

УДК 541.64.532.72

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДИФФУЗИИ НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЕЩЕСТВА В ПОЛИМЕРНОМ МАТЕРИАЛЕ

© 1998 г. Г. А. Аминова, Г. В. Мануйко, Г. С. Дьяконов, В. Ф. Сопин

Казанский государственный технологический университет
420015 Казань, ул. К.Маркса, 68

Поступила в редакцию 22.12.97 г.
Принята в печать 26.02.98 г.

Предложена математическая модель диффузии низкомолекулярного вещества в полимерных частицах, которая учитывает происходящие при этом изменения структуры, массы и объема частиц. Из уравнения баланса массы выведена формула вычисления скорости усадки частиц в процессе экстракции растворителя, что исключает необходимость ее задания. Особенностью предложенной модели является наличие подвижной границы, в связи с чем разностная схема построена с учетом перехода от изменяющейся к фиксированной области. В результате реализации представленной разностной схемы становится возможным определить поле распределения концентрации растворителя внутри частиц в каждый момент времени, скорость усадки частиц и кинетические характеристики процесса удаления растворителя.

ВВЕДЕНИЕ

Исследование диффузии низкомолекулярных веществ представляет значительный интерес для различных областей физикохимии полимерных систем. На сегодняшний день по данной проблеме получен и систематизирован большой объем экспериментальных и теоретических результатов. В качестве основных среди них можно выделить сведения о характере изменения коэффициентов диффузии в зависимости от состава раствора и температуры; влиянии геометрии диффундирующих молекул, зависимости диффузии от надмолекулярной и фазовой структуры полимеров, соотношении диффузионных и релаксационных процессов; взаимосвязи между коэффициентами взаимо- и самодиффузии, о различных феноменологических моделях и т.д.

Особенностью рассматриваемого процесса диффузии низкомолекулярного вещества в полимерном материале является одновременное изменение состава взаимодействующих фаз, структуры полимерного материала и его объема. Кинетика процесса определяется главным образом молекулярной диффузией низкомолекулярного целевого вещества в полимере, сопровождаю-

щейся изменением структуры полимерной фазы, релаксацией макромолекул с соответствующим послойным изменением диффузионных характеристик и плотности материала.

В литературе известен целый ряд теоретических работ, в которых исследованы массообменные процессы в полимерах с учетом изменения структуры и объема полимерного материала. Обычно при описании процесса переноса низкомолекулярного вещества в полимерном материале считают, что функция изменения его объема или линейного размера известна [1–3]. В наиболее, на наш взгляд, интересной работе с точки зрения учета подвижности границ раздела фаз рассмотрен процесс изменения объема тела, вызванный его усадкой (при сушке и экстрагировании) или набуханием (при сорбции) в полимерной системе [4]. Однако предполагалось, что объем полимерной гранулы изменяется по заранее заданному закону. В работе [5] предложена математическая модель на основе дифференциального уравнения с переменным коэффициентом диффузии, зависящим от времени релаксации макромолекул полимера.

В работе [6] при математическом описании получения полимерного сферического продукта кроме традиционных взаимодействующих фаз (сплошной (растворитель, вода), дисперсной (полимерные частицы) и паровой фазы, в которую идет выпаривание растворителя) рассматривается еще фаза "жидкой мембранны" (желатины или мездрового клея). Математическая модель процесса строится на основе законов сохранения массы, импульса и энергии для каждого компонента и условий равновесия. Упрощение математической модели проводится на основе оценки пространственно-временных масштабов элементарных явлений, составляющих рассматриваемый процесс. В данной модели усадка частиц учитывается пересчетом радиуса частиц; вместе с тем в уравнении переноса растворителя отсутствует член учитывающий скорость усадки частиц.

Анализ литературных источников показал, что в существующих на настоящий момент математических моделях исследуемого процесса недостаточно проработан вопрос о подвижности границ раздела фаз, что вносит в описание процесса существенные погрешности. Предлагаемые модели построены либо без учета изменения структуры и объемов взаимодействующих фаз, либо в предположении, что они изменяются по известным законам. В настоящей работе предлагается модель диффузии низкомолекулярного вещества в процессе экстракции растворителя из полимерного материала с учетом его усадки.

ТЕОРИЯ

Для описания процесса экстрактивного извлечения растворителя из полимерных частиц воспользуемся упрощенным методом [1] построения модели, который включает описание процесса переноса на уровне одной частицы дисперсной фазы и в дисперсной системе в целом. Анализ процесса переноса в дисперсной системе строится с использованием результатов решения соответствующей задачи об элементарном акте переноса.

Рассмотрим массообмен одиночной частицы со сплошной фазой. Можно считать, что полимерные частицы в процессе извлечения растворителя ведут себя как твердые тела, поскольку в них не наблюдаются циркуляция и перемешивание жидкости (растворителя), как это имеет место в объеме капель обычных жидкостей.

Экстрактивное извлечение растворителя из полимерных частиц сопровождается значительной усадкой (объем частиц уменьшается в несколько раз), в связи с чем математическая модель массопереноса растворителя внутри частицы должна описывать изменение не только состава частицы, но и ее объема.

Пусть частица представляет собой истинный раствор полимера в растворителе (в состав частицы могут входить и другие компоненты). В процессе экстракции молекулы растворителя перемещаются из внутренних областей к поверхности частицы, а молекулы полимера смещаются к центру, что проявляется в виде усадки частицы.

Поместим в центр частицы начало неподвижной системы координат. Уравнение переноса массы растворителя внутри частицы выводится на основе уравнения баланса массы этого компонента для произвольной малой фиксированной относительно системы отсчета области объема V . Скорость изменения массы растворителя в выделенном объеме V , с одной стороны, можно запи-

сать в виде $\int \frac{\partial c_2}{\partial t} dV$, где c_2 – концентрация растворите-

ля в микрообъеме V . С другой стороны, если в частице отсутствуют химические реакции, то изменение массы растворителя в выделенной области возможно только за счет разности между вошедшим и вышедшим количествами растворителя через поверхность области. Используя формулу Гаусса-Остроградского и обычные в таких случаях преобразования, можно получить локальное уравнение баланса массы растворителя

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = -\operatorname{div} J_p, \quad (1)$$

где J_p выражается через линейную скорость переноса растворителя в выбранной системе отсчета с помощью формулы $J_p = c_2 w_p$.

Вследствие усадки всех слоев частицы происходит макроскопическое движение вещества частицы со скоростью v (равной скорости усадки). Представим вектор поверхностной плотности потока J_p в виде суммы

$$J_p = J_{p, \text{конв}} + J_{p, \text{диф}}, \quad (2)$$

где $J_{p, \text{конв}} = c_2 v$, $J_{p, \text{диф}} = c_2 (w_p - v)$

Соотношение (2) – это формальная запись, позволяющая выделить поток относительного переноса растворителя, связанный с отклонением локальной скорости v_p движения растворителя в выделенной малой области от скорости v перемещения области вследствие усадки.

Подставив соотношение (2) в формулу (1), получим уравнение диффузии растворителя

$$\frac{\partial c_2}{\partial \tau} = -\operatorname{div}(c_2 v + J_{p, \text{диф}}), \quad (3)$$

учитывающее усадку частицы. Оно отличается от обычного уравнения диффузии слагаемым, включающим скорость усадки частицы.

Диффузионный перенос вещества в первом приближении можно описать с помощью закона Фика

$$J_{p, \text{диф}} = -D \operatorname{grad} c_2 \quad (4)$$

Тогда уравнение (3) запишется в виде

$$\frac{\partial c_2}{\partial \tau} = -\operatorname{div}(c_2 v - D \operatorname{grad} c_2), \quad (5)$$

где D – эффективный коэффициент диффузии. Следует сказать, что происходящее в процессе усадки (набухания) изменение структуры полимера может оказывать влияние на диффузию молекул растворителя [7, 8]. При этом коэффициент диффузии зависит не только от концентрации извлекаемого (проникающего) вещества, но и от других переменных. Например, от изменяющихся во времени структурных характеристик или от внутренних напряжений [7, 9, 10].

Согласно данным работ [11, 12], при набухании процесс диффузии низкомолекулярных жидкостей или их паров в полимеры определяется не только проникновением молекул сорбата в поры полимера, но также связан с конформационными перестройками макромолекул, т.е. релаксационными процессами, сопровождающими процесс диффузии. В случае полимера, находящегося в напряженном состоянии, проникновение растворителя, приводя к разрушению локальных (межмолекулярных) связей, способствует конформационной перестройке макромолекул в сторону упорядочения. Релаксационные свойства полимеров учитываются в формуле для коэффициента диффузии растворителя в полимере [11]. Анализ

функциональной связи коэффициента диффузии и концентрации низкомолекулярного компонента в полимерных системах показывает, что она не однозначна и во многом определяется взаимодействием молекул высокомолекулярного соединения и растворителя. Особенно сложно оценить ситуацию для многокомпонентной системы, когда для растворения используется смесь низкомолекулярных веществ или из раствора извлекаются сложные смеси. Для рассматриваемого в настоящей работе процесса в первом приближении можно использовать зависимость $D = D_0 c^k$, где D_0 и k – константы.

В связи с тем что нагревание системы происходит достаточно медленно, можно считать, что отсутствуют большие перепады температуры, и вклад температуропроводности в общий поток растворителя незначителен. Учтем этот вклад через эффективный коэффициент диффузии D .

Если считать, что пространственная зависимость величин, входящих в уравнение (5), в каждой точке частицы сводится к зависимости от расстояния между данной точкой и центром частицы, то получим задачу со сферической симметрией. В этом случае уравнение (5) примет вид

$$\frac{\partial c_2}{\partial \tau} = -\frac{\partial}{r^2 \partial r} \left[r^2 \left(c_2 v - D \frac{\partial c_2}{\partial r} \right) \right] \quad (6)$$

$$0 < r < R(\tau)$$

Соотношения (2), (4) и предположение о сферической симметрии позволяют записать граничное условие на изменяющейся поверхности частицы следующим образом:

$$4\pi R^2(\tau) \left(D \frac{\partial c_2}{\partial r} \right)_{r=R(\tau)} = -I_p \quad (7)$$

Соотношение (7) показывает, что и для подвижной границы справедливо обычное граничное условие третьего рода, означающее равенство потоков вещества, подводимого изнутри частицы к ее поверхности с помощью механизма эффективной диффузии и отводимого от нее в сплошную фазу. Поток растворителя I_p с поверхности частицы опишем соотношением $4\pi R^2 \beta (c_1^* - \bar{c}_1)$, где β – коэффициент массоотдачи; c_1^* , \bar{c}_1 – концентрация насыщения и текущая концентрация растворителя в сплошной фазе.

При записи граничного условия считаем, что коэффициент массоотдачи одинаков для всех частиц. Это согласуется с утверждением [13], что коэффициент массоотдачи для частиц, размер которых удовлетворяет условию $d > 0.06$ мм (для аппаратов с мешалками), не зависит от размеров частиц.

В уравнение (6) входит линейная скорость усадки v . Обычно ее задают, используя зависимость объема частицы от среднеобъемной концентрации извлекаемого компонента [4].

Выведем формулу для скорости усадки частицы. Баланс вещества частицы описывается уравнением

$$\frac{dm}{d\tau} = -I_p, \quad (8)$$

где $m(\tau)$ – масса частицы в момент времени τ , которая складывается из массы растворителя $m_p(\tau)$ и массы полимера m_n , не изменяющейся в процессе экстракции. Следовательно, с учетом уравнения (7) получим

$$\frac{dm_p}{d\tau} = 4\pi R^2(\tau) \left(D \frac{\partial c_2}{\partial r} \right) \Big|_{r=R(\tau)} \quad (9)$$

Изменение массы частицы сопровождается изменением ее объема и плотности. Выделим явно два последних параметра

$$\frac{dm}{d\tau} = \frac{d}{d\tau} \left(\frac{4}{3}\pi R^3(\tau) \bar{\rho}(\tau) \right)$$

($\bar{\rho}(\tau)$ – среднеобъемная плотность частицы). Учитывая, что изменяется только масса растворителя, а $m_n = \text{const}$, полученное соотношение запишем в виде

$$\frac{dm_p}{d\tau} = \frac{d}{d\tau} \left(\frac{4}{3}\pi R^3(\tau) \bar{c}_2(R, \tau) \right) \quad (10)$$

Здесь

$$\bar{c}_2(R, \tau) = \frac{1}{4/3\pi R^3(\tau)} \int_0^{R(\tau)} c_2(r, \tau) 4\pi r^2 dr \quad (11)$$

Продифференцировав по τ правую часть выражения (10) и воспользовавшись соотношением (9), получим скорость усадки поверхностного слоя частицы

$$v(R, \tau) = \frac{dR}{d\tau} = \frac{1}{\bar{c}_2(R, \tau)} \times \\ \times \left[\left(D \frac{\partial c_2}{\partial r} \right) \Big|_{r=R(\tau)} - \frac{R d\bar{c}_2(R, \tau)}{3d\tau} \right] \quad (12)$$

Предполагая, что извлекаемое вещество не накапливается во внутренних слоях частицы, запишем аналогичное выражение и для скорости усадки слоя частицы, находящегося на расстоянии r от ее центра

$$v(r, \tau) = \frac{dr}{d\tau} = \frac{1}{\bar{c}_2(r, \tau)} \times \\ \times \left[\left(D \frac{\partial c_2}{\partial r} \right) \Big|_{r=r(\tau)} - \frac{rd\bar{c}_2(r, \tau)}{3d\tau} \right], \quad (13)$$

где

$$\bar{c}_2(r, \tau) = \frac{1}{4/3\pi r^3(\tau)} \int_0^r c_2(r, \tau) 4\pi r^2 dr \quad (14)$$

Анализ соотношений (6) и (13) показывает, что изменение объема частицы, вызванное ее усадкой, ослабляет диффузионный поток растворителя вследствие его транспортировки матрицей полимера, так как слагаемые в правой части (6) имеют разные знаки.

Система уравнений (6), (12), (13) и (14), дополненная краевыми условиями

$$\frac{\partial c_2}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad \left(D \frac{\partial c_2}{\partial r} \right) \Big|_{r=R(\tau)} = -\beta(c_1^* - \bar{c}_1), \quad (15)$$

$$\tau = 0, \quad c_2(r, 0) = c_{2,0}(r), \quad 0 \leq r \leq R(0),$$

описывает процесс экстрактивного извлечения растворителя из полимерной частицы с учетом ее усадки. Граничное условие на подвижной поверхности частицы связывает математическую модель процесса на уровне одной частицы дисперсной фазы с описанием процесса экстракции растворителя в дисперсной системе в целом.

Особенностью построенной модели является наличие подвижной границы. Предлагаемый численный метод основан на переходе от изменяющейся области к фиксированной [14] и использовании разностной схемы специального вида.

Переход к фиксированной области можно осуществить с помощью преобразования $x = r/R(\tau)$, $c_2(r, \tau) = c_2(xR, \tau) \equiv c(x, \tau)$; тогда система примет вид

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = \frac{1}{Rx^2} \frac{\partial}{\partial x} \left[x^2 \left(a \frac{\partial c}{\partial x} + bc \right) \right] + f, \quad 0 < x < 1, \quad \tau > 0$$

$$a = \frac{D}{R} \left(1 - \frac{c}{\bar{c}} \right), \quad b = - \left(w - x \frac{dR}{d\tau} \right)$$

$$f = -\frac{3}{R} \frac{dR}{d\tau} c, \quad w = -\frac{xR}{3\bar{c}(x, \tau)} \frac{d\bar{c}(x, \tau)}{d\tau}$$

$$\frac{dR}{d\tau} = \frac{1}{\bar{c}(1, \tau)} \left[\left(\frac{D \partial c}{R \partial x} \right)_{x=1} - \frac{R d\bar{c}(1, \tau)}{3d\tau} \right]$$

$$D = D_0 c^k, \quad R(0) = R_0,$$

$$\bar{c}(x, \tau) = \frac{1}{x^3 R^3(\tau)} \int_0^{xR} c(r, \tau) r^2 dr \quad (16)$$

$$\left(\frac{D \partial c}{R \partial x} \right)_{x=1} = -\tilde{\beta}(\tau), \quad \tau > 0$$

$$\tilde{\beta}(\tau) = \beta(c_1^* - \bar{c}_1)$$

$$\left[a \frac{\partial c}{\partial x} + bc \right]_{x=0} = 0, \quad \tau > 0$$

$$c(x, 0) = c_0(x), \quad 0 \leq x \leq 1$$

В результате перехода от изменяющейся к фиксированной области уравнение диффузии в системе (16) усложнилось: появилось дополнительное слагаемое f в правой части уравнения, а также по иному записываются диффузионный и конвективный члены уравнения. Так как конвективный и диффузионный члены с течением времени обращаются в нуль, необходимо использовать разностную схему, обеспечивающую устойчивые вычисления [15].

Схема строится на сетке, равномерной по пространственной координате $\bar{w}_h = \{x_i = ih, i = \overline{1, N+1}, (N+1)h = 1\}$ и неравномерной по временной координате $\bar{w}_\tau = \{\Delta t^{j+1} = t^{j+1} - t^j, j = \overline{1, M}\}$.

Система уравнений (16) в конечно-разностном виде записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{c_i^{j+1} - c_i^j}{\Delta t^{j+1}} &= \frac{1}{R^{j+1} h \bar{x}_i^2} \left\{ \hat{x}_i^2 \left[\frac{1}{2h} (a_i^j + a_{i+1}^j) (c_{i+1}^{j+1} - c_i^{j+1}) + \right. \right. \\ &+ \left(\frac{1}{2} + \alpha_{+, i+1} \right) b_{i+1}^j c_{i+1}^{j+1} + \left(\frac{1}{2} - \alpha_{+, i} \right) b_i^j c_i^{j+1} \left. \right] - \hat{x}_{i-1}^2 \times \\ &\times \left[\frac{1}{2h} (a_{i-1}^j + a_i^j) (c_i^{j+1} - c_{i-1}^{j+1}) + \left(\frac{1}{2} + \alpha_{+, i} \right) b_i^j c_i^{j+1} + \right. \\ &+ \left. \left. \left(\frac{1}{2} - \alpha_{+, i-1} \right) b_{i-1}^j c_{i-1}^{j+1} \right] \right\} - \max(0, -\alpha_{-, i}) f_{i-1}^{j+1} - \\ &- (1 - \max(0, -\alpha_{-, i}) - \max(0, -\alpha_{+, i})) f_i^{j+1} - \\ &- \max(0, -\alpha_{+, i}) f_{i+1}^{j+1} \\ 1 \leq i \leq N, \quad 0 \leq j \leq M; \quad c_i^j &= c_{i,0}, \quad 1 \leq i \leq N+1 \end{aligned}$$

$$\frac{D_{N+1}^{j+1} c_{i+1}^{j+1} - c_i^j}{R^{j+1} h} = -\tilde{\beta}^{j+1}$$

$$\frac{R^{j+1} - R^j}{\Delta t^{j+1}} = \frac{1}{\bar{c}_{N+1}^j} \left[-\tilde{\beta}^{j+1} - \frac{R^{j+1} (\bar{c}_{N+1}^j - \bar{c}_{N+1}^{j-1})}{\Delta t^{j+1}} \right], \quad 1 \leq j \leq M$$

$$a_i^j = \frac{D_i^j}{R^j} \left(1 - \frac{c_i^j}{\bar{c}_i^j} \right), \quad f_i^{j+1} = -\frac{3}{R^{j+1}} \frac{R^{j+1} - R^j}{\Delta t^{j+1}} c_i^{j+1}$$

$$b_i^j = x_i \left(\frac{R^j c_{i+1}^{j+1} - c_i^{j+1}}{3\bar{c}_i^j \Delta t^j} + \frac{R^{j+1} - R^j}{\Delta t^{j+1}} \right)$$

Величины \hat{x}_i, \bar{x}_i вычисляются через специально введенные параметры $\alpha_{+, i}, \alpha_{+, i}, \alpha_{-, i}, \alpha_{-, i}$, которые используются в разностной схеме для повышения ее точности и устойчивости.

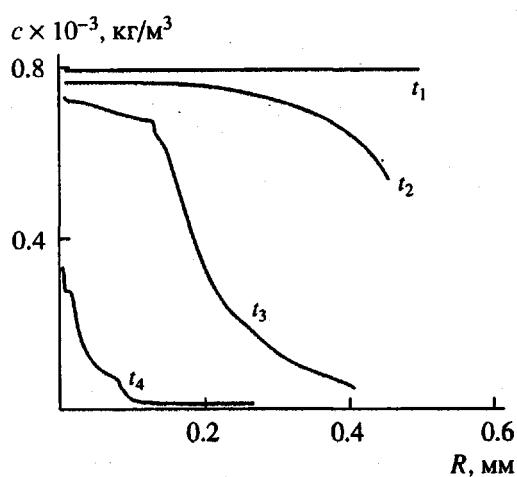


Рис. 1. Изменение профиля концентрации растворителя внутри частицы с течением времени при $D_0 = 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$; $K = 2.5$; $c_0 = 792 \text{ кг}/\text{м}^3$; $\bar{c} = 10 \text{ кг}/\text{м}^3$; $t_1 = 0$, $R = 5 \times 10^{-4} \text{ м}$, $M = 4.14 \times 10^{-4} \text{ мг}$, $\bar{c} = 792 \text{ кг}/\text{м}^3$; $t_2 = 26 \text{ мин}$, $R = 4.58 \times 10^{-4} \text{ м}$, $M = 2.67 \times 10^{-5} \text{ мг}$, $\bar{c} = 663 \text{ кг}/\text{м}^3$; $t_3 = 54 \text{ мин}$, $R = 4.10 \times 10^{-4} \text{ м}$, $M = 6.40 \times 10^{-6} \text{ мг}$, $\bar{c} = 159 \text{ кг}/\text{м}^3$; $t_4 = 157 \text{ мин}$, $R = 2.67 \times 10^{-4} \text{ м}$, $M = 5.28 \times 10^{-12} \text{ мг}$, $\bar{c} = 10 \text{ кг}/\text{м}^3$.

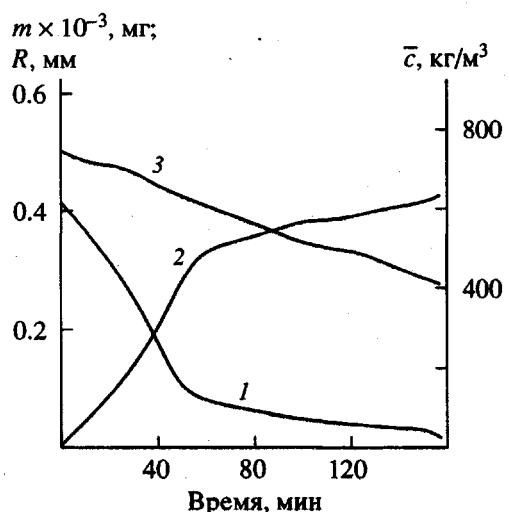


Рис. 2. Графики временных зависимостей средней концентрации растворителя внутри частицы \bar{c} (1), массы извлеченного растворителя $m = M_0 - M(t)$ (2) и радиуса частицы R (3).

Используемая схема имеет неявный вид и решается методом прогонки.

На рис. 1 показано изменение профиля концентрации растворителя внутри частицы с течением времени. Данный график получен впервые в

результате реализации предлагаемой математической модели. Видно, что в течение процесса характерно образование тонкой пленки вблизи границы раздела фаз, где концентрация растворителя близка к нулю, тогда как в глубине наблюдается незначительное изменение содержания этого компонента. В результате реализации предложенной модели возможно отслеживание качества получаемого продукта в ходе машинного эксперимента при изменении входных характеристик, а также оптимизация процесса.

На рис. 2 приведены графики изменения средней концентрации, массы извлеченного растворителя, радиуса частицы с течением времени для того же процесса.

Модель является универсальной, может быть использована для описания процессов извлечения растворителя из полимерного материала с учетом усадки во многих производствах полимерных продуктов, таких как получение полимерной дисперсии в производстве нитрокрасок, получение основы для кинофотоматериалов из ацетатов целлюлозы, получение оргстекла, производство сферического пороха, процесс водной дегазации синтетического каучука, при условии дополнения модели блоками расчета коэффициентов тепломассопереноса, гидродинамических параметров и т.д.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Протодьяконов И.О., Марцукевич Н.А., Марков А.В. Явления переноса в процессах химической технологии. Л.: Химия, 1981.
2. Храмцов Ю.И., Николаев Н.И. // Журн. физ. химии. 1968. Т. 42. № 9. С. 2184.
3. Гринберг Г.А. // Прикл. математика и механика. 1969. Т. 33. № 2. С. 269.
4. Рудобашта С.П. // Гидродинамика, тепло- и массообмен в зернистых средах. Межвуз. сб. Иваново: Ивановский химико-технологический ин-т, 1983. С. 3.
5. Аскадский А.А., Матвеев Ю.М. Химическое строение и физические свойства полимеров. М.: Химия, 1983.
6. Клинов А.В., Дьяконов Г.С., Дьяконов С.Г. // Межвуз. тематич. сб. науч. тр. "Массообменные процессы и аппараты химической технологии". Казань, 1993. С. 136.
7. Беккер Б.И., Бочавер К.З. // Теорет. основы хим. технологий. 1978. Т. 12. № 1. С. 137.
8. Бреслер С.Е., Ерусалимский Б.Д. Физика и химия макромолекул. М.; Л.: Наука, 1965.
9. Алексашенко А.А. // Теорет. основы хим. технологии. 1981. Т. 15. № 4. С. 494.

10. Алексашенко А.А. // Теорет. основы хим. технологии. 1982. Т. 16. № 4. С. 451.
11. Плановский А.Н., Михайлов Г.Г., Карасев И.Н. Исследование структуры потоков перемешивающей жидкости радиально-лопастными мешалками. М.: МИХМ, 1976. Вып. 61. С. 90.
12. Елкин Г.Э., Самсонов Г.В., Якович Г.А. // Теорет. основы хим. технологии. 1978. Т. 12. № 5. С. 751.
13. Брагинский Л.Н., Бегачев В.И., Барабаш В.М. Перемешивание в жидких средах: физические основы и методы расчета. Л.: Химия, 1984. С. 336.
14. Ефремова И.С., Смирнов М.С. // Инж.-физ. журн. 1976. Т. 31. № 5.
15. Штойан Г. // Дифференц. уравнения. 1982. Т. 18. № 7. С. 615.

A Mathematical Model for the Diffusion of Low-Molecular-Mass Substance into Polymer Material

G. A. Aminova, G. V. Manuiko, G. S. D'yakonov, and V. F. Sopin

*Kazan State Technological University,
ul. K. Markska 68, Kazan, 420015 Tatarstan, Russia*

Abstract—A mathematical model is proposed to explain the diffusion of a low-molecular-mass substance into polymer particles. This model takes into account the variation of the structure, weight, and volume of particles. The expression for the shrinkage velocity of particles during solvent extraction is derived from the mass-balance equation. This excludes the need to preset this value. The advanced model assumes the existence of a mobile interface. Therefore, a difference scheme is constructed taking into account the transition from a variable to a fixed region. Realization of the difference scheme allows one to determine the solvent concentration profile inside a particle at each moment of time, the shrinkage velocity of a particle, and the kinetic characteristics of the solvent extraction process.