

УДК 532.516:536.24

НИКИТЕНКО Н.И., СНЕЖКИН Ю.Ф., СОРОКОВАЯ Н.Н.

Институт технической теплофизики НАН Украины

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИОННО-ФИЛЬТРАЦИОННОГО ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА ПРИ РЕГЕНЕРАЦИИ ТВЕРДЫХ СОРБЕНТОВ В АДсорБЕРЕ С РАЗВИТОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ ТЕПЛОПОДВОДА

Представлено математичну модель і числовий метод розрахунку динаміки десорбції в гранульованому твердому сорбенті в адсорбері з розвинутою поверхнею теплопідводу, коли тепломасоперенос здійснюється дифузійно-фільтраційним шляхом. Наведено результати числових експериментів, що свідчать про адекватність математичної моделі.

Представлены математическая модель и численный метод расчета динамики десорбции в гранулированном твердом сорбенте в адсорбере с развитой поверхностью теплоподвода, когда тепломассоперенос осуществляется диффузионно-фильтрационным путем. Приведены результаты численных экспериментов, свидетельствующие об адекватности математической модели.

The mathematical model and numerical method of calculation of the dynamics of desorption in the granulated firm sorbent in an adsorber with the advanced surface of a supply of heat when of heat-mass transfer is carried out by diffused and percolation way are submitted. The results of the numerical experiments testifying to adequacy of formulated mathematical model are resulted.

A – энергия активации;
 c – удельная изобарная теплоемкость;
 D – коэффициент диффузии;
 $F(r)$ – дифференциальная функция распределения пор по размерам;
 h , h_y и l – размеры шагов разностной сетки по пространственным координатам x и y , и времени;
 I – мощность внутренних источников массы;
 i , m , n – порядковые номера шагов разностной сетки по координатам x , y и времени;
 JK , MK – количество узловых точек вдоль осей x и y ;
 K_0 – общая проницаемость среды;
 $K_{\chi\nu}$ – относительная проницаемость фазы χ ;
 L – удельная теплота фазового перехода жидкости в пар, включающая в себя теплоты испарения свободной жидкости и удельную энергию десорбции влаги;
 n – плотность частиц;
 N_A – число Авогадро;
 P – давление;
 r – радиус;
 r^* – характеристический параметр дисперсности размеров пор;
 R_y – универсальная газовая постоянная;
 S – площадь;
 T – температура;
 t – время;
 U – объемная концентрация;
 V – объем;

W – влагосодержание пористого тела;
 w – скорость;
 α – коэффициент теплоотдачи;
 δ – толщина испаряющегося слоя;
 ε – коэффициент излучения частиц;
 $\varepsilon_{сл}$ – порозность слоя;
 $\varepsilon_{ст}$ – степень черноты излучающей поверхности;
 η – динамический коэффициент вязкости;
 λ – коэффициент теплопроводности;
 μ – молекулярная масса вещества;
 Ω – весовой параметр разностного уравнения;
 Π – пористость гранул;
 ρ – плотность;
 σ – поверхностное натяжение;
 $\sigma_{изл}$ – постоянная Стефана – Больцмана;
 φ – степень насыщения парогазовой смеси;
 Ψ – объемная доля пористой системы, занятая компонентом фазы;
 ∇ – оператор Гамильтона.

Индексы нижние:
 0 – начальные значения;
 D – диффузия;
 \max , \min – максимальное и минимальное значение;
 x , y – проекции на оси Ox и Oy ;
 ν – нормаль к рассматриваемой поверхности;
 v – воздух;
 $г$ – газ;

гр – гранула;
 ж – жидкость;
 к – капилляр;
 п – пар;
 под – теплоподводящая поверхность;
 пс – пар окружающей среды;
 н – насыщенное состояние;
 р – равновесное состояние;
 с – внешняя среда;

Введение

Твердые адсорбенты, такие как цеолиты, силикагели, алюмогели и др., обладающие развитой пористостью и высокими адсорбционными свойствами, находят широкое применение в различных отраслях промышленности. По мере насыщения их адсорбционная способность снижается. Регенерация отработанных сорбентов проводится при достаточно высоких температурах, что повышает требования к выбору температурного режима, поскольку применение температур ниже или выше оптимальной снижает адсорбционную емкость сорбента. В первом случае – вследствие неполного удаления адсорбата, во втором – вследствие возможного разрушения структуры адсорбента. Также проведение десорбции при излишне высоких температурах повышает энергоемкость процесса. Математическое моделирование динамики теплопереноса и фазовых превращений в процессе восстановления твердых сорбентов позволяет определить оптимальный температурный режим десорбции с учетом свойств адсорбата и сорбента.

В адсорберах термотрансформаторов восстановление отработанных сорбентов проводится в вакууме путем кондуктивного подвода энергии от внешнего теплоносителя. Для интенсификации теплоподвода применяется ребрение теплообменной поверхности. Адсорбент засыпается в межреберное пространство адсорбера таким образом, чтобы толщина слоя соответствовала высоте ребра. 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-

сл – слой;
 т – твердая фаза пористых гранул;
 тр – транспортные поры;
 эф – эффективное значение.

Индексы верхние:

а.с. – абсолютно сухое тело;
 ж – жидкость.

пористыми материалами, объем которых в процессе удаления влаги остается неизменным. Влажный гранулированный адсорбент можно рассматривать как многокомпонентную гетерогенную капиллярно-пористую систему, включающую в себя скелет адсорбента, жидкий адсорбат и парогазовую смесь.

Математическое моделирование динамики регенерации влажного сорбента в адсорбере связано с решением сопряженной задачи теплопроводности для металлической ребренной поверхности теплоподвода и теплообмена в диспергированном пористом слое. В работе авторов [1] была представлена математическая модель и численный метод расчета процесса десорбции воды из гранулированного сорбента для случая, когда имеют место относительно невысокие градиенты давления и температуры и теплоперенос осуществляется диффузионным путем. В настоящей работе построена математическая модель и разработан метод численного решения диффузионно-фильтрационного теплопереноса и фазовых превращений при осушении отработанного сорбента в адсорбере термотрансформатора.

Математическая модель и метод расчета

Когда ребра адсорбера термотрансформатора имеют одинаковые геометрические характеристики и расположены параллельно оси Oy с одинаковым шагом вдоль оси Ox (рис. 1), при моделировании теплопереноса 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).

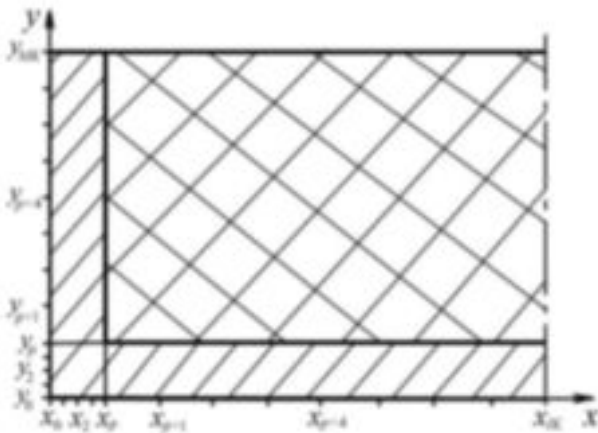


Рис. 1. Вид расчетной области в адсорбере

Процесс теплопроводности в оребренной поверхности адсорбера описывается уравнением

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

где c_p и λ – удельная объемная теплоемкость и коэффициент теплопроводности металла поверхности.

При построении системы уравнений тепло - и массопереноса в неподвижном гранулированном адсорбенте полагается, что вся жидкость связана с пористыми гранулами, а парообразная влага перемещается к поверхности слоя по транспортным порам и капиллярам гранул. Применение достаточно высоких температур для восстановления влажного сорбента порождает конвективное движение связанного вещества, при этом тепломассоперенос осуществляется путем диффузии и фильтрации.

Дифференциальные уравнения переноса энергии, массы жидкости, пара и воздуха в слое гранулированного сорбента представляются в следующем виде:

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

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

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

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

Здесь

$$c_{эф} = c_T \rho_T (1 - \Pi - \varepsilon_{сл}) + c_{ж} U_{ж} + c_{п} U_{п} + c_{в} U_{в}$$

– эффективная теплоемкость 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;

$$w_{эф,\psi} = [w_{ж,\psi} c_{ж} U_{ж} + w_{г,\psi} (c_{п} U_{п} + c_{в} U_{в})] / c_{эф}$$

– эффективная скорость связанного вещества в направлении ψ , $\psi = x, y$; $w_{ж,\psi}$, $w_{г,\psi}$ – скорости фильтрационного движения жидкой и газовой фаз согласно закону Дарси пропорциональны соответствующим градиентам давления $\nabla P_{ж}$ и $\nabla P_{г}$:

$$w_{\chi,\psi} = -K_0 K_{\chi,\psi} / \eta_{\chi,\psi} \nabla P_{\chi,\psi}, \quad \chi = ж, г.$$

Внутрипоровые давления парогазовой смеси $P_{г}$ и жидкости $P_{ж}$ выражаются через функции $U_{п}$, $U_{в}$, $U_{ж}$ и T . Объемные доли в слое гранулированного пористого адсорбента, занятые твердым телом гранул Ψ_T , жидкостью $\Psi_{ж}$ и газом $\Psi_{г}$, находятся по соотношениям

$$\Psi_T = (1 - \Pi)(1 - \varepsilon_{сл}), \quad \Psi_{ж} = U_{ж} / \rho_{ж}, \quad \Psi_{г} = 1 - \Psi_T - \Psi_{ж}, \quad (6)$$

где $\rho_{ж}$ – истинная плотность жидкости. Парциальные плотности пара и воздуха в слое определяются по выражениям $\rho_{п} = U_{п} / \Psi_{г}$ и $\rho_{в} = U_{в} / \Psi_{г}$, а парциальные давления пара и воздуха находятся с использованием уравнения состояния разреженного газа: $P_{п} = \rho_{п} R_y T / \mu_{п}$, $P_{в} = \rho_{в} R_y T / \mu_{в}$. Давление парогазовой смеси равно сумме парциальных давлений его компонентов $P_{г} = P_{п} + P_{в}$. Давление жидкости $P_{ж}$ представляется в виде суммы $P_{ж} = P_{г} + P_{к}$, где капиллярное давление $P_{к}$ находится [2] как среднее капиллярное давление жидкости в порах гранул.

В отдельном цилиндрическом капилляре радиуса r в соответствии с формулой Лапласа $P_k = 2\sigma(T)/r$. Объем жидкости $dV(r)$, содержащейся в капиллярах с радиусами от r до $r+dr$ в единичном объеме слоя, пропорционален дифференциальной функции $F(r)$ распределения пор по размерам (определяемой из

условия $\Pi = \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} F(r)dr$) и объемной доле $\theta(r)$ капилляра, занятой жидкостью, т.е. $dV(r) = \theta(r)F(r)dr$.

Среднее значение капиллярного давления в данной точке тела может быть представлено в виде выражения, аналогичного формуле Лапласа

$$P_k = 2\sigma(T) \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \frac{\theta(r)}{r} F(r)dr / \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \theta(r)F(r)dr = \frac{2\sigma(T)}{r^*},$$

$$r_{\min} < r^* < r_{\max}. \quad (7)$$

Эффективный коэффициент диффузии жидкости $D_{ж}$ в порах гранул находится по формуле [3]

$$D_{ж} = \gamma_{D_{ж}} [\exp(A_D / R_y T) - 1]^{-1},$$

которая в предельных случаях переходит в эмпирическую формулу Аррениуса для твердых тел и в формулу Эйнштейна для жидких сред. Для пара и воздуха, в соответствии с молекулярно-кинетической теорией газа, коэффициенты диффузии равны

$$D_{п} = D_{в} = \gamma_{D_{п}} T^{3/2} / P_{г}.$$

Диффузионный коэффициент переноса $\gamma_{D_{п}}$ определяется выражением [4]

$$\gamma_{D_{п}} = \gamma_{D_{п}}^0 (1 - \varepsilon_{сл}) + \gamma_{D_{п}}^* \varepsilon_{сл},$$

где $\gamma_{D_{п}}^0$ и $\gamma_{D_{п}}^*$ – диффузионные коэффициенты переноса пара в гранулах и в транспортных порах.

Граничные условия тепло- и массообмена формулируются следующим образом. На поверхности $y = y_{МК}$ и $x_p \leq x \leq x_{ИК}$ (рис. 1) контакта адсорбента и внешней среды, задаются граничные условия третьего рода:

$$\lambda_{эф} \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=0} = \alpha(T_c - T|_{y=0}) - L I|_{y=0}, \quad (8)$$

$$D_{ж} \frac{\partial U_{ж}}{\partial y} \Big|_{y=0} = I|_{y=0}, \quad (9)$$

$$-D_{п} \frac{\partial U_{п}}{\partial y} \Big|_{y=0} + \frac{\partial(w_{гy} U_{п})}{\partial y} \Big|_{y=0} = \gamma_{пс} (U_{п}|_{y=0} - \rho_{пс} \psi_{п}), \quad (10)$$

$$U_{в}|_{y=0} = \frac{P_c \psi_{г} \mu_{в}}{R_y T|_{y=0}} - U_{п}|_{y=0} \frac{\mu_{в}}{\mu_{п}}. \quad (11)$$

Выражение (10) представляет уравнение сохранения массы пара [5].

На правой границе $x = x_{ИК}$ и $y_0 \leq y \leq y_{МК}$ расчетной области имеют место условия симметрии полей температуры, скоростей и объемных концентраций жидкой и газовой фаз

$$\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=x_{ИК}} = 0; \quad \frac{\partial U_{ж}}{\partial x} \Big|_{x=x_{ИК}} = 0; \quad \frac{\partial U_{п}}{\partial x} \Big|_{x=x_{ИК}} = 0;$$

$$\frac{\partial U_{в}}{\partial x} \Big|_{x=x_{ИК}} = 0; \quad \frac{\partial w_{жx}}{\partial x} \Big|_{x=x_{ИК}} = 0; \quad \frac{\partial w_{гx}}{\partial x} \Big|_{x=x_{ИК}} = 0. \quad (12)$$

К левой и нижней границам гранулированного слоя от нагревающих поверхностей подводится тепловой поток, а потоки массы жидкости, пара и воздуха отсутствуют. Например, для границы $y = y_p$ и $x_p \leq x \leq x_{ИК}$ они запишутся таким образом:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=y_p} = \lambda_{эф} \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=y_p}; \quad \frac{\partial U_{ж}}{\partial y} \Big|_{y=y_p} = 0;$$

$$\frac{\partial U_{п}}{\partial y} \Big|_{y=y_p} = 0; \quad \frac{\partial U_{в}}{\partial y} \Big|_{y=y_p} = 0;$$

$$\frac{\partial w_{жy}}{\partial y} \Big|_{y=y_p} = 0; \quad \frac{\partial w_{гy}}{\partial y} \Big|_{y=y_p} = 0; \quad \frac{\partial w_{жx}}{\partial x} \Big|_{x=x_{ИК}} = 0;$$

$$\frac{\partial w_{гx}}{\partial x} \Big|_{x=x_{ИК}} = 0. \quad (13)$$

На границе $y = y_0$ и $x_0 \leq x \leq x_{ИК}$ контакта рассматриваемой области с внешней средой условия теплообмена могут быть представлены выражением

$$A_0 \lambda \frac{\partial T(P, t)}{\partial \nu} + A_1 T(P, t) + A_2 = 0. \quad (14)$$

Здесь ν – нормаль к граничной поверхности в точке P . При $A_0=0$ и $A_1=1$ выражение (14) 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 (14) при $A_1=A_2=0$. Если имеет место лучистый теплообмен, эффективный коэффициент теплоотдачи на поверхности нагрева определяется выражением

$$\alpha_{\text{эф}} = \alpha + \sigma_{\text{изл}} \varepsilon_{\text{ст}} (T_c^2 + T|_{\nu=0}^2) (T_c + T|_{\nu=0}). \quad (15)$$

На границе раздела жидкого адсорбата и парогазовой смеси интенсивность фазового перехода I определяется по формуле [6]

$$I = \frac{1}{4} n \varepsilon \delta^* \left\{ \bar{\delta} (2 - \bar{\delta}) \left[\exp \left(\frac{A}{R_y T|_{\nu=0}} \right) - 1 \right]^{-1} - \varphi_c \left[\exp \left(\frac{A}{R_y T_c} \right) - 1 \right]^{-1} \right\} \quad (16)$$

Здесь n – плотность испаряющихся молекул, $n = U_{\text{ж}} N_A / \mu$; δ^* – средняя длина смещения активизированной частицы внутри конденсированного тела, $\delta^* = A / (\xi n)$, где $\xi = \text{const}$; $\bar{\delta}$ – относительная толщина испаряющегося слоя жидкости, $\bar{\delta} = \delta / \delta^*$, δ – толщина приграничного слоя, в котором протекает процесс испарения, $\delta = \delta^*$ при $\delta^* < \delta$ и $\delta = \delta^*$ при $\delta^* \geq \delta$, где δ^* – определяющий размер испаряющегося тела. Выражение для равновесной толщины слоя конденсата δ^* на поверхности неиспаряющегося тела в газовой среде со степенью насыщения φ было получено Никитенко Н.И. [6]

$$\delta^* = \delta^* \bar{\delta} = \delta^* (1 - \sqrt{1 - \varphi}). \quad (17)$$

В соответствии с (17) 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.

Для определения интенсивности испарения жидкости из капилляров гранул выделяется контрольный объем $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$, включающий в себя одну гранулу. Зная количество гранул адсорбента в единичном объеме слоя $n_{\text{гр}}$, можно определить среднюю величину контрольного объема $\Delta V = 1/n_{\text{гр}}$ и средний объем гранулы $V_{\text{гр}} = \Delta V (1 - \varepsilon_{\text{сл}})$. Если средняя площадь наружной поверхности гранулы равна $S_{\text{гр}}$, то средняя полуширина транспортной поры будет $r_{\text{тр}} = \Delta V \varepsilon_{\text{сл}} / S_{\text{гр}}$.

На внешней поверхности гранулы средняя интенсивность десорбции жидкости равна

$$I_{\text{гр}} = \zeta S_{\text{гр}} I_c, \quad (18)$$

где ζ – коэффициент, учитывающий уменьшение поверхности испарения вследствие контакта гранул.

Процесс десорбции является достаточно медленным, а размеры гранул относительно размера слоя невелики, и отклонение функций T , $U_{\text{т}}$, $U_{\text{ж}}$, $U_{\text{п}}$, $U_{\text{в}}$, $P_{\text{п}}$, $\rho_{\text{п}}$ и φ в пределах контрольного объема от их средних значений по этому объему незначительны, т.е. имеет место локальное термодинамическое равновесие. Тогда, считая $T_c = T|_{\nu=0} = T$, из (16) вытекает выражение для интенсивности фазового перехода I_c на внутренних поверхностях слоя

$$I_c = \gamma_c U_{\text{ж}} \left\{ \left[\exp \left(\frac{A}{R_y T} \right) - 1 \right]^{-1} [\bar{\delta} (2 - \bar{\delta}) - \varphi] \right\}, \quad (19)$$

$$\gamma_c = \frac{1}{4} \frac{N_A}{\mu} \varepsilon \delta^*,$$

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

Полагая, что $\varphi_c = \varphi|_{\nu=0} = \varphi$, из формулы (17) следует, что толщина слоя адсорбата на поверхности гранулы равна толщине слоя адсорбата δ^* на поверхностях капилляров радиуса $r > \delta^*$ внутри гранулы. Неравновесное значение δ^* находится следующим образом. Осредненный вес жидкости, связанной с одной гранулой в контрольном объеме

$G_{гр} = U / n_{гр}$. Объем жидкости в грануле $V_{гр}^ж = G_{гр} / \rho_{ж}$ включает объем $V_{гр,1}^ж$ полностью заполненных капилляров с радиусами $r < \delta^ж$, и объем $V_{гр,2}^ж$ частично заполненных капилляров радиуса $r > \delta^ж$:

$$V_{гр,1}^ж = \int_{r_{min}}^{\delta^ж} F(r) dr, \quad V_{гр,2}^ж = \delta^ж (S_{гр} + S'_{гр}). \quad (20)$$

Здесь $F(r) = dV / dr$ – дифференциальная функция распределения пор по радиусам, где dV – суммарный объем пор радиуса от r до $r+dr$ в единичном объеме тела. Общая площадь поверхностей частично заполненных жидкостью капилляров в грануле определяется интегралом [4]:

$$S'_{гр} = \int_{\delta^ж}^{r_{max}} dS'_{гр} = \frac{2}{n_{гр}} \int_{\delta^ж}^{r_{max}} \frac{F(r)}{r} dr.$$

Площадь контакта жидкости, покрывающей наружную поверхность гранулы, с парогазовой смесью в транспортных порах, вследствие малости отношения толщины слоя $\delta^ж$ к определяющему размеру гранулы, полагается равной $S_{гр}$. Толщина слоя конденсата $\delta^ж$ находится на базе закона сохранения массы

$$\frac{G_{гр}}{\rho_{ж}} = V_{гр,1}^ж + \delta^ж (S_{гр} + S'_{гр}) = \int_{r_{min}}^{\delta^ж} F(r) dr + \delta^ж \left(S_{гр} + \frac{2}{n_{гр}} \int_{\delta^ж}^{r_{max}} \frac{F(r)}{r} dr \right). \quad (21)$$

Интенсивность десорбции в капиллярах гранулы находится по формуле $I'_{гр} = S''_{гр} I_c$, где $S''_{гр}$ – средняя суммарная площадь поверхности контакта адсорбата с парогазовой смесью в порах гранулы контрольного объема. В капиллярах с радиусами от r до $r+dr$, причем $r \geq \delta^ж$, площадь контакта составит $dS''_{гр} = F(r) 2\pi(r - \delta^ж) dr / (\pi r^2 n_{гр})$. При $\delta^ж = 0$, это соотношение совпадает с приведенным выше выражением для $dS'_{гр}$. Общая площадь контакта фаз находится путем интегрирования

$$S''_{гр} = \int_{\delta^ж}^{r_{max}} dS''_{гр} = 2 \int_{\delta^ж}^{r_{max}} \frac{F(r)}{r} dr - 2\delta^ж (1 - \sqrt{1 - \phi}) \int_{\delta^ж}^{r_{max}} \frac{F(r)}{r^2} dr. \quad (22)$$

Интенсивность десорбции в единичном объеме слоя определяется выражением

$$I_V = (\zeta S_{гр} + S''_{гр}) n_{гр} I_c = \gamma_V I_c, \quad (23)$$

где $\gamma_V = (\zeta S_{гр} + S''_{гр}) n_{гр}$ – коэффициент объемного испарения.

Объемные концентрации компонентов связанного вещества U'_ψ ($\psi = ж, п, в$) в пористых гранулах находятся через значения объемных концентраций U_ψ соответствующих компонентов в слое и порозности слоя:

$$U'_{ж} = \frac{G_{ж}}{V_{сл}} = U_{ж} (1 - \varepsilon_{сл}),$$

$$U'_{п} = \rho_{п} (\Psi_{г} + \varepsilon_{сл}) = U_{п} + \rho_{п} \varepsilon_{сл},$$

$$U'_в = \rho_в (\Psi_{г} + \varepsilon_{сл}) = U_в + \rho_в \varepsilon_{сл}. \quad (24)$$

Решение нелинейной системы дифференциальных уравнений (1)–(5) при граничных условиях (8)–(14) проводилось численным методом, базирующимся на явной трехслойной пересчетной разностной схеме Никитенко Н.И. [7]. Разностная аппроксимация уравнения (3) в декартовых координатах x, y на равномерной разностной сетке $x_i = ih, (i = 0, 1, \dots, IK; h = \text{const}), y_m = mh_y, (m = 0, 1, \dots, MK; h_y = \text{const}), t_n = nl (n = 0, 1, \dots, l > 0)$ имеет вид

$$\frac{\bar{U}_{ж,i,m}^{n+1} - U_{ж,i,m}^n}{l} = - \left[\left((w_{ж} U_{ж})_{i+1,m}^n - (w_{ж} U_{ж})_{i,m}^n \right) - \left((w_{ж} U_{ж})_{i,m}^n - (w_{ж} U_{ж})_{i-1,m}^n \right) \right] / (2h^2) - \left[\left((w_{ж} U_{ж})_{i,m+1}^n - (w_{ж} U_{ж})_{i,m}^n \right) - \left((w_{ж} U_{ж})_{i,m}^n - (w_{ж} U_{ж})_{i,m-1}^n \right) \right] / (2h_y^2), \quad (25)$$

$$\begin{aligned}
 & (1 + \Omega_{\text{ж}}) \frac{U_{\text{ж},m}^{n+1} - U_{\text{ж},m}^n}{l} - \Omega_{\text{ж}} \frac{U_{\text{ж},m}^n - U_{\text{ж},m}^{n-1}}{l} = \\
 & = - \left[(w_{\text{ж}} \bar{U}_{\text{ж}})_{i+1,m}^n - (w_{\text{ж}} \bar{U}_{\text{ж}})_{i,m}^n \right] - \\
 & \left[(w_{\text{ж}} \bar{U}_{\text{ж}})_{i,m}^n - (w_{\text{ж}} \bar{U}_{\text{ж}})_{i-1,m}^n \right] / (2h^2) - \\
 & - \left[(w_{\text{ж}} \bar{U}_{\text{ж}})_{i,m+1}^n - (w_{\text{ж}} \bar{U}_{\text{ж}})_{i,m}^n \right] - \\
 & \left[(w_{\text{ж}} \bar{U}_{\text{ж}})_{i,m}^n - (w_{\text{ж}} \bar{U}_{\text{ж}})_{i,m-1}^n \right] / (2h_y^2) + \\
 & \left[(D_{\text{ж},i+1,m} + D_{\text{ж},i,m}) (\bar{U}_{\text{ж},i+1,m}^n - \bar{U}_{\text{ж},i,m}^n) - \right. \\
 & \left. - (D_{\text{ж},i,m} + D_{\text{ж},i-1,m}) (\bar{U}_{\text{ж},i,m}^n - \bar{U}_{\text{ж},i-1,m}^n) \right] / (2h^2) + \\
 & + \left[(D_{\text{ж},i,m+1} + D_{\text{ж},i,m}) (\bar{U}_{\text{ж},i,m+1}^n - \bar{U}_{\text{ж},i,m}^n) - \right. \\
 & \left. (D_{\text{ж},i,m} + D_{\text{ж},i,m-1}) (\bar{U}_{\text{ж},i,m}^n - \bar{U}_{\text{ж},i,m-1}^n) \right] / (2h_y^2) - I_V.
 \end{aligned} \tag{26}$$

Аналогичным образом аппроксимируются уравнения (1), (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

$$l_{\text{ж}} \leq \min \left[\left(\frac{w_{\text{ж}x}}{h} + \frac{w_{\text{ж}y}}{h_y} \right)^{-1}; \frac{(1 + 2\Omega_{\text{ж}})}{2D_{\text{ж}}(1/h^2 + 1/h_y^2)} \right]. \tag{27}$$

Расчетный шаг по времени l для разностной схемы, аппроксимирующей систему (1) – (5), определяется из условия $l \leq \min \{l_{\text{Тпод}}; l_T; l_{\text{ж}}; l_{\text{п}}; l_{\text{в}}\}$, где $l_{\text{Тпод}}; l_T; l_{\text{ж}}; l_{\text{п}}; l_{\text{в}}$ – допустимые шаги по времени для разностных аппроксимаций уравнений соответственно (1), (2), (3), (4) и (5).

Результаты расчета

На базе представленной математической модели проводился расчет динамики теплопереноса в оребренной поверхности адсорбера и теплопереноса в слое гранулированного силикагеля при его регенерации путем кондуктивного нагрева в условиях вакуума. Расчеты велись для следующих исходных данных: $T_0 = 283 \text{ К}$; $T_c = 318 \text{ К}$; $P_c = 8 \text{ кПа}$; $U_0 = 297 \text{ кг/м}^3$; $W_0 = 0,25 \text{ кг/кг}$; $\lambda_{\text{т}} = 0,74 \text{ Вт/(м·К)}$;

$c_{\text{т}} = 920 \text{ Дж/(кг·К)}$; $\rho_{\text{т}} = 1250 \text{ кг/м}^3$; $\phi_c = 0,8$; $A = A_D = 0,4205 \cdot 10^8 \text{ Дж/кмоль}$; $\Pi = 0,46$; $\epsilon_{\text{сл}} = 0,34$.

На рис. 2 показаны графики изменения температуры в некоторых точках теплоподводящей поверхности и слоя гранулированного силикагеля в процессе регенерации в адсорбере для случая, когда: высота ребра 0,05 м, межреберное расстояние 0,1 см, толщина подложки 3 мм, полутолщина ребра 1,5 мм, на границе $y = y_0$ температура $T(x, y_0) = 523 \text{ К}$.

На рис.3 представлены кривые изменения во времени среднего влагосодержания силикагеля при десорбции воды, полученные для случаев диффузионно-фильтрационного теплопереноса (сплошная линия) и без учета фильтрации влаги (пунктир) при различных температурах на наружной поверхности $y = y_0$ адсорбера. Кривые, полученные с учетом фильтрационного теплопереноса, качественно согласуются с представленными в [8] кривыми кинетики десорбции воды из гранулированного цеолита в цилиндрическом адсорбере. Они имеют два участка. Начальный, более пологий участок, соответствует этапу прогрева оребренной поверхности адсорбера. На втором этапе скорость обезвоживания сорбента возрастает. Проявление фильтрации тем заметнее, чем выше температура десорбции.

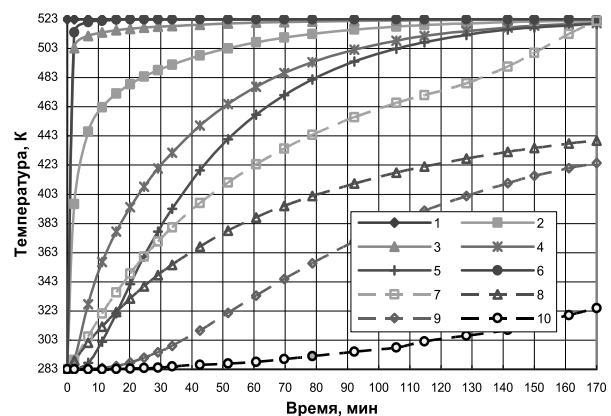


Рис. 2. Изменение во времени температуры в некоторых точках теплоподводящей поверхности (сплошная линия) и слоя силикагеля (пунктир) в процессе десорбции воды: 1 – $(x_0; y_0)$; 2 – $(x_0; y_p)$; 3 – $(x_p; y_p)$; 4 – $(x_{p+3}; y_p)$; 5 – $(x_p; y_{\text{МК}})$; 6 – $(x_p; y_{p+3})$; 7 – $(x_{p+1}; y_{p+1})$; 8 – $(x_{p+1}; y_{\text{МК}})$; 9 – $(x_{\text{К}}; y_{p+1})$; 10 – $(x_{\text{К}}; y_{\text{МК}})$.

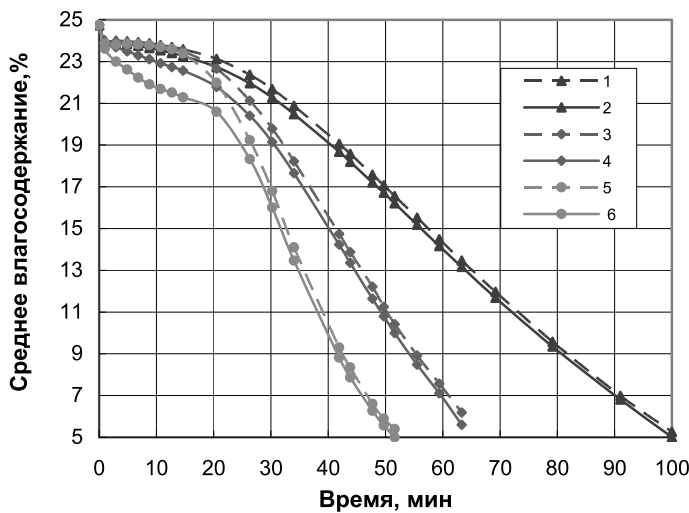


Рис. 3. Графики изменения среднего влагосодержания слоя толщиной 0,03 м гранулированного силикагеля в процессе десорбции воды: 1, 2 – $T = 423$ К; 3, 4 – $T = 473$ К; 5, 6 – $T = 523$ К. Расстояние между ребрами 0,03 м.

На продолжительность регенерации отработанного сорбента оказывают влияние геометрические параметры и теплофизические характеристики адсорбера термотрансформатора. На рис. 4 приводятся результаты расчета кинетики десорбции воды из гранулированного силикагеля при различных значениях расстояния между ребрами теплоподводящей поверхности. Их величина заметно влияет на продолжительность десорбции на втором этапе, характеризуемом тем, что температура вершин ребер практически достигает температуры десорбции, и прогрев пористого слоя ускоряется. Чем меньше расстояние между ребрами, тем больше поверхность контакта сорбента с нагревающей поверхностью и тем выше интенсивность десорбции влаги. На рис. 5 представлены графики изменения среднего влагосодержания силикагеля, размещенного на стальной и на алюминиевой ребреных поверхностях адсорбера. Относительно невысокий коэффициент теплопроводности стали замедляет прогрев ребер, вследствие чего повышение температуры гранул сорбента, контактирующих с горячей поверхностью металлической стенки, вызывает интенсивное испарение воды, пары которой конденсируются и поглощаются более холодными гранулами, удаленными на некоторое расстояние от

стенки. Это повышает среднее влагосодержание адсорбента на этапе прогрева и существенно удлиняет процесс его восстановления. Следовательно, для изготовления корпуса адсорбера или только ребер нагревающей поверхности необходимо применять металлы с достаточно высоким коэффициентом теплопроводности. Использование для изготовления теплоподводящей поверхности алюминия, теплопроводность которого в три раза выше, чем стали, позволяет сократить время регенерации более чем на треть.

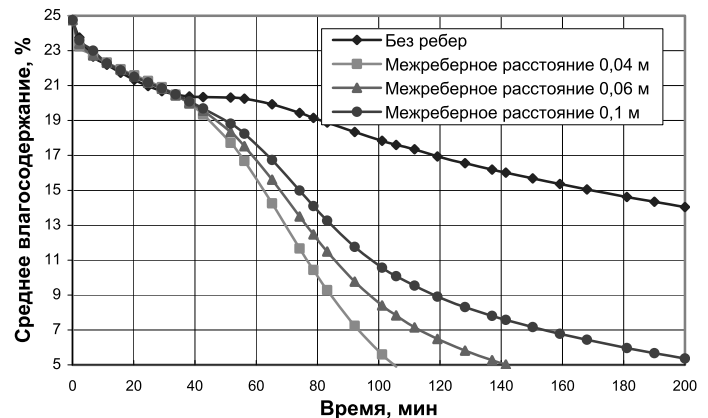


Рис. 4. Изменение во времени среднего влагосодержания слоя толщиной 0,05 м гранулированного силикагеля в процессе десорбции воды в зависимости от расстояния между ребрами. Температура десорбции 523 К.

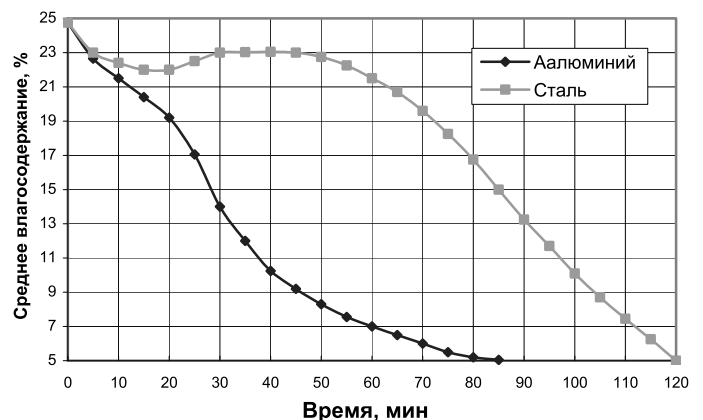


Рис. 5. Изменение во времени среднего влагосодержания слоя толщиной 0,03 м гранулированного силикагеля в процессе десорбции воды в зависимости от материала теплоподводящей поверхности. Температура десорбции 523 К.

Выводы

Представленная двухмерная математическая модель и метод расчета тепломассопереноса и фазовых превращений при десорбции влаги из гранулированного сорбента в адсорбере термотрансформатора с развитой поверхностью теплоподвода могут быть использованы для выбора оптимальных режимов процесса 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.* Математическая модель и метод расчета тепломассопереноса и фазовых превращений в процессах сушки // Пром. теплотехника. – 2001. – Т.23, № 3. – С. 65 – 3.
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., Снежкин Ю.Ф., Сороковая Н.Н.* Математическое моделирование процесса регенерации твердых сорбентов // Наукові праці ОНАХА. – 2007. – Вип.30. – Т.1. – С. 12 – 17.
5. *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.
6. *Никитенко Н.И.* Исследование динамики испарения конденсированных тел на основе закона интенсивности спектрального излучения частиц // ИФЖ. – 2002. – Т.75, № 3. – С. 128 – 134.
7. *Никитенко Н.И.* Теория тепломассопереноса. – К.: Наук. думка, 1983. – 352 с.
8. *Leong K.C., Liu Y.* Numerical study of a combined heat and mass recovery adsorption cooling cycle // Intern. J. Heat/ Mass Transfer. – 2004. – 47. – P. 4761 – 4770.

Получено 02.07.2009 г.