

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В ПРОЦЕССАХ СОРБЦИИ И ДЕСОРБЦИИ В ГРАНУЛИРОВАННЫХ СОРБЕНТАХ В АДСОРБЕРЕ ТЕРМОТРАНСФОРМАТОРА

Никитенко Н.И., Снежкин Ю.Ф., Сороковая Н.Н.
Институт технической теплофизики НАН Украины, г. Киев

Представлены математическая модель и численный метод расчета динамики теплопереноса и фазовых превращений в процессах сорбции и десорбции в гранулированных твердых сорбентах в адсорбере термотрансформатора. Приведены результаты численных экспериментов, свидетельствующие об адекватности сформулированной математической модели.

The mathematical model and numerical method of calculation of dynamics of heat and mass transfer and phase transformations in processes of sorption and desorption in the pelletized solid sorbents in an adsorber of thermotransformer are submitted. The results of the numerical experiments testifying to adequacy of formulated mathematical model are resulted.

Ключевые слова: динамика сорбции и десорбции, адсорбент, адсорбат, гранулированный слой, кондуктивный теплоподвод, математическое моделирование, термотрансформатор

Твердые адсорбенты, такие как цеолиты, силикагели, алюмогели и др. находят широкое применение в различных отраслях промышленности. По мере насыщения адсорбционная способность сорбента снижается и возникает необходимость его восстановления. Правильный выбор температурного режима регенерации позволяет сохранять адсорбционные свойства сорбента. Применение слишком высокой температуры может привести к разрушению его структуры, низкой – к неполному удалению адсорбата. Как в первом, так и во втором случае снижается емкость сорбента. Расчет динамики теплопереноса и фазовых превращений в процессе насыщения и восстановления твердых сорбентов позволяет определить скорость отработки адсорбционной емкости сорбента и оптимальный температурный режим десорбции с учетом свойств адсорбата и сорбента.

В [1] построена математическая модель и разработан численный метод расчета динамики десорбции в твердых сорбентах в адсорбере термотрансформатора. В настоящей работе представляется математическая модель и метод расчета динамики процессов теплопереноса при адсорбции и восстановлении гранулированного твердого сорбента в адсорбере с развитой поверхностью теплообмена.

В адсорберах термотрансформаторов насыщение сорбента осуществляется путем подвода парогазовой смеси с высоким содержанием пара к внешней границе слоя, а восстановление отработанных сорбентов проводится путем кондуктивного подвода энергии от внешнего теплоносителя. В процессе насыщения от поверхности теплообмена отводится теплота адсорбции, а в процессе регенерации полезно используется теплота конденсации испарившегося адсорбата. Для интенсификации теплообмена применяется оребрение теплообменной поверхности. Адсорбент засыпается в межреберное пространство адсорбера таким образом, чтобы толщина слоя соответствовала высоте ребра. Средой, контактирующей с внешней границей дисперсного слоя адсорбента в адсорбере, является вакуум. Гранулы адсорбента могут быть в виде шариков, таблеток или кусочков неправильной формы с размером зерна в пределах от 0,1 до 7 мм. Форма и размер гранул выбирается в зависимости от условий работы адсорбционного элемента. Обычно адсорбер заполняется гранулами одного размера. Твердые сорбенты, как правило, являются капиллярно-пористыми материалами, объем которых в процессе увлажнения или осушки остается практически неизменным. Слой влажного гранулированного адсорбента можно рассматривать как гетерогенную пористую систему, включающую в себя скелет адсорбента, жидкий адсорбат и парогазовую смесь.

Математическое моделирование динамики адсорбции и десорбции во влажном сорбенте в адсорбере связано с решением сопряженной задачи теплопроводности для металлической оребренной поверхности теплообмена и теплопереноса в дисперсном пористом слое в вакуумной среде. Если ребра адсорбера имеют одинаковые геометрические характеристики и расположены параллельно оси Oy с одинаковым шагом вдоль оси Ox (рис. 1), при моделировании процессов тепло- и массопереноса в соответствии с условиями симметрии можно ограничиться рассмотрением области, верхней и нижней границами которой выбираются поверхности контакта с внешней средой, а боковыми границами являются плоскости симметрии ребра (слева) и диспергированного слоя в межреберном пространстве (справа).

Процесс теплопроводности в оребренной теплоподводящей поверхности описывается уравнением

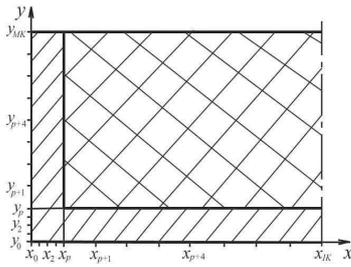


Рис.1– Вид расчетной области в адсорбере

$$c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right), \quad (1)$$

где c_p и λ — объемная теплоемкость и теплопроводность металла.

При построении системы уравнений тепломассопереноса в неподвижном гранулированном слое полагалось, что вся жидкость связана с пористыми гранулами, а парообразная влага перемещается в слое по транспортным порам и капиллярам гранул. Применение достаточно высоких температур для восстановления влажного сорбента, а также интенсивное тепловыделение при увлажнении сухого сорбента порождает конвективное движение связанного вещества, и тепломассоперенос осуществляется путем диффузии и фильтрации.

Система дифференциальных уравнений диффузионно-фильтрационного переноса энергии, массы жидкости, пара и воздуха в процессах сорбции и десорбции в дисперсном слое сорбента в двухмерной постановке представляется в следующем виде

$$c_{эф} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + w_{эф,x} \frac{\partial T}{\partial x} + w_{эф,y} \frac{\partial T}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_{эф} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_{эф} \frac{\partial T}{\partial y} \right) - LI_V, \quad (2)$$

$$\frac{\partial U_{ж}}{\partial t} + \frac{\partial (w_{ж,x} U_{ж})}{\partial x} + \frac{\partial (w_{ж,y} U_{ж})}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{ж} \frac{\partial U_{ж}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{ж} \frac{\partial U_{ж}}{\partial y} \right) - I_V, \quad (3)$$

$$\frac{\partial U_{п}}{\partial t} + \frac{\partial (w_{г,x} U_{п})}{\partial x} + \frac{\partial (w_{г,y} U_{п})}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{п} \frac{\partial U_{п}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{п} \frac{\partial U_{п}}{\partial y} \right) + I_V, \quad (4)$$

$$\frac{\partial U_{в}}{\partial t} + \frac{\partial (w_{г,x} U_{в})}{\partial x} + \frac{\partial (w_{г,y} U_{в})}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{в} \frac{\partial U_{в}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{в} \frac{\partial U_{в}}{\partial y} \right) + I_V. \quad (5)$$

Здесь $U_{ж}$, $U_{п}$, $U_{в}$ — объемные концентрации жидкости, пара и воздуха в гранулированном слое; $c_{эф} = c_T \rho_T (1 - \Pi - \epsilon_{сл}) + c_{ж} U_{ж} + c_{п} U_{п} + c_{в} U_{в}$ — эффективная теплоемкость слоя; Π — пористость гранул; $\epsilon_{сл}$ — порозность слоя; $\lambda_{эф} = \lambda_T U_T / \rho_T + \lambda_{ж} U_{ж} / \rho_{ж} + \lambda_{п} U_{п} / \rho_{п} + \lambda_{в} U_{в} / \rho_{в}$ — эффективная теплопроводность слоя; L — удельная теплота фазового перехода, которая учитывает теплоту испарения (конденсации) свободной и связанной жидкости; $w_{эф,\psi} = [w_{ж,\psi} c_{ж} U_{ж} + w_{г,\psi} (c_{п} U_{п} + c_{в} U_{в})] / c_{эф}$ — эффективная скорость связанного вещества в направлении k , $k = x, y, z$; $w_{ж,k}$, $w_{г,k}$ — векторы скорости фильтрационного движения жидкой и газовой фаз согласно закону Дарси пропорциональны соответствующим градиентам давления $\nabla P_{ж}$ и $\nabla P_{г}$: $w_{\chi,k} = -K_0 K_{\chi} / \eta_{\chi} \nabla P_{\chi,k}$, $\chi = ж, г$.

Давление парогазовой смеси $P_{г}$ в порах слоя определяется следующим образом. Находятся объемные доли жидкости $\Psi_{ж} = U_{ж} / \rho_{ж}$, где $\rho_{ж}$ — истинная плотность жидкости, и газа $\Psi_{г} = 1 - \Psi_{ж}$ в дисперсном слое. Парциальные плотности пара и воздуха в слое равны $\rho_{п} = U_{п} / \Psi_{г}$ и $\rho_{в} = U_{в} / \Psi_{г}$, а парциальные давления пара и воздуха рассчитываются с помощью уравнения состояния для парогазовой смеси. Для процессов сорбции и десорбции она может рассматриваться как смесь идеальных газов. При этом $P_{п} = \rho_{п} R T / \mu_{п}$ и $P_{в} = \rho_{в} R T / \mu_{в}$. Общее давление парогазовой смеси $P_{г} = P_{п} + P_{в}$. Давление жидкости $P_{ж}$ представляется в виде суммы $P_{ж} = P_{г} + P_{к}$, где капиллярное давление $P_{к}$ вычисляется [2] как среднее капиллярное давление жидкости в порах тела по формуле

$$P_{к} = 2\sigma(T) \int_{r_{min}}^{r_{max}} \frac{\theta}{r} f(r) dr / \int_{r_{min}}^{r_{max}} \theta f(r) dr = \frac{2\sigma(T)}{r^*}. \quad (6)$$

Здесь $\sigma(T)$ — коэффициент поверхностного натяжения; r_{min} , r_{max} — минимальный и максимальный радиусы капиллярной поры; r^* — характеристический параметр дисперсности размеров пор, $r_{min} < r^* < r_{max}$; $f(r)$ — дифференциальная функция распределения пор по размерам, определяемая из условия

$$\Pi = \int_{r_{min}}^{r_{max}} f(r) dr; \quad \theta(r, t) = 1 - (1 - \delta / r)^2$$

— объемная доля жидкости в капилляре радиуса r в момент времени

t , определяемая выражением, которое получено как отношение площади сечения капилляра, занятого жидкостью, к общей площади сечения; δ — толщина конденсата.

Эффективные коэффициенты диффузии жидкости $D_{ж}$ [3] и пара $D_{п}$ находятся по формулам: $D_{ж} = \gamma_{D_{ж}} [\exp(A_D / R_y T) - 1]^{-1}$ и $D_{п} = D_{в} = \gamma_{D_{п}} T^{3/2} / P_{г}$. Здесь A_D — энергия активации для диффузионного процесса; $\gamma_{D_{ж}}$ и $\gamma_{D_{п}}$ — диффузионные коэффициенты переноса жидкости и пара. Поскольку перенос пара осуществляется как в гранулах, так и в транспортных порах, для которых диффузионные коэффициенты различны, величина $\gamma_{D_{п}}$ определяется выражением $\gamma_{D_{п}} = \gamma_{D_{п}}^0 (1 - \epsilon_{сл}) + \gamma_{D_{п}}^* \epsilon_{сл}$, где $\gamma_{D_{п}}^0$ и $\gamma_{D_{п}}^*$ — диффузионные коэффициенты переноса пара в капиллярах гранул и в транспортных порах.

Интенсивность фазового перехода I_c на границе раздела жидкого адсорбата и разреженной парогазовой смеси в адсорбере определяется по формуле [4]

$$I_c = \frac{\epsilon n \delta^*}{4} \left\{ \varphi_{г} \left[\exp\left(\frac{A}{R_y T|_{v=0}}\right) - 1 \right]^{-1} - \varphi_{с} \left[\exp\left(\frac{A}{R_y T_c}\right) - 1 \right]^{-1} \right\}, \quad (7)$$

где $\varphi_{г}$ — влажность парогазовой смеси, которой согласно изотерме сорбции отвечает объемная концентрация $U_{ж}$ в данной точке пористого тела; T_c и $\varphi_{с}$ — температура и влажность внешней среды; A — энергия активации; ϵ — коэффициент излучения; δ^* — средняя длина диффузионного смещения активированной частицы внутри конденсированного тела, $\delta^* = A / (\xi n)$, $\xi = \text{const}$, n — плотность молекул, претерпевающих фазовый переход, $n = U_{ж} N_A / \mu$, N_A — число Авогадро, μ — молекулярная масса.

Равновесная толщина слоя конденсата δ на поверхности неиспаряющегося тела в газовой среде со степенью насыщения φ может быть найдена по формуле, полученной в работе [4]

$$\delta = \delta^* \bar{\delta} = \delta^* (1 - \sqrt{1 - \varphi}). \quad (8)$$

Здесь $\bar{\delta}$ — относительная толщина слоя жидкости, $\bar{\delta} = \delta / \delta^*$ когда $0 < \delta < \delta^*$ и $\bar{\delta} = 1$ когда $\delta \geq \delta^*$.

В соответствии с (8) можно принять, что при заданных значениях температуры и влажности толщина слоя жидкости на стенках капилляров одинакова и равна δ для капилляров радиуса $r > \delta$, а капилляры радиуса $r \leq \delta$ заполнены жидкостью полностью.

При определении интенсивности фазового перехода в капиллярах гранул рассматривается контрольный объем $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$, включающий в себя одну гранулу. Если количество гранул в единичном объеме тела $n_{гп}$, то средняя величина контрольного объема $\Delta V = 1 / n_{гп}$, а средний объем гранулы $V_{гп} = \Delta V (1 - \epsilon_{сл})$. Если средняя площадь наружной поверхности гранулы равна $S_{гп}$, то средняя полуширина транспортной поры будет $r_{гп} = \Delta V \epsilon_{сл} / S_{гп}$.

Средняя интенсивность фазового перехода на поверхности гранулы определяется по формуле

$$I_{гп} = \zeta S_{гп} I. \quad (9)$$

Коэффициент ζ учитывает уменьшение поверхности фазового перехода вследствие контакта гранул.

Поскольку процессы сорбции-десорбции проходят достаточно медленно, а размеры гранул относительно определяющего размера тела невелики, в пределах контрольного объема отклонение функций T , $U_{т}$, $U_{ж}$, $U_{п}$, $U_{в}$, $P_{п}$, $\rho_{п}$ и φ от их средних значений по этому объему незначительны, т.е. имеет место локальное термодинамическое равновесие. Тогда выражение для удельной интенсивности фазового перехода I на внутренних поверхностях слоя при $T_c = T|_{v=0} = T$ в соответствии с (8) имеет вид

$$I = \gamma \left\{ \left[\exp\left(\frac{A}{R_y T} - 1\right) \right]^{-1} [\varphi_{г} - \varphi] \right\}, \quad \gamma = \frac{1}{4} \frac{U_{ж} N_A}{\mu} \epsilon \delta^*, \quad (10)$$

где $\varphi = P_{п} / P_{н}$ — относительная влажность парогазовой смеси в контрольном объеме.

В соответствии с условием локального термодинамического равновесия и формулой (8) можно положить, что толщина слоя адсорбата на поверхности гранулы равна толщине слоя адсорбата δ на поверхностях капилляров радиуса $r > \delta$ внутри нее. Неравновесное значение δ находится следующим образом. Осредненный вес жидкости, связанной с гранулой в контрольном объеме, равен $G_{гп} = U / n_{гп}$. Объем жидкости в грануле $V_{гп}^{ж} = G_{гп} / \rho_{ж}$ включает объем $V_{гп,1}^{ж}$ полностью заполненных жидкостью капилляров

с радиусами $0 \leq r \leq \delta$, и объема $V_{гр,2}^*$ частично заполненных капилляров радиуса $r > \delta$: $V_{гр,1}^* = \int_{r_{\min}}^{\delta} f(r)dr$ и

$V_{гр,2}^* = \delta(S_{гр} + S'_{гр})$. Здесь функция $f(r) = dV/dr$, где dV — суммарный объем пор радиуса от r до $r+dr$ в единичном объеме адсорбента; $S'_{гр}$ — общая площадь внутренних поверхностей частично заполненных жидкостью капилляров в грануле, определяемая интегралом [1]

$$S'_{гр} = \int_{\delta}^{r_{\max}} dS'_{гр} = \frac{2}{n_{гр}} \int_{\delta}^{r_{\max}} \frac{f(r)}{r} dr, \quad (12)$$

где r_{\min} и r_{\max} — минимальный и максимальный радиусы пор гранулы.

Когда известна зависимость равновесной объемной концентрации жидкости $U'_{ж}$ в пористом материале от φ_T (изотермы сорбции и десорбции), площадь контакта жидкой и газообразной фаз в капиллярах гранулы $S'_{гр}$ также может быть определена с использованием формулы, полученной в [5]:

$$S'_{гр} = \frac{2\sqrt{1-\varphi_T}}{\rho_{ж}\delta^*} \frac{\partial U'_{ж}}{\partial \varphi_T} V_{гр}. \quad (13)$$

Площадь контакта слоя жидкости, покрывающая поверхность гранулы вследствие малости отношения толщины δ к определяющему размеру гранулы полагается равной $S_{гр}$.

Толщина слоя конденсата δ находится на базе закона сохранения массы

$$\frac{G_{гр}}{\rho_{ж}} = V_{гр,1}^* + \delta(S_{гр} + S'_{гр}) = \int_{r_{\min}}^{\delta} F(r)dr + \delta \left(S_{гр} + \frac{2}{n_{гр}} \int_{\delta}^{r_{\max}} \frac{F(r)}{r} dr \right). \quad (14)$$

Интенсивность десорбции в капиллярах гранулы находится по формуле $I'_{гр} = S''_{гр}I$, где $S''_{гр}$ — средняя суммарная площадь поверхности контакта адсорбата с парогазовой смесью во внутренних порах гранулы контрольного объема. Площадь контакта жидкой и газообразной фаз в капиллярах гранулы с радиусами от r до $r+dr$, причем $r \geq \delta$, составит $dS''_{гр} = F(r)2\pi(r-\delta)dr / (\pi r^2 n_{гр})$. Общая площадь контакта фаз находится путем интегрирования

$$S''_{гр} = \int_{\delta}^{r_{\max}} dS''_{гр} = 2 \int_{\delta}^{r_{\max}} \frac{F(r)}{r} dr - 2\delta^* (1 - \sqrt{1-\varphi_T}) \int_{\delta}^{r_{\max}} \frac{F(r)}{r^2} dr. \quad (15)$$

Интенсивность фазового перехода в единичном объеме слоя адсорбента определяется выражением

$$I_V = (\zeta S_{гр} + S''_{гр})n_{гр}I = \gamma_V I, \quad (16)$$

где $\gamma_V = (\zeta S_{гр} + S''_{гр})n_{гр}$ — объемный коэффициент фазового превращения.

На поверхности $y = y_K$ и $x_p \leq x \leq x_K$ контакта адсорбента и внешней среды, задаются граничные условия третьего рода:

$$\lambda_{эф} \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{v=0} = \alpha(T_c - T|_{v=0}) - L I_c \Big|_{v=0}, \quad (17)$$

$$D_{ж} \frac{\partial U_{ж}}{\partial y} \Big|_{v=0} = I_c \Big|_{v=0}, \quad (18)$$

$$-D_{п} \frac{\partial U_{п}}{\partial y} \Big|_{v=0} = \gamma_{п,c} (U_{п} \Big|_{v=0} - \rho_{п,c} \Psi_{п}), \quad (19)$$

где v — нормаль к поверхности. Выражение (19) представляет уравнение сохранения массы пара [2].

На правой границе $x = x_K$ и $0 \leq y \leq y_K$ рассматриваемой области имеют место условия симметрии полей температуры и объемных концентраций жидкости и пара

$$\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{v=0} = 0; \quad \frac{\partial U_{ж}}{\partial x} \Big|_{v=0} = 0; \quad \frac{\partial U_{п}}{\partial x} \Big|_{v=0} = 0 \quad (20)$$

На границе контакта адсорбента с теплообменной поверхностью между ними происходит теплообмен, а перенос массы жидкости и пара отсутствует. Для левой границы $x = x_p$ и $y_p \leq y \leq y_K$ граничные условия имеют вид

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{v=-0} = \lambda_{\text{эф}} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{v=+0}; \quad \frac{\partial U_{\text{ж}}}{\partial x} \Big|_{v=0} = 0; \quad \frac{\partial U_{\text{п}}}{\partial x} \Big|_{v=0} = 0. \quad (21)$$

На границе $y = 0$ и $0 \leq x \leq x_K$ контакта расчетной области с внешней средой условия теплообмена могут быть представлены следующим образом

$$A_0 \lambda \frac{\partial \vartheta(P, t)}{\partial v} + A_1 \vartheta(P, t) + A_2 = 0. \quad (22)$$

Здесь v — нормаль к граничной поверхности в точке P . При $A_0=0$ и $A_1=1$ выражение (22) представляет собой граничное условие первого рода, при $A_0=A_1=0$ — граничное условие второго рода, при $A_0=0$, $A_1=\alpha$ и $A_2=\alpha T_c$ — граничное условие третьего рода. На границе $x = 0$ ($0 \leq y \leq y_K$) имеет место условие симметрии температурного поля, вытекающее из (22) при $A_1=A_2=0$.

Для случая, когда на поверхности нагрева имеет место лучистый теплообмен, эффективный коэффициент теплоотдачи определяется выражением $\alpha_{\text{эф}} = \alpha + \sigma \varepsilon_{\text{ст}} (T_c^2 + T|_{v=0}^2) (T_c + T|_{v=0})$, где σ — постоянная Стефана-Больцмана, $\varepsilon_{\text{ст}}$ — степень черноты излучающей поверхности.

Объемные концентрации адсорбата $U'_{\text{ж}}$, пара $U'_{\text{п}}$ и воздуха $U'_{\text{в}}$ в пористых гранулах находятся через значения объемных концентраций U_{Ψ} ($\Psi = \text{ж, п, в}$) компонентов в слое и порозности слоя:

$$U'_{\text{ж}} = U_{\text{ж}} (1 - \varepsilon_{\text{сл}}), \quad U'_{\text{п}} = \rho_{\text{п}} (\Psi_{\text{г}} + \varepsilon_{\text{сл}}) = U_{\text{п}} + \rho_{\text{п}} \varepsilon_{\text{сл}}, \quad U'_{\text{в}} = \rho_{\text{в}} (\Psi_{\text{г}} + \varepsilon_{\text{сл}}) = U_{\text{в}} + \rho_{\text{в}} \varepsilon_{\text{сл}}. \quad (23)$$

Для решения нелинейной системы уравнений тепломассопереноса (2) – (5) при граничных условиях (17) – (22) разработан численный метод, базирующийся на явной трехслойной пересчетной разностной схеме Никитенко Н.И. [6]. Разностная аппроксимация уравнения (3), с условием принятых допущений, в декартовых координатах x, y на равномерной разностной сетке $x_i = ih$, ($i = 0, 1, \dots, h = \text{const}$), $y_m = mh_y$, ($m = 0, 1, \dots, h_y = \text{const}$), $t_n = nl$ ($n = 0, 1, \dots, l > 0$) имеет вид

$$\frac{\bar{U}_{\text{ж},i,m}^{n+1} - U_{\text{ж},i,m}^n}{l} = - \left[\left((w_{\text{ж}} U_{\text{ж}})_{i+1,m}^n - (w_{\text{ж}} U_{\text{ж}})_{i,m}^n \right) - \left((w_{\text{ж}} U_{\text{ж}})_{i,m}^n - (w_{\text{ж}} U_{\text{ж}})_{i-1,m}^n \right) \right] / (2h^2) - \left[\left((w_{\text{ж}} U_{\text{ж}})_{i,m+1}^n - (w_{\text{ж}} U_{\text{ж}})_{i,m}^n \right) - \left((w_{\text{ж}} U_{\text{ж}})_{i,m}^n - (w_{\text{ж}} U_{\text{ж}})_{i,m-1}^n \right) \right] / (2h_y^2), \quad (24)$$

$$\begin{aligned} (1 + \Omega_{\text{ж}}) \frac{U_{\text{ж},i,m}^{n+1} - U_{\text{ж},i,m}^n}{l} - \Omega_{\text{ж}} \frac{U_{\text{ж},i,m}^n - U_{\text{ж},i,m}^{n-1}}{l} = & - \left[\left((w_{\text{ж}} \bar{U}_{\text{ж}})_{i+1,m}^n - (w_{\text{ж}} \bar{U}_{\text{ж}})_{i,m}^n \right) - \right. \\ & \left. \left((w_{\text{ж}} \bar{U}_{\text{ж}})_{i,m}^n - (w_{\text{ж}} \bar{U}_{\text{ж}})_{i-1,m}^n \right) \right] / (2h^2) - \left[\left((w_{\text{ж}} \bar{U}_{\text{ж}})_{i,m+1}^n - (w_{\text{ж}} \bar{U}_{\text{ж}})_{i,m}^n \right) - \right. \\ & \left. \left((w_{\text{ж}} \bar{U}_{\text{ж}})_{i,m}^n - (w_{\text{ж}} \bar{U}_{\text{ж}})_{i,m-1}^n \right) \right] / (2h_y^2) + \left[(D_{\text{ж},i+1,m} + D_{\text{ж},i,m}) (\bar{U}_{\text{ж},i+1,m}^n - \bar{U}_{\text{ж},i,m}^n) - \right. \\ & \left. - (D_{\text{ж},i,m} + D_{\text{ж},i-1,m}) (\bar{U}_{\text{ж},i,m}^n - \bar{U}_{\text{ж},i-1,m}^n) \right] / (2h^2) + \left[(D_{\text{ж},i,m+1} + D_{\text{ж},i,m}) (\bar{U}_{\text{ж},i,m+1}^n - \bar{U}_{\text{ж},i,m}^n) - \right. \\ & \left. \left(D_{\text{ж},i,m} + D_{\text{ж},i,m-1} \right) (\bar{U}_{\text{ж},i,m}^n - \bar{U}_{\text{ж},i,m-1}^n) \right] / (2h_y^2) - I_V. \end{aligned} \quad (25)$$

Аналогичным образом аппроксимируются уравнения (2), (4) и (5). Весовой параметр $\Omega_{\text{ж}} \geq 0$ устраняет ограничения на шаг по времени. Его значения выбирается после построения разностной сетки исходя из условия устойчивости $l_{\text{ж}} \leq \left\{ (w_{\text{ж}x} / h + w_{\text{ж}y} / h_y)^{-1}; (1 + 2\Omega_{\text{ж}}) / [2D_{\text{ж}} (1/h^2 + 1/h_y^2)] \right\}$. Расчетный шаг по времени l для разностной схемы, аппроксимирующей систему (2) – (5), определяется из условия $l \leq \min(l_{\text{Tp}}; l_{\text{T}}; l_{\text{ж}}; l_{\text{п}})$, где $l_{\text{Tp}}; l_{\text{T}}; l_{\text{ж}}; l_{\text{п}}$ — допустимые шаги по времени для разностных аппроксимаций уравнений соответственно (2), (3), (4) и (5).

На базе представленной математической модели проводился расчет адсорбции и десорбции воды из слоя гранулированного силикагеля в адсорбере термотрансформатора. Расчеты проводились при следующих исходных данных: $T_0 = 293 \text{ K}$; $\lambda_{\text{т}} = 0,74 \text{ Вт/(м·K)}$; $c_{\text{т}} = 920 \text{ Дж/(кг·K)}$; $\rho_{\text{т}} = 1250 \text{ кг/м}^3$; $\varphi_{\text{с}} = 0,8$; $A = A_D = 0,4205 \cdot 10^8 \text{ Дж/кмоль}$; $\Pi = 0,46$; $\varepsilon = 0,34$. Температура и давление среды в адсорбере в процессе сорбции $T_{\text{с}} = 393 \text{ K}$; $P_{\text{с}} = 2,33 \text{ кПа}$, а в процессе десорбции $T_{\text{с}} = 318 \text{ K}$; $P_{\text{с}} = 8 \text{ кПа}$. При регенерации адсорбента

поверхность $y = y_0$ адсорбера снаружи омывается водой с температурой $T = 573$ К. Коэффициент теплоотдачи рассчитывался по формуле [7] $Nu = 0,0296 Re^{0,8} Pr^{0,43} (Pr/Pr_{ст})^{0,25}$.

На рис.2 представлены кривые изменения во времени среднего влагосодержания слоя силикагеля в процессе адсорбции, полученные расчетным (сплошная линия) и экспериментальным [8] (пунктир) путем. Как видно из рисунка, между ними имеет место хорошее соответствие. На рис. 3, 4 приводятся результаты расчета кинетики десорбции воды из гранулированного силикагеля, для различных значений межреберного расстояния и различных материалов теплообменной поверхности адсорбера. Наличие ребер заметно влияет на продолжительность десорбции на втором этапе, когда температура вершин ребер практически достигает температуры десорбции, и прогрев пористого слоя ускоряется. Увеличение поверхности контакта сорбента с поверхностью нагрева за счет уменьшения расстояния между ребрами ускоряет десорбцию влаги. Использование алюминия, теплопроводность которого в три раза выше, чем стали, для изготовления поверхности теплообмена позволяет сократить время регенерации более чем на треть.

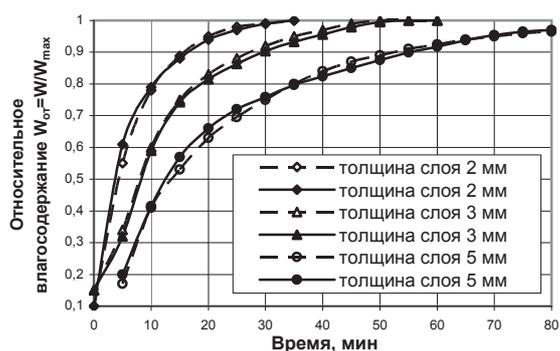


Рис. 2 – Кинетика адсорбции воды слоем гранулированного силикагеля в адсорбере

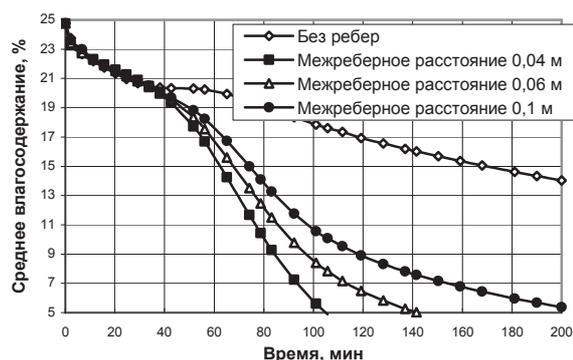


Рис. 3 – Кинетика десорбции воды из слоя гранулированного силикагеля толщиной 0,05 м

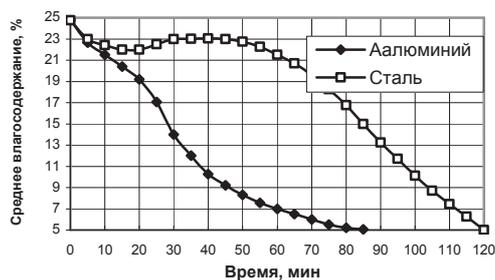


Рис. 4 – Кинетика десорбции воды из слоя гранулированного силикагеля толщиной 0,03 м для различных материалов поверхности теплообмена

Выводы

Представленная двумерная математическая модель и численный метод расчета тепломассопереноса и фазовых превращений при адсорбции и десорбции влаги из гранулированного пористого сорбента в адсорбере термотрансформатора с развитой поверхностью теплообмена могут быть использованы для выбора оптимальных режимов процессов насыщения и регенерации отработанных сорбентов, а также при выборе оптимальных параметров конструкции адсорберов.

Литература

1. Никитенко Н.И., Снежкин Ю.Ф., Сороковая Н.Н. Математическое моделирование динамики регенерации твердых сорбентов в адсорбере с развитой поверхностью теплоподвода. Наукові праці ОНАХТ (Одеської національної академії харчових технологій). – 2008. – Вип. 32. – С. 170 – 175.
2. Никитенко Н.И., Снежкин Ю.Ф., Сороковая Н.Н. Динамика процессов тепломассопереноса, фазовых превращений и усадки при обезвоживании коллоидных капиллярно-пористых материалов // Пром. теплотехника. – 2003. – Т. 25. – № 3. – С. 56–66.
3. Никитенко Н.И. Проблемы радиационной теории тепло- и массопереноса в твердых и жидких средах // ИФЖ. – 2000. – Т. 73, – № 4. – С. 851–860.
4. Никитенко Н. И. Исследование динамики испарения конденсированных тел на основе закона интенсивности спектрального излучения частиц// ИФЖ. – 2002. – Т. 75. – № 3. – С. 128–134.
5. Никитенко Н.И., Снежкин Ю.Ф., Сороковая Н.Н. Развитие теории и моделирование динамики адсорбции в тепловых аппаратах. Наукові праці ОНАХТ (Одеської національної академії харчових технологій). – 2009. – Вип. 35. – С. 9 – 15.
6. Никитенко Н.И. Теория тепломассопереноса. – Киев: Наук. Думка. – 1983. – 352 с.
7. Исаченко В.П., Осипова В.А., Сукомел А.С. Теплопередача. – М.: Энергоиздат. – 1981. – 416 с.

8. Кельцев Н.В. Основы адсорбционной техники. 2-е издание. – М.: Химия. – 1984. –590 с.

УДК 502.174.1:66.011

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ УТВОРЕННЯ ТВЕРДИХ ОРГАНО-МІНЕРАЛЬНИХ КОМПОЗИТІВ

Корнієнко Я.М. – д-р. техн. наук, професор,
Сачок Р.В., аспірант
Національний технічний університет України "КПІ"

Розроблено математичну модель безперервного процесу пошарового гранулоутворення твердих багатошарових гуміново-мінеральних композитів в апараті псевдозрідженого шару утилізації рідких промислових відходів з отриманням комплексних гранульованих добрив для екологічно безпечного землеробства і визначені умови стабілізації дисперсного складу за допомогою узагальненої функції втрат якості продукту.

The mathematical model of continuous granulation process of solid multi-layer humic-mineral composites in the fluidized bed unit intended for liquid industrial wastes utilization with obtaining of complex granular fertilizers for environmentally safe agriculture was developed and the stabilization terms of the dispersion composition were defined by the generalized function of losses of quality of product.

Ключові слова: псевдозріджений шар, дисперсний склад, гуміново-мінеральні багатошарові композити, функція потужності джерела нових центрів грануляції, еквівалентний діаметр, функція втрат якості

Загострення екологічних проблем в умовах постіндустріального суспільства вимагає впровадження нових принципів користування природними ресурсами, в першу чергу серед яких — припинення виснаження родючих ґрунтів, які складають більше 70 % національного багатства України.

Тому розробка технології одержання нового покоління гуміново-мінеральних гранульованих добрив із змінним співвідношенням поживних і стимулюючих речовин, які визначаються агроекологічними та ґрунтово-кліматичними умовами регіону їх застосування, є актуальною.

Авторами [1] запропонований спосіб одержання твердих багатошарових гуміново-мінеральних композитів із застосуванням техніки псевдозрідження, як ресурсо- та енергоощадної технології. Цей метод дозволяє отримати гуміново-мінеральні добрива з змінним співвідношенням гумінових, мінеральних, поживних та стимулюючих речовин, що розподіляються на нанорівні завдяки технології внесення робочого розчину різних складів.

Експериментальними дослідженнями [2,3] встановлено, що вміст гумінових речовин не повинен перевищувати $1 \div 2$ % по відношенню до сухих речовин, тоді як кількість мінеральних N:P:K компонентів змінюється в межах $10 \div 20$ %.

Багаторічними агродослідженнями встановлено високу ефективність гуміново-мінеральних добрив на кислих ґрунтах, при наявності у їх складі домішок кальцію в межах $5 \div 8$ %. [3] Тому основними вимогами до гуміново-мінеральних твердих композитів є рівномірність розподілення компонентів та мікродомішок по всьому об'єму гранули на рівні 100 – 1000 нм.

Фізична модель

Рідка фаза диспергується в двофазну систему: зернистий матеріал – газовий теплоносій, рис.1, і за рахунок дії адгезійно-сорбційних сил утримується на поверхні твердих частинок у вигляді надтонкої плівки, до якої від нагрітих твердих частинок і газового теплоносія підводиться теплота. Це призводить до інтенсивного випаровування розчинника в результаті чого на поверхні твердих частинок утворюється тонкий шар з мікрокристалів мінеральних речовин та осаджених між ними колоїдних часток гумінових сполук з розмірами $10^{-6} - 10^{-7}$ м.

Такий механізм утворення багатошарових твердих композитів забезпечує рівномірність розподілення колоїдних частинок гумінових речовин на рівні 0,8 – 1,5 %(мас) та міцність більше 7Н/гранулу. Одержаний готовий продукт – 90% за масою сфероподібних частинок з розмірами 1,5 – 4,5 мм.

Враховуючи стохастичний характер процесу, в реальних умовах два типи утворення гранул: пошаровий та агломераційний. Для першого типу можливо прогнозування зміни розмірів частинок, а для другого випадку це зробити неможливо. Основним завданням є стабілізація кінетики безперервного процесу