая постоянная, кДж/(кг-моль К);  $T$  – температура газа, К;  $u$  – мольная концентрация газа;  $l$  – длина трубки (пути диффузии), м;  $[ ]$  – квадратная матрица;  $( )$  – столбцевая матрица.

### Индексы

$D$  – диффузионная составляющая;  $i, j$  – компоненты;  $f$  – поверхность раздела,  $K$  – конвективная составляющая;  $c$  – суммарный поток;  $*$  – эквимолярные условия;  $m$  – число компонентов.

### Список литературы

1. Кафаров В.В. Основы массопередачи. – М.: Высшая школа, 1972. – 494 с.
2. Рамм В.М. Абсорбция газов. – М.: Химия, 1971. – 767 с.
3. Дильман В.В. Комбинированный метод исследования и расчета многокомпонентной диффузии с инертным газом // Теорет. основы хим. технологии, 2008, т. 42, № 2. – С. 176-180.
4. Дильман В.В., Лотхов В.А., Каширская О.А. Экспериментальная проверка уравнений Стефана–Максвелла // Теорет. основы хим. технологии, 2009, т. 43, № 3. – С. 303-307.
5. Дильман В.В. Концентрационные зависимости трехкомпонентной диффузии Стефана–Максвелла в газовых смесях // Теорет. основы хим. технологии, 2010, т. 44, № 3. – С. 270-274.
6. Дильман В.В., Каширская О.А., Лотхов В.А. Особенности многокомпонентной диффузии // Теорет. основы хим. технологии, 2010, т. 44, № 4. – С. 396-400.
7. Toor H.L. Diffusion in three-component gas mixtures // AIChE Journal, 1957, vol. 3, № 2. – P. 198-204.
8. Туровский Е.Н., Александров И.А., Двойрис А.Д. Сравнение методов расчета диффузии в многокомпонентных газовых смесях // Химия и технология топлив и масел, 1971, № 4. – С. 36-40.
9. Александров И.А. К расчету массопередачи в многокомпонентных системах // Теорет. основы хим. технологии, 1970, т. 4, № 1. – С. 48-52.
10. Александров И.А. Массопередача при ректификации и абсорбции многокомпонентных смесей. – Л.: Химия, 1975. – 320 с.
11. Осипова Л.Э., Теляков Э.Ш., Николаев Н.А. Моделирование неэквимолярных процессов массо- и теплопереноса в системах газ (пар)-жидкость // Теорет. основы хим. технологии, 1997, т. 31, № 3. – С. 1-7.
12. Toor H.L. Solution of the linearized equation of multicomponent mass transfer // AIChE Journal, 1964, vol. 10, № 4. – P. 448-455.
13. Константинов Е.Н., Николаев А.М. Массопередача при ректификации многокомпонентных смесей // Известия ВУЗов. Нефть и газ, 1964, № 1. – С. 53-57.
14. Arnold J.H. Studies in diffusion III. Unsteady state vaporization and absorption // Trans. Am. Inst. Chem. Eng., 1944, vol. 40, № 3. – P. 361-369.
15. Carty R., Schrot T. Concentration profiles in ternary gaseous diffusion // Ind. Eng. Chem. Fundam, 1975, vol. 14, № 3. – P. 276-284.

**Osipova L.E.** – candidate of technical sciences, associate professor

E-mail: osipovalilija@mail.ru

**Kazan State University of Architecture and Engineering**

The organization address: 420043, Russia, Kazan, Zelenaya st., 1

**Nizamov I.I.** – post-graduate student

E-mail: nizyama@yandex.ru

**Kazan National Research Technological University**

The organization address: 420045, Russia, Kazan, K. Marks st., 68

## Research of diffusion in multicomponent gas mixtures

### Resume

Designing of system of air cleaning and heating (cooling) assumes carrying out different calculation of mass and heat transfer processes. Is necessary to consider that the multi-component of medium and the process primarily are related to the diffusions phenomena. As a rule description of multi-component diffusion are based on equations of Stefan-Maxwell. These equations obtained from the solution of the Boltzmann equation. For the isothermal and adiabatic conditions these equations are rigorous approximation, which satisfies practical requirements. As an important assumption in the derivation of an equation was assumption of independence of the binary molecular diffusion coefficient of the gas mixture. Theoretical and experimental results confirm the validity of this assumption.

Mathematical description diffusion process of multi-component gas mixtures is presented. The advantages of matrix models with comparison with obtained by the combined method equations of V.V. Dilman are shown. On the basis matrix equations of multi-component diffusion is developed mathematical model taking into account the dynamics of process in Stephen tube. The model was realized by the method of method of finite differences in Excel and Chem Cad. Three-component mixture - acetone, methanol and air was investigated. As a result, molar flows and concentrations, folding in each section of the tube as a result of the diffusion of volatile components (acetone, methanol) through a layer of inert gas (air), and the time to process a steady state were calculated. The formation of a stationary concentration profiles for 1 (acetone) and third (air) component along the tube was shown graphically. For the second component (methanol) profile qualitatively corresponds to the profile of the 1st component. Adequacy of the mathematical model is confirmed by comparing the values obtained profiles of concentrations of components with the results published in the literature.

**Keywords:** multi-component diffusion, mass transfer, Stephen's instrument, matrix model, equimolar process, dynamics.

### References

1. Kafarov V.V. Fundamentals of mass transfer. – M.: High School, 1972. – 494 p.
2. Ramm V.M. Absorption of gases. – M.: Chemistry, 1971. – 767 p.
3. Dilman V.V. Combined method of investigation and calculation of multicomponent diffusion with inert gas // Theoret. basis chem. technology, 2008, vol. 42, № 2. – P. 176-180.
4. Dilman V.V., Lotkhov V.A., Kashirskaya O.A. Experimental verification of the Stefan-Maxwell equations // Theoret. basis chem. technology, 2009, vol. 43, № 3. – P. 303-307.
5. Dilman V.V. Concentration dependences of ternary diffusion Stefan-Maxwell gas mixtures // Theoret. basis chem. technology, 2010, vol. 44, № 3. – P. 270-274.
6. Dilman V.V., Kashirskaya O.A., Lotkhov V.A. Features multicomponent diffusion // Theoret. basis chem. technology, 2010, vol. 44, № 4. – P. 396-400.
7. Toor H.L. Diffusion in three-component gas mixtures // AIChE Journal, 1957, vol. 3, № 2. – P. 198-204.
8. Turevsky E.N., Alexandrov I.A., Dvoyris A.D. Comparison of methods for the calculation of diffusion in multicomponent gas mixtures // Chemistry and technology of fuels and oils, 1971, № 4. – P. 36-40.
9. Alexandrov I.A. Calculation of mass transfer in multicomponent systems // Theoret. basis chem. technology, 1970, vol. 4, № 1. – P. 48-52.

10. Alexandrov I.A. Mass transfer in distillation and absorption of multicomponent mixtures. – L.: Chemistry, 1975. – 320 p.
11. Osipova L.E., Telyakov E.S., Nikolaev N.A. Neekvimolyarnyh modeling processes of mass and heat transfer in systems gas (vapor)-liquid // Theoret. basis chem. technology, 1997, vol. 31. – P. 1-7.
12. Toor H.L. Solution of the linerarized equation of multicomponent mass transfer // AIChE Journal, 1964, vol. 10, № 4. – P. 448-455.
13. Konstantinov E.N., Nikolaev A.M. Mass transfer in distillation of multicomponent mixtures // News of high schools. Oil and gas, 1964, № 1. – P. 53-57.
14. Arnold J.H. Studies in diffusion III. Unsteady state vaporization and absorption // Trans. Am. Inst. Chem. Eng., 1944, vol. 40, № 3. – P. 361-369.
15. Carty R., Schrot T. Concentration profiles in ternary gaseous diffusion // Ind. Eng. Chem. Fundam, 1975, vol. 14, № 3. – P. 276-284.