

УДК 66.081.2

АПРОБАЦИЯ 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: ffpt@kti.ru

В рамках предложенного кинетического метода расчета многокомпонентной неизотермической 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 так же противоточного тарельчатого абсорбера при разделении углеводородной смеси. Произведено сравнение результатов расчета с экспериментальными данными. Сравниваются не только составы выходных потоков насыщенного абсорбента и сухого газа, но и распределение концентрации аммиака в газовой и жидкой фазах по высоте пленочного абсорбера, а также температуры газовой и жидкой фаз на входе и выходе из аппарата.

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

APPROBATION 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: ffpt@kti.ru

Within a framework of the developed kinetic method of the calculation of multicomponent nonisothermal absorption, based on the nonlocal version of thermodynamics, the algorithm of calculation of mass exchange vehicle (absorber) is worked out. The sequence of calculation both all device, and its separate 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. Are compared not only structures of output streams of saturated absorbent and dry gas, but also distribution of concentration of ammonia in gas and liquid phases on height of a film absorber, and also temperature of gas and liquid phases on an entrance and an exit from the device.

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

Абсорбция газов сопровождается тепловыми эффектами, которые, как правило, оказывают влияние на процесс массообмена [8,9]. В работах [5,6] приводятся основы разработанной в рамках нелокальной версии термодинамики [3,4] кинетической модели расчета многокомпонентной неизотермической абсорбции. Эта модель включает:

- уравнение массопередачи для неизотермических условий

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

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

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

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

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

где k_i - константа фазового равновесия для i -го компонента;

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

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

N_i - член уравнения массопередачи, учитывающий термодиффузию компонента через границу раздела фаз, имеет размерность концентрации (мольные доли).

- уравнение теплопередачи (с учетом тепловых эффектов на границе раздела фаз)

$$J_{Ty} = \frac{1}{1/\alpha_y + 1/\alpha_x} (T_y - T_x) + \frac{1}{1 + \alpha_y/\alpha_x} (J_1 - J_2) \quad (2)$$

- уравнение для расчета равновесной температуры на границе раздела фаз

$$T^* = \frac{\alpha_y T_y + J_1 - J_2 + \alpha_x T_x}{\alpha_y + \alpha_x}, \quad (3)$$

здесь α_y, α_x - коэффициенты теплоотдачи в газовой и жидкой фазах соответственно, $\text{Вт}/\text{м}^2$;

J_1 - теплота абсорбции, $\text{Вт}/\text{м}^2$;

J_2 - теплота испарения растворителя, $\text{Вт}/\text{м}^2$;

T_y, T_x - температуры в ядре потока газовой и жидкой фаз соответственно, К .

При разработке модели принималось, что перенос массы и тепла происходит в тонком пограничном слое, прилегающем к границе раздела фаз, по линейному закону [1,7]. Величины φ_{Myi} (φ_{Mxi}), входящие в уравнение для коэффициентов массоотдачи, а также величины η_{Ty} (η_{Tx}), входящие в уравнение для коэффициентов теплоотдачи, рассчитываются теоретически. Они зависят от физических свойств смеси - скорости звука c_s , плотности ρ , молекулярной массы M . 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 (1) и уравнения теплопередачи (2) 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.

Расчет процесса переноса тепла и массы, которые происходят в реальном массообменном аппарате, на основе уравнений (1), (2) и (3) сводится к процедуре численного интегрирования. При составлении алгоритма и программы расчета неизотермического абсорбера в качестве метода сходимости был использован метод простых итераций. Предварительно рабочая часть аппарата разбивается на заданное число элементарных объемов. Затем колонна «заполняется» газом, равным по количеству и составу сырому газу. Следующий этап – это последовательный расчет аппарата сверху вниз. При этом каждый j -й элементарный объем массообменного аппарата рассчитывается следующим образом.

1. Предварительно задается температура на границе раздела фаз T_j^* равной температуре жидкости T_{xy} . По этой температуре выбираются константы фазового равновесия k_i . Затем по уравнению (1) рассчитываются удельные мольные потоки компонентов.

2. Истинное изменение мольного количества распределяющихся компонентов в газовой фазе ΔF_{ij} в элементе колонного аппарата высотой Δh определяется с помощью уравнения материального баланса, записанного в конечно-разностной форме

$$\Delta F_{ij} = \int_0^H J_{Mij} \sigma \Delta h, \quad (4)$$

где σ - поверхность контакта в единице объема, m^2 / m^3 ,

H – рабочая высота аппарата, m .

3. По формуле (3) уточняется значение температуры на границе раздела фаз T_j^* до тех пор пока разность значений T_j^* на двух соседних итерациях не будет удовлетворять заранее заданной точности расчета. Таким образом, из формулы (3) итерационным путем находим T_j^* , а из уравнения (4) ΔF_{ij} .

4. Суммируя покомпонентные изменения газовой фазы, определяем общее изменение расхода газа

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

5. По уравнению материального баланса определяются искомые параметры выходных потоков j -го элемента аппарата

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

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

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

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

6. По уравнению (2) определяются удельные количества теплоты в обеих фазах.

7. Истинные изменения количества теплоты в газовой и жидкой фазах определяются из уравнений

$$\Delta Q_{yj} = J_{Tyj} \sigma \Delta h ,$$

$$\Delta Q_{xj} = (J_{Tyj} + J_{1j} - J_{2j}) \sigma \Delta h .$$

8. Температуры потоков, покидающих элементарный объем аппарата, определяются из уравнений теплового баланса

$$G_{Tj} = G_{T,j+1} - \Delta G_j c_{py} T_{y,j+1} - \Delta Q_{yj}$$

$$L_{Tj} = L_{T,j-1} + \Delta G_j c_{py} T_{y,j+1} + \Delta Q_{xj}$$

$$T_{yj} = \frac{G_{Tj}}{G_j c_{py}}$$

$$T_{xj} = \frac{L_{Tj}}{L_j c_{px}}$$

где c_{py} - молярная газовая теплоемкость, Дж/(кмоль · К);

c_x - теплоемкость жидкости, Дж/(кмоль · К);

G_T, L_T - теплосодержание соответственно газовой и жидкой фаз, Дж .

Полученные в результате первого приближения выходные параметры жидкой фазы $L_n, x_{i,n}, T_{xn}$ вследствие произвольного выбора газа заполнения, не будут удовлетворять уравнению покомпонентного материального баланса

$$(G_{n+1}y_{i,n+1} + L_0x_{i,0}) - (G_1y_{i,1} + L_nx_{i,n}) = 0 \quad (5)$$

Поэтому дальнейший расчет аппарата повторяется в направлении снизу вверх и сверху вниз до тех пор, пока не будет выполнено условие (5).

Адекватность предложенной теоретической модели расчета неизотермической абсорбции была проверена на примере системы с одним распределяющимся компонентом. В ходе экспериментального исследования изучалась абсорбция аммиака водой из аммиачно-воздушной смеси. Массообменный аппарат представлял собой пленочную колонну высотой 1,2 м и диаметром 0,0275 м. Конструкция колонны позволяла проводить промежуточные отборы проб газа и жидкости. Концентрационные профили аммиака в обеих фазах измерялись при различных гидродинамических режимах. Температуры материальных потоков измерялись на входе и выходе из аппарата. В таблице 1 приведены экспериментальные и расчетные значения концентрации аммиака в газовой и жидкой фазах при различных скоростях газа W и плотности орошения $q = 22,3 \cdot 10^{-6} \text{ м}^3 / (\text{м} \cdot \text{с})$.

Таблица 1

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	0,023	0,0	8,0
	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	0,025	0,0	4,0
	0,004	0,034	0,006	0,036	16,0	5,5
	0,016	0,046	0,014	0,048	12,5	4,0
	0,026	0,062	0,023	0,062	11,5	0,0
$W = 5,3 \text{ м/с}$	0,000	0,030	0,000	0,030	0,0	0,0
	0,008	0,038	0,009	0,040	10,0	5,0
	0,020	0,047	0,021	0,051	5,0	7,8
	0,036	0,061	0,031	0,061	13,8	0,0

На рис.1 представлены профили изменения концентраций и температур аммиака в жидкой и газовой фазах по высоте пленочного абсорбера для скорости газа $W = 3,0 \text{ м/с}$ и плотности орошения $q = 22,3 \cdot 10^{-6} \text{ м}^3 / (\text{м} \cdot \text{с})$. Экспериментальный температурный профиль в жидкой фазе несколько отличается от расчетного. Очевидно, это связано с тем, что пленочный абсорбер не имел тепловой изоляции, температура окружающей среды в ходе эксперимента

была близка к $0^{\circ}C$ и тепловые потери отразились в первую очередь на температуре жидкой фазы. Анализ табличных данных и графического материала позволяет сделать вывод о том, кинетическая модель адекватно описывает процессы теплопереноса при неизотермической абсорбции.

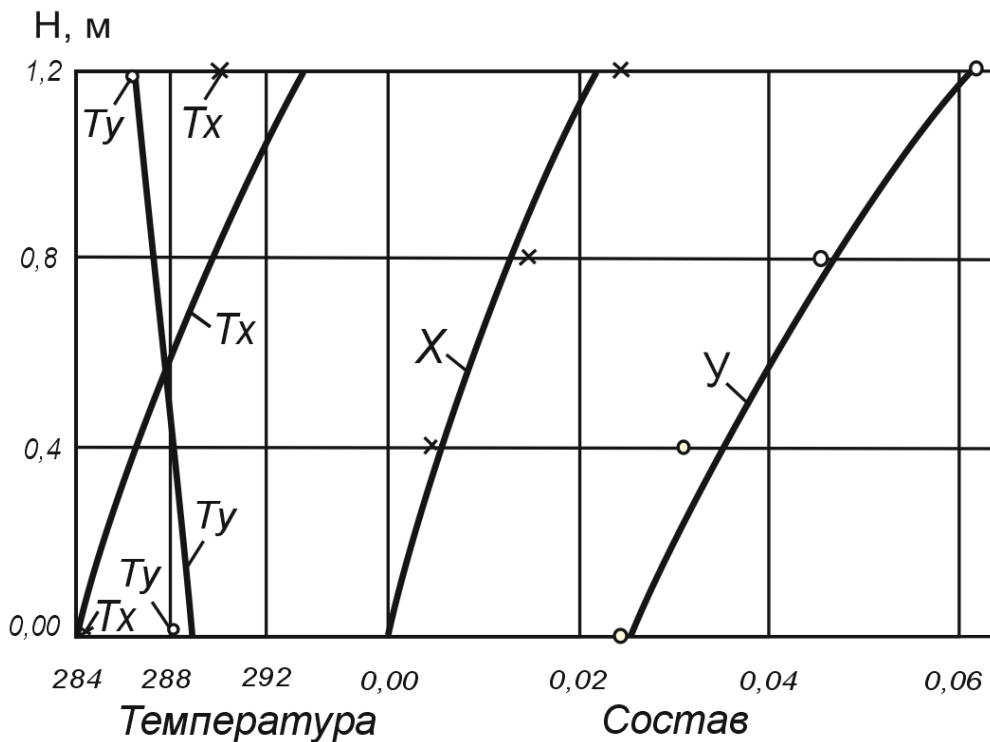


Рис. 1. Распределение концентраций температур по высоте пленочного абсорбера в газовой (Y) и жидкой (X) фазах: (0, x) – экспериментальные данные; (—) – расчетные данные.

$$W = 1,3 \text{ м/с}, \quad q = 22,3 \cdot 10^{-6} \text{ м}^3 / (\text{м} \cdot \text{с}).$$

При обработке экспериментальных данных коэффициент переноса ν_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.

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 $L_0 = 0,182 \text{ кмоль/с}$, коэффициенты переноса $\nu_y = 2 \cdot 10^{-6}$, $\nu_x = 8,3 \cdot 10^{-8}$, рабочая высота аппарата

$H = 3,3\text{ м}$, удельная поверхность контакта фаз в единице объема $\sigma = 200\text{ м}^2 / \text{м}^3$.

Экспериментальные и расчетные значения концентраций компонентов приведены в таблице 2. Экспериментальные данные заимствованы из работы [2]. Сравнение экспериментальных и расчетных значений выходных концентраций в сухом газе и насыщенном абсорбенте показывает хорошее их совпадение.

Таблица 2

Экспериментальные и расчетные значения концентраций
(многокомпонентная углеводородная смесь)

Компонент	Сырой газ (эксп)	Тощий абсорб. (эксп.)	Сухой газ (эксп.)	Сухой газ (расчет)	Насыщ. абсорб. (экспер.)	Насыщ. абсорб. (расчет)
N_2	0,110	0,000	0,151	0,132	0,000	0,002
C_1	0,364	0,000	0,477	0,422	0,007	0,030
C_2	0,211	0,000	0,240	0,218	0,053	0,059
C_3	0,215	0,015	0,112	0,171	0,192	0,151
$i - C_4$	0,036	0,010	0,006	0,021	0,041	0,042
$n - C_4$	0,047	0,042	0,010	0,030	0,113	0,071
C_5	0,016	0,022	0,004	0,007	0,039	0,035
Абсорб.	0,000	0,911	-	-	0,555	0,610
Тем-ра, К	308,0	307,0	308,0	325,6	315,0	329,3

Подводя итог вышеизложенному, можно сделать вывод, что предложенный кинетический метод расчета многокомпонентной неизотермической абсорбции разработанный в рамках нелокальной версии термодинамики, позволяет раскрыть физический смысл коэффициентов массоотдачи, массопередачи, теплоотдачи, выделить гидродинамическую составляющую этих коэффициентов и поставить на повестку дня разработку теоретических методов определения коэффициентов переноса, отвечающих за гидродинамическую обстановку в зоне переноса массы и тепла через границу раздела фаз. Учет тепловых эффектов процесса абсорбции позволит в дальнейшем изучить их влияние на точность определения концентраций компонентов в газовой и жидкой фазах при изменении расходных показателей контактирующих фаз.

Список литературы

1. Александров И.А. Массопередача при ректификации и абсорбции многокомпонентных

смесей. Л.: Химия, 1974, 320 с.

2. Галеева Р.Г. Исследование абсорбции нефтяных (попутных) газов. Канд. Дисс. М., 1970, 143 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.: Всесоюзн. научн. конф. «Математическое моделирование сложных химико-технологических систем»: Тез. докл. Одесса, 1985, кн. 1, с. 18.
5. Майков В.П., Неумоина Н.Г. Метод расчета многокомпонентной неизотермической абсорбции Депонированная рукопись в ЦСИФ, ЦИНТИхимнефтемаша № 1603, 31.10.86г., 15 с.
6. Неумоина Н.Г. Метод расчета неизотермической абсорбции. Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата технических наук. Москва, МИХМ, 1986г. – 16 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.