

**Хвастухин Ю.И., Колесник В.В.,
Орлик В.Н., Цюпяшук А.Н.**
Институт газа НАН Украины, Киев

Математическое моделирование процесса дегидратации мелкодисперсных частиц в псевдооживленном слое инертных частиц. 2. Разработка математического обеспечения

Разработано математическое обеспечение процесса дегидратации мелкодисперсных частиц в псевдооживленном слое инертных частиц. Описана процедура расчета. Приведены примеры расчета технологических параметров процесса.

Ключевые слова: мелкодисперсные частицы, дегидратация, псевдооживленный слой, математическая модель.

Розроблено математичне забезпечення процесу дегідратації дрібнодисперсних частинок у псевдозрідженому шарі інертних часток. Описано процедуру розрахунку. Наведено приклади розрахунку технологічних параметрів процесу.

Ключові слова: дрібнодисперсні частинки, дегідратація, псевдозріджений шар, математична модель.

Настоящая статья является продолжением работы [1], посвященной созданию математического описания основных этапов технологического процесса получения наполнителей для композитных облегченных теплоизоляционных материалов. Процесс основан на сжигании природного газа, запыленного мелкими частичками гидратированного стекла, в псевдооживленном слое инертных частичек.

Было показано, что в силу принятых предположений и с учетом совокупности физико-химических превращений компонентов газового потока и мелких частичек, транспортируемых этим потоком, математическое описание сводится к нижеследующей системе уравнений.

Для компонентов газового потока часть уравнений может быть записана в явном виде относительно производных:

$$dG_{CH_4}/dh = F \varepsilon W_{CH_4}; \quad (1)$$

$$dG_{N_2}/dh = F \varepsilon W_{N_2}; \quad (2)$$

$$dG_{NO}/dh = -(2M_{NO} / M_{N_2}) \times dG_{N_2}/dh = -(2M_{NO} / M_{N_2}) F \varepsilon W_{N_2}; \quad (3)$$

$$dG^{(p)}_{H_2O}/dh = F \varepsilon W^{(p)}_{H_2O}; \quad (4)$$

$$Q_{in}(\theta) = F \int_0^h S_{in}^s \alpha_{in} (\theta - t) dh, \quad (5)$$

а между производными для остальных компонентов существуют линейные соотношения, ко-

торые в матрично-векторной форме могут быть записаны в таком виде:

$$A[9,9] \times \begin{pmatrix} dG_{O_2} / dh \\ dG_{H_2O} / dh \\ dG_{CO_2} / dh \\ dG_{CO} / dh \\ dG_{H_2} / dh \\ dt / dh \\ dG^{(II)}_{H_2O} / dh \\ dG^{(III)}_{CO_2} / dh \\ dM / dh \end{pmatrix} = B[9,5] \times \begin{pmatrix} dG_{CH_4} / dh \\ dG_{N_2} / dh \\ dG_{NO} / dh \\ dG^{(p)}_{H_2O} / dh \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Для коэффициентов матриц, отличных от 0, имеют место соотношения:

$$a_{11} = a_{22} = a_{33} = a_{44} = a_{55} = 1,$$

$$a_{27} = a_{38} = a_{99} = -1,$$

$$a_{17} = \frac{M_{O_2}}{2M_{H_2O}}, \quad a_{18} = \frac{M_{O_2}}{2M_{CO_2}},$$

$$a_{48} = \frac{M_{CO}}{M_{CO_2}}, \quad a_{57} = \frac{M_{H_2}}{2M_{H_2O}},$$

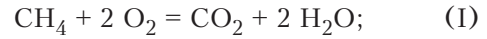
$$a_{61} = I_{O_2}^F, \quad a_{62} = I_{H_2O}^F, \quad a_{63} = I_{CO_2}^F,$$

$$a_{64} = I_{CO}^F, \quad a_{65} = I_{H_2}^F; \quad a_{66} = \sum_i G_i c_i^P,$$

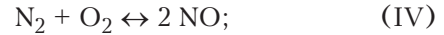
$$\begin{aligned}
 a_{71} &= K_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{P}} G_{\text{H}_2}, \quad a_{72} = -2MR_{\text{H}_2\text{O}}S_{\text{H}_2\text{O}}, \\
 a_{75} &= 2K_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{P}} G_{\text{O}_2}, \quad a_{76} = G_{\text{H}_2} G_{\text{O}_2} dK_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{P}} / dt, \\
 a_{79} &= -R_{\text{H}_2\text{O}}S_{\text{H}_2\text{O}}G_{\text{H}_2\text{O}}, \quad a_{81} = K_{\text{CO}_2}^{\text{P}} G_{\text{CO}}, \\
 a_{83} &= -2MR_{\text{CO}_2}S_{\text{CO}_2}, \quad a_{84} = 2K_{\text{CO}_2}^{\text{P}} G_{\text{O}_2}, \\
 a_{86} &= G_{\text{CO}}G_{\text{O}_2}dK_{\text{CO}_2}^{\text{P}} / dt, \quad a_{89} = -R_{\text{CO}_2}S_{\text{CO}_2}G_{\text{CO}_2}, \\
 a_{91} &= 1/M_{\text{O}_2}, \quad a_{92} = 1/M_{\text{H}_2\text{O}}, \quad a_{93} = 1/M_{\text{CO}_2}, \\
 a_{94} &= 1/M_{\text{CO}}, \quad a_{95} = 1/M_{\text{H}_2}; \\
 b_{11} &= \frac{2M_{\text{O}_2}}{M_{\text{CH}_4}}, \quad b_{12} = \frac{M_{\text{O}_2}}{M_{\text{N}_2}}, \\
 b_{21} &= \frac{-2M_{\text{H}_2\text{O}}}{M_{\text{CH}_4}}, \quad b_{31} = \frac{-M_{\text{CO}_2}}{2M_{\text{CH}_4}}, \\
 b_{61} &= -I_{\text{CH}_4}^{\text{F}}, \quad b_{62} = -I_{\text{N}_2}^{\text{F}}, \quad b_{63} = -I_{\text{NO}}^{\text{F}}; \\
 b_{64} &= I_{\text{H}_2\text{O}}^{(\text{v})}(\Theta_{\text{Rp}}) - I_{\text{H}_2\text{O}}^{(\text{v})}(t), \\
 b_{65} &= F[S_{\text{in}}^{\text{S}} \alpha_{\text{in}}(\Theta - \tau) + \varepsilon(1 - \varepsilon_{\text{p}})S_{\text{p}}^{\text{S}} \alpha_{\text{p}}(\Theta_{\text{Rp}} - t)], \\
 b_{91} &= -1/M_{\text{CH}_4}, \quad b_{92} = -1/M_{\text{N}_2}, \quad b_{93} = -1/M_{\text{NO}}.
 \end{aligned}$$

Тут G_i , M_i , $I_i^{\text{F}}(t)$, $c_{\text{p}i}$, $i = \text{O}_2, \text{N}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{CH}_4, \text{CO}_2, \text{NO}, \text{CO}, \text{H}_2$ — массовый расход (кг/с), молекулярный вес (кг/кмоль), полная энтальпия (кДж/кг) и удельная теплоемкость (кДж/(кг·К)) соответствующих компонентов газового потока; M — мольный расход газового потока в целом, кмоль/с; ε — порозность ПС.

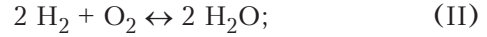
W_{CH_4} — удельная скорость протекания реакции, кг/(м³·с)



W_{N_2} — удельная скорость протекания реакции



$K_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{P}}$ — константа равновесия для реакции



$K_{\text{CO}_2}^{\text{P}}$ — константа равновесия для реакции



$G_{\text{H}_2\text{O}}^{(\text{II})}$, $G_{\text{CO}_2}^{(\text{III})}$ — скорости образования H_2O и CO_2 по реакциям (II) и (III), кг/с; θ , t , θ_{Rp} , θ_{ev} — температуры инертных частиц, газового потока, поверхности мелких частиц, переносимых газовым потоком, и температура дегидратации; $I_{\text{H}_2\text{O}}^{(\text{v})}(\theta_{\text{Rp}})$, $I_{\text{H}_2\text{O}}^{(\text{v})}(t)$ — энтальпия паров воды при температуре поверхности частички θ_{Rp} , переносимых потоком, и температуре этого потока, соответственно; S_{in}^{S} , α_{in} , S_{p}^{S} , α_{p} — удельные поверхности (1/м) и коэффициенты теплообмена (кВт/(м²·К)) газовой фазы с инертными частицами и частицами, переносимыми этим потоком соответственно; $W_{\text{H}_2\text{O}}^{(\text{p})}$ — удельная скорость удаления связанной воды из частиц, переносимых газовым потоком, кг/(м³·с); $Q_{\text{in}}(\theta)$ — скорость результирующего теплообмена между газовым потоком и инертными частицами по всей высоте псевдооживленного слоя (ПС) при его температуре θ , кВт.

В работе [1] описана также процедура определения производной $d\theta_{\text{Rp}}/dh$ для текущей температуры поверхности частицы радиуса R_{p} при ее контакте с газовой фазой на этапах предварительного прогрева, удаления связанной воды и последующего нагрева.

Для этапа удаления связанной воды указана процедура нахождения производной dR_{ev}/dh для текущей границы между материалом, содержащим гидратную воду при температуре $\theta_{\text{ev}} = \text{const}$, и слоем материала $R_{\text{ev}} \leq r \leq R_{\text{p}}$, освобожденного от гидратной воды. Знание этой производной позволяет определить удельную скорость $W_{\text{H}_2\text{O}}^{(\text{p})}$.

Разработанное математическое обеспечение рассматриваемого технологического процесса является совокупностью внешней и внутренней процедур расчета. Суть внутренней процедуры состоит в решении (интегрировании) приведенной

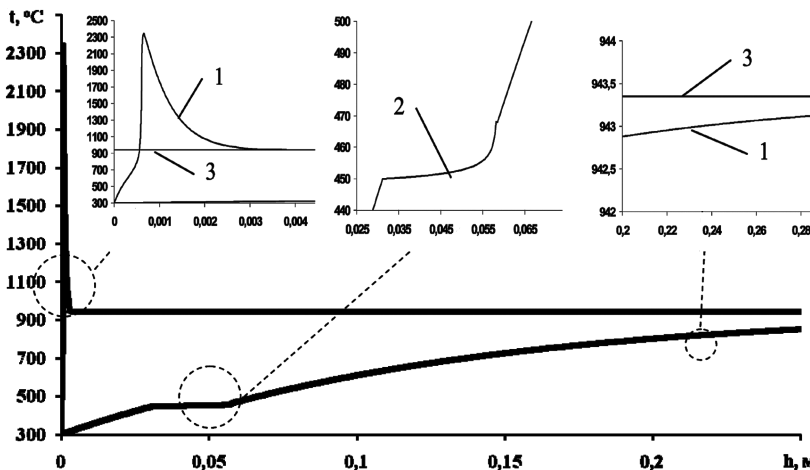


Рис.1. Изменение по высоте кипящего слоя h температуры газовой фазы t (1), частиц (поверхности частиц на этапе удаления связанной воды), транспортируемых газовым потоком θ_{Rp} (2), температуры инертных частиц псевдооживленного слоя θ (3).

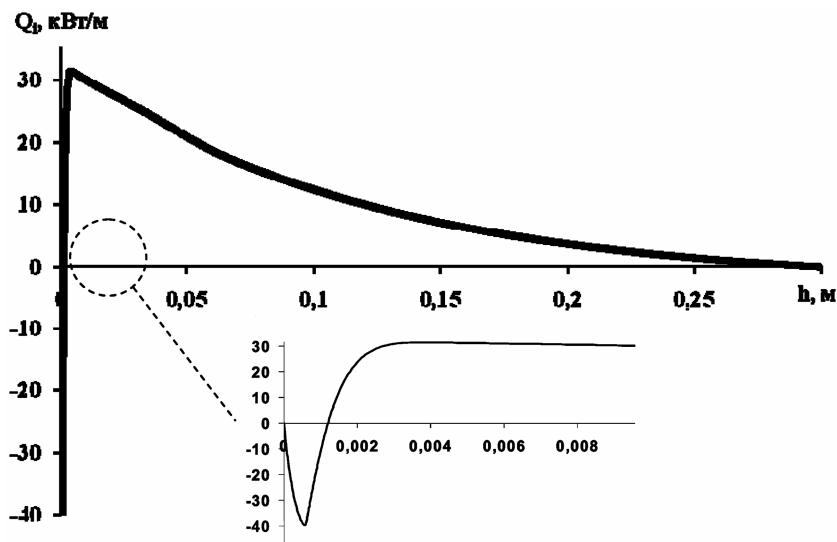


Рис. 2. Изменение результирующей скорости теплообмена Q_1 между газовой фазой и инертными частицами по высоте псевдоожиженного слоя h .

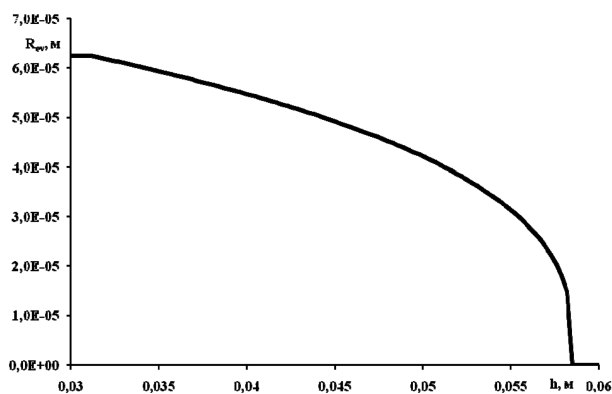


Рис. 3. Изменение радиуса границы материала, содержащего гидратную воду, на этапе ее выделения.

системы уравнений при заданном значении температуры θ инертных частиц ПС. Реализация внешней процедуры связана с нахождением такого значения температуры θ' , для которого выполняется условие $Q_{in}(\theta') = 0$.

С математической точки зрения внутренняя задача — это задача Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений, часть из которых задана в неявном виде, а внешняя задача — это задача поиска корня функции одной переменной.

При решении задачи Коши использовалась одношаговая процедура численного интегрирования с переменным шагом [2]. Изменение шага обуслов-

лено в первую очередь необходимостью ограничения величины приращения таких параметров процесса, как температура газового потока t , концентрации O_2 , N_2 , CH_4 на соответствующих участках их быстрого изменения. Кроме того, для повышения точности и достоверности расчетов необходимо точно отслеживать координату, в которой концентрация кислорода или метана (в зависимости от их первоначального соотношения) становится равной нулю. Также необходимо точно определять координату, в которой температура частиц, переносимых газовым потоком, становится равной температуре выделения связанной воды $\theta_{ев}$ и на-

чинается процесс дегидратации с образованием подвижной границы $R_{ев}$ между различными областями обрабатываемой частицы: обезвоженной и еще содержащей связанную воду.

В процессе интегрирования, как было указано в [1], значения производных dG_{CH_4}/dh , dG_{N_2}/dh , dG_{NO}/dh , $dG^{(P)}_{H_2O}/dh$ вычисляются непосредственно (соотношения (1)–(4)), а значения остальных производных находятся из решения системы линейных алгебраических уравнений (6).

Полученное на k -м шаге итерации для температуры инертных частиц $\theta^{(k)}$ значение величины $Q_{in}(\theta^{(k)})$ используется для нахождения с заданной точностью оценки величины θ' .

Приведенные на рис.1–4 результаты численного анализа процесса дегидратации демон-

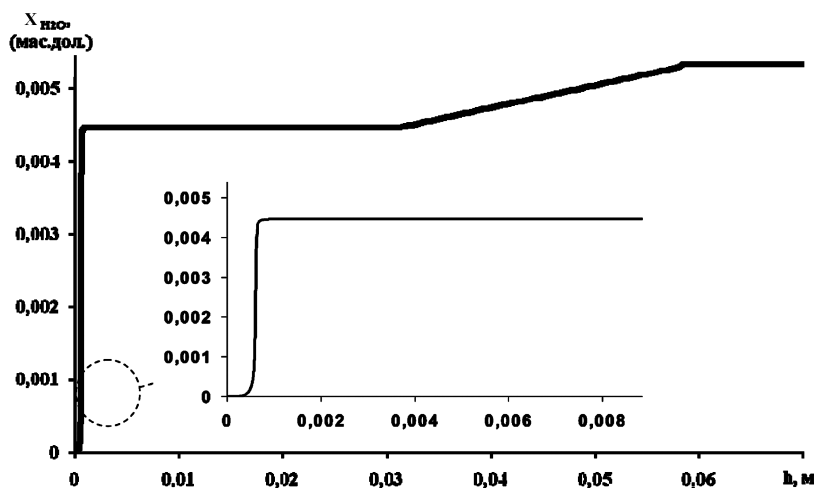


Рис. 4. Изменение массовой доли паров воды в газовом потоке по высоте псевдоожиженного слоя.

стрируют возможности разработанного математического обеспечения.

Из рис.1 видно, что сжигание газа происходит в очень узкой прирешеточной зоне (кривая 1). Фактически в газовой фазе происходит адиабатический разогрев газовой смеси, приводящий к большому перепаду температур между газовой и твердой фазами и достигающий более 1000 °С. Это объясняется тем, что скорость реакции окисления существенно превышает скорость межфазного теплообмена [3, 4]. Вследствие такого разогрева газовой смеси создаются условия для интенсивного образования оксидов азота.

Кривая 2 отображает интенсивность роста температуры поверхности обрабатываемой мелкодисперсной частицы, содержащей гидратную воду. Характерное плато на кривой (заметное замедление роста температуры поверхности частицы) связано с протеканием процесса дегидратации частицы.

В зависимости от текущих технологических параметров к моменту выхода дегидратированной частицы из ПС температуры газовой и твердых крупной и мелкой фаз сближаются и могут сравняться.

На рис.2 показано, что в прирешеточной зоне ПС идет подогрев пыле-топливной смеси до момента воспламенения топлива за счет теплоотвода от разогретого слоя инертных частиц, а в дальнейшем тепловой поток меняет свое направление до момента выравнивания температур газа и инертного слоя.

На рис.3 отображено изменение радиуса границы материала, содержащего связанную воду, как результат протекания процесса дегидратации. В результате испарения воды концентрация ее в газовом потоке изменяется, что показано на рис.4.

Таким образом, получение математического обеспечения позволяет детально исследовать процесс дегидратации при варьировании конструктивных и технологических параметров, что в результате обеспечивает существенную экономию ресурсов при проектировании новых производств или модернизации существующих.

Список литературы

1. Хвастухин Ю.И., Колесник В.В., Орлик В.Н., Цюпяшук А.Н. Математическое моделирование процесса дегидратации мелкодисперсных частиц в псевдооживленном слое инертных частиц. 1. Математическое описание процесса // Энерготехнологии и ресурсосбережение. — 2011. — № 6. — С. 66–72.
2. Калиткин Н.Н. Численные методы. — М.: Наука, 1978. — 512 с.
3. Яната Й. Модель сжигания газообразного топлива в псевдооживленном слое // Хим. технология. — 1978. — № 4. — С. 34–37.
4. Орлик В.Н., Махорин К.Е., Воробей А.С. Математическое моделирование процесса сжигания метана в псевдооживленном слое инертных частиц. Реф. сб. // Проблемы создания котлоагрегатов с топками кипящего слоя // Энергетическое машиностроение. — М.: НИИинформэнергомаш, 1979. — С. 44–47.

Поступила в редакцию 02.02.12

***Khvastukhin Yu.I., Kolesnyk V.V.,
Orlyk V.N., Tsyupyashuk A.N.***

The Gas Institute of NASU, Kiev

Mathematical Simulation of Fine-Dispersed Particles Dehydration Process in Inert Particles Fluidized Bed. 2. Software Development

The software for fine-dispersed particles dehydration process in fluidized bed of inert particles is developed. The computation procedure is described. The examples of calculation of process technological parameters are resulted.

Key words: fine-dispersed particles, dehydration, fluidized bed, mathematical model.

Received February 2, 2012