

# 真空下同轴圆筒间分子蒸馏过程的数值模拟

张旭斌, 许春建, 周明

(天津大学化工学院, 天津 300072)

**摘要:** 在源于 Boltzmann 方程的 BGK 模型方程的基础上, 建立了计算多组分稀薄气体流动的数学模型, 揭示了蒸发空间气体的密度、温度、速度和压力的变化规律. 运用该模型对同轴柱面之间的蒸发与冷凝过程进行了数值模拟, 考察了惰性气体存在对该过程的影响, 着重讨论了蒸发器结构尺寸、残留惰性气体分压等因素对蒸发效率和分离因数的影响.

**关键词:** BGK 方程; 数值模拟; 分离; 稀薄气体

中图分类号: TQ028

文献标识码: A

文章编号: 1009-606X(2005)01-0097-06

## 1 前言

分子蒸馏是一种浓缩、纯化和分离高沸点、热敏性和易氧化混合物的温和方法, 在高真空下进行蒸发与冷凝过程是分子蒸馏技术的主要特征之一. 过去 30 多年里, 在气体动力学理论的基础上, 许多学者<sup>[1-7]</sup>对此过程进行了研究, 主要是针对平面冷凝相上的蒸发与冷凝现象, 只有 Sugimoto 等<sup>[8,9]</sup>研究了柱面冷凝相上的蒸发现象. 所有上述学者都仅研究了单组分的蒸发与冷凝过程.

Ferron<sup>[10]</sup>用四阶矩法(Four-moment Method)对平行平板之间两组分的蒸发和冷凝过程进行了研究, 这种方法不能考察蒸发空间残留惰性气体组分对过程的影响. Bhandarkar 等<sup>[11]</sup>和 Lutišan 等<sup>[12,13]</sup>以及 Batistella 等<sup>[14]</sup>应用直接蒙特卡罗模拟法(DSMC)采用一维刚球模型对两组分的蒸发和冷凝过程进行了研究, 但需要大量的计算时间和资源, 而且存在各宏观量的统计涨落问题.

本工作以速度分布函数满足的非线性 Bhatnagar-Gross-Krook(BGK)模型方程为基础<sup>[15,16]</sup>, 建立了描述同轴柱面之间多组分蒸发和冷凝动力学过程的数学模型, 并对该过程进行了数值模拟.

## 2 控制方程

在两同轴柱面之间的蒸发空间里, 由于相界面处的蒸发与冷凝作用造成气体由蒸发面向冷凝面定向运动. 当蒸发面和冷凝面之间的距离远小于柱面的长度时, 圆柱面外气体对蒸发和冷凝过程的影响可以忽略. 由于在蒸发空间中惰性气体的存在是不可避免的, 而且由于惰性气体分子和蒸气分子之间的碰撞使得蒸气分子在蒸发空间的运动发生变化, 因此讨论蒸发和冷凝过程时,

需考虑惰性气体的影响.

由于蒸发分子是由蒸发面向冷凝面运动, 因此建立如图 1 所示的柱坐标系.  $z$  轴沿着圆柱的轴方向, 蒸发面温度为  $T_h$ , 冷凝面温度为  $T_c$ , 蒸发面与冷凝面之间的距离为  $D$ . 为简化模拟过程, 作如下假设:

- (1) 分子蒸发达到稳态且与  $z$  轴向位置无关;
- (2) 气体分子行为由多组分 BGK 模型方程描述;
- (3) 离开冷凝相表面的蒸气分子速度符合局域 Maxwell 速度分布函数;
- (4) 忽略外力场对气体分子的作用;
- (5) 蒸发空间残留惰性气体分子数量恒定, 而且残留惰性气体分子入射到液相表面时进行漫反射, 即反射出的分子的速度符合液相表面温度下的局域 Maxwell 速度分布函数.

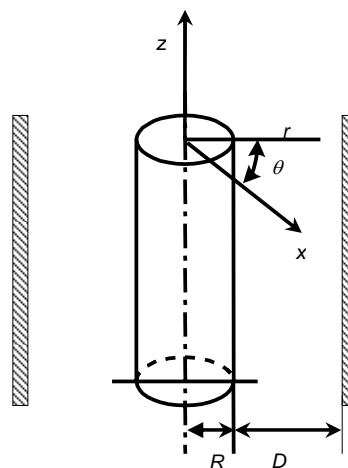


图 1 同轴圆筒示意图

Fig.1 Schematic representation of an evaporation condensation problem

[Molecules evaporated from the surface with temperature  $T_h$  at  $r=R$  are condensed on the surface at temperature  $T_c$  at  $r=R+D(D>0)$ ]

收稿日期: 2003-12-24, 修回日期: 2004-05-28

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(编号: 201136010)

作者简介: 张旭斌(1970-), 男, 山西省长治市人, 博士, 化学工程专业; 许春建, 通讯联系人, E-mail: cjxu@tju.edu.cn.

在上述条件下,可以得到如下稳态 BGK 方程<sup>[15-18]</sup>:

$$\xi_{i,r} \frac{\partial f_i}{\partial r} + \frac{\xi_{i,\theta}^2}{r} \frac{\partial f_i}{\partial \xi_{i,r}} - \frac{\xi_{i,r} \xi_{i,\theta}}{r} \frac{\partial f_i}{\partial \xi_{i,\theta}} = \frac{1}{\tau_i} (f_{i,e} - f_i), \quad (1)$$

$$\text{式中 } f_{i,e} = \frac{n_i}{(2\pi W_i T)^{3/2}} \exp\left[-\frac{(\xi_{i,r} - u)^2 + \xi_{i,\theta}^2 + \xi_{i,z}^2}{2W_i T}\right], \quad W_i = k_b/m_i,$$

$$\text{其中: } n_i = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_i d\xi_{i,r} d\xi_{i,\theta} d\xi_{i,z} \quad (i=1, 2, \dots, N), \quad (2)$$

$$n = \sum_i n_i, \quad (3)$$

$$u_i = \frac{2}{n_i} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_{i,r} f_i d\xi_{i,r} d\xi_{i,\theta} d\xi_{i,z} \quad (i=1, 2, \dots, N), \quad (4)$$

$$u = \sum_i u_i n_i m_i / \sum_i n_i m_i, \quad (5)$$

$$T = \frac{2}{3n} \sum_i \frac{1}{W_i} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} [(\xi_{i,r} - u)^2 + \xi_{i,\theta}^2 + \xi_{i,z}^2] f_i d\xi_{i,r} d\xi_{i,\theta} d\xi_{i,z}, \quad (6)$$

$$\tau_i = \frac{1}{2} \sqrt{m_i / (2\pi k_b T)} / \sum_j (n_j d_{ij}^2 \sqrt{1 + m_i/m_j}), \quad d_{ij} = \frac{1}{2}(d_i + d_j), \quad (7)$$

边界条件为

$$r=R \text{ 时, } f_i = \frac{n_{i,h}}{(2\pi W_i T_h)^{3/2}} \exp\left[-\frac{\xi_{i,r}^2 + \xi_{i,\theta}^2 + \xi_{i,z}^2}{2W_i T_h}\right] \quad (\xi_{i,r} > 0), \quad (8)$$

$$r=R+D \text{ 时, } f_i = \frac{n_{i,c}}{2\pi W_i T_c} \exp\left[-\frac{\xi_{i,r}^2 + \xi_{i,\theta}^2 + \xi_{i,z}^2}{2W_i T_c}\right] \quad (\xi_{i,r} < 0). \quad (9)$$

令  $\varphi = \arctan(\xi_{i,\theta}/\xi_{i,r})$ ,  $\xi = (\xi_{i,r}^2 + \xi_{i,\theta}^2)^{1/2}$ , 引入函数  $g = \int_{-\infty}^{+\infty} f d\xi_z$ ,

$h = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_z^2 f d\xi_z$ , 则式(1)~(7)转换成如下形式:

$$\xi_i \cos \varphi \frac{\partial g_i}{\partial r} - \frac{\xi_i \sin \varphi}{r} \frac{\partial h_i}{\partial \varphi} = \frac{1}{\tau_i} (g_{i,e} - g_i), \quad (10)$$

$$\xi_i \cos \varphi \frac{\partial h_i}{\partial r} - \frac{\xi_i \sin \varphi}{r} \frac{\partial h_i}{\partial \varphi} = \frac{1}{\tau_i} (h_{i,e} - h_i), \quad (11)$$

$$g_{i,e} = n_i / (2\pi W_i T) \exp\left[-(\xi_i^2 + u^2 - 2u\xi_i \cos \varphi) / (2W_i T)\right], \quad (12)$$

$$h_{i,e} = \frac{n_i}{2\pi} \exp\left[-(\xi_i^2 + u^2 - 2u\xi_i \cos \varphi) / (2W_i T)\right], \quad (13)$$

$$n_i = 2 \int_0^\pi \int_0^{+\infty} g_i \xi_i d\xi_i d\varphi, \quad (14)$$

$$u_i = \frac{2}{n_i} \int_0^\pi \int_0^{+\infty} \xi_i^2 \cos \varphi g_i d\xi_i d\varphi, \quad (15)$$

$$3nk_b T = \sum_i m_i \left[ 2 \int_0^\pi \int_0^{+\infty} (\xi_i^2 - 2u\xi_i \cos \varphi) \xi_i g_i d\xi_i d\varphi + 2 \int_0^\pi \int_0^{+\infty} \xi_i h_i d\xi_i d\varphi - n_i u^2 \right], \quad (16)$$

边界条件变为

$$r=R, \quad g_i = \frac{n_{i,h}}{2\pi W_i T_h} \exp\left\{-\frac{\xi_i^2 + u^2 - 2u\xi_i \cos \varphi}{2W_i T_h}\right\} \quad (\xi_{i,r} > 0),$$

$$h_i = \frac{n_{i,h}}{2\pi} \exp\left\{-\frac{\xi_i^2 + u^2 - 2u\xi_i \cos \varphi}{2W_i T_h}\right\} \quad (\xi_{i,r} > 0). \quad (17)$$

$$r=R+D, \quad g_i = \frac{n_{i,c}}{2\pi W_i T_c} \exp\left\{-\frac{\xi_i^2 + u^2 - 2u\xi_i \cos \varphi}{2W_i T_c}\right\} \quad (\xi_{i,r} < 0),$$

$$h_i = \frac{n_{i,c}}{2\pi} \exp\left\{-\frac{\xi_i^2 + u^2 - 2u\xi_i \cos \varphi}{2W_i T_c}\right\} \quad (\xi_{i,r} < 0). \quad (18)$$

蒸发效率由下式计算:

$$\eta_i = \frac{\text{实际蒸发速率}}{\text{理想蒸发速率}} = \frac{2r \int_0^\pi \int_0^{+\infty} \xi_i^2 \cos \varphi g_i d\xi_i d\varphi}{P_{i,h}^s X_{i,h} (2\pi m_i k_b T_h)^{-1/2}}, \quad (19)$$

其中,  $P_{i,h}^s$  为组分  $i$  在蒸发温度下的饱和蒸气压. 二元物系分离因数  $\alpha$  由下式计算:

$$\alpha = \frac{\int_0^\pi \int_0^{+\infty} \xi_A^2 \cos \varphi g_A d\xi_A d\varphi \frac{X_B}{X_A}}{\int_0^\pi \int_0^{+\infty} \xi_B^2 \cos \varphi g_B d\xi_B d\varphi \frac{X_A}{X_B}}. \quad (20)$$

### 3 数值计算方法

#### 3.1 方程离散化

将蒸发空间沿  $r$  方向进行网格划分,  $r_l (l=1, 2, \dots, L, r_1=1, r_L=R+D)$  表示  $r$  空间的网格点; 将分子速度空间进行网格划分,  $\xi_j (j=1, 2, \dots, J, \xi_1=0, \xi_J=\xi_{\max})$  表示分子速度空间  $\xi$  的网格点; 对方位角进行网格划分,  $\varphi_k (k=1, 2, \dots, \hat{K}, \dots, K, \varphi_1=0, \varphi_{\hat{K}}=\pi/2, \varphi_K=\pi)$  表示方位角离散后的网格点. 为了书写简便, 如不作特殊声明, 后边公式将下标  $i$  省略.

对方程(10), (11)进行离散化, 形式如下:

$$\xi_j \cos \varphi_k \nabla_1 \phi_{l,j,k}^n - \frac{\xi_j \sin \varphi_k}{\hat{r}_l} \nabla_2 \phi_{l,j,k}^n = \frac{1}{\tau_i} (\phi_{e,l,j,k}^{n-1} - \phi_{l,j,k}^n), \quad (21)$$

其中:  $\nabla_1 \phi_{l,j,k}^n = (\phi_{l,j,k}^n - \phi_{l-1,j,k}^n) / \Delta r_{l-1} \quad (1 < l \leq L, 1 \leq k < \hat{K}),$

$$\nabla_l \phi_{l,j,k}^n = -(\phi_{l,j,k}^n - \phi_{l+1,j,k}^n) / \Delta r_l \quad (1 < l \leq L, \hat{K} \leq k < K),$$

$$\nabla_2 \phi_{l,j,k}^n = \left( -\frac{3}{2} \phi_{l,j,k}^n + 2\phi_{l,j,k+1}^n - \frac{1}{2} \phi_{l,j,k+2}^n \right) \Delta \varphi_k,$$

$\phi$  代表  $g$  或  $h$ .

#### 3.2 计算过程

采用迭代对方程(10)~(16)进行求解, 用 Simpson 法对分子速度进行积分, 计算过程如下:

(1) 首先给定初值  $n_i^0, u_i^0, T_i^0$ , 应用式(12)和(13)计算  $g_{e,l,k,j}^0, h_{e,l,k,j}^0$ .

(2) 对于  $\hat{K} \leq k \leq K$ , 应用从式(18)得到的边界值  $g_{L,j}^1$ ,

$h_{l,j}^1$ , 令  $l=L-1, L-2, \dots, 1$ , 用式(10)和(11)计算  $g_{l,k,j}^1, h_{l,k,j}^1$ . 从  $l=l+1$  到  $l=l$  每进行一步, 都要应用从式(10)和(11)直接计算得到  $g_{l,k,j}^1, h_{l,k,j}^1$ , 令  $k=K-1, K-2, \dots, \hat{K}$ , 用式(10)和(11)计算  $g_{l,k,j}^1, h_{l,k,j}^1$ , 对于  $j=1 \rightarrow J$  重复执行这一步.

(3) 对于  $1 \leq k \leq \hat{K}-1$ , 用从式(17)得到的边界值  $g_{l,j}^1, h_{l,j}^1$ , 令  $l=2, 3, \dots, L$ , 用公式(10)和(11)计算  $g_{l,k,j}^1, h_{l,k,j}^1$ . 从  $l=l-1$  到  $l=l$  每进行一步, 都令  $k=\hat{K}-1, \hat{K}-2, \dots, 1$ , 用公式(10)和(11)计算  $g_{l,k,j}^1, h_{l,k,j}^1$ , 对于  $j=1 \rightarrow J$  重复执行这一步.

(4) 应用 Simpson 积分式和式(14)~(16)计算得到新的  $n_p^1, u_p^1, T_p^1$ , 进而用式(12)和(13)计算新的  $g_{e,l,k,j}^1, h_{e,l,k,j}^1$ .

(5) 重复进行步骤(2)~(4), 直到满足条件:

$$\left| g_{l,k,j}^{n+1} - g_{l,k,j}^n \right| / g_{l,k,j}^n \leq \varepsilon = 0.001.$$

(6) 通过式(19)和(20)求得蒸发效率与分离因数.

### 4 模型与实验结果比较

Hickman 等<sup>[20]</sup>采用射流张力计对邻苯二甲酸二异辛酯(EHP)在不同蒸发温度下的蒸发速率进行了测定. 实验中冷凝器温度  $T=273$  K, EHP 流体的半径  $R=3.44$  mm, 蒸发面和冷凝面的间距  $D=17$  mm,  $P_{N_2}=0.1$  Pa, EHP 的物性数据见表 1.

表 1 纯组分的物理性质

	$M$ (kg/mol)	$A$	$B$	$d$ ( $\times 10^{-10}$ m)
EHP	0.391	14.62	5440	8.58

Note:  $\lg P=A-B/T$ .

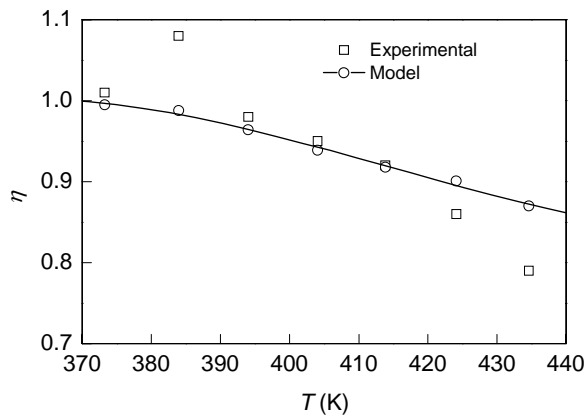


图 2 蒸发面温度与蒸发效率的关系  
Fig.2 Dependence of evaporation efficiency on heating cylinder temperature for the EHP

蒸发效率与蒸发温度的关系见图 2. 从图可以看出, 随着蒸发温度的升高, 蒸发效率下降. 但是模型计算的蒸发效率比实验蒸发效率下降速度慢, 这是由于采用射流张力计进行实验, 因表面蒸发致冷而使下部流体表面温度下降, 从而使实际蒸发速率减小, 因此由其所

得蒸发效率与模型计算结果相比下降速度要快. 且随着蒸发温度的升高, 这种偏差越大, 从图可以看出, 高蒸发温度时模型计算与实验所得的蒸发效率差别更大.

### 5 计算结果与讨论

为了考察惰性气体分压、蒸馏器结构与尺寸对分子蒸馏过程的影响, 对邻苯二甲酸二丁酯 DBP 和癸二酸二丁酯 DBS 二元物系的蒸发与冷凝过程进行了模拟, 且假定残留惰性气体为氮气, 物性数据见表 2.

表 2 纯物质的主要性质

	$M$ (kg/mol)	$A$	$B$	$d$ ( $\times 10^{-10}$ m)
DBP	0.278	12.7	4450	7.5
DBS	0.314	13.22	4850	8.0
$N_2$	0.028			3.16

Note:  $\lg P=A-B/T$ .

蒸发表面和冷凝表面之间的蒸发空间的分子数密度分布如图 3 所示. 从图可以看出, 不管凸面(内圆柱的外表面为蒸发面, 外圆柱的内表面为冷凝面)蒸发还是凹面(内圆柱的外表面为冷凝面, 外圆柱的内表面为蒸发面)蒸发, 分子数密度都随着离开蒸发液面距离的增加而迅速降低, 然后下降速度变得缓慢; 而且分子数密度的变化凹面蒸发时比凸面蒸发时更平缓一些.

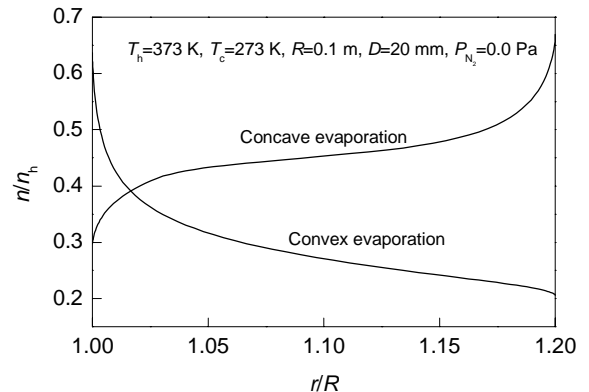


图 3 分子数密度分布  
Fig.3 Profiles of molecule number density

蒸发表面和冷凝表面之间的蒸发空间的气体流动速度分布如图 4 所示. 从图可以看出, 在蒸发表面附近, 由于分子的剧烈碰撞作用使得分子的平动能迅速转化成了气体的动能, 因此气体流动速度迅速增加; 然后随着离开蒸发表面距离逐渐增加, 分子间的碰撞次数逐渐减少, 分子能够获得的能量减少, 于是气体流动速度增加变得平缓. 凸面蒸发时, 气体流动速度为正, 即气体从内柱面流向外柱面; 凹面蒸发时, 气体流动方向为负, 也即气体从外柱面流向内柱面.

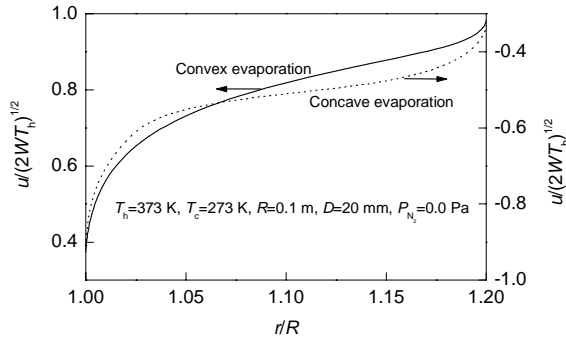


图4 流动速度分布  
Fig.4 Profiles of flow velocity

蒸发表面和冷凝表面之间的蒸发空间的动力学温度分布如图5所示。从图可以看出，在蒸发面附近，由于分子间剧烈的碰撞作用，使分子的热运动能迅速向宏观动能转变，气体的流动速度迅速增大，而温度迅速下降；随着离开蒸发表面距离的增加，气体的流动速度不断增加，而温度不断下降，但是由于分子数密度的减小和温度的下降，分子间的碰撞作用也在减弱，从而温度变化也趋于平缓。

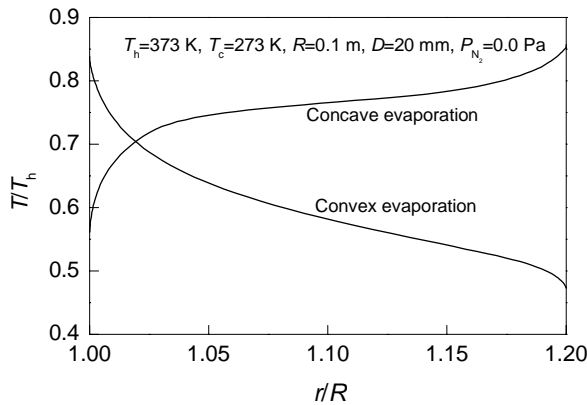


图5 气体温度分布  
Fig.5 Profiles of vapor temperature

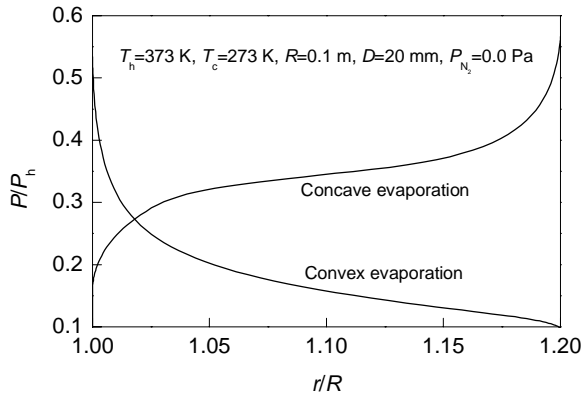


图6 气体压力分布  
Fig.6 Profiles of vapor pressure

蒸发表面和冷凝表面之间的蒸发空间的压力分布如图6所示。从图可以看出，在离蒸发表面很短的距离内，由于分子数密度和温度迅速下降，从而压力也急剧下降；然后随着离蒸发表面距离的增加，分子数密度和温度变化趋于平缓，压力变化趋势也变得平缓。

从图7可以看到蒸发柱面半径对蒸发效率的影响。凸面蒸发时，随着半径的增大，蒸发效率逐渐下降；凹面蒸发时，随着半径的增大，蒸发效率逐渐增大。这是由于随着半径的增大，凸面蒸发时，分子间碰撞作用加强，凹面蒸发时，分子间碰撞作用减弱，而且凸面蒸发的碰撞作用弱于凹面蒸发时(图7)，因此凸面蒸发的蒸发效率比凹面蒸发的高。

从图8可以看到蒸发柱面半径对分离因数的影响。凸面蒸发时，随着半径的增大，分离因数逐渐下降；凹面蒸发时，随着半径的增大，分离因数逐渐增大。但是凸面蒸发的分离因数比凹面蒸发的高。这是由于随着半径的增大，凸面蒸发时，分子间碰撞作用加强，其中碰撞作用对轻组分的影响比重组分的大，因此分离因数逐渐下降；凹面蒸发时，情况恰恰相反，随着半径的增大，

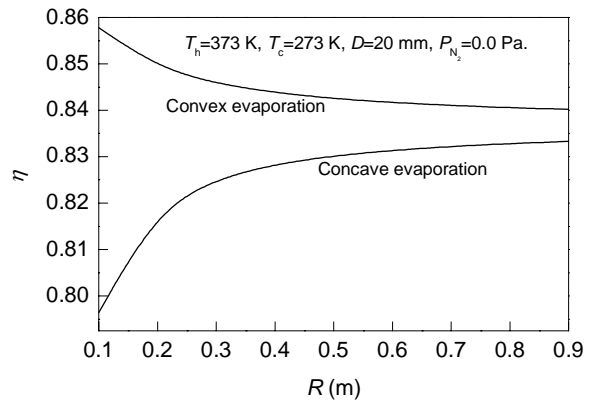


图7 蒸发面半径对蒸发效率的影响  
Fig.7 Relation between evaporation efficiency and radius

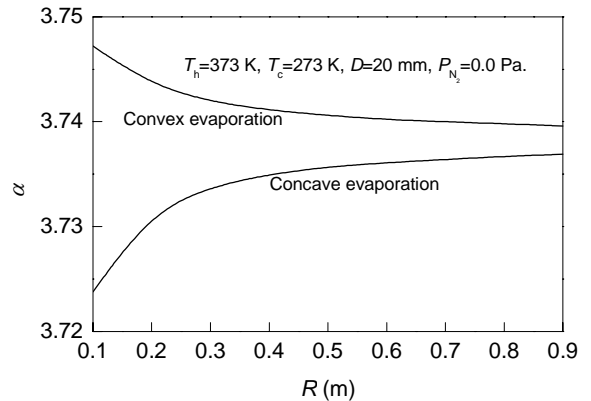


图8 蒸发面半径对分离因数的影响  
Fig.8 Relation between separation factor and radius

分子间碰撞作用减弱, 因此分离因数上升, 而且凹面蒸发的碰撞作用比凸面蒸发的强, 所以前者的分离因数比后者的小.

图 9 给出了不同残留惰性气体分压下蒸发效率随蒸发柱面半径的变化关系. 从图可以看出, 随着残留惰性气体分压的增大, 蒸发空间中残留惰性气体分子数增加, 相应蒸发分子与残留惰性气体分子之间的碰撞次数增加, 使蒸发分子返回蒸发表面的概率增大, 最终造成蒸发效率减小并且变化明显; 随着蒸发柱面半径的增大, 凸面蒸发的效率逐渐下降, 凹面蒸发的效率逐渐升高, 而且凸面蒸发始终比凹面蒸发的蒸发效率高.

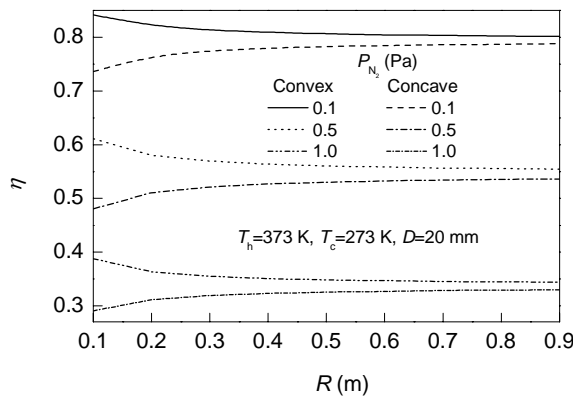


图 9 不同残留惰性气体分压下蒸发面半径对蒸发效率的影响

Fig.9 Relation between evaporation efficiency and radius

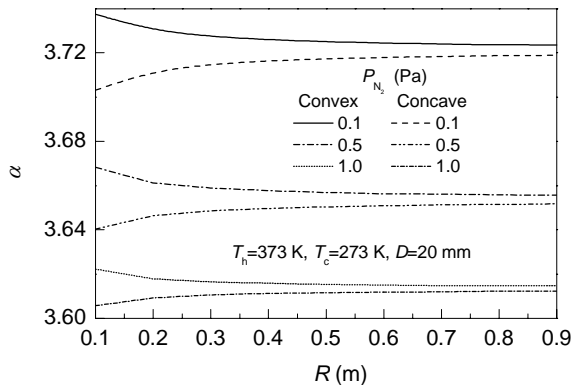


图 10 不同残留惰性气体分压下蒸发面半径对分离因数的影响

Fig.10 Relation between separation factor and radius

图 10 给出了不同残留惰性气体分压下分离因数随蒸发柱面半径的变化关系. 从图可以看出, 随着残留惰性气体分压的增大, 残留惰性分子与蒸发气体分子的碰撞作用加强, 分离因数逐渐下降; 随着蒸发柱面半径的增大, 凸面蒸发的分离因数逐渐下降, 凹面蒸发的分离因数逐渐上升, 而且凸面蒸发的分离因数始终比凹面蒸发的高.

## 6 结论

在分子蒸馏器的蒸发空间内蒸发气体分子之间以及与残留惰性气体分子之间的碰撞对分子蒸馏过程的影响是不可忽略的, 实际蒸发速率要小于不考虑分子碰撞的理想条件下蒸发液膜表面的蒸发速率.

计算结果表明, 凸面蒸发时, 蒸发效率和分离因数随着蒸发柱面半径的增大而减小; 凹面蒸发时, 蒸发效率和分离因数随着蒸发柱面半径的增大而增大. 凸面蒸发时的蒸发效率和分离因数比凹面蒸发时大. 残留惰性气体的存在造成了蒸发效率和分离因数的减小, 但是不会改变其随着蒸发柱面半径改变而变化的趋势. 计算结果对实现分子蒸馏的优化操作以及合理设计分子蒸馏器具有一定的指导意义.

### 符号表:

$A, B$	Antoine 方程参数	$T$	温度 (K)
$d$	分子直径 (m)	$\alpha$	分离因数
$D$	蒸发面与冷凝面的距离 (mm)	$\eta$	蒸发效率
$f$	速度分布函数	$\theta$	柱坐标方位角 (rad)
$f_e$	Maxwell 速度分布函数	$\lambda$	平均自由程 (m)
$g$	速度分布函数	$\tau$	碰撞时间 (s)
$h$	速度分布函数	$\varphi$	柱坐标方位角 (rad)
$i$	组分序号	$\xi$	分子速度 (m/s)
$k_b$	Boltzmann 常数 (J/K)	上、下标	
$m$	分子质量 (kg)	A	易挥发组分
$M$	摩尔质量 (kg/mol)	B	难挥发组分
$n$	分子数密度 ( $\text{m}^{-3}$ )	c	冷凝面
$N$	组分数	e	平衡态
$P$	压力 (Pa)	h	蒸发面
$r$	径向坐标 (m)	$i$	组分序号
$R$	蒸发器半径 (m)	s	饱和状态
$R_U$	普适气体常数 [J/(mol·K)]	$r, \theta, z$	柱坐标系
$u$	气体在 $x$ 方向或径向上的宏观流速 (m/s)		
$W$	特殊气体常数 [ $W=k_b/m_i$ , J/(K·kg)]		
$X$	蒸发液相中组分的摩尔分数		

### 参考文献:

- [1] Pao Y P. Application of Kinetic Theory to the Problem of Evaporation and Condensation [J]. Phys. Fluids, 1971, 14(2): 306–312.
- [2] Siewert C E, Thomas Jr J R. Half-space Problems in the Kinetic Theory of Gases [J]. Phys. Fluids, 1973, 16(9): 1557–1559.
- [3] Matsushita T. Kinetic Analysis of the Problem of Evaporation and Condensation [J]. Phys. Fluids, 1976, 19(11): 1712–1715.
- [4] Fischer J. Distribution of Pure Vapor between Two Parallel Plates under the Influence of Strong Evaporation and Condensation [J]. Phys. Fluids, 1976, 19(9): 1305–1311.
- [5] Aoki K, Sone Y, Yamada T. Numerical Analysis of Gas Flows Condensing on Its Plane Condensed Phase on the Basis of Kinetic Theory [J]. Phys. Fluids A, 1990, 2(10): 1867–1878.
- [6] Aoki A, Masukawa N. Gas Flows Caused by Evaporation and Condensation on Two Parallel Condensed Phases and the Negative Temperature Gradient: Numerical Analysis by Using a Nonlinear Kinetic Equation [J]. Phys. Fluids, 1994, 6(3): 1379–1395.
- [7] Prendergast K H, Xu K. Numerical Hydrodynamics from Gas-kinetic Theory [J]. J. Comput. Phys., 1993, 109(1): 53–66.

- [8] Sugimoto H, Sone Y. Numerical Analysis of Steady Flows of a Gas Evaporating from Its Cylindrical Condensed Phase on the Basis of Kinetic Theory [J]. *Phys. Fluids A*, 1992, 4(2): 419–440.
- [9] Sone Y, Sugimoto H. Evaporation of a Rarefied Gas from a Cylindrical Condensed Phase into a Vacuum [J]. *Phys. Fluids*, 1995, 7(8): 2072–2085.
- [10] Ferron J R. Evaporation and Condensation of Mixtures under Rarefied Conditions [J]. *Ind. Eng. Chem. Fundam*, 1986, 25(4): 594–602.
- [11] Bhandarkar M, Ferron J R. Simulation of Rarefied Vapor Flows [J]. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1991, 30(5): 998–1007.
- [12] Lutišan J, Cvengroš J. Mean Free Path of Molecules on Molecular Distillation [J]. *Chem. Eng. J.*, 1995, 56(2): 39–50.
- [13] Lutišan J, Cvengroš J. Effect of Inert Gas Pressure on the Molecular Distillation Process [J]. *Sep. Sci. Tech.*, 1995, 30(17): 3375–3389.
- [14] Batistella C B, Maciel M R W, Filho R M. Rigorous Modeling and Simulation of Molecular Distillators: Development of a Simulator under Conditions of Non-ideality of the Vapor Phase [J]. *Comput. Chem. Eng.*, 2000, 24(2–7): 1309–1315.
- [15] Bhatnagar P L, Gross E P, Krook M. A Model for Collision Processes in Gases [J]. *J. Phys. Rev.*, 1954, 94(3): 511–525.
- [16] Sofonea V, Sekerka R F. BGK Models for Diffusion in Isothermal Binary Fluid Systems [J]. *Physica. A*, 2001, 299(3): 494–520.
- [17] Chapman S, Cowling T G. *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases*, 2nd ed [M]. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1971. 62–71.
- [18] Yen S M. Numerical Solution of the Nonlinear Boltzmann Equation for Non-equilibrium Gas Flow Problems [J]. *Ann. Rev. Fluid. Mech.*, 1984, 16: 67–97.
- [19] Chu C K. Kinetic-theoretic Description of the Formation of a Shock Wave [J]. *Physics Fluids*, 1965, 8(1): 12–22.
- [20] Hickman K C D, Trevoy D J. Studies in High Vacuum Evaporation—The Falling Stream Tensimeter [J]. *Ind. Eng. Chem.*, 1952, 44(8): 1882–1888.
- [21] Perry E S, Weber W H. Vapor Pressures of Phlegmatic Liquids—II. [J]. *J. Am. Chem. Soc.*, 1949, 71(11): 3726–3730.
- [22] Yaws C L. *Chemical Properties Handbook* [M]. New York: McGraw-Hill, 1999. 178–179.

## Simulation of Molecular Distillation between Coaxial Cylinder at High Vacuum

ZHANG Xu-bin, XU Chun-jian, ZHOU Ming

(School of Chemical Engineering and Technology, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

**Abstract:** On the basis of the Bhatnagar–Gross–Krook equation, a new scheme for multi-component flow calculations between two closed surfaces of evaporation and condensation was developed. This model reveals the profiles of density, temperature, velocity and concentration of vapor in the space between evaporation surface and condensation surface. It was used to simulate the vapor behaviors of the dibutylphthalate–dibutylsebacate (DBP–DBS) mixture system in the presence of an inert gas. The effects of inert gas pressure and construction parameters on evaporation efficiency and separation factor were discussed.

**Key words:** BGK equation; numerical simulation; separation; rarefied gas