

Математическая модель процесса абсорбции в насадочных колоннах

Е. А. Лантева, О. Г. Дударовская

Казанский государственный энергетический университет

Аннотация: В статье рассмотрен процесс абсорбции при противотоке фаз с хаотичными насадками. В нижнюю часть колонны поступает газ на разделение, в верхнюю часть колонны подается жидкость на орошение насадки. В слое насадки происходит пленочное течение жидкой фазы по поверхности контактных элементов, а в каналах сложной геометрии в противотоке движется газовый поток. Причем, пленочное течение, как правило, ламинарное волновое, а движение газовой фазы – турбулентное. Через межфазную поверхность газ-жидкость происходит обмен импульсом, массой и энергией. В качестве насадки могут использоваться регулярные и нерегулярные (хаотичные) элементы различных конструкций и размеров. Первоначальный выбор конструкции насадки выполняется, исходя из предельных нагрузок, которые обеспечивают пленочный режим, а затем уточняются, согласно полученной эффективности процесса, который должен удовлетворять требованиям технического задания на проектирование или модернизацию аппарата. Для того, чтобы учесть межфазный перенос к системам дифференциальных уравнений переноса, применяются граничные условия четвертого рода на поверхности раздела. Однако, такой подход возможен, если распределение площади межфазной поверхности в пространстве фиксировано и известно, например, для пленочных контактах устройств и некоторых регулярных насадок.

Выполнены расчеты процесса увлажнения воздуха водой с применением уравнения массопереноса (все сопротивление в газовой фазе) в колонне с трубчатой насадкой с интенсификаторами. Дано сравнение эффективности массообмена, полученного из численного решения, с экспериментальными данными, а также расчеты по модели идеального вытеснения газа. Установлено, что с учетом турбулентности газового потока расчет эффективности адекватно согласуется с экспериментом, а модель идеального вытеснения немного завышает значения эффективности разделения.

Ключевые слова: абсорбция, математическая модель, колонна, насадка с интенсификаторами.

Введение

При математическом моделировании процессов массообмена применяются аналитические, численные [1,2] и приближенные методы [3,4]. Выбор метода зависит от гидродинамических условий взаимодействия фаз, конструкции аппарата и режима работы. Теоретической основой моделирования являются фундаментальные законы сохранения импульса, массы и энергии совместно с условиями термодинамического равновесия. С учетом пространственно-временных масштабов явлений переноса импульса, массы и энергии и выявлений определяющих механизмов тепломассообмена,

всегда можно выполнить сокращение исходного полного математического описания в виде трехмерной моделей до двух – или одномерных. При этом должна сохраняться физическая картина процессов и требуемая точность моделирования [5-7].

В данной статье рассмотрено стационарное движение пленки жидкости и газа при противотоке в насадочной колонне [8-10]. Через межфазную поверхность газ-жидкость происходит обмен импульсом, массой и энергией. В качестве насадки могут использоваться регулярные и нерегулярные (хаотичные) элементы различных конструкций и размеров. Выбор насадки должен удовлетворять требованиям технического задания на проектирование [8] или модернизацию аппарата [9-11].

При хаотичном расположении насадок, а также регулярных насадок сложной геометрии с интенсификаторами (выступы, просечки, гофры и др.) учет взаимодействия фаз осуществляется межфазными источниками [6,7,11]. На основе данного подхода ниже представлена следующая математическая модель.

Система дифференциальных уравнений тепло- и массообмена в ядре потоков в насадочной колонне:

– в жидкой фазе:

$$u_{\text{ж}}(r) \frac{\partial C_{\text{ж}}}{\partial z} = \frac{D_{\text{ж}}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \frac{\partial C_{\text{ж}}}{\partial r} \right] \pm \frac{dM dF}{dV}, \quad (1)$$

$$u_{\text{ж}}(r) \rho_{\text{ж}} c_{\text{рж}} \frac{\partial T_{\text{ж}}}{\partial z} = \frac{\lambda_{\text{ж}}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \frac{\partial T_{\text{ж}}}{\partial r} \right] \pm \frac{q dF}{dV}, \quad (2)$$

– в газовой фазе:

$$w_{\text{г}}(r) \frac{\partial C_{\text{г}}}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r D_{\text{гг}} \frac{\partial C_{\text{г}}}{\partial r} \right] \mp \frac{dM dF}{dV}, \quad (3)$$

$$w_{\text{г}}(r) \rho_{\text{г}} c_{\text{рг}} \frac{\partial T_{\text{г}}}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \lambda_{\text{гг}} \frac{\partial T_{\text{г}}}{\partial r} \right] \mp \frac{q dF}{dV}, \quad (4)$$

где dF / dV – удельная площадь поверхности контакта газа и жидкости в локальном объеме, $\text{м}^2/\text{м}^3$; $c_{\text{рг}}, c_{\text{рж}}$ – удельные теплоемкости газа и жидкости, $\text{Дж}/(\text{кг К})$; $w_{\text{Г}}(r), u_{\text{Ж}}(r)$ – скорости газа и жидкости, как функции поперечной координаты, $\text{м}/\text{с}$; z, r – вертикальная и радиальная координаты, м ; $C_{\text{Г}}, C_{\text{Ж}}$ – концентрации газовой и жидкой фаз, $\text{кг}/\text{м}^3$; $\text{кг}/\text{кг}$; $D_{\text{ж}}, D_{\text{т}}$ – коэффициенты молекулярной и турбулентной диффузии, $\text{м}^2/\text{с}$; $T_{\text{ж}}$ – температура жидкости, $^{\circ}\text{C}$; ρ – плотность фазы, $\text{кг}/\text{м}^3$; $\lambda_{\text{ж}}$ – удельная теплопроводность жидкости, $\text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$; q – плотность теплового потока, $\text{Дж}/(\text{м}^2\cdot\text{с})$; dM – поток массы, $\text{кг}/(\text{м}^2\cdot\text{с})$.

В правой части уравнений (1) – (4) межфазные источники массы и теплоты, где знак \pm зависит от процесса абсорбции или десорбции.

Граничные условия к системе уравнений (1) – (4).

При $z = 0$ (вход газа и выход жидкости):

$$w_{\text{Г}}(r) = w_{\text{ГН}}(r); C_{\text{Г}} = C_{\text{ГН}}; T_{\text{Г}} = T_{\text{ГН}}; \partial C_{\text{Ж}} / \partial z = 0; \partial T_{\text{Ж}} / \partial z = 0;$$

При $z = H$ (вход жидкости и выхода газа):

$$u_{\text{Ж}}(r) = u_{\text{ЖН}}(r); C_{\text{Ж}} = C_{\text{ЖН}}; \partial C_{\text{Г}} / \partial z = 0; \partial T_{\text{Г}} / \partial z = 0;$$

При $r = R$ (на стенке колонны):

$$\partial C_{\text{Ж}} / \partial r = 0; \partial T_{\text{Ж}} / \partial r = 0; \partial C_{\text{Г}} / \partial r = 0;$$

(стенки колонны теплоизолированные).

Процесс абсорбции может сопровождаться выделением теплоты, связанной с теплотой растворения газа в жидкой фазе. Поэтому система уравнений (1) – (4) включает уравнения теплообмена между фазами (2), (4). Кроме этого, как в процессе абсорбции, так и десорбции, температуры газа и жидкости на входе в насадочный слой часто имеют различные значения, что влияет на массообмен. Поэтому температурный режим необходимо учитывать в расчетах насадочных аппаратов.

Удельный поток массы компонента ($\text{кг}/\text{м}^2\cdot\text{с}$):

$$j = dM = \beta_{\Gamma} \Delta C_{\Gamma} = \beta_{\text{ж}} \Delta C_{\text{ж}}, \quad (5)$$

где ΔC_{Γ} , $\Delta C_{\text{ж}}$ – движущие силы массоотдачи в газовой и жидкой фазах, кг/м³; β – коэффициенты массоотдачи, м/с.

Плотность потока теплоты (Вт/м²):

$$q = \alpha_{\Gamma} \Delta T_{\Gamma} = \alpha_{\text{ж}} \Delta T_{\text{ж}}, \quad (6)$$

где ΔT_{Γ} , $\Delta T_{\text{ж}}$ – движущие силы теплоотдачи в фазах, К; α – коэффициенты теплоотдачи, Вт/м²К.

Плотности потоков массы и теплоты можно записать используя коэффициенты массо- и теплопередачи. Тогда вместо значений C_{Γ} и T_{Γ} на границе раздела фаз применяются равновесные концентрации:

для процесса абсорбции:

$$j = K_{\text{ог}} (C_{\Gamma} - C_{\Gamma}^*) = K_{\text{ож}} (C_{\text{ж}}^* - C_{\text{ж}}), \quad (7)$$

и для процесса десорбции:

$$j = K_{\text{ог}} (C_{\Gamma}^* - C_{\Gamma}) = K_{\text{ож}} (C_{\text{ж}} - C_{\text{ж}}^*), \quad (8)$$

где $K_{\text{ог}}$, $K_{\text{ож}}$ – коэффициенты массопередачи, отнесенные к соответствующим движущим силам массопередачи в концентрациях газовой и жидкостной фаз, соответственно, м/с; C^* – равновесные концентрации, кг/м³.

Плотность потока теплоты:

$$q = K_{\text{т}} (T_{\Gamma} - T_{\text{ж}}), \text{ при } T_{\Gamma} > T_{\text{ж}},$$

(9)

$$q = K_{\text{т}} (T_{\text{ж}} - T_{\Gamma}), \text{ при } T_{\text{ж}} > T_{\Gamma}.$$

(10)

В выражениях (7), (8) коэффициенты массопередачи и в (9), (10) – коэффициент теплоотдачи $K_{\text{т}}$ вычисляются по соответствующим выражениям аддитивности фазовых сопротивлений, где коэффициенты

массоотдачи и теплоотдачи можно вычислить по уравнениям математических моделей [7,11] или для известных исследованных насадок по эмпирическим зависимостям различных авторов.

Коэффициенты турбулентного обмена в газовой фазе принимается, $\nu_{ТГ} \approx D_{ТГ} \approx \lambda_T / \rho_T c_{pT}$, где турбулентная вязкость в ядре потока в хаотичной насадке и регулярной с интенсификаторами вычисляется по выражению [11] $\nu_T = 3,87 \nu_T \sqrt{\xi Re_3}$, где ξ - коэффициент гидравлического сопротивления насадки; Re_3 - число Рейнольдса для насадки.

Профили скорости жидкости $u_{ж}(r)$ и газа $w_T(r)$ являются функциями поперечной координаты в сечениях колонны по высоте (координате z). Профили скорости зависят от условий входа газа и жидкости в нижнем ($z = 0$) и верхнем ($z = H$) сечениях насадочного слоя, а также от внутренних закономерностей двухфазного противоточного течения на элементом насадки. Насадку довольно сложно разместить полностью однородно в объеме колонны. Чаще всего у стенок колонны порозность (свободный объем) насадочного слоя немного больше, чем при $R/d_3 > 10$, т.е. вдали стенок. Профили скорости фаз $u_{ж}(r, z)$ и $w_T(r, z)$ могут быть найдены из численного решения систем уравнений движения жидкой и газовой фаз или экспериментально на пилотной установке насадочной колонны.

Результаты экспериментальных и численных исследований профилей скоростей представлены в работах [11-13], где показано, что неоднородный профиль скорости газа вызывает снижение эффективности процесса тепломассообмена и сепарации дисперсной фазы на 5-30%.

При равномерном распределении газовой и жидкостной фаз по сечению насадочного слоя в системе уравнений (1) – (4) принимается, $u_{ж}(r) = u_{ж\text{ ср}}$, $w_T(r) = w_{T\text{ ср}}$, т.е. средние расходные скорости.

При заданных начальных концентрациях при абсорбции $C_{ГН}$ и десорбции $C_{ЖН}$ из решения системы уравнений (1) и (3) (без отсутствия тепловых эффектов) численно находятся профили $C_{Г}(z, r)$ и $C_{Ж}(z, r)$ и концентрации на выходе из слоя насадки $C_{ГК}$ и $C_{ЖК}$. Это дает возможность вычислить эффективность процесса абсорбции и десорбции:

$$E_{Г} = \frac{C_{ГН} - C_{ГК}}{C_{ГН} - C_{Г}^*}, E_{Ж} = \frac{C_{ЖН} - C_{ЖК}}{C_{ЖН} - C_{Ж}^*}. \quad (11)$$

С применением уравнения массопереноса (3) выполнены расчеты процесса увлажнения воздуха водой (все сопротивление в газовой фазе) в колонне с трубчатой насадкой с интенсификаторами. На рис. 1 дано сравнение эффективности массообмена, полученного из численного решения (1), (3), с экспериментальными данными, а также расчеты по модели идеального вытеснения газа. Установлено, что с учетом турбулентности газового потока расчет эффективности адекватно согласуется с экспериментом, а модель идеального вытеснения немного завышает значение $E_{Г}$ рис 1.

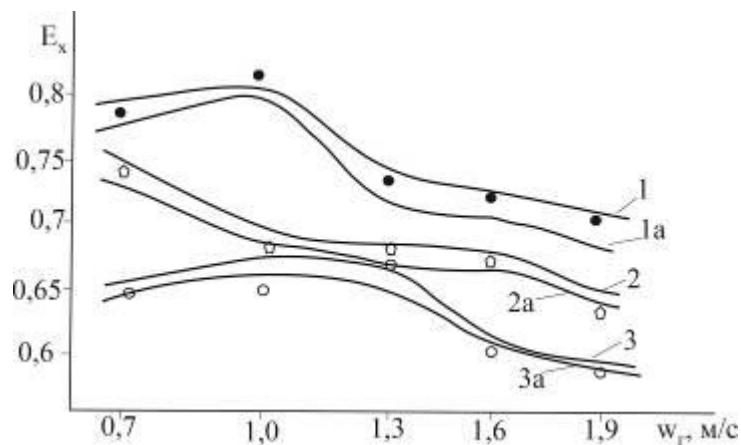


Рис. 1. Зависимость массообменной эффективности от скорости газа при различных плотностях орошения. 1 – $q_{ж}=14,1 \text{ м}^3/\text{м}^2 \text{ ч}$; 2 – $q_{ж}=8,8 \text{ м}^3/\text{м}^2 \text{ ч}$; 3 – $q_{ж}=4,9 \text{ м}^3/\text{м}^2 \text{ ч}$; точки- экспериментальные данные. 1-3 – расчет по модели идеального вытеснения; 1а-3а- из решения (1), (3)

Для сравнительных массообменных характеристик насадок выполнены численные исследования процесса абсорбции аммиака из воздушно-аммиачной смеси водной в колоннах с металлическими кольцами Рашига 25 x 25 мм ($a_v = 220 \text{ м}^2/\text{м}^3$) и насадкой «Инжехим 2012» с номинальным размером 20 мм ($a_v = 220 \text{ м}^2/\text{м}^3$). Поверхность насадки имеет регулярную шероховатость в виде микрорельефа высотой выступов $\square 0,8 \text{ мм}$ и с шагом $\square 3 \text{ мм}$. Это обеспечивает даже при небольших числах Рейнольдса волновое течение пленки и повышение коэффициента массоотдачи в 1,5-2 раза. Процесс массообмена происходит при атмосферном давлении и температуре 20 °С. Моделируется пленочный режим работы насадки при скорости газа $w_T = 1,0 \text{ м/с}$ и плотности орошения $q_{\text{ж}} = 10 \text{ м}^3/(\text{м}^2\text{час})$. На рис. 2 представлен безразмерный профиль концентрации аммиака $C_T / C_{\text{ГН}}$ при $C_{\text{ГН}} = 0,3 \text{ кг/м}^3$ в зависимости от высоты насадочного слоя.

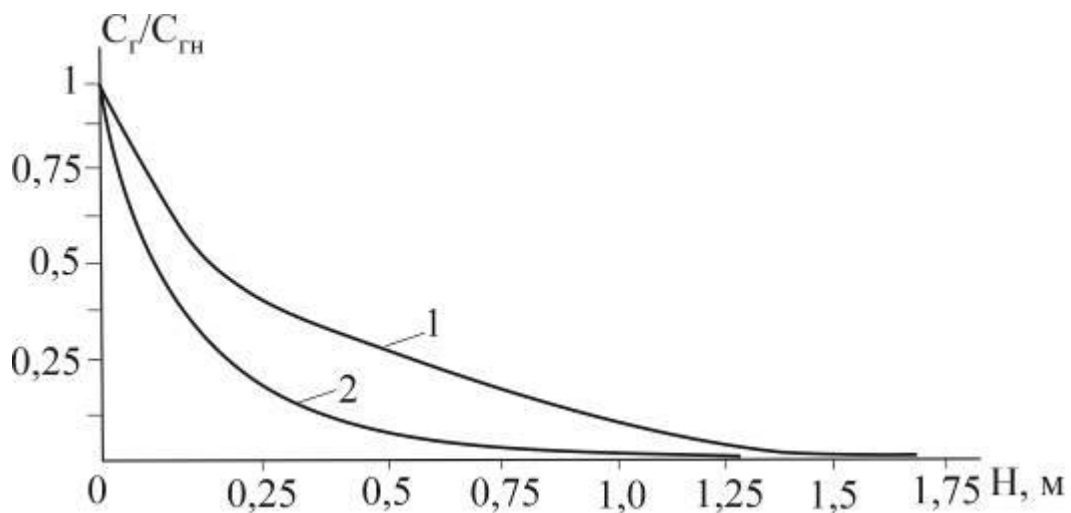


Рис 2. Расчетный безразмерный профиль концентрации аммиака при абсорбции воздушно-аммиачной смеси водой с кольцами Рашига 25 x 25 мм – 1; 2 – с насадкой «Инжехим-2012» 20 x 20 мм. Скорость газа $w_T = 1,0 \text{ м/с}$; плотность орошения $10 \text{ м}^3/(\text{м}^2\text{час})$; начальная концентрация аммиака в газовой смеси $C_{\text{ГН}} = 0,3 \text{ кг/м}^3$, в воде $C_{\text{ЖН}} = 0$.

Из полученных результатов следует более высокая эффективность массопередачи в колонне с насадкой «Инжехим 2012». Например, эффективность массообмена $E_T = 0,985$ в колонне с кольцами Рашига достигается при высоте слоя $H = 1,6$ м, а с насадкой «Инжехим 2012» при $H = 1,25$ м. Расчет с применением модели идеального вытеснения потоков получено $H = 1,38$ м и $H = 0,85$ м, соответственно для колец и «Инжехим 2012». Таким образом, турбулентное перемешивание газа в слое насадки дает некоторое снижение эффективности массообмена при прочих равных условиях. Поэтому из решения системы уравнений (1), (3) следует требуемая высота насадки больше на 15-30 % по сравнению с расчетом по модели идеального вытеснения.

Выводы

На основе применения системы дифференциальных уравнений массопереноса решена научно-технологическая задача определения эффективности процесса абсорбции в колоннах с различными насадками. Показано согласование с экспериментальными данными и сделаны сравнительные характеристики насадок. Математическая модель может применяться при проектировании или модернизации насадочных аппаратов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №18-79-10136 <https://rscf.ru/project/18-79-10136/>

Литература

1. Софиева Ю.Н., Абрамов К.В. Применение пакета моделирующих программ ChemCAD в учебно-тренировочных комплексах для изучения систем автоматизации ректификационных установок // Инженерный вестник Дона, 2012, №1. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n1y2012/651



2. Кряклина И.В. Математическая модель и оптимизация параметров работы пластинчатого рекуператора // Инженерный вестник Дона, 2014, №1. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n1y2014/2269
 3. Guo J., Wu L., Dai X., Xiang Y., Fan D Absorption enhancement and total absorption in a graphene-waveguide hybrid structure // AIP Advances. 2017. V. 7. № 2. Pp. 025101.
 4. Heymes F., Manno Demoustier P., Charbit F., Louis Fanlo J., Moulin P. Hydrodynamics and mass transfer in a packed column: case of toluene absorption with a viscous absorbent // Chemical Engineering Science. 2006. V. 61. № 15. Pp. 5094-5106.
 5. Левич В.Г. Физико-химическая гидродинамика, издание 3-е. М. - Ижевск, изд-во "ИКИ", 2016. - 686 с.
 6. Дьяконов С.Г., Елизаров В.В., Елизаров В.И. Теоретические основы проектирования промышленных аппаратов химической технологии на базе сопряженного физического и математического моделирования – Казань: КГТУ, 2009. – 456 с.
 7. Лаптев, А. Г., Фарахов М. И., Минеев Н. Г. Основы расчета и модернизация теплообменных установок в нефтехимии: – Санкт – Петербург, СТРАТА, 2015. 576 с.
 8. Рамм В. М Адсорбция газов. Изд. 2-е, переработ. и доп. М., "Химия", 1976. 656 с.
 9. Шиляев М.И., Хромова Е.М. Моделирование процесса абсорбции газов в насадочных колоннах и трубчатых абсорберах // Инженерно-физический журнал. 2019. Т. 92. № 3. С. 781-799.
 10. Елизаров В.И., Шавалеев Р.Р., Титова Е.С., Сафаров А.Р. Математическая модель массопереноса в насадочных колоннах // Вестник Технологического университета. 2015. Т. 18. № 22. С. 134-136.
-

11. Лаптев А.Г., Башаров М.М., Лаптева Е.А., Фарахов Т.М. Модели и эффективность процессов межфазного переноса. Часть 2. Тепломассообменные процессы. // Под ред. Лаптева А.Г. – Казань: Центр инновационных технологий, 2020 – 565 стр.

12. Витковская Р.Ф., Пушков А. С., Шинкунас С. Аэродинамика и тепломассообмен насадочных аппаратов. – Санкт - Петербург: Лань, 2019. 288 с.

13. Пушнов А.С., Балтернас П., Каган А., Загорскис А. Аэродинамика воздухоочистных устройств с зернистым слоем. – Вильнюс: Техника, 2010. – 348 с.

References

1. Sofieva YU.N., Abramov K.V. Inzhenernyj vestnik Dona, 2012. №1. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n1y2012/651

2. Kryaklina I.V. Inzhenernyj vestnik Dona, 2014, №1. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n1y2014/2269

3. Guo J., Wu L., Dai X., Xiang Y., Fan D AIP Advances. 2017. V. 7. № 2. Pp. 025101.

4. Heymes F., Manno Demoustier P., Charbit F., Louis Fanlo J., Moulin P. Chemical Engineering Science. 2006. V. 61. № 15. Pp. 5094-5106.

5. Levich V.G. Fiziko-khimicheskaya gidrodinamika [Physical and chemical hydrodynamics]. M. Izhevsk, izd-vo "IKI", 2016. 686 p.

6. D'yakonov S.G., Elizarov V.V., Elizarov V.I. Teoreticheskiye osnovy proyektirovaniya promyshlennykh apparatov khimicheskoy tekhnologii na baze sopryazhennogo fizicheskogo i matematicheskogo modelirovaniya. [Theoretical foundations for the design of industrial devices of chemical technology based on conjugated physical and mathematical modeling]. Kazan': KGTU. 2009. 456 p.

7. Laptev, A. G., Farahov M. I., Mineev N. G. Osnovy rascheta i modernizatsiya teplomassoobmennykh ustanovok v neftekhimii [Fundamentals of

calculation and modernization of heat and mass transfer plants in petrochemistry]: Sankt – Peterburg. STRATA. 2015. 576 p.

8. Ramm V. M Gas adsorption [Adsorbciya gazov]. Izd. 2-e, pererabot. i dop. M., "Himiya". 1976. 656 p.

9. SHilyaev M.I., Hromova E.M. Inzhenerno-fizicheskij zhurnal. 2019. V. 92. № 3. pp. 781-799.

10. Elizarov V.I., SHavaleev R.R., Titova E.S., Safarov A.R. Vestnik Tekhnologicheskogo universiteta. 2015. V. 18. № 22. pp. 134-136.

11. Laptev A.G., Basharov M.M., Lapteva E.A., Farahov T.M Modeli i effektivnost' processov mezhfaznogo perenosa [Models and efficiency of interfacial transfer processes]. CHast' 2. Teplomassoobmennyye processy. Pod red. A.G. Lapteva Kazan': Centr innovacionnyh tekhnologij, 2020. 565 p.

12. Vitkovskaya R.F., Pushkov A. S., SHinkunas S. Aerodinamika i teplomassoobmen nasadochnyh apparatov [Aerodynamics and heat and mass transfer of packing devices]. Sankt - Peterburg: Lan', 2019. 288 p.

13. Pushnov A.S., Balternas P., Kagan A., Zagorskis A. Aerodinamika vozduhoochistnyh ustrojstv s zernistym sloem [Aerodynamics of air cleaning devices with a granular layer]. Vil'nyus: Tekhnika, 2010. 348 p.