

УДК 66.071.7

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АБСОРБЦИИ ГАЗОВОЙ СМЕСИ С УЧЕТОМ ИЗМЕНЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРНОГО РЕЖИМА

© В.П. Дудаков, Е.А. Рубцова

Рассмотрен процесс абсорбции многокомпонентной газовой смеси с учетом изменения температурного режима в абсорбере. Разработан алгоритм и математическая модель процесса абсорбции с учетом температуры. Проведена проверка адекватности модели, показавшая возможность проведения расчетов с ее использованием.

Рассмотрим метод расчета абсорбции газовой смеси, основанный на численном решении уравнений массопередачи с учетом изменения температурного режима в абсорбере.

Разработаем математическую модель абсорбера для поглощения HCl водой при заданной температуре поступающего газа $t = 70^\circ \text{C}$; и температуре поступающей на абсорбцию воды $v = 50^\circ \text{C}$.

Ограничения модели: рассматривается один газ HCl, исходный газ не содержит водяных паров, степень извлечения HCl из газа равна 95%, неизвестно общее число единиц переноса N_0 , но задана конечная концентрация $Y = 0,016$.

Зададимся коэффициентами массопередачи: при поглощении хлористого водорода $0,0438 \text{ кмоль}/(\text{м}^3\text{с})$; при испарении воды $0,05 \text{ кмоль}/(\text{м}^3\text{с})$. Коэффициент теплоотдачи от газа к жидкости $\alpha = 1,3 \text{ кВт}/\text{м}^2\text{К}$.

Скорость процессов передачи массы и тепла определяется уравнениями массопередачи для абсорбции компонента и для испарения поглотителя

$$dW_A = -G_0 dY_A = K_A (y_A - y_A^*) dF, \quad (1)$$

$$dW_B = -G_0 dY_B = K_B (y_B - y_B^*) dF. \quad (2)$$

А также уравнением теплообмена между фазами и теплопередачи от среды в абсорбере к охлаждающему агенту

$$G_0 c dt = \alpha (v - t) dF, \quad (3)$$

$$dQ_0 = k \psi (v - \theta) dF = W_\omega c_\omega d\theta. \quad (4)$$

В этих уравнениях K_A и K_B – коэффициенты массопередачи при абсорбции компонента и испарения поглотителя; α – коэффициент теплоотдачи между жидкостью и газом; k – коэффициент теплопередачи между средой в абсорбере и охлаждающим агентом; ψ – поверхность охлаждения, приходящаяся на единицу поверхности соприкосновения фаз; θ – температура охлаждающего агента; W_ω – расход охлаждающего агента; c_ω – теплоемкость охлаждающего агента.

Знак «минус» соответствует противотоку между газом и охлаждающим агентом, а «плюс» – прямотоку.

В данной модели мы уравнением (4) пренебрежем.

Уравнения (5) выражают связь между y и Y

$$y_A = \frac{Y_A}{1 + Y_A + Y_B}, \quad (5)$$

$$y_B = \frac{Y_B}{1 + Y_A + Y_B}.$$

Решение системы дифференциальных уравнений (1)–(4) может быть выполнено различными способами. В нашем случае мы зададимся температурой выходящей жидкости.

Систему уравнений (1)–(4) представим в виде:

$$\frac{dY_A}{dN} = -(y_A - y_A^*), \quad (6)$$

$$\frac{dY_B}{dN} = -b(y_B - y_B^*), \quad (7)$$

$$\frac{dt}{dN} = p(v - t). \quad (8)$$

Здесь N число единиц переноса по газовой фазе, а коэффициенты b , p и r имеют следующие значения:

$$N = \frac{K_A F}{G_0}, \quad (9)$$

$$b = \frac{K_B}{K_A}, \quad (10)$$

$$p = \frac{\alpha}{c K_A}.$$

Уравнение теплового баланса имеет вид:

$$\frac{dv}{dN} = A \frac{dY_A}{dN} + B \frac{dY_B}{dN} + P \frac{dt}{dN} + R \frac{d\theta}{dN}, \quad (11)$$

$$A = \frac{\Phi + c_A'(t - v)}{lc},$$

$$B = \frac{r_B + \Psi + c_B'(t - v)}{lc}, \quad (12)$$

$$P = \frac{c}{lc}.$$

Подставляя значения производных (6)–(8) в уравнение (11), получим:

$$\frac{dv}{dN} = -A(y_A - y_A^*) - S_b(y_B - y_B^*) + S_p(v - t) + S_r(v - \theta), \quad (13)$$

$$\begin{aligned} S_b &= Bb, \\ S_p &= Pp. \end{aligned} \quad (14)$$

Конечная концентрация Y_{A2} задана, а N_0 определим расчетом. Представим систему дифференциальных уравнений (6)–(8) в виде нелинейных интегральных уравнений:

$$Y_A = Y_{A1} - N_0 \int_0^z (y_A - y_A^*) d\zeta, \quad (15)$$

$$Y_B = Y_{B1} - N_0 \int_0^z b(y_B - y_B^*) d\zeta, \quad (16)$$

$$t = t_1 + N_0 \int_0^z p(v - t) d\zeta, \quad (17)$$

В данных уравнениях ζ – переменная интегрирования, а $z = N/N_0$.

Для решения системы уравнений (15)–(17) разбиваем интеграл изменения z от 0 до 1 на несколько участков, так что каждому соответствует приращение переменной интегрирования.

Значения Y_A , Y_B , t в каждой точке (на границе участков) предварительно приняты (нулевое приближение).

Нулевые приближения для l и x вычисляем из уравнений:

$$l = l_2 + (Y_A - Y_{A2}) + (Y_B - Y_{B2}), \quad (18)$$

$$x = \frac{l_2 x_2 + (Y_A - Y_{A2})}{l}. \quad (19)$$

Зададимся нулевыми приближениями для v

$$v = v_2 + A(Y_A - Y_{A2}) + B(Y_B - Y_{B2}) + P(t - t_2) + R(\theta - \theta_2). \quad (20)$$

После того как нулевые приближения установлены, вычислим y_A и y_B по уравнениям (5), а по значениям x и

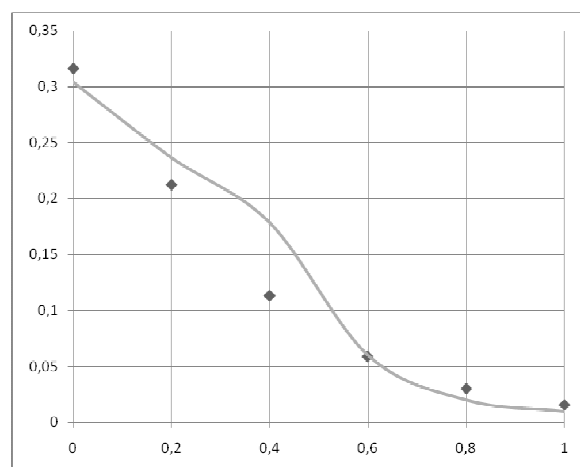


Рис. 1. Зависимость изменения концентрации газа от высоты абсорбера, где линия – данные, полученные при расчете по модели; точки – экспериментальные данные

v найдем равновесные концентрации y_A^* и y_B^* . Выполняя интегрирование, определим значения Y_A , Y_B , t , соответствующие первому приближению. Интегрирование будем вести с помощью метода Симпсона.

Сначала выполним интегрирование по уравнению (15) и исходя из заданного значения Y_{A2} (при $z = 0$) находим общее число единиц переноса:

$$N_0 = \frac{Y_{A1} - Y_{A2}}{\int_0^1 (y_A - y_A^*) d\zeta}. \quad (21)$$

Полученное значение N_0 используется при определении значений остальных параметров по уравнениям (16) и (17).

Первое приближение для v вычисляется по уравнению:

$$v = v_2 + N_0 \left[\int_0^z A(y_A - y_A^*) d\zeta + \int_0^z S_b(y_B - y_B^*) - \int_0^z S_p(v - t) d\zeta - \int_0^z S_r(v - \theta) d\zeta \right]. \quad (22)$$

Найденные первые приближения применяют для определения новых значений y_A^* и y_B^* , после чего находят значения, соответствующие второму приближению, таким же способом, как и при отыскании первого приближения. Итерации продолжаются до тех пор, пока значения параметров, а также значения N_0 в двух последующих итерациях не совпадут между собой с достаточной точностью.

Для проверки адекватности математической модели абсорбции с учетом температуры в качестве экспериментальных данных воспользуемся значениями, полученными в работе [7] для поглощения HCl водой, при температуре газа $t = 70^\circ \text{C}$, температуре жидкости $v = 50^\circ \text{C}$. И сравним эти значения со значениями, полученными нами при использовании математической модели абсорбции с учетом температуры.

По графикам на рис. 1 видно, что значения концентраций в газовой фазе, рассчитанные по математической модели, лежат достаточно близко к экспериментальным значениям концентраций. Средняя относительная погрешность составляет 11 %, что говорит о достаточной адекватности математической модели.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бекман И.Н. Диагностика базальтовых волоконных адсорбентов // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2 Химия. 2003. Т. 44. № 5.
2. Воскресенская Н.И., Шепелев А.Н., Левит М.З. Активированный уголь как средство очистки выбросов при производстве фрикционных изделий // Экология и промышленность России. 2006. Май.
3. Кафаров В.В. Основы массопередачи. М., 1979.
4. Рамм В.М. Абсорбция газов. М.: Химия, 1976.

Поступила в редакцию 14 апреля 2008 г.

Dudakov V.P., Rubtsova E.A. Mathematical model of absorption of multi-component of gas mixture taking into account the change of temperature regime. The process of absorption of multi-component gas mixture taking into account the change of temperature regime in the absorber is considered. The algorithm and mathematical model of absorption process taking into account the change of temperature regime is elaborated. The check of the model adequacy is conducted; it showed the opportunity of calculations using this model.