

УДК 66.081.2

## ПРИМЕНЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОГО МЕТОДА РАСЧЕТА МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ АБСОРБЦИИ

Неумоина Н.Г., Белов А.В.

*Камышинский технологический институт (филиал) ФГБОУ ВПО «Волгоградский государственный технический университет», Камышин, Волгоградская область, Россия (403876, Волгоградская обл., г. Камышин, ул. Ленина, 6а), e-mail: fpt@kti.ru*

В рамках предложенного кинетического метода расчета многокомпонентной изотермической абсорбции, основанного на нелокальной версии термодинамики, разработан алгоритм расчета массообменного аппарата (абсорбера). Рассмотрена подробно последовательность расчета как всего аппарата, так и его отдельного элемента. Программная реализация алгоритма позволила произвести расчет пленочного абсорбера при поглощении аммиака водой, а также противоточного тарельчатого абсорбера при разделении углеводородной смеси. Произведено сравнение результатов расчета с экспериментальными данными. Сравниваются не только составы в выходных потоках насыщенного абсорбента и сухого газа, а также распределение концентрации аммиака в газовой и жидкой фазах по высоте пленочного абсорбера.

Ключевые слова: абсорбция, массопередача, массоотдача, коэффициент переноса.

## APPLICATION OF KINETIC METHOD OF CALCULATION TO MULTICOMPONENT ISOTHERMAL ABSORPTION

Neumoina N.G., Belov A.V.

*A Kamyshin technological institute of the "Volgograd state technical university", Kamyshin, Volgograd area, Russia(403876, Kamyshin, Volgograd region, street of Lenin, 6a, e - mail: fpt@kti.ru*

Within a framework of the developed kinetic method of the calculation of multicomponent isothermal absorption, based on the nonlocal version of thermodynamics, the algorithm of calculation of mass exchange vehicle (absorber) is worked out. The sequence of calculation for the vehicle as a whole and its particular element is considered in detail. A numeric realization of the algorithm allows to produce the calculation of pellicle absorber for a case water absorbs ammonia, and also of backflow plate absorber for the separation of hydrocarbon mixture. Comparison of calculation results to experimental data is performed. Comparative analysis is developed not only for compositions of saturated absorbent and dry gas in output streams, but also for distribution of concentration of ammonia in gas and liquid phases on the height of pellicle absorber.

Keywords: absorption, mass transfer, mass return, coefficient of transfer.

В статье [3] приводится разработанная в рамках нелокальной версии термодинамики [2] кинетическая модель расчета многокомпонентной изотермической абсорбции.

Уравнение для удельного мольного потока через границу раздела фаз имеет вид

$$J_{Myi} = k_{Fi} (y_i - k_i x_i), \quad (1)$$

$$\frac{1}{k_{Fi}} = \frac{1}{\beta_{yi}} + \frac{k_i}{\beta_{xi}}, \quad (2)$$

$$\beta_{yi} = v_y c_{Sy} \varphi_{yi}, \quad (3)$$

$$\beta_{xi} = v_x c_{Sx} \varphi_{xi}, \quad (4)$$

где  $k_{Fi}$  - коэффициент массопередачи  $i$ -го компонента;

$\beta_{yi}, \beta_{xi}$  - коэффициенты массоотдачи  $i$ -го компонента соответственно в газовой и жидкой фазах.

Для проверки адекватности предложенной модели необходимо произвести расчет и сравнить с имеющимися экспериментальными данными.

Чтобы рассчитать изменение мольного количества распределяющегося компонента в газовой фазе  $\Delta F_i$  по уравнению (1) необходимо это уравнение проинтегрировать

$$\Delta F_i = \int_0^H J_{Mi} \sigma \Delta h, \quad (5)$$

где  $\sigma$  - поверхность контакта в единице объема,  $m^2 / m^3$ ,

$H$  – рабочая высота аппарата,  $m$ .

На практике интегрирование уравнения (1) сводится к процедуре численного интегрирования. Задача расчета изотермического абсорбера ставится в поверочном варианте. Целью расчета является нахождение выходных потоков абсорбера и их составов, а также покомпонентных составов газа и жидкости по высоте аппарата. Исходными данными для расчета выходных потоков абсорбера и их составов являются: входной поток абсорбента  $L_1$ , концентрации в нем распределяющихся компонентов  $x_{i,1}$ , количество газа, поступающего на абсорбцию  $G_{n+1}$ , концентрации в нем извлекаемых компонентов  $y_{i,n+1}$ , величины коэффициентов переноса  $v_y$  и  $v_x$ , средние температуры газовой и жидкой фаз  $T_y$  и  $T_x$ , константы фазового равновесия извлекаемых компонентов  $k_i$ , высота рабочей части аппарата  $H$ , поверхность контакта в единице объема  $\sigma$ , физические свойства газовой и жидкой фаз (скорость звука, плотность, молярная масса). Решение поставленной задачи осуществляется методом итераций и заканчивается при достижении заранее заданной степени точности. Рассмотрим подробнее последовательность итерационного расчета. Зная высоту рабочей части аппарата  $H$  и задавшись числом элементарных объемов  $n$ , на которые разбивается рабочая часть аппарата, выбираем шаг интегрирования

$$\Delta h = H / n.$$

Так как интегрирование уравнения (1) проводится численно, то изменение мольного количества распределяющегося компонента в газовой фазе  $\Delta F_{ij}$  в  $j$ -м элементарном объеме колонного аппарата высотой  $\Delta h$  определяется из уравнения (5), записанного в конечных

разностях

$$\Delta F_{ij} = J_{Mij} \sigma \Delta h. \quad (6)$$

При использовании метода итераций первым этапом расчета является «заполнение» колонны исходным газом. При этом допускается, что до подачи абсорбента в колонну с каждого элементарного объема аппарата уходит газ, по количеству и составу равный сырому газу.

Второй этап решения – расчет каждого элементарного объема аппарата, начиная с верха колонны, в ходе которого определяются количества и составы потоков газа и жидкости, покидающих этот элементарный объем.

Рассмотрим подробнее последовательность расчета  $j$ -го элемента аппарата.

1. Определяется удельный мольный поток по уравнению массопередачи (1).
2. По уравнению (6) рассчитываются изменения мольного количества распределяющихся компонентов в газовой фазе, и эти значения суммируются

$$\Delta G_j = \sum_{i=1}^m \Delta F_{ij}.$$

3. На основе уравнения материального баланса определяются искомые параметры выходных потоков аппарата

$$G_j = G_{j+1} + \Delta G_j,$$

$$L_j = L_{j-1} + G_{j+1} - \Delta G_j,$$

$$y_{i,j} = (y_{i,j+1} G_{j+1} + \Delta F_{ij}) / G_j,$$

$$x_{i,j} = (x_{i,j-1} L_{j-1} - \Delta F_{ij}) / L_j.$$

В результате расчета при первом приближении определяются выходные параметры жидкой фазы  $L_n, x_n$  и расчетные параметры входного газового потока  $G_{n+1}, y_{i,n+1}$ . Вследствие произвольного выбора состава газа заполнения полученные в результате первой итерации покомпонентные составы конечных продуктов разделения не удовлетворяют уравнению материального баланса

$$(G_{n+1} y_{i,n+1} + L_0 x_{i,0}) - (G_1 y_{i,1} + L_n x_{i,n}) = 0. \quad (7)$$

Дальнейший расчет аппарата производится снизу вверх. Если материальный баланс снова не будет сходиться, то расчет аппарата повторяется сверху вниз и снизу вверх до тех пор, пока условие (7) не будет выполнено.

Рассчитаем противоточный абсорбер для разделения многокомпонентной

углеводородной смеси. В качестве абсорбента используется керосиновая фракция с молекулярным весом  $M = 210 \text{ кг/кмоль}$  и плотностью  $\rho_x = 820 \text{ кг/м}^3$ . Количество поступающего на абсорбцию газа  $G_{n+1} = 0,514 \text{ кмоль/с}$ , количество тощего абсорбента  $L_0 = 0,182 \text{ кмоль/с}$ , средняя температура жидкости  $T_x = 307 \text{ К}$ , коэффициенты переноса  $v_y = 2 \cdot 10^{-6}$ ,  $v_x = 8,3 \cdot 10^{-8}$ , рабочая высота аппарата  $H = 3,3 \text{ м}$ , средняя температура газа  $T_y = 308 \text{ К}$ , удельная поверхность контакта фаз в единице объема  $\sigma = 200 \text{ м}^2 / \text{м}^3$ .

Экспериментальные и расчетные значения концентраций компонентов, а также значения констант фазового равновесия приведены в таблице 1 [4]. Экспериментальные данные заимствованы из работы [1]. Сравнение экспериментальных и расчетных значений выходных концентраций в сухом газе и насыщенном абсорбенте показывает хорошее их совпадение.

Таблица 1

Экспериментальные и расчетные значения концентраций  
(многокомпонентная углеводородная смесь)

| Компонент | Константа равнов. $k_i$ | Сырой газ (эксп) | Тощий абсорб. (эксп.) | Сухой газ (эксп.) | Сухой газ (расчет) | Насыщ. абсорб. (экспер.) | Насыщ. абсорб. (расчет) |
|-----------|-------------------------|------------------|-----------------------|-------------------|--------------------|--------------------------|-------------------------|
| $N_2$     | 49,8                    | 0,110            | 0,000                 | 0,151             | 0,141              | 0,000                    | 0,002                   |
| $C_1$     | 11,8                    | 0,364            | 0,000                 | 0,477             | 0,448              | 0,007                    | 0,031                   |
| $C_2$     | 2,7                     | 0,211            | 0,000                 | 0,240             | 0,216              | 0,053                    | 0,076                   |
| $C_3$     | 0,89                    | 0,215            | 0,015                 | 0,112             | 0,147              | 0,192                    | 0,183                   |
| $i - C_4$ | 0,38                    | 0,036            | 0,010                 | 0,006             | 0,017              | 0,041                    | 0,045                   |
| $n - C_4$ | 0,28                    | 0,047            | 0,042                 | 0,010             | 0,025              | 0,113                    | 0,074                   |
| $C_5$     | 0,08                    | 0,016            | 0,022                 | 0,004             | 0,006              | 0,039                    | 0,034                   |
| Абсорб.   | -                       | 0,000            | 0,911                 | -                 | -                  | 0,555                    | 0,555                   |

Адекватность предложенной кинетической модели реальному объекту была проверена также в ходе экспериментального исследования хорошо растворимого газа в аппарате с достаточно хорошо определяемой поверхностью контакта фаз: исследовалось поглощение аммиака водой из аммиачно-воздушной смеси в трубке с орошаемыми стенками.

В задачу экспериментального исследования входило определение профилей концентраций аммиака в газовой и жидкой фазах по высоте колонны. Изучение поглощения аммиака водой из аммиачно-воздушной смеси проводилось при различных нагрузках по

жидкости и газу. Условия проведения эксперимента представлены в таблице 2.

Таблица 2

Гидродинамические условия проведения эксперимента

| Параметры режима                          | 1 серия              | 2 серия              |
|---|----------------------|----------------------|
| Расход воды, м <sup>3</sup> /с            | $1,9 \cdot 10^{-6}$  | $5,6 \cdot 10^{-6}$  |
| Плотность орошения, м <sup>3</sup> /(м с) | $22,3 \cdot 10^{-6}$ | $70,0 \cdot 10^{-6}$ |
| Изменение скорости газа в колонне, м/с    | 1,3 – 5,3            | 1,3 – 5,3            |

В таблице 3 представлены экспериментальные и расчетные значения концентрации аммиака в газовой и жидкой фазах для плотности орошения  $q = 22,3 \cdot 10^{-6} \text{ м}^3 / (\text{м} \cdot \text{с})$  и различных скоростей газа  $W$  в колонне. Там же приводятся относительные отклонения расчетных значений от экспериментальных.

Таблица 3

Экспериментальные и расчетные значения концентраций аммиака по высоте колонны

| Скорость газа         | Экспериментальные данные |                   | Расчетные данные  |                   | $\Delta x, \%$ | $\Delta y, \%$ |
|-----------------------|--------------------------|-------------------|-------------------|-------------------|----------------|----------------|
|                       | $x, \text{ м.д.}$        | $y, \text{ м.д.}$ | $x, \text{ м.д.}$ | $y, \text{ м.д.}$ |                |                |
| $W = 1,3 \text{ м/с}$ | 0,000                    | 0,016             | 0,000             | 0,013             | 0,0            | 18,0           |
|                       | 0,002                    | 0,025             | 0,002             | 0,022             | 0,0            | 12,0           |
|                       | 0,007                    | 0,035             | 0,006             | 0,038             | 14,0           | 8,0            |
|                       | 0,014                    | 0,062             | 0,012             | 0,062             | 14,0           | 0,0            |
| $W = 3,0 \text{ м/с}$ | 0,000                    | 0,024             | 0,000             | 0,024             | 0,0            | 0,0            |
|                       | 0,004                    | 0,034             | 0,006             | 0,034             | 16,0           | 0,0            |
|                       | 0,016                    | 0,046             | 0,014             | 0,047             | 12,5           | 2,1            |
|                       | 0,026                    | 0,062             | 0,023             | 0,062             | 11,5           | 0,0            |
| $W = 5,3 \text{ м/с}$ | 0,000                    | 0,030             | 0,000             | 0,028             | 0,0            | 6,7            |
|                       | 0,008                    | 0,038             | 0,009             | 0,038             | 10,0           | 0,0            |
|                       | 0,020                    | 0,047             | 0,020             | 0,049             | 0,0            | 4,0            |
|                       | 0,036                    | 0,061             | 0,033             | 0,061             | 8,3            | 0,0            |

На рис. 1 представлены изменения концентрации аммиака в жидкой и газовой фазах по высоте колонны для скорости газа  $W = 1,3 \text{ м/с}$  и плотности орошения  $22,3 \cdot 10^{-6} \text{ м}^3 / (\text{м} \cdot \text{с})$ . Анализ величин, представленных в таблице 3, и графическое сопоставление экспериментальных и расчетных данных об изменении концентрации аммиака в обеих фазах указывают на их удовлетворительное совпадение. Относительное отклонение расчетных значений концентраций от экспериментальных в основном не превышает погрешности

схождения материального баланса - 15%.

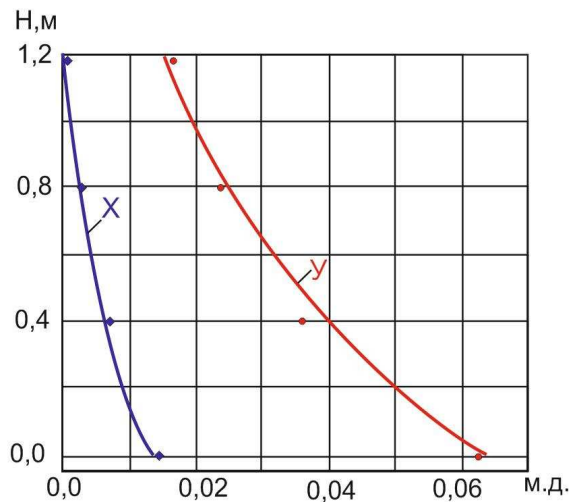


Рис. 1. Распределение концентрации аммиака по высоте колонны в жидкой (  $x$  ) и газовой (  $y$  ) фазах.  $W = 1,3 м/с$ ,  $q = 22,3 \cdot 10^{-6} м^3/(м \cdot с)$ .

При обработке экспериментальных данных коэффициент переноса  $\nu_x$  определялся на основе предположения о том, что перепад концентраций ( $x_i^* - x_i$ ) происходит на всей толщине жидкой пленки (т.е. толщина пограничного ламинарного слоя в жидкой фазе равна толщине пленки жидкости). Коэффициент переноса в газовой фазе подбирался в ходе расчета до наилучшего совпадения экспериментальных и расчетных данных. В таблице 4 представлены значения коэффициента переноса в газовой фазе  $\nu_y$  и соответствующие ему толщины диффузионного слоя  $\delta_y$  в газе в зависимости от скорости газа в колонне для двух различных плотностей орошения.

Таблица 4

Значения коэффициента переноса  $\nu_y$  и толщины диффузионного слоя  $\delta_y$  в газовой фазе

| Показатель    | $q = 22,3 \cdot 10^{-6} м^3/(м \cdot с)$ |                     |                     | $q = 70,0 \cdot 10^{-6} м^3/(м \cdot с)$ |                     |                      |
|---------------|--|---------------------|---------------------|--|---------------------|----------------------|
|               | 1,3                                      | 3,0                 | 5,3                 | 1,3                                      | 3,0                 | 5,3                  |
| $\nu_y$       | $3,3 \cdot 10^{-5}$                      | $5,3 \cdot 10^{-5}$ | $8,0 \cdot 10^{-5}$ | $3,3 \cdot 10^{-5}$                      | $7,4 \cdot 10^{-5}$ | $11,8 \cdot 10^{-5}$ |
| $\delta_y, м$ | $1,3 \cdot 10^{-7}$                      | $0,8 \cdot 10^{-7}$ | $0,5 \cdot 10^{-7}$ | $1,3 \cdot 10^{-7}$                      | $0,6 \cdot 10^{-7}$ | $0,4 \cdot 10^{-7}$  |

Анализ табличных данных показывает, что с увеличением скорости газа в колонне толщина диффузионного слоя в газовой фазе уменьшается, а коэффициент переноса возрастает. Это хорошо согласуется с физическим смыслом, который вкладывается в коэффициент переноса

v.

Подводя итог, можно сделать вывод, что предложенный кинетический метод расчета многокомпонентной изотермической абсорбции, разработанный в рамках нелокальной версии термодинамики, позволяет раскрыть физический смысл коэффициентов массоотдачи и массопередачи, выделить гидродинамическую составляющую этих коэффициентов и поставить на повестку дня разработку теоретических методов определения коэффициентов переноса. Сравнение результатов расчета по предложенной модели с экспериментальными данными для различных случаев абсорбции показывает хорошую ее работоспособность и возможность практического применения.

### Список литературы

1. Галеева Р.Г. Исследование абсорбции нефтяных (попутных) газов : дис. ... канд. наук. - М., 1970. - 143 с.
2. Майков В.П. Расширенная версия классической термодинамики - физика дискретного пространства-времени. – М. : МГУИЭ, 1997. – 160 с. : ил.
3. Майков В.П., Неумоина Н.Г. Метод расчета многокомпонентной изотермической абсорбции : депонированная рукопись в ЦСИФ, ЦИНТИ химнефтемаша № 1602, 31.10.86 г. - 16 с.
4. Неумоина Н.Г. Метод расчета неизотермической абсорбции : автореф. дис. ... канд. техн. наук. – М. : МИХМ, 1986. – 16 с.
5. Шервуд Т., Пигфорд Р., Уилки Ч. Массопередача. - М. : Химия, 1982. - 696 с.

### Рецензенты:

Фокин Владимир Михайлович, доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой «Энергоснабжение и теплотехника» ФГБОУ ВПО «Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет», г. Волгоград.

Семенов Борис Александрович, доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой «Промышленная теплотехника» ФГБОУ ВПО «Саратовский государственный технический университет им. Ю.А. Гагарина», г. Волгоград.