

УДК 66.081.2

ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ КИНЕТИЧЕСКОГО МЕТОДА РАСЧЕТА МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ АБСОРБЦИИ ГАЗОВ

Неумоина Н.Г.¹, Белов А.В.¹

¹Камышинский технологический институт (филиал) ФГБОУ ВПО «Волгоградский государственный технический университет», Камышин, Волгоградская область, Россия (403876, Камышин, Волгоградская обл., ул. Ленина, 6а), e-mail: fpt@kti.ru

Рассматривается построение модели кинетического метода расчета многокомпонентной неизотермической абсорбции. Основой для разработки данного метода расчета послужила нелокальная версия термодинамики, предложенная Майковым В.П. В рамках нелокальной версии термодинамики установлен принцип дискретизации термодинамических параметров. Этот принцип позволяет ввести в термодинамику время и определить минимальный макроскопический масштаб для описания процессов переноса массы, тепла, импульса. Для системы «газ-жидкость» получены уравнения массопередачи и теплопередачи. Уравнение массопередачи содержит слагаемое, учитывающее термодиффузию, а уравнение теплопередачи содержит слагаемое, учитывающее тепловые эффекты абсорбции на границе раздела фаз. При выводе этих уравнений применено приближение теории пограничного слоя. В пределах пограничного слоя перепад концентраций и температур происходит по линейному закону. В коэффициентах массоотдачи и теплоотдачи удалось выделить гидродинамическую и физическую составляющие. Гидродинамическая составляющая зависит от конкретной гидродинамической обстановки в зоне раздела фаз и фактически определяет толщину пограничного слоя. Физическая составляющая показывает, от каких теплофизических свойств контактирующих фаз газа и жидкости зависят коэффициенты массоотдачи и теплоотдачи.

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

CREATION OF MODEL OF THE KINETIC METHOD OF CALCULATION TO MULTICOMPONENT NONISOTHERMAL ABSORPTION OF GASES

Neumoina N.G.¹, Belov A.V.¹

¹A Kamyslin technological institute of the "Volgograd state technical university", Kamyslin, Volgograd area, Russia(403876, Kamyslin, Volgograd region, street of Lenin, 6a, e - mail: fpt@kti.ru

Creation of model of a kinetic method of calculation to multicomponent nonisothermal absorption is considered. The method is based on the nonlocal version of thermodynamics developed by Maikov V.P. Within a framework of nonlocal version of thermodynamics, a principle of discretization of thermodynamics parameters is set. This principal allows to introduce time to thermodynamics and to define a minimum macroscopic scale for description of transfer processes of mass, heat and impulse. For gas-liquid system the equations of a mass transfer and a heat transfer are received. The equation of a mass transfer contains composed, considering thermal diffusion, and the equation of a heat transfer contains composed, considering thermal effects of absorption on limit of the section of phases. For the conclusion of this equation approaching of theory of frontier layer is applied. Within the limits of frontier layer the overfall of concentrations and temperatures takes place on a linear law. In the coefficients of massreturn and heatreturn it was succeeded to hydrodynamic and physical constituents. Hydrodynamic constituent depends on a certain hydrodynamic situation on the border of division of phases and actually determines the thickness of frontier layer. Physical constituent shows: what thermophysical properties of contacting phases of gas and liquid the coefficient of massreturn and heatreturn depends on.

Keywords: absorption, masstransfer, massreturn, heatreturn, heat transfer, coefficient of transfer.

Абсорбция газов является экзотермическим процессом. Но в большинстве известных в настоящее время теоретических методов расчета процесса абсорбции используется приближение изотермического процесса, а сопутствующими процессами выделения и переноса тепла пренебрегают. Некоторые авторы [8,9] указывают на то, что тепловым эффектам при абсорбции

газов уделяется недостаточно внимания.

В статье предлагается метод расчета кинетики неизотермической абсорбции, в котором наиболее полно учитывается влияние тепловых эффектов на процесс массопередачи при абсорбции. Уравнения тепло- и массопередачи получены в рамках нелокальной версии термодинамики, разработанной Майковым В.П. (НВТ) [3,4]. Этот подход позволяет описать процессы переноса тепла и массы без постулирования каких-либо модельно-механизменных представлений, а полученные выводы в значительной степени сохраняют термодинамический характер.

В работе [5] кратко изложены основы нелокальной версии термодинамики, получено выражение для равновесного потока массы

$$J_{Mi}^* = c_s \rho_{CM} y_i. \quad (1)$$

где c_s – скорость звука в данной среде, м/с;

ρ_{CM} – молярная плотность смеси, кмоль/м³;

y_i – мольная доля компонента.

Для равновесного теплового потока в рамках той же теории можно получить следующее выражение

$$J_T^* = c_s^3 \rho'_{CM}, \quad (2)$$

где ρ'_{CM} – массовая плотность смеси, кг/м³.

Если подставить значения скорости звука и плотности ρ_{CM} , ρ'_{CM} смеси для идеальноегазовых условий в уравнения (1) и (2), то можно получить следующие выражения для равновесных потоков массы и тепла

$$J_{Mi}^* = \frac{P}{\sqrt{(c_p / c_v) RTM}}, \quad (3)$$

$$J_T^* = \left(\frac{c_p}{c_v} \right)^{\frac{3}{2}} P \sqrt{\frac{RT}{M}}. \quad (4)$$

Интересно сравнить эти зависимости с идеальным потоком частиц и удельным потоком энергии, полученным в рамках статистической физики [6, с. 110, с. 472].

$$N = \frac{P}{\sqrt{2\pi RTM}}, \quad (5)$$

$$E = P \sqrt{\frac{2 RT}{\pi M}}. \quad (6)$$

Выражения для J_{Mi}^* и N и для J_T^* и E совпадают с точностью до постоянного множителя, что подтверждает правильность выбора характерного линейного размера.

Перейдем непосредственно к описанию процесса переноса тепла и массы из одной фазы в другую. При совместном тепломассопереносе через одну и ту же поверхность принято считать [1,2,7], что перепад температур и концентраций в основном происходит в тонком слое, прилегающем к границе раздела фаз. Для описания неравновесных процессов, протекающих в приграничном ламинарном слое, как правило, можно применить линейное приближение. Тогда результирующая неравновесная плотность потока массы в линейном приближении для неизотермических условий запишется так

$$J_{Mi} = \Delta J_{Mi}^* = \frac{\partial J_{Mi}^*}{\partial y} \Delta y_i + \frac{\partial J_{Mi}^*}{\partial T} \Delta T \quad (7)$$

Оценим величину перепада концентраций Δy_i и температур ΔT . Если во всем ламинарном слое толщиной δ_y наблюдается перепад концентраций $(y_i - y_i^*)$ и перепад температур $(T_y - T^*)$ (где y_i^* и T^* - равновесные значения концентраций и температур на границе раздела фаз), а элементарный перепад концентраций Δy_i и температур ΔT осуществляется на длине, равной характерному радиусу взаимодействия $\Delta \ell$ (см. рис. 1), то величины элементарных перепадов могут быть оценены следующим образом

$$\Delta y_i = \frac{y_i - y_i^*}{\delta_y / \Delta \ell}, \quad (8)$$

$$\Delta T = \frac{T_y - T^*}{\delta_y / \Delta \ell}. \quad (9)$$

Подставляя выражения равновесного мольного потока (1) в (7) и учитывая (8) и (9) получим уравнение для неравновесного мольного потока в неизотермических условиях

$$J_{Myi} = \left(c_{Sy} \rho_{CMY} \frac{\partial y_i}{\partial y_i} + \rho_{CMY} y_i \frac{\partial c_{Sy}}{\partial y_i} + c_{Sy} y_i \frac{\partial \rho_{CMY}}{\partial y_i} \right) \frac{c_{Sy} \Delta \tau}{\delta_y} (y_i - y_i^*) + (\rho_{CMY} y_i \frac{\partial c_{Sy}}{\partial T} + c_{Sy} y_i \frac{\partial \rho_{CMY}}{\partial T}) \frac{c_{Sy} \Delta \tau}{\delta_y} (T_y - T^*) \quad (10)$$

Представим мольный поток в виде произведения плотности потока на некоторую скорость переноса, которую будем называть скоростью переноса субстанции

$$J_{Myi} = c_{Cy} (\varphi_{Myi} (y_i - y_i^*) + \varphi_{Tyi} (T_y - T^*)), \quad (11)$$

где

$$c_{Cy} = c_{Sy}^2 \Delta \tau / \delta_y, \quad (12)$$

$$\varphi_{Myi} = \rho_{CMy} + \frac{\rho_{CMH} y_i}{c_{Sy}} \cdot \frac{\partial c_{Sy}}{\partial y_i} + y_i \frac{\partial \rho_{CMy}}{\partial y_i}, \quad (13)$$

$$\varphi_{Tyi} = \frac{\rho_{CMH} y_i}{c_{Sy}} \cdot \frac{\partial c_{Sy}}{\partial T} + y_i \frac{\partial \rho_{CMy}}{\partial T}. \quad (14)$$

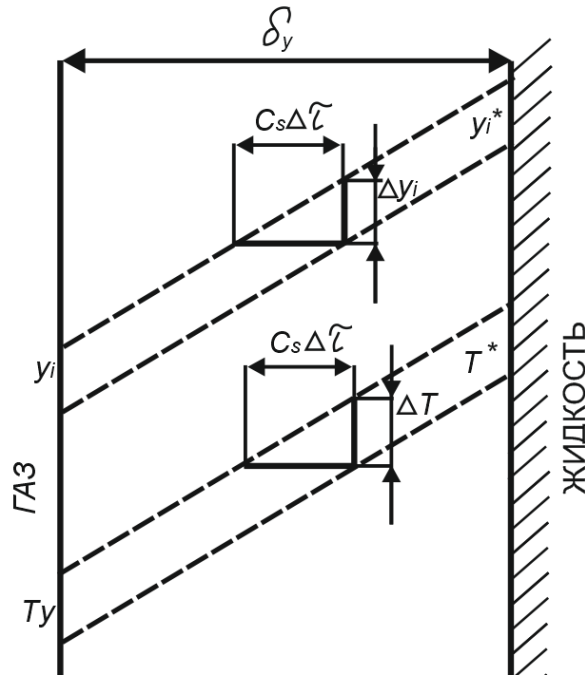


Рис.1. Условия на межфазной границе.

Вместо скорости переноса субстанции c_{Cn} удобно ввести безразмерную характеристику процесса переноса массы – коэффициент переноса v_y , который определяется выражением

$$v_y = c_{Cy} / c_{Sy}. \quad (15)$$

Тогда величина неравновесного мольного потока со стороны газовой фазы окончательно запишется следующим образом

$$J_{Myi} = v_y c_{Sy} (\varphi_{yi} (y_i - y_i^*) + \varphi_{Tyi} (T_y - T^*)). \quad (16)$$

Рассуждая аналогичным образом можно получить выражение для потока массы от границы раздела фаз в ядро жидкой фазы.

Для полного описания процессов тепломассопереноса необходимо составить уравнение теплового баланса. При этом важно учесть все виды тепловых эффектов газовой абсорбции. Обычно выделяют следующие виды тепловых эффектов [1,2,7] : 1- повышение температуры жидкости за счет тепла абсорбции; 2- понижение температуры жидкости за счет испарения растворителя; 3- теплопередача между контактирующими фазами; 4- теплопередача между матери-

альными потоками и стенками аппарата (тепловые потери).

В дальнейших рассуждениях будем рассматривать случай адиабатической абсорбции (тепловыми потерями пренебрегаем). Получим на основе нелокальной версии термодинамики уравнение для расчета теплопередачи между фазами. Ранее (см. формулу (2)) было получено уравнение для расчета теплового потока в равновесных условиях. Чтобы получить неравновесный тепловой поток, снова воспользуемся линейным приближением и запишем

$$J_{Ty} = \Delta J_{Ty}^* = \frac{dJ_{Ty}^*}{dT} \Delta T. \quad (17)$$

Величина ΔT - это элементарный перепад температур, который определяется уравнением (19). После дифференцирования равновесного теплового потока (2) и подстановки уравнения (9) в (17) получим

$$J_{Ty} = (3c_{Sy}^2 \rho'_y \frac{\partial c_{Sy}}{\partial T} + c_{Sy}^3 \frac{\partial \rho'_y}{\partial T}) \frac{c_{Sy} \Delta \tau}{\delta y} (T_y - T^*). \quad (18)$$

Представим тепловой поток в виде произведения скорости переноса субстанции на плотность теплового потока

$$J_{Ty} = c_{Cy} (3c_{Sy} \rho'_y \frac{\partial c_{Sy}}{\partial T} + c_{Sy}^2 \frac{\partial \rho'_y}{\partial T}) (T_y - T^*). \quad (19)$$

Где скорость переноса субстанции c_{Cy} определяется выражением (12). Вводя безразмерный коэффициент переноса ν_y по уравнению (15), запишем выражение для неравновесного теплового потока со стороны газовой фазы

$$J_{Ty} = \alpha_y (T_y - T^*), \quad (20)$$

где

$$\alpha_y = \nu_y c_{Cy} \eta_{Ty}, \quad (21)$$

$$\eta_{Ty} = 3c_{Sy} \rho'_y \frac{\partial c_{Sy}}{\partial T} + c_{Sy}^2 \frac{\partial \rho'_y}{\partial T}. \quad (22)$$

Здесь α_y - коэффициент теплоотдачи в газовой фазе, Bm/m^2 . Путем аналогичных рассуждений можно получить уравнение для неравновесного теплового потока в жидкой фазе.

Рассмотрим тепловые эффекты газовой абсорбции. Обычно принимают, что тепло при растворении газа выделяется на границе раздела фаз (аналогично – при испарении растворителя охлаждается граница раздела фаз). Примем эту гипотезу в качестве рабочей. Тогда уравнение теплового баланса для выделенного объема на границе раздела фаз запишется в виде

$$J_{Ty} + J_1 - J_2 - J_{Tx} = 0 \quad (23)$$

где J_{Ty} - поток тепла от ядра газовой фазы к границе раздела фаз, $Вт/м^2$;

J_{Tx} - поток тепла от границы раздела фаз в ядро жидкой фазы, $Вт/м^2$;

J_1 - теплота абсорбции, $Вт/м^2$;

J_2 - теплота испарения растворителя, $Вт/м^2$.

Теплота абсорбции J_1 и теплота испарения растворителя J_2 определяются следующим образом

$$J_1 = \sum_{i=1}^m q_i J_{Mi}, \quad (24)$$

$$J_2 = r J_{Mp}, \quad (25)$$

где q_i - удельная теплота абсорбции i -го компонента, $Дж/кмоль$;

r - удельная теплота испарения растворителя, $Дж/кмоль$;

J_{Mp} - удельный мольный поток растворителя, $кмоль/м^2с$.

Уравнение массоотдачи в газовой фазе (16), аналогичное ему выражение для неравновесного мольного потока в жидкой фазе, условие фазового равновесия

$$y_i^* = k_i x_i^*, \quad (26)$$

где k_i - константа фазового равновесия для i -го компонента; уравнения теплоотдачи для газовой (20) и жидкой фаз образуют исходную систему уравнений для описания процессов тепло-массообмена при неизотермической абсорбции. Решая эту систему относительно неизвестных y_i^* , x_i^* , T^* , J_{Mi} , J_T , получим:

- уравнение массопередачи для неизотермических условий

$$J_{Mi} = k_{Fi} (y_i - k_i x_i + N_i), \quad (27)$$

где

$$\frac{1}{k_{Fi}} = \frac{1}{\beta_{yi}} + \frac{k_i}{\beta_{xi}},$$

$$\beta_{yi} = v_y c_{Sy} \varphi_{Myi},$$

$$\beta_{xi} = v_x c_{Sx} \varphi_{Mxi},$$

$$N_i = \varphi_{Tyi} / \varphi_{Myi} (T_y - T^*) + k_i \varphi_{Tx} / \varphi_{Mxi} (T^* - T_x)$$

где k_{Fi} - коэффициент массопередачи i -го компонента, $кмоль/(м^2с)$;

β_{yi}, β_{xi} - коэффициенты массоотдачи, $кмоль/(м^2с)$,

- уравнение теплопередачи

$$J_{Ty} = \frac{1}{1/\alpha_y + 1/\alpha_x} (T_y - T_x) + \frac{1}{1 + \alpha_y/\alpha_x} (J_1 - J_2) \quad (28)$$

(тепловой поток в жидкой фазе определяется из балансового соотношения (23)),

и уравнение для расчета равновесной температуры на границе раздела фаз

$$T^* = \frac{\alpha_y T_y + J_1 - J_2 + \alpha_x T_x}{\alpha_y + \alpha_x}$$

Величины φ_{Myi} (φ_{Mxi}), входящие в уравнение для коэффициента массоотдачи, а также величины η_{Ty} (η_{Tx}), входящие в уравнение для коэффициента теплоотдачи, рассчитываются теоретически. Они зависят от физических свойств смеси - скорости звука, плотности, молекулярной массы. Безразмерный коэффициент переноса субстанции v_y (v_x) характеризует гидродинамические условия, в которых протекают процессы тепло- и массопередачи и теоретически не может быть определен в рамках поставленной в статье задачи. В общем случае коэффициент переноса v_y меньше единицы. В пределе он может быть равным единице и тогда $c_{Cy} = c_{Sy}$, а $\delta_y = \Delta\ell$, то есть процесс переноса массы и тепла будет происходить с максимально возможной скоростью, равной скорости звука в данной среде, а толщина пограничного ламинарного слоя δ_y будет равна характерному линейному размеру $\Delta\ell$.

При использовании уравнения массопередачи (27) и уравнения теплопередачи (28) для расчета тепломассообменного процесса коэффициентами переноса v_y и v_x необходимо задаваться и корректировать их в зависимости от того, какое распределение концентраций по высоте аппарата необходимо получить. Поэтому задача расчета неизотермического абсорбера ставится в поверочном варианте. Алгоритм расчета по предложенной модели и результаты расчета однокомпонентной и многокомпонентной изотермической абсорбции будут изложены в следующем сообщении.

Список литературы

1. Александров И.А. Массопередача при ректификации и абсорбции многокомпонентных смесей. Л.: Химия, 1974, 320 с.
2. Кафаров В.В. Основы массопередачи. М.: Высшая школа, 1979, 439 с.
3. Майков В.П. Расширенная версия классической термодинамики - физика дискретного пространства-времени. – М.: МГУИЭ. 1997 – 160 с., ил.

4. Майков В.П. Динамическое равновесие как сложная иерархическая система. –В кн.: Всесоюз. научн. конф. «Математическое моделирование сложных химико-технологических систем»: Тез. докл. Одесса, 1985, кн. 1, с. 18.
5. Неумоина Н.Г., Белов А.В. Обоснование кинетического метода расчета многокомпонентной изотермической абсорбции. Фундаментальные исследования. 2013. №10-5. С. 1010-1013.
6. Трайбус М. Термостатика и термодинамика. М.: Энергия, 1974, 504 с.
7. Шервуд Т., Пигфорд Р., Уилки Ч. Массопередача. М.: Химия, 1982, 696 с.
8. Born J.R., Coggan G.C. A note of heat effects in gas absorption//Chem. Eng. Sci., 1969, v 24, №1, p.196-197.
9. Born J.R., Stockar U., Coggan G.C. Gas absorption with heat effects. 1. A new computational method. //Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop., 1974, v 13, №2, p.115-123.

Рецензенты:

Богомолов А.Н., д.т.н., профессор, проректор по научной работе ФГБОУ ВПО «Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет» , г.Волгоград;

Семенов Б.А., д.т.н., профессор, заведующий кафедрой «Промышленная теплотехника» ФГБОУ ВПО «Саратовский государственный технический университет им. Ю.А.Гагарина», г.Саратов.