

<http://dx.doi.org/10.15589/jnn20140507>  
УДК 532.5  
Л 42

# MATHEMATICAL SIMULATION OF FLOW PROCESS OF ABSORBENT SPHERICAL PARTICLE BY MEANS OF GAS STREAM

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОБТЕКАНИЯ СФЕРИЧЕСКОЙ ЧАСТИЦЫ АБСОРБЕНТА ПОТОКОМ ГАЗА

Lev I. Leibovych

[lli@mksat.net](mailto:lli@mksat.net)

ORCID: 0000-0003-0436-6950

Pavlo A. Patsurkovskiy

[pavlo.patsurkovskiy@nuos.edu.ua](mailto:pavlo.patsurkovskiy@nuos.edu.ua)

ORCID: 0000-0003-0436-6950

Л. И. Лейбович,

канд. техн. наук, доц.;

П. А. Пацурковский,

асп.

Admiral Makarov National University of Shipbuilding, Mykolayiv

Национальный университет кораблестроения имени адмирала Макарова, г. Николаев

**Abstract.** The mass transfer calculation models in the gas-liquid systems are given. It is shown that the diffusion coefficient exponent is a major parameter which influences the mass transfer coefficient. The mathematical simulation of the absorbent spherical particle flow by means of the gas stream in the FlowVision software package is performed. The range of variation of the average integral fluid velocity at the surface of the absorbent spherical droplet is determined. It was proved that the hydrogen sulfide absorption by the chemical sorbents occurs in the instantaneous reaction mode. The concentration profiles for the reactants located in the interphase boundary at the instantaneous chemical reaction are given. The dependence of the displacement velocity of the instantaneous reaction plane inside the droplet on the contact time of the absorbate and absorbent is received. It is proved, that the displacement velocity of the instantaneous reaction plane inside the droplet exceeds 300 m/s for the investigated mass-transfer apparatus. The maximum droplet surface area which is updated during its existence is determined. The recommendation on the selection of mass transfer calculation model is given.

**Keywords:** mass transfer; absorption; surface of phases contact.

**Аннотация.** Выполнено математическое моделирование процесса обтекания сферической частицы потоком газа, определен диапазон изменения среднеинтегрального значения скорости движения жидкости на поверхности сферической капли.

**Ключевые слова:** массообмен; абсорбция; поверхность контакта фаз.

**Анотація.** Виконано математичне моделювання процесу обтікання сферичної частинки потоком газу, визначено діапазон зміни середньоінтегрального значення швидкості руху рідини на поверхні сферичної капли.

**Ключові слова:** масообмін; абсорбція; поверхня контакту фаз.

## REFERENCES

- [1] Astaryta Dzh. *Massoperedacha s khymicheskoy reaktsiyey* [Mass transfer with chemical reaction]. Leningrad, Khymyya Publ., 1971. 224 p.
- [2] Brounshteyn B.Y., Fyshbeyn, G.A. *Gidrodinamika, masso- i teploobmen v dispersnykh sistemakh* [Hydrodynamics, heat and mass transfer in disperse systems]. Leningrad, Khymyya Publ., 1977, 280 p.
- [3] Leybovych L.Y., Patsurkovskiy P.A. K voprosu opredeleniya modeli rascheta processov massoobmena v oborudovanii ochistki vozdukha [To the question of definition of mass transfer processes calculation model in air purifying equipment]. *Sudnova energhetika: stan ta problemy: Materialy VI Mizhnarodnoi naukovo-tekhnichnoi konferentsii studentiv, aspirantiv, naukovtsiv ta fakhivtsiv* [Ship power engineering: status and problems: Materials of the VI international scientific conference of students, academics and professionals]. Mykolayiv, 2013, pp. 252–254.
- [4] Manoylo E.V. Zakonomernosti protsessa massoobmena v tsentrobezhnom apparate [Regularities of mass transfer process in the centrifugal apparatus]. *Vostochno-Yevropeyskiy zhurnal peredovykh tekhnologiy – East European Journal of advanced technologies*, 2011, vol. 1, no. 9, pp. 8–12.

- [5] Rivkind V.Ya. Ob odnoy modelnoy statsionarnoy zadache dvizheniya dvukh sred s khimicheskoy reaktsiey [On one model stationary motion problem of two environments with chemical reaction]. *Zapiski nauchnykh seminarov LOMY – Notes of scientific LOMI seminars*, 1973, no. 35, pp. 106–113.
- [6] Rivkind V.Ya. Statsionarnoe dvizhenie slabo deformiruemoi kapli v potoke vyazkoy zhidkosti [The stationary motion of weakly deformable droplet in a viscous liquid flow]. *Zapiski nauchnykh seminarov LOMY – Notes of scientific LOMI seminars*, 1977, no. 69, pp. 157–170.
- [7] Rivkind V.Ya. Statsionarnoe dvizhenie vyazkoi kapli s uchetom ee deformatsii [The stationary motion of the viscous droplet taking into account its deformation]. *Zapiski nauchnykh seminarov LOMY – Notes of scientific LOMI seminars*, 1979, no. 84, pp. 220–242.
- [8] Rivkind V.Ya. Teoreticheskoe obosnovanie metoda posledovatelnykh priblizheniy dlya statsionarnykh zadach mekhaniki vyazkoi zhidkosti so svobodnymi granitsami razdela [The theoretical justification of method of consequent approximations for stationary problems of viscous fluid mechanics with free interfacial boundaries]. *Zapiski nauchnykh seminarov LOMY – Notes of scientific LOMI seminars*, 1982, no. 115, pp. 228–235.
- [9] Shervud T.K., Pigford R.L., Uilki Ch.R. *Massoperedacha* [Mass transfer]. Moscow, Chemistry, 1982. 696 p.
- [10] Clift R. *Bubbles, drops, and particles*. New York, Academic press Publ., 1978. 394 p.

## ПОСТАНОВКА ПРОБЛЕМЫ

Интенсивность массообмена в абсорбционных процессах зависит от величины поверхности контакта фаз. Наиболее эффективным является массообменное оборудование, основанное на использовании вихревого движения газожидкостного потока [4], при условии максимально возможного развития межфазной поверхности. Максимально развить поверхность контакта фаз возможно при высокой степени диспергирования жидкой фазы, когда среднемедианный размер капель меньше  $1 \cdot 10^{-4}$  м. Математическое описание процессов, протекающих в массообменных аппаратах, основано на анализе гидродинамики движения газожидкостного потока. Наиболее сложной задачей является описание движения жидкости внутри капель, движущихся со скольжением в потоке газа. Именно гидродинамика движения жидкости внутри капли и определяет выбор модели расчетов процессов массообмена в газожидкостных системах.

В настоящий момент существует несколько моделей расчета процессов массообмена в газожидкостных системах [3]. К ним относятся пленочная модель Льюиса и Уитмена, модель проникания Хигби, модели Кишиневского, Данкверста, Левича, Кафарова и др. Основное отличие этих моделей состоит в определении коэффициента массоотдачи как функции коэффициента диффузии абсорбируемого вещества в жидкой фазе

$$\beta \sim D^n,$$

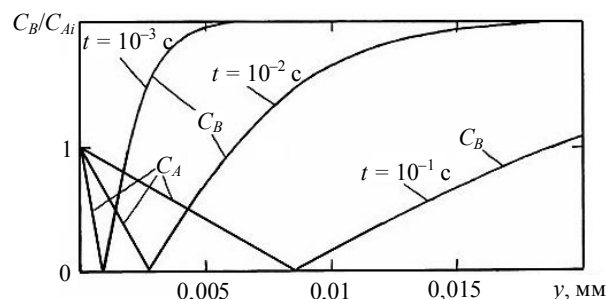
где  $\beta$  – коэффициент массоотдачи;  $D$  – коэффициент диффузии;  $n$  – показатель степени.

Значение показателя степени  $n$  в перечисленных выше моделях лежит в интервале от 0,5 до 1. Таким образом, значение коэффициента массоотдачи в зависимости от выбора той или иной модели может изменяться в довольно широком диапазоне. В связи с этим возникает вопрос выбора адекватной модели расчета процесса массообмена.

## АНАЛИЗ ПОСЛЕДНИХ ИССЛЕДОВАНИЙ И ПУБЛИКАЦИЙ

Диффузия и химическая реакция часто происходят в одном и том же месте. И эти два кинетических явления оказывают столь сильное влияние друг на друга, что их приходится анализировать одновременно, учитывая все аспекты указанных явлений в одних и тех же дифференциальных кинетических уравнениях [1, 9]. Но анализ указанной системы усложняется еще больше, если диффузионные процессы сопровождаются гидродинамическими процессами в жидкой фазе [5].

На основании [1] установлено, что абсорбция сероводорода химическими сорбентами происходит в режиме мгновенной реакции. В работе [9] для мгновенной химической реакции определены профили концентраций для реагентов, находящихся у границы раздела фаз (рис. 1).



**Рис. 1.** Профили концентраций для реагентов, находящихся у границы раздела фаз при мгновенной химической реакции

Из рис. 1 видно, что из-за высокой скорости абсорбции компонента  $A$ , которым в данном случае является сероводород, плоскость реакции довольно быстро смещается внутрь жидкого сорбента  $B$ . Также в [9] приводится уравнение смещения плоскости мгновенной химической реакции от поверхности

раздела фаз в зависимости от времени реакции, имеющее вид

$$y = 2\sqrt{\alpha \cdot t}, \quad (1)$$

где  $y$  – расстояние от поверхности раздела фаз до плоскости реакции;  $\alpha$  – постоянная;  $t$  – время реакции.

Уравнение (1) получено для мгновенной химической реакции, протекающей в неподвижной жидкой фазе. Классическая теория Адамара–Рыбчинского, связанная с движением капли жидкости в газовом потоке при числах Рейнольдса  $Re < 1$  [2], показывает наличие движения жидкости внутри капли. В рамках этой теории было выявлено наличие вихревого движения жидкости внутри сферической капли, обтекаемой потоком газа. В современных абсорбционных

аппаратах число  $Re$  изменяется в диапазоне от 0 до 100. Для данного интервала чисел  $Re$  также характерно наличие вихревого движения внутри капли и на ее поверхности, что способствует обновлению абсорбента на поверхности капли, а следовательно, и увеличению площади поверхности контакта между абсорбатом и абсорбентом.

Более детальное изучение характера движения жидкости внутри капли, омываемой потоком газа, было выполнено в работах [6–8, 10]. Некоторые расчетные данные [6] по движению сред, как вне, так и внутри капли при ее небольшой деформации (соотношение размеров большой и малой полуосей составляет не более 1,03) приведены на рис. 2.

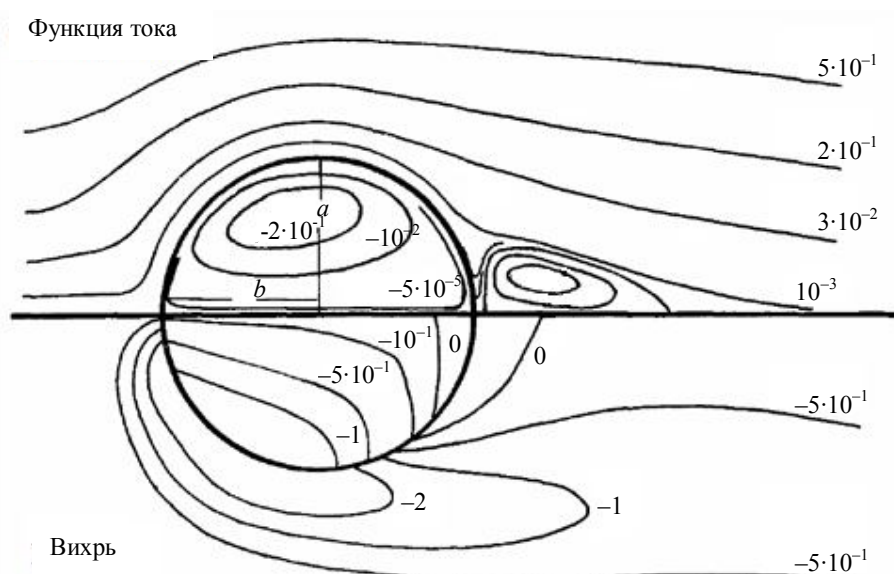


Рис. 2. Результаты моделирования обтекания сфероидальной капли при  $Re = 50$

Данные исследований Ривкинда [6–8] имеют существенное отличие от классической теории Адамара–Рыбчинского [2], которое заключается в том, что вихрь движения жидкости внутри капли смещен в сторону ее лобовой части. При этом не соблюдается постоянство скорости движения жидкости у поверхности раздела фаз, что может существенно влиять на равномерность процесса абсорбции по поверхности капли.

Отсутствие данных по размерам исследуемых капель в работах [6–8] усложняет расчет величины скорости движения жидкости внутри капель.

**ЦЕЛЬ РАБОТЫ** – оценить влияние обновления жидкости на поверхности капли абсорбента на площадь поверхности контакта фаз.

## ИЗЛОЖЕНИЕ ОСНОВНОГО МАТЕРИАЛА

Согласно предположению авторов, циркуляция жидкости в капле, а точнее, на ее поверхности, может оказывать весомое влияние на поверхность контакта фаз, которая определяет эффективность и скорость процесса очистки.

Из-за отсутствия в литературе интересующих авторов данных было выполнено моделирование процесса движения капли несжимаемой жидкости в потоке газа. Для математического анализа характера движения использовались критерий Рейнольдса, критерий Вебера и симплекс  $\mu^*$ , которые определяются по формулам

$$Re = \frac{v \cdot \rho_1 \cdot d}{\mu_1}; \quad We = \frac{\rho_1 \cdot v^2 \cdot d}{\sigma}; \quad \mu^* = \frac{\mu_2}{\mu_1},$$

где  $d$  – диаметр частицы;  $v$  – скорость скольжения, равная разности скоростей диспергированной и сплошной сред;  $\rho_1, \mu_1$  – плотность и динамическая вязкость сплошной среды, обтекающей частицы жидкости;  $\mu_2$  – динамическая вязкость диспергированной среды (жидкости);  $\sigma$  – поверхностное натяжение.

Оценка степени деформации капли осуществлялась с помощью параметра  $f$ , который определяется по формуле [10]

$$f = 1 + 0,081 \cdot We^{0,95}.$$

Максимальное значение числа Вебера в исследуемом массообменном аппарате  $We = 0,37$ , что соответствует  $f = 1,03$ , т. е. для максимального значения числа Вебера в исследуемом процессе массообмена величина деформации капли весьма незначительна. Исходя из этого при моделировании принималось, что капля имеет сферическую форму и не претерпевает деформаций за все время существования.

Часто в литературе приводятся данные для значений симплекса  $\mu^*$ , равных 0, 1, 3, 10 и  $\infty$ . Причем нулевое значение  $\mu^*$  относится к газовому пузырю в потоке жидкости, значения  $0 < \mu^* \leq 10$  – к каплям жидкости в потоке газа и  $\mu^* = \infty$  – к твердым частицам. В исследуемой авторами задаче  $\mu^* \approx 880$ . Для упрощения поставленной задачи, можно предположить, что  $\mu^* \rightarrow \infty$ , т. е. капля жидкости движется как твердая частица. Данное предположение позволяет проводить моделирование процесса обтекания капли жидкостью потоком газа в два этапа. На первом решается внешняя задача, т. е. моделируется обтекание твердой сферической частицы. Это позволяет получить распределение скорости потока газа в пограничном слое и на поверхности частицы. На втором этапе решается внутренняя задача: на поверхности сферической капли жидкости задается распределение скорости потока газа, полученное на первом этапе.

Капли в массообменном аппарате движутся со скольжением, т. е. их скорость превышает скорость потока газа. По мере движения капли тормозятся потоком газа. Численное моделирование проводилось для начального максимального значения скорости скольжения до 14 м/с.

Его целью было: оценка значения среднеинтегральной скорости движения жидкости по поверхности капли; определение влияния движения жидкости внутри капли, омываемой потоком газа, на перемещение фронта химической реакции внутрь капли.

Ответы на данные вопросы позволят обосновать выбор модели расчета процессов массообмена в газожидкостной системе при абсорбции сероводорода, сопровождаемой мгновенной химической реакцией в жидкой фазе.

Моделирование осуществлялось в программном комплексе FlowVision.

При решении поставленной задачи принимались следующие допущения:

- капля имеет сферическую форму;
- в процессе движения капля не деформируется и не вращается.
- так как изменение плотности воздуха, движущегося в массообменном аппарате, невелико, то принимается, что воздух – ламинарная жидкость.

Модель ламинарной жидкости используется для моделирования течений газа при малых, а также умеренных числах Рейнольдса и при небольших изменениях плотности (приближение Буссинеска), что свойственно для внешней задачи.

Постановка задачи во многом совпадает с [6]. Капля вязкой несжимаемой жидкости с кинематической вязкостью  $\nu_1$  и плотностью  $\rho_1$  движется в потоке несжимаемой жидкости вязкостью  $\nu_2$  и плотностью  $\rho_2$ . Система координат выбирается таким образом, что начало их совпадает с центром тяжести капли. Перейдем к безразмерным переменным по формулам:

$$x = \frac{x'}{a}; \quad v = \frac{v' \cdot a}{\nu_1}; \quad p = \frac{p' \cdot a^2}{\rho_1 \cdot \nu_1^2};$$

где  $x'$ ,  $v'$ ,  $p'$  – размерные величины координаты, скорости и давления соответственно.

Тогда уравнение движения жидкости внутри капли примет вид

$$(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} - \Delta \vec{v} + \nabla \left( p_1 + \frac{g a^3 x_1}{\nu_1^2} \right) = 0,$$

а уравнение движения жидкости вне капли –

$$\rho^* (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} - \mu \Delta \vec{v} + \rho^* \nabla \left( p_2 + \frac{g a^3 x_1}{\nu_1^2} \right) = 0; \quad \rho^* = \frac{\rho_2}{\rho_1};$$

$$\mu^* = \rho^* \frac{\nu_2}{\nu_1}.$$

Уравнение неразрывности имеет вид

$$\text{div } v = 0.$$

На границе капли  $\Gamma$  выполняются условия непротекания, непрерывности касательных скоростей и касательных напряжений:

$$\vec{v} \cdot \vec{n}|_{\Gamma} = 0; \quad (\vec{v} \cdot \vec{\tau})|_{\Gamma} = 0; \quad (\vec{\tau} \cdot \sigma \cdot \vec{n})|_{\Gamma} = 0. \quad (2)$$

В (2)  $\vec{\tau}$ ,  $\vec{n}$  – единичные векторы касательной и нормали к поверхности  $\Gamma$ , причем вектор  $\vec{n}$  направлен внутрь капли.

На входе задается значение скорости скольжения. Для заданной скорости рассчитывается распределение скоростей вблизи поверхности сферической частицы. Например, на рис. 3, а показано распределение скоростей вблизи поверхности сферической частицы при скорости скольжения на входе 10 м/с.

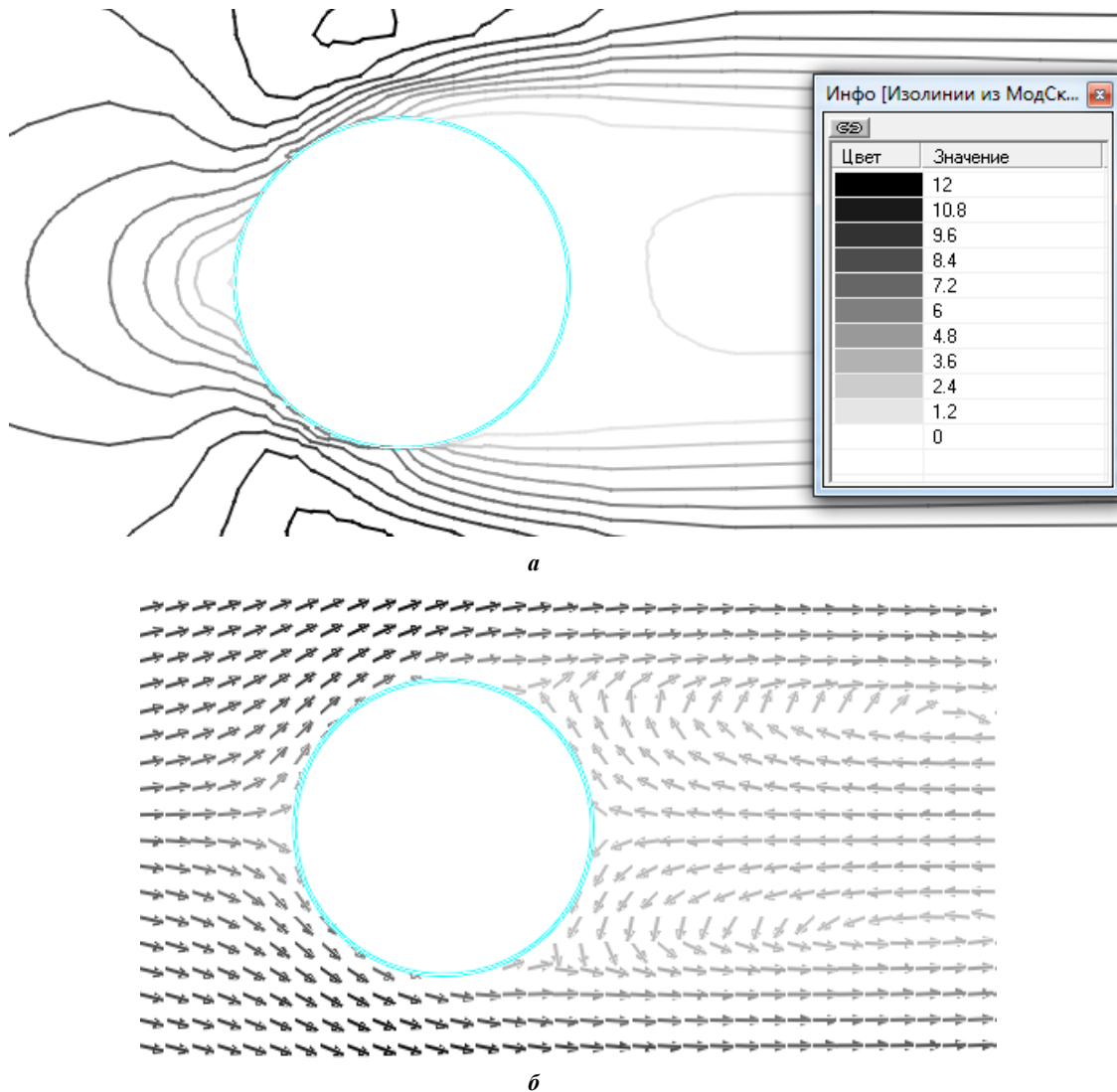
С использованием программ, позволяющих проводить регрессионный анализ (Mathcad, Advanced Grapher), были определены регрессионные уравнения распределения скоростей на поверхности сферической частицы для рассматриваемого диапазона скоростей скольжения от 0 до 14 м/с. Как пример ниже приведено уравнение распределения скоростей жидкости на поверхности капли при скорости скольжения 10 м/с:

$$v = -(1,3975995 \cdot 10^{26}) \cdot x^6 + (5,6635999 \cdot 10^{22}) \cdot x^5 -$$

$$-(8,1873108 \cdot 10^{18}) \cdot x^4 + (5,0557222 \cdot 10^{14}) \cdot x^3 -$$

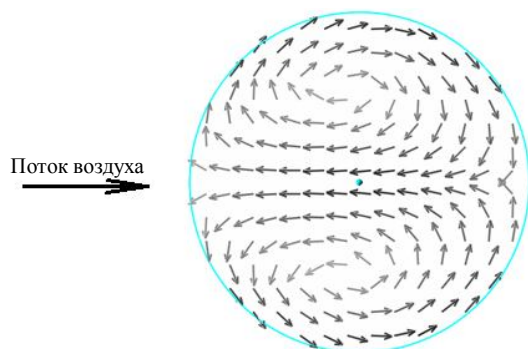
$$-(1,4300431 \cdot 10^{10}) \cdot x^2 + 318993 \cdot x.$$





**Рис. 3.** Результаты моделирования при скорости скольжения 10 м/с: *а* – изолинии скоростей при обтекании сферической частицы; *б* – распределение векторов скоростей

Затем решалась внутренняя задача путем задания полученного распределения скоростей на поверхности частицы жидкости. Как пример полученных результатов для диапазона скоростей скольжения от 0 до 14 м/с на рис. 4 показано распределение векторов скоростей внутри сферической капли при скорости скольжения 10 м/с.



**Рис. 4.** Распределение векторов скоростей при скорости скольжения 10 м/с

Аналогичные расчеты выполнялись для скоростей скольжения от 1 до 14 м/с. По полученным результатам моделирования для каждого значения скорости скольжения рассчитывалось среднеинтегральное значение скорости движения жидкости на поверхности сферической капли. Данное значение лежит в интервале  $(1,4...5,5) \cdot 10^{-4}$  м/с.

Сравнение полученных результатов с данными рис. 2 показало хорошую сходимость в динамике течения, о чем свидетельствуют смещение вихря в лобовую часть сферической частицы и отрыв потока в тыльной части капли с формированием вихрей.

На основе полученных результатов становится целесообразным сравнить скорость обновления поверхности капли со скоростью перемещения плоскости реакции от границы раздела фаз внутрь капли.

Обработка приведенных на рис. 1 данных позволила получить зависимость скорости смещения плоскости мгновенной реакции в глубь капли от времени контакта фаз (рис. 5).

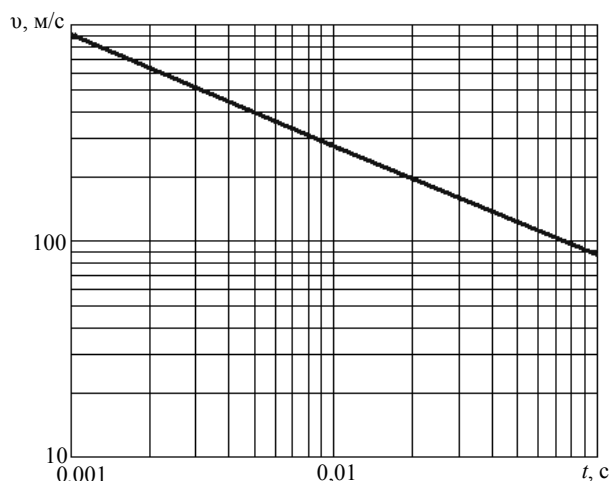


Рис. 5. Зависимость скорости смещения плоскости мгновенной реакции в глубь капли от времени контакта фаз

Из анализа данных рис. 5 с учетом максимального времени существования капли порядка 6...7 мс

(для исследуемого массообменного аппарата) следует, что скорость смещения плоскости мгновенной реакции в глубь капли превышает 300 м/с. Сравнивая данную скорость со скоростью движения жидкости на поверхности капли, можно сделать вывод, что преобладает перенос вещества молекулярной диффузией.

### ВЫВОД

По результатам математического моделирования в программном комплексе FlowVision определено среднеинтегральное значение скорости движения жидкости на поверхности капли абсорбента. Максимальная площадь поверхности капли, которая обновляется за время ее существования, составляет порядка 3 %, что свидетельствует о нецелесообразности учета данной величины при расчете процесса массообмена из-за соизмеримости полученных результатов с погрешностью расчетов. Расчет процесса массообмена рекомендуется проводить согласно модели Хигби.

### СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Астарита, Д. Ж. Массопередача с химической реакцией [Текст] / Д. Ж. Астарита; [пер. с англ.] под ред. Л. А. Серафимова. – Л. : Химия, 1971. – 224 с.
- [2] Броунштейн, Б. И. Гидродинамика, массо- и теплообмен в дисперсных системах [Текст] / Б. И. Броунштейн, Г. А. Фишбейн. – Л. : Химия, 1977. – 280 с.
- [3] Лейбович, Л. И. К вопросу определения модели расчета процессов массообмена в оборудовании очистки воздуха [Текст] / Л. И. Лейбович, П. А. Пацурковский // Суднова енергетика: стан та проблеми : матер. VI Міжнар. наук.-техн. конф. студентів, аспірантів, науковців та фахівців. – Миколаїв : НУК, 2013. – С. 252–254.
- [4] Манойло, Е. В. Закономерности процесса массообмена в центробежном аппарате [Текст] / Е. В. Манойло // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. – 2011. – № 1/9 (49). – С. 8–12.
- [5] Ривкинд, В. Я. Об одной модельной стационарной задаче движения двух сред с химической реакцией [Текст] / В. Я. Ривкинд // Записки научных семинаров ЛОМИ. – 1973. – № 35. – С. 106–113.
- [6] Ривкинд, В. Я. Стационарное движение слабо деформируемой капли в потоке вязкой жидкости [Текст] / В. Я. Ривкинд // Записки научных семинаров ЛОМИ. – 1977. – № 69. – С. 157–170.
- [7] Ривкинд, В. Я. Стационарное движение вязкой капли с учетом ее деформации [Текст] / В. Я. Ривкинд // Записки научных семинаров ЛОМИ. – 1979. – № 84. – С. 220–242.
- [8] Ривкинд, В. Я. Теоретическое обоснование метода последовательных приближений для стационарных задач механики вязкой жидкости со свободными границами раздела [Текст] / В. Я. Ривкинд // Записки научных семинаров ЛОМИ. – 1982. – № 115 – С. 228–235.
- [9] Шервуд, Т. К. Массопередача [Текст] / Т. К. Шервуд, Р. Л. Пигфорд, Ч. Р. Уилки; пер. с англ. Н. Н. Кулова. – М. : Химия, 1982. – 696 с.
- [10] Clift, R. Bubbles, drops, and particles [Text] / R. Clift, J. R. Grace, M. E. Weber. – New York : ACADEMIC PRESS, 1978. – 394 p.

© Л. И. Лейбович, П. А. Пацурковский

Надійшла до редколегії 04.07.2014

Статтю рекомендує до друку

канд. техн. наук, проф. Б. В. Димо