

Автореферат
№ 93

Израил. Гушану И.В.

ОДЕССКИЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ ХОЛОДИЛЬНОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

На правах рукописи

ДЬЯКОНОВ Герман Сергеевич

УДК 532.72

ОДНОФАЗНЫЙ МАССОПЕРЕНОС В ЖИДКИХ СМЕСЯХ

Специальность 05.14.05 - Теоретические основы
теплотехники

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

XV 1110

Институт холода
ОНАХТ
Бібліотека

Одесса - 1987

Работа выполнена в Казанском химико-технологическом институте им. С.М.Кирова.

Научный руководитель — Заслуженный деятель науки РСФСР и ТАССР, доктор технических наук, профессор
УСМАНОВ А.Г.

Официальные оппоненты — доктор технических наук старший научный сотрудник, В.И. НЕДОСТУП
кандидат физико-математических наук, доцент Л.Р. ЛЕНСКИЙ

Ведущая организация — Всесоюзный научно-исследовательский институт углеводородного сырья (г.Казань)

Защита диссертации состоится "18" сентября 1988 г. в 11 часов на заседании специализированного совета И.068.27.01 при Одесском технологическом институте холодильной промышленности по адресу:

270057, г.Одесса, ул. Петра Великого, 1/3, ОТИХП.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке института.

Автореферат разослан " " 1988 г.

Ученый секретарь
специализированного совета
доцент

Р.К.Никольшин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. В решениях XXVII съезда КПСС предусмотрено до 2000 года существенно изменить технический уровень производства химической, нефтехимической промышленности, химического машиностроения и других отраслей народного хозяйства, в том числе повысить точность проектных разработок.

Поскольку директивные показатели определяют необходимость значительного снижения энергетических, сырьевых и материальных затрат при выпуске серийной продукции, одним из средств решения поставленных задач является существенное увеличение точности предпроектных и проектных разработок нового оборудования и техники в целом.

Однако, сейчас нет надежных способов определения таких необходимых для этого величин, как характеристики диффузионного массопереноса в многокомпонентных жидких смесях. Единственным источником данных является эксперимент, от точности которого зависит эффективность и качество проектирования.

Цель работы заключалась в разработке новых методов экспериментального определения коэффициентов диффузии в жидких смесях на основе голографической интерферометрии и получении экспериментальных значений коэффициентов диффузии для неисследованных ранее смесей; развитии теоретического метода определения элементов матрицы коэффициентов многокомпонентной диффузии; обобщении на основе полученных результатов математического описания однофазного массопереноса через турбулентный пограничный слой в случае течения многокомпонентной смеси, а также в создании соответствующего математического и программного обеспечения.

Научная новизна. Разработано математическое и программное обеспечение семи новых методов измерения коэффициентов диффузии в жидких смесях, позволяющее осуществить выбор метода исходя из требуемой точности результатов при минимальной трудоемкости их получения.

Осуществлено математическое моделирование процессов, протекающих в диффузионном приборе и на этой основе определены оптимальные с точки зрения точности результатов и трудоемкости опыта условия их проведения.

Впервые проведено экспериментальное исследование концентрационной зависимости коэффициентов бинарной диффузии при нормальном давлении в жидких смесях *n*-гексан - четырехлористый углерод при 293 К, этиловый спирт - четырехлористый углерод при 296 К, *n*-гексан - толуол при 298 К, *n*-гексан - бензол при 299 К.

○ Разработана теоретическая схема получения замкнутого описания коэффициентов диффузии в жидких смесях, позволяющая в рамках аппарата решеточных теорий рассчитывать кинетические коэффициенты.

Предложено обобщение математического описания однофазного массопереноса в турбулентном пограничном слое на случай многокомпонентных смесей.

Научные положения, защищаемые в работе.

Для создания точных и эффективных методов измерения коэффициентов диффузии необходимо использовать различные варианты краевых условий математической постановки задачи о диффузии в жидких смесях. Математическое моделирование процессов, протекающих в голографическом диффузиометре, даёт возможность выбора оптимальных по точности и трудоёмкости условий проведения эксперимента. Метод голографической интерферометрии является наиболее точным средством измерения полей концентраций. На основе принципа сопряженного физического и математического моделирования возможно сокращенное описание поведения неравновесных молекулярных систем, которое представляет основу для получения статистического оператора неравновесных систем, потоковых соотношений и замкнутого определения коэффициентов переноса. Использование принципа независимости диффузионных потоков позволяет обобщить математическое описание однофазного массопереноса на случай течения многокомпонентной жидкой смеси вдоль твердой поверхности.

Основные научные результаты, полученные в работе.

Разработаны 2 новых метода измерения коэффициентов бинарной диффузии и 5 новых методов измерения элементов матрицы коэффициентов трехкомпонентной диффузии, допускающих реализацию произвольного начального поля концентраций в диффузионном приборе. Четыре из семи построены на аналитической процедуре извлечения коэффициентов диффузии из экспериментальной информации, полученной методом голографической интерферометрии.

Экспериментально получена концентрационная зависимость коэффициентов бинарной диффузии при нормальном давлении в четырех жидких смесях и дано объяснение их экстремального характера. Рассмотрена новая теоретическая схема получения замкнутого описания матрицы коэффициентов диффузии в жидких смесях, не использующая традиционного аппарата частичных функций распределения и лишённая, тем самым, проблемы замыкания системы уравнений для их определения.

Получено сокращенное описание неравновесных многочастичных систем двумя независимыми методами - "сопряженного физического и математического моделирования" и "проектирующих операторов". Продемонстрировано согласование полученных результатов в асимптотических случаях разреженных газообразных смесей, однокомпонентных жидкостей из твердых сфер, идеальных жидких смесей с уравнениями Стефана-Максвелла, Энского, принципа независимости диффузионных потоков. На основе созданного программного обеспечения получены температурные и концентрационные зависимости коэффициентов диффузии для ряда чистых жидкостей, полярных и неполярных, и смесей из полярных и неполярных компонентов. Предложено в критериальной форме уравнение для коэффициента массоотдачи от твердой поверхности к движущейся многокомпонентной жидкой смеси, учитывающее молекулярный диффузионный перенос всех компонентов.

Практическая ценность и внедрение результатов работы.

Полученные экспериментальные значения коэффициентов бинарной диффузии в четырех жидких смесях необходимы для расчета, моделирования и проектирования аппаратов разделения веществ химической, нефтеперерабатывающей и нефтехимической и других отраслей промышленности в качестве справочных данных.

Математическое и программное обеспечение семи новых методов измерения коэффициентов диффузии в жидких смесях и разработанные экспериментальные средства могут быть реализованы для выбора оптимальных схем экспериментального получения справочных данных.

Разработанные алгоритмы и их программное обеспечение для теоретического определения коэффициентов диффузии и массоотдачи могут быть использованы в автоматизированных системах получения стандартных справочных данных и Системах Автоматизированного Проектирования (САПР). Они переданы для ис-

пользования при проектировании оборудования для производства химических реагентов нефтедобычи в НПО "Союзнефтепромхим"; средств расходомерии во ВНИИР; оборудования для нефтяной промышленности в ТатНИИНефтеХимМаш; производства кинофотоматериалов в КазНИИТехфотопроект; оборудования для переработки углеводородного сырья во ВНИИУС (г.Казань), о чём в диссертации имеются соответствующие документы.

Апробация работы. Материалы диссертации докладывались и обсуждались на ежегодных научно-технических конференциях КХТИ им. С.М.Кирова в период 1986-1987 гг.; I, II и III Всесоюзной студенческой научной конференции "Интенсификация тепло- и массообменных процессов в химической технологии", Казань, 1982, 1984, 1987 гг.; V Всесоюзной конференции "Математические методы в химии", Грозный, 1985 г.; VIII Всесоюзной теплофизической школы, Алма-Ата, 1985 г.

Публикации. По теме диссертации имеется II публикаций.

Объём и структура диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, выводов, заключения и приложений. Работа содержит 156 страниц основного текста, 19 рисунков, 7 таблиц, 5 программ для микроЭВМ Электроника ДЗ-28 и 2 блок-схемы алгоритмов. Библиография содержит 212 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В диссертации рассматриваются имеющиеся в настоящее время теоретические подходы для описания процессов переноса в жидких смесях; показывается, что среди них не существует ни одного, позволяющего на основе развитого математического аппарата построить инженерный метод расчета коэффициентов диффузии в идеальных и неидеальных смесях.

Анализируются полуэмпирические методы описания потоковых соотношений и их кинетических коэффициентов с целью выявления возможной основы для построения математического и программного обеспечения методов расчета. Классифицируются имеющиеся экспериментальные методы исследования молекулярной диффузии в жидкостях и выделяются, как наиболее точные и перспективные, оптические методы. На основе проведенного анализа формулируются направления дальнейших исследований:

I. Разработка новых методов измерения коэффициентов диффузии в жидких смесях.

2. Математическое моделирование процессов, протекающих в голографическом диффузиометре и выбор на этой основе оптимальных условий эксперимента.

3. Экспериментальное исследование коэффициентов диффузии в жидких смесях с экстремальным характером концентрационной зависимости.

4. Разработка теоретического подхода для формулировки потоковых соотношений переноса массы и построение замкнутых выражений для кинетических коэффициентов в жидких смесях.

5. Создание математического и программного обеспечения для реализации инженерного метода расчета коэффициента диффузии в жидких смесях.

6. Обобщение на основе полученных потоковых соотношений молекулярного массопереноса математического описания массоотдачи от твердой поверхности к движущейся многокомпонентной жидкой смеси.

Математическое моделирование голографических диффузиометров

В работе рассматриваются математические основы двух методов реализации диффузионного эксперимента в бинарных жидких смесях. Методом математического моделирования выявлено преимущество в точности первого метода, позволяющего избежать принципиальных трудностей, связанных с организацией "острой" границы раздела между жидкостями в начальный момент времени. В то же время показан существенный выигрыш в продолжительности и трудоёмкости осуществления эксперимента при его организации с начальным условием вида δ -функции и построении методики извлечения коэффициентов на основе метода моментов.

Для получения значений коэффициента диффузии необходимо учитывать истинный начальный профиль концентраций, поэтому в первом методе настоящей работы задача о диффузии на бесконечной прямой сведена к решению задачи на полубесконечной прямой. Для упрощения методики извлечения D из решения уравнения нестационарной диффузии, т.е. решения обратной краевой задачи, начало полубесконечной прямой выбиралось при $x = 0$, где $C(x=0) = 0$. Тогда явное выражение для коэффициентов диффузии имеет вид:

$$\mathcal{D} = \pi \left[\int_0^{\infty} S(x, t) dx \int_0^{\infty} \frac{S(\alpha, \tau)}{\sqrt{t-\tau}} d\tau \right]^2 \quad (I)$$

Моделирование процедуры извлечения коэффициентов этим методом приводит к неточности $\sim 2\%$ при экспериментальной неточности определения $S \sim 0,1$.

Однако у метода I, несмотря на его точность, есть принципиальный недостаток, связанный с необходимостью использования временных интегралов, для получения которых требуется расшифровать большое число интерферограмм, что приводит к большой трудоёмкости эксперимента.

Указанный недостаток легко может быть ликвидирован при реализации в эксперименте специального вида начального условия, называемого δ -функцией (метод 2). Практическое осуществление δ -ввода эквивалентно введению возмущенной смеси фиксированного состава в очень узкую пространственную область $\Delta l \ll l$, где l - длина диффузионной ячейки. Использование в алгоритме расчета метода моментов позволяет реализовать эксперимент, в котором однократное фотографирование интерферограммы обеспечивает всю необходимую информацию для получения \mathcal{D} , в силу чего трудоёмкость метода существенно снижается.

Математическое моделирование метода показывает, что при неточности определения $S \pm 0,05$ ошибка в воспроизведении коэффициента составляет $\sim 1\%$, а максимальная разница значений \mathcal{D} определенных через разные комбинации моментов $\sim 2\%$.

В работе осуществлено обобщение метода I на трехкомпонентную смесь (метод 3). При этом для решения уравнения диффузии использовался метод диагонализации Тура. Основная характерная особенность метода 3 - запись в аналитическом виде зависимости элементов матрицы коэффициентов трехкомпонентной диффузии (МКТД) от временных и пространственных интегралов функций смещения интерференционных полос на двух отличающихся в пределах видимого диапазона длинах волн; а также возможность учёта начальных возмущений.

Математическое моделирование данного метода позволило выявить оптимальные значения начальных концентраций возмущенной смеси для двух независимых экспериментов, времени их осуществления, шага пространственного и временного интегрирования. Основное ограничение этого метода заключается в необ-

ходимости экспериментального определения функций смещения с точностью до 0,01 для получения хорошей точности извлечения МКТД.

В работе разработано 3 численных метода извлечения МКТД. В первом из них в случае известных инкрементов показателя преломления смеси методом "случайного поиска" неплохие по точности значения МКТД получаются на основе массива $S(x, z)$, заданных с точностью до 0,01. Во втором - тем же методом определяется сразу 8 неизвестных величин - элементы МКТД и инкременты показателя преломления. Однако при этом выявлено, что точность получаемых результатов существенно зависит от выбора начального приближения, поэтому метод рекомендуется для уточнения экспериментальных результатов МКТД. В третьем случае при использовании в алгоритме поиска метода 3 удаётся извлечь МКТД с точностью до 1,5% при точности измерения до 0,01 при неизвестных инкрементах показателя преломления. Программное обеспечение 4+6 методов выполнено на языке Фортран для ЭВМ М-7000.

Реализация численных методов связана с наличием "острой" границы в качестве краевого условия, поэтому был разработан седьмой метод, математические основы которого получены на основе интегрирования уравнений диффузии дважды по координате и один раз по времени с реализацией граничных условий специального вида. Результат интегрирования - линейная система уравнений относительно D_{ij} .

$$\iint_0^{\infty} \left[(c_i)_{z_2} - (c_i)_{z_1} \right] d\xi dx = \sum_{j=1}^2 D_{ij} \int_{z_1}^{z_2} (c_j)_{x=0} d\tau; \quad i=1,2 \quad (2)$$

Моделирование этого метода осуществлялось для модельного начального условия вида δ -функции на микроЭВМ Электроника ДЗ-28. При измерении функций смещения S с точностью до 0,1 можно получить приемлемую точность извлечения МКТД.

Экспериментальное изучение диффузии в жидких смесях

Все экспериментальные результаты получены оптическим методом голографической интерферометрии. Оптическая схема голографического интерферометра соответствует схеме Маха - Цендера (рис. I). В качестве источника излучения использовался гелий - неоновый лазер ЛГ-38. Голограмма устанавливалась на

Оптическая схема

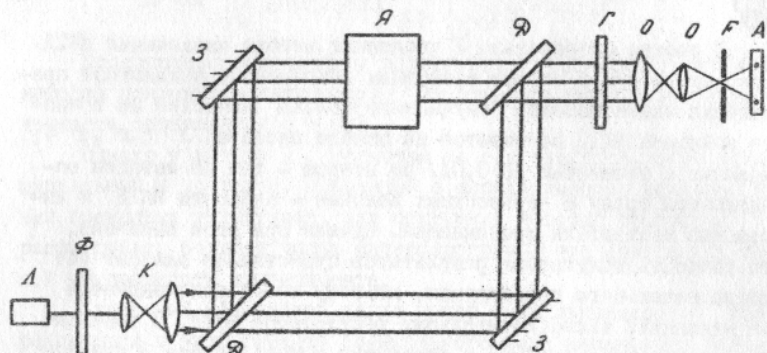


Рис. 1.

Л - источник излучения, Ф - фотозатвор, К - коллиматор, А - фотоаппарат, Д - светоделительный клин, З - зеркало, Г - голограмма, О - объектив, Я - измерительная ячейка, F - диафрагма

Коэффициенты бинарной диффузии в смеси $C_2H_5OH - CCl_4$ при 296 К и нормальном давлении

$D \cdot 10^9 \text{ м}^2/\text{с}$

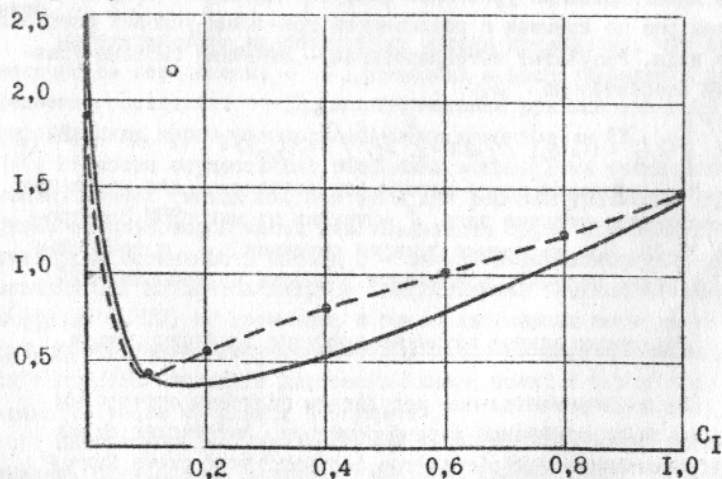


Рис. 2.

—•— - эксперимент
 — - расчет по разработанному алгоритму

небольшом расстоянии от кюветы; при этом отпадала необходимость использования объектива, проецирующего изображение ячейки на голограмму. Для уменьшения влияния эффектов, связанных с нелинейностью записи, соотношение по интенсивности между опорным и объектным пучками составляло 1:10. Преимуществами такой схемы является компактность, виброустойчивость, удобство настройки.

На основе требований достижения приемлемой точности измерения D была сконструирована ячейка с прорезью высотой 40 мм, шириной 8 мм и толщиной по ходу луча 2 мм из нержавеющей стали. Ячейка имела 3 капилляра для ввода жидкостей, причём 2 верхних располагались на расстоянии 2 мм друг от друга по высоте с целью возможности осуществления δ -ввода методом наложения. Для создания замкнутого объёма ячейка с двух сторон сжималась обоймой с оптическими стеклами через полиэтиленовые прокладки толщиной 0,2 мм.

Оптическая схема целиком смонтирована на виброизолированном столе, представляющем собой массивную (~ 1000 кг) стальную плиту, уложенную на пневматические амортизаторы.

Основной массив экспериментальных данных по концентрационной зависимости коэффициента бинарной диффузии в жидких смесях $C_6H_6 - CCl_4$; $C_2H_5OH - CCl_4$; $C_6H_6 - C_2H_5OH$; $C_6H_6 - C_6H_6$ был получен методом 2. Первый метод использовался в качестве эталонного, а также в тех случаях, когда D существенно зависел от состава, и влияние начального возмущения могло быть заметным. В качестве эталонных систем были использованы изобутиловый спирт-вода; этанол-вода, n -гексан - четыреххлористый углерод.

Выбор объектов исследования определялся стремлением отразить характерные особенности поведения жидких смесей: смеси из неполярных компонентов; с полярным компонентом, экстремальный характер концентрационной зависимости которой показан на рис.2.

Теоретическое описание однофазного массопереноса

В настоящее время определение потоков массы в жидких рабочих средах осуществляется на основе линейных соотношений молекулярного переноса феноменологической природы. Для определения потоков нами применен метод, характерная особенность которого заключается в совместном использовании методов физического и математического моделирования. При этом процессы, протекающие

в сложных системах, представляются в виде иерархии элементарных явлений разных масштабов, математическое описание каждого из которых устанавливается независимо методом физического моделирования. Влияние масштаба явления в целом учитывается подстройкой параметров математического описания элементарных явлений на основе локального удовлетворения законам сохранения.

Установлено, что в N -частичной молекулярной системе можно выделить явления 2-х временных масштабов: t_c - времени столкновения молекул и t_p - время релаксации макроскопических полей ($t_c \ll t_p$). В соответствии с этим можно ожидать, что математическое описание каждого масштаба может строиться независимо, а их взаимодействие учитываться параметрически. Подстройка параметров производится на основе удовлетворения принципу сохранения числа элементов ансамбля Гиббса в виде уравнения Лиувилля, осредненного по t_c (т.к. поведение реальных N -частичных систем формулируется в терминах величин, осредненных приборами).

В соответствии с введенной иерархией масштабов неявный вид N -частичной функции распределения F^N может быть определен в рамках использования результатов физического моделирования явлений каждого масштаба независимо.

Так, в частности, в неравновесной системе из ν компонентов возникают диффузионные потоки \bar{J}_α , которым соответствуют диффузионные скорости \bar{V}_α . При этом макроскопический масштаб системы определяется параметрами $\bar{V}_\alpha(\nu, t)$; $M_\alpha(\nu, t)$. Тогда

$$F^N = F^N(\rho, \nu, t, \bar{V}_\alpha, \dots, M_\alpha, \dots); \quad \alpha = 1, \nu \quad (3)$$

В случае существования локального равновесия зависимость от ρ, ν , и M_α определяется через F_0^N ; поскольку $\bar{V}_\alpha \ll \bar{V}_\alpha^i$, F^N можно разложить в ряд

$$F^N = F_0^N \left(1 + \sum_{\alpha, k} a_{\alpha k} \frac{\partial}{\partial V_{\alpha k}} + \sum_{\alpha, k, l} a_{\alpha k l} \frac{\partial^2}{\partial V_{\alpha k} \partial V_{\alpha l}} + \dots \right),$$

где ограничиться линейным членом.

Коэффициенты разложения $a_{\alpha k}$ находятся из дополнительных условий в виде определения потоков \bar{J}_α .

Для определения \bar{V}_α нужно потребовать, чтобы выполнялось уравнение Лиувилля. Тогда будем иметь

$$3(KT)^2 \nabla M_\alpha - \sum_{\beta=1}^{\nu} \left\langle \frac{1}{\rho_\beta} \frac{\partial}{\partial \rho_\beta} \right\rangle (V_\beta - V_\alpha) = 0; \quad \alpha = 1, \nu \quad (4)$$

Явный вид F^N в работе также был получен на основе аппарата практирующих операторов.

Нужно отметить, что из (4) следуют все известные резуль-

таты теорий в асимптотических случаях разреженного газа, теории линейных реакций для чистых жидкостей и результаты на основе принципа независимости диффузионных потоков.

В случае существования ограничений на потоки, определяемых реализуемой в опыте системой отсчета, на основе решения (4) для бинарной системы получено

$$\bar{J}_\alpha = -\nabla M_\alpha \frac{3(KT)^2 N_A m_B}{\rho \langle \frac{1}{\rho_\beta} \frac{\partial}{\partial \rho_\beta} \rangle_0} = -\frac{m_\alpha n N_\alpha}{KT \rho} D_{\alpha\beta} \nabla M_\alpha \quad (5)$$

Откуда

$$D_{\alpha\beta} = 3(KT)^2 / \left\langle \frac{1}{\rho_\beta} \frac{\partial}{\partial \rho_\beta} \right\rangle_0 (n_\alpha + n_\beta) \quad (6)$$

Для вычисления средних от динамических функций по равновесному ансамблю была использована концепция "самосогласованного" поля, приводящая к решеточной модели жидкого состояния. Ее реализация выполнена в 2-х вариантах. В первом для коэффициента самодиффузии имеем

$$D_{ii} = \left[\left(\frac{2KT}{\mu} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{S_0}{k} \cdot \frac{3}{4\pi} \right) \right] / 4.5(a-\sigma)^2 \quad (7)$$

Для определения a использовалась минимизация функционала свободной энергии жидкости.

В общем случае бинарной диффузии из (6) имеем

$$D_{\alpha\beta} = 3 \left(\frac{KT}{2\pi \mu_{\alpha\beta}} \right)^{1/2} \frac{1}{8\pi \sigma_{\alpha\beta}^2 g_{\alpha\beta}} \quad (8)$$

и для вычислений $g_{\alpha\beta}$ используется теория возмущений. В качестве нулевого приближения служили результаты для модели твердых сфер. Учет вклада в радиальную функцию распределения $g_{\alpha\beta}$ сил притяжения был выполнен на основе уравнения состояния вида

$$p + f(\nu) = nKT \left[1 + \frac{2}{3} \pi n \sum_{\alpha=1}^{\nu} \sum_{\beta=1}^{\nu} x_\alpha x_\beta \sigma_{\alpha\beta}^3 g_{\alpha\beta} \right] \quad (9)$$

и аналитической формы уравнения состояния чистых жидкостей Ли - Кеслера.

Разработанный алгоритм расчета коэффициентов бинарной диффузии проверен на литературных данных для чистых жидкостей N_2 , CH_4 , C_2H_6 , H_2O , смеси $C_2H_5OH-H_2O$, а также на собственных экспериментальных данных. В случае неидеальных смесей термодинамический фактор $\partial \ln f_\alpha / \partial \ln x$ определялся на основе программного обеспечения расчета равновесия смеси в рамках двух аппроксимирующих моделей - НРТЛ и Вильсона. На рис.2 показан пример согласования расчетных и экспериментальных результатов, демонстрирующий хорошую сходимость.

На основе полученных потоковых соотношений предложено обобщенное уравнение для коэффициентов массосдачи, учитывающее влияние всех компонентов смеси.

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

1. Разработанные 2 новых метода измерения коэффициентов бинарной диффузии и 5 методов измерения МКТД не содержат принципиальных трудностей существующих методов.

2. Разработанное математическое и программное обеспечение семи новых методов измерения коэффициентов диффузии в жидких смесях позволяет осуществить выбор метода исходя из требуемой точности результатов при их минимальной трудоёмкости.

3. Проведенное математическое моделирование процессов, протекающих в диффузионной ячейке, позволяет определить оптимальные по точности условия проведения экспериментов.

4. Результаты впервые проведенного экспериментального исследования концентрационной зависимости коэффициентов бинарной диффузии при нормальном давлении в жидких смесях $n - C_6H_{14} - CCl_4$ при 293 К; $C_2H_5OH - CCl_4$ при 296 К; $n - C_6H_{14} - C_6H_5CN$ при 298 К и $n - C_6H_{14} - C_6H_6$ при 299 К представляют интерес в качестве справочных данных для проектирования аппаратов разделения веществ.

5. Разработанная на основе принципа сопряженного физического и математического моделирования новая теоретическая схема получения описания матрицы коэффициентов диффузии в жидких смесях лишена проблемы замыкания системы уравнений для их определения.

6. Выражения, полученные в рамках аппарата решеточных теорий растворов и на основе теории возмущений позволяют вычислять коэффициенты бинарной диффузии в жидких идеальных и неидеальных смесях.

7. Уравнение для коэффициента массоотдачи от твердой поверхности, полученное на основе принципа независимости диффузионных потоков, учитывает влияние всех компонентов смеси.

8. Математическое и программное обеспечение метода расчета коэффициентов бинарной диффузии может быть построено на основе аналитических форм уравнений состояния Ликслера для чистых жидкостей и моделей НРТЛ и Вильсона для смесей.

Основное содержание диссертации опубликовано в работах:

1. Клинова Л.П., Сосновская Н.В., Дьяконов Г.С. Определе-

ние коэффициентов бинарной диффузии в жидкостях методом голографической интерферометрии // Прикладная электрохимия : Сб. Казан. хим.-техн. ин-та. - Казань, 1981. - с.72-75.

2. Извлечение матрицы коэффициентов многокомпонентной диффузии из хроматографического эксперимента / Дьяконов Г.С., Перельгин О.А. // Тезисы докл. Всесоюз. студ. научн. конф. "Интенсификация тепло- и массообменных процессов в химической технологии". - Казань. - 1982. - с. 74.

3. Дьяконов Г.С., Усманов А.Г. Уравнение массопереноса в турбулентном пограничном слое на границе многокомпонентная среда - твердое тело // Тепло- и массообмен в хим. технологии: Сб. Казан. хим.-техн. ин-та. - Казань, 1984. - с.68-70.

4. Уравнение массопереноса в турбулентном пограничном слое на границе многокомпонентная среда - твердое тело / Дьяконов Г.С., Усманов А.Г. // Тезисы докл. П Всесоюз. студ. научн. конф. "Интенсификация тепло-массообменных процессов в химической технологии". - Казань. - 1984. - с.202.

5. Моделирование массопереноса в системе многокомпонентная среда - твердое тело / Дьяконов Г.С., Ибрагимов Р.А. // Тезисы докл. У Всесоюз. конф. "Математические методы в химии". - Грозный. - 1985. - с.97.

6. Соотношение для потоков массы в многокомпонентных жидких смесях / Галямов М.Р., Дьяконов Г.С., Ибрагимов Р.А. // Тезисы докл. Ш Всесоюз. студ. научн. конф. "Интенсификация тепло- и массообменных процессов в хим. технологии". - Казань. - 1987. - с. 222 - 223.

7. Голографический поляризационный диффузиометр / Болтыбаева Л.Л., Дьяконов Г.С., Ибрагимов Р.А. // Тезисы докл. Ш Всесоюз. студ. научн. конф. "Интенсификация тепло- и массообменных процессов в химической технологии". - Казань. - 1987. - с.34.

8. Дьяконов Г.С., Ибрагимов Р.А., Усманов А.Г. Измерение кинетических характеристик массопереноса в жидких смесях методом голографической поляризационной интерферометрии // Массообменные процессы и аппараты химической технологии : Сб. Казан. хим.-техн. ин-та. - Казань. - 1987. - с. 136-139.

9. Дьяконов Г.С., Ибрагимов Р.А. Измерение матрицы коэффициентов трехкомпонентной диффузии методом двухдлиновой голографической интерферометрии // Теплообмен в хим. технологии: Сб. Казан. хим.-техн. ин-та. - Казань. - 1987. - с.74-80.

10. Сопряженное физическое и математическое моделирование переноса массы в жидких смесях / Дьяконов Г.С., Ибрагимов Р.А., Дьяконов С.Г.; Казан. хим.-техн. ин-т.- М., 1987. - 28 с.: - Деп. в ВИНТИ 10.08.87 № 5768-В-87.

11. Измерение кинетических характеристик массопереноса в жидких смесях методом голографической поляризационной интерферометрии / Дьяконов Г.С., Ибрагимов Р.А., Усманов А.Г.; Казан. хим.-техн. ин-т.- М., 1987. - 15 с.: - Деп. в ВИНТИ 10.08.87 № 5770-В-87.

Условные обозначения:

D , $D_{\alpha\beta}$ - коэффициент бинарной диффузии; S - функция смещения интерференционных полос; C - концентрация; x - координата; t , τ - время; D_{ij} - элементы матрицы коэффициентов трехкомпонентной диффузии; f^N - N - частичная функция распределения; \bar{p}_i , \bar{v}_i и \bar{u}_i - импульс, координата и скорость i -ой молекулы системы; μ_α - химический потенциал компонента α ; \bar{V}_α - диффузионная скорость компонента α ; V - число компонентов смеси; f_0^N - равновесная N - частичная функция распределения; k - постоянная Больцмана; T - абсолютная температура; ρ - плотность; N_α - число частиц компонента α ; m - молекулярная масса; n - числовая плотность; S_2 - конфигурационная энтропия; a - параметр решетки; b - параметр потенциала Леннарда - Джонса; $g_{\alpha\beta}$ - радиальная функция распределения в месте контакта твердых сфер; z_α - мольная доля компонента α в смеси; D_{ii} - коэффициент самодиффузии.

Гьяконов