

Л. М. МУСАБЕКОВА, А. А. ЮНУСОВА, Д. У. ЮНУСОВА, А. М. БРЕНЕР

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА ТЕПЛА И МАССЫ В РЕАКТОРАХ СМЕШАННОГО ТИПА С УЧЕТОМ ОБЪЕМНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ФАЗ

Экспериментальные исследования и опыт промышленной эксплуатации показывают, что расчет аппаратов с большой единичной мощностью по экспериментальным данным, полученным на малогабаритных опытных установках, заключается в обеспечении расчетной эффективности их работы. Эта эффективность имеет тенденцию уменьшаться с увеличением габаритов аппарата [1, 2]. Отмеченное явление получило название масштабного эффекта и стало предметом исследования многих ученых [1].

Наличие в объеме аппарата участков рециркуляции, областей со сложной структурой потоков и застойных зон создает большие проблемы при разработке математических моделей. Однако даже работоспособную модель не всегда корректно использовать при проектировании промышленного аппарата вследствие отмеченной проблемы масштабного перехода, поскольку структура потоков может измениться при изменении габаритных размеров аппарата.

В нашей статье описан подход к отмеченной проблеме, основанный на некоторых идеях, предложенных в работах [2], который позволяет дать достаточно простую методику оценки влияния масштабного фактора на эффективность массообмена, пригодную для использования в инженерных методиках расчета.

Если удастся описать реактор в виде последовательности соединенных проточных реакторов идеального смешения и правильно оценить количество таких модельных реакторов n , то C – кривую, описывающую реакцию системы, можно представить в виде [1]:

$$\frac{C}{C_0} = \frac{n^n \theta^{n-1}}{(n-1)!} \exp(-n\theta), \quad (1)$$

где θ – время пребывания основного реагента в аппарате.

Весь объем аппарата делится на зоны взаимодействия, характеризующихся различными соотношениями взаимодействующих потоков. Предполагается, что структура потоков в выделенном малом элементе объема реактора соот-

ветствует структуре потоков в лабораторном аппарате с таким же соотношением потоков и равномерным распределением фаз [2].

Тогда при неравномерном распределении потоков предполагаем, что каждому элементу объема можно поставить в соответствие локальное значение объемного коэффициента массопередачи, определяющегося соотношением потоков в этом объеме и полученное на лабораторных установках малого размера с известной структурой потоков. При этом расчет значений коэффициентов массопередачи (как и теплопередачи) можно проводить по схеме идеального вытеснения [1, 2].

Тогда для элементарных объемов реактора можно записать следующую систему уравнений:

$$\frac{\partial Y}{\partial z} = L(z, r) \frac{\partial X}{\partial z}; \quad (2)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial z} = K_v(z, r) \frac{d\chi}{dV}, \quad (3)$$

где X, Y – безразмерные концентрации взаимодействующих реагентов; K_v – объемный коэффициент массопередачи; z – продольная координата; r – радиальная координата; χ – степень превращения; V – объем реактора; L – соотношение потоков взаимодействующих фаз.

В линейном приближении можно положить:

$$\frac{d\chi}{dV} \approx k_{st} X - Y, \quad (4)$$

где k_{st} – константа равновесия реакции.

Тогда систему (1), (2) можно привести к виду:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 Y}{\partial z^2} - D(z, r) \frac{\partial Y}{\partial z} = 0, \\ \frac{\partial^2 X}{\partial z^2} - \left[D(z, r) - \frac{\partial(\ln L)}{\partial z} \right] \frac{\partial X}{\partial z} = 0. \end{cases} \quad (5)$$

Эффективный коэффициент диффузии определяется по формуле

$$D(z, r) = \frac{\partial(\ln K_v)}{\partial z} + K_v(\lambda - 1), \quad (6)$$

где λ – фактор массообмена [2]:

$$\lambda = k_{st}L. \quad (7)$$

Поскольку среднее значение λ не зависит от характера распределения потоков и постоянно по длине реактора, то среднее значение коэффициентов массопередачи можно вычислить по формуле

$$\bar{K}_V = \frac{1}{f} \iint_f K_V(L) df. \quad (8)$$

После ряда преобразований получаем уравнение рабочей линии массообменного процесса в аппарате в виде

$$Y = Y_0 \frac{1}{\lambda - 1} \times \left[(1 - \lambda\chi) \exp\left(\frac{\lambda - 1}{J_Y} f \int_0^z \bar{K}_V ds\right) - \lambda(1 - \chi) \right] + X_0 \frac{k_{st}}{\lambda - 1} \left[1 - \exp\left(\frac{\lambda - 1}{J_Y} f \int_0^z \bar{K}_V ds\right) \right]. \quad (9)$$

Случай $\lambda = 1$ должен быть рассмотрен отдельно [2]. При этом получаем

$$Y = Y_0 \left[1 - \frac{f(1 - \chi)}{J_Y} \int_0^z \bar{K}_V ds \right] + X_0 \frac{k_{st} f}{J_Y} \int_0^z \bar{K}_V ds. \quad (10)$$

На основе предлагаемого подхода удается также получить формулы для расчета степени превращения веществ в реакторе со сложной структурой потоков взаимодействующих фаз с учетом масштабного перехода:

при $\lambda \neq 1$:

$$\chi = \left\{ \left[\exp\left(\frac{\lambda - 1}{J_Y} f \int_0^H \bar{K}_V ds\right) - 1 \right] / \left[\lambda \exp\left(\frac{\lambda - 1}{J_Y} f \int_0^H \bar{K}_V ds\right) - 1 \right] \right\} \left(1 - \frac{k_{st} X_0}{Y_0} \right); \quad (11)$$

при $\lambda = 1$:

$$\chi = \left\{ \left[\frac{f}{J_Y} \int_0^H \bar{K}_V ds \right] / \left[1 + \frac{f}{J_Y} \int_0^H \bar{K}_V ds \right] \right\} \left(1 - \frac{k_{st} X_0}{Y_0} \right). \quad (12)$$

Если необходимо учесть наличие в аппарате n последовательных участков с определяемым отдельно на каждом участке коэффициентом массопередачи, то формула для расчета степени превращения приобретает вид:

при $\lambda \neq 1$:

$$\chi = \frac{\exp\left(\frac{\lambda - 1}{J_Y} f \sum_{i=1}^n \int_0^{H_i} \bar{K}_{V(i)} ds\right) - 1}{\lambda \exp\left(\frac{\lambda - 1}{J_Y} f \sum_{i=1}^n \int_0^{H_i} \bar{K}_{V(i)} ds\right) - 1} \times \left(1 - \frac{k_{st} X_0}{Y_0} \right); \quad (13)$$

при $\lambda = 1$:

$$\chi = \frac{\frac{1}{J_Y} f \sum_{i=1}^n \int_0^{H_i} \bar{K}_{V(i)} ds}{\frac{1}{J_Y} f \sum_{i=1}^n \int_0^{H_i} \bar{K}_{V(i)} ds + 1}. \quad (14)$$

Получаем также формулу для расчета степени превращения веществ в реакторе при наличии в аппарате n последовательных участков с различной структурой потоков фаз:

$$\chi = \frac{\exp\left(\frac{\lambda - 1}{J_Y} f \sum_{i=1}^n \int_0^{H_i} \bar{K}_{V(i)} ds\right) - 1}{\lambda \exp\left(\frac{\lambda - 1}{J_Y} f \sum_{i=1}^n \int_0^{H_i} \bar{K}_{V(i)} ds\right) - 1} \times \left(1 - \frac{k_{st} X_0}{Y_0} \right). \quad (15)$$

Анализ математической модели распределения дисперсной фазы в реакторе показывает [3], что существует некоторый характерный радиус R_s , на котором интенсивность потока дисперсной фазы устанавливается на определенном расстоянии от входного сечения реактора H_s равной средней по сечению реактора. Получены следующие оценки для указанных радиуса и средней интенсивности:

$$R_s = \sqrt{\frac{aD}{2} \ln\left(\frac{4D}{\pi a}\right)}, \quad (16)$$

$$\bar{j} = J \sqrt{\frac{2h}{H_s}} \exp\left(-\frac{hR_s^2}{2a^2 H_s}\right). \quad (17)$$

Таким образом, при оценочных расчетах весь объем аппарата можно условно разделить на две зоны: зону стабилизации высотой H_s , в пределах которой область интенсивного массообмена занимает лишь некоторую часть объема рабочей зоны аппарата, и зону установившегося массообмена, в которой локальные коэффициенты массоотдачи достигают в среднем оптимальной величины во всем объеме реактора.

При этом в первой зоне можно ввести в рассмотрение так называемый коэффициент ухудшения массообмена γ , равный отношению коэффициента массоотдачи в этой зоне к оптимальному по данным экспериментальных исследований [1, 2].

Для минимальной локальной интенсивности потока дисперсной фазы на основе стохастической модели случайного блуждания получаем оценку

$$i_{\min} = \frac{4I \sqrt{\frac{a}{\pi d_0}}}{\exp\left(-\frac{d_0}{4a}\right)}. \quad (18)$$

Здесь начальное распределение дисперсной фазы охарактеризовано некоторым условным шагом между точечными источниками орошения d_0 и введен характерный продольный размер элементарного объема реактора a (например, размер насадочного элемента).

График зависимости d_0/a от соотношения минимальной локальной плотности потока к общей начальной плотности орошения i_{\min}/I приведен на рисунке.

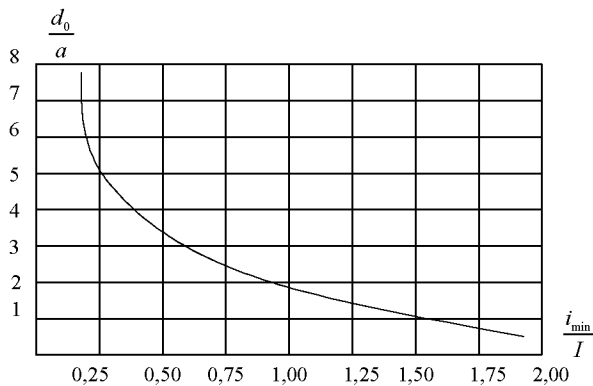


График решений уравнения (12)

На основе изложенных моделей получаем расчетные соотношения для степени превращения веществ в реакторе с учетом наличия двух отмеченных зон в реакторе с различным распределением потоков фаз в зонах:

для $\lambda \neq 1$:

$$\chi = \frac{\exp\left(\frac{\lambda-1}{G} F \bar{K} [H - (1-\gamma)] H_s\right) - 1}{\lambda \exp\left(\frac{\lambda-1}{G} F \bar{K} [H - (1-\gamma)] H_s\right) - 1}; \quad (19)$$

для $\lambda = 1$:

$$\chi = \frac{\frac{F}{G} \bar{K} [H - (1-\gamma)] H_s}{\frac{F}{G} \bar{K} [H - (1-\gamma)] H_s + 1}. \quad (20)$$

Здесь F – полное сечение аппарата; G – интенсивность потока сплошной фазы.

Если для оценки эффективности аппарата вследствие неравномерного распределения потоков в объеме использовать представление о высоте единицы переноса [4], то расчет соответствующей характеристики можно проводить по формулам:

$$h = h^* + \Delta h, \quad (21)$$

$$\Delta h = \frac{(1-\gamma) H_s}{N}, \quad (22)$$

$$N = \frac{1}{\lambda-1} \ln\left(\frac{1-\chi}{1-\lambda\chi}\right), \quad (23)$$

где h^* – высота единицы переноса при равномерном распределении потоков (по данным экспериментальных исследований на лабораторном стенде).

Таким образом, использование стохастических методов, в частности методов случайного блуждания, позволяет дать адекватное математическое описание распределения дисперсной фазы по объему реакционных аппаратов химической технологии, даже при наличии сложных внутренних устройств. Предложенная математическая модель распределения фаз в объеме аппарата позволяет использовать результаты лабораторных исследований на малогабаритных установках и на их основании проводить расчеты промышленных химических аппаратов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Левеницкий О. Инженерное оформление химических процессов. М.: Химия, 1969. С. 622.

2. Brener A.M., Bolgov N.P., Sokolov N.M., Tarat E.Ya. The application of random walk methods to the modelling of liquid distribution on the regular shelf packing // Theor. Found. of Chem. Eng. 1981. V. 15(1). P. 62-67.

3. Brener A.M. Adaptation of random walk methods to the modelling of liquid distribution in packed columns // Advances in Fluid Mechanics, IV. Southampton, Boston: WIT Press, 2002. P. 291-300.

4. Шервуд Т., Пизфорд Р., Уилки Ч. Массопередача. М.: Химия, 1982. С. 696.

Резюме

Реакторлардағы масса тасу тиімділігін есептеудегі масштабты тиімді жобалаудың жаңа бағыты қарастырылады. Бұл бағыт аппараттың барлық жұмыс көлемін әсерлесетін фазалардың түрлі қатынасты ағыстары бар зоналарға бөлуге негізделген. Табылған өрнектер химиялық аппараттарды есептеуге қолданылады.

Summary

The new approach to modelling the liquid distribution influence on the heat and mass transfer intensity in the gas-liquid chemical reactors has been carried out. The expressions obtained can be applied to the design of reactors with allowance for the scaling phenomena.

УДК 513.83

ЮКГУ им. М. Ауезова

Поступила 3.03.07г.