

А.Г.Муравьев

МАССОПЕРЕНОС НА ЧАСТИЦЕ ДИСПЕРСНОЙ ФАЗЫ ПРИ ЗАВИСЯЩЕМ ОТ ВРЕМЕНИ КОЭФФИЦИЕНТЕ МАССООТДАЧИ В СПЛОШНОЙ СРЕДЕ

On the basis of the known model of mass transfer inside a particle of a disperse phase the model of mass transfer is constructed when the resistances of phases are comparable and the mass – transfer coefficient in a continuous phase is time-dependent. The numerical method of the solution of the equation of the constructed mathematical model is offered. Besides an approximate analytical method of the solution of the equation is suggested when resistance prevails over the mass transfer from a disperse phase.

Введение

В данной работе строится математическая модель процесса массопереноса на частице дисперсной фазы при соизмеримых фазовых сопротивлениях для заданной зависимости коэффициента массоотдачи в сплошной фазе от времени. Под частицей дисперсной фазы подразумевается пузырек, капля или твердая частица. Предполагается известной зависимость от времени средней по объему частицы мольной доли целевого компонента для внутренней задачи, т.е. при постоянном значении мольной доли целевого компонента на межфазной поверхности.

2. Постановка задачи

Распределение скоростей внутри частицы считается установившимся. Начальные мольные доли целевого компонента внутри частицы x_{d0} и вдали от частицы в сплошной фазе $x_{c\infty}$ считаются постоянными и заданными. Предполагается, что мольные доли целевого компонента на поверхности частицы во внутренней x_{df} и сплошной x_{cf} фазах зависят только от времени и связаны между собой равновесной зависимостью $x_{cf} = mx_{df}$, где коэффициент фазового равновесия m постоянен. Массоперенос в сплошной фазе описывается с помощью осредненного по поверхности частицы коэффициента массоотдачи β , который зависит от времени. Предполагается, что известна зависимость от времени средней по объему частицы мольной доли целевого компонента при условии, что все сопротивление массопереносу сосредоточено во внутренней фазе. Необходимо определить, как меняются со временем средняя по объему частицы мольная доля целевого компонента x_{dcp} при условии, что сопротивления массопереносу в обеих фазах соизмеримы.

3. Построение математической модели

Перейдем к формулировке задачи в безразмерном виде. Введем безразмерное время $t = D_d \tau / R^2$, где τ — размерное время; D_d — коэффициент диффузии в дисперсной фазе; R — характерный размер частицы. Пусть, например, $R = 3V/S$, где V и S — объем и площадь поверхности частицы. Для частицы сферической формы данный характерный размер совпадает с радиусом. Затем так определим безразмерную среднюю по объему частицы мольную долю целевого компонента Φ , чтобы ее начальное значение было равно нулю $\Phi = (x_{dcp} - x_{d0}) / (x_{c\infty}/m - x_{d0})$. При этом на поверхности частицы безразмерная мольная доля целевого компонента Φ_f будет определяться выражением $\Phi_f = (x_{df} - x_{d0}) / (x_{c\infty}/m - x_{d0})$.

Если известно решение Φ_0 поставленной нами задачи для случая, когда мольная доля целевого компонента на поверхности частицы считается постоянной, т.е. когда все сопро-

тивление массопереносу сосредоточено в дисперсной фазе, то можно воспользоваться формулой Дюамеля [1], предварительно осреднив ее по объему частицы:

$$\Phi = \int_0^t \Phi_f(\lambda)(\partial\Phi_0(t-\lambda)/\partial t)d\lambda. \quad (1)$$

Функция Φ_f здесь неизвестна. Если найти соотношение, позволяющие выразить Φ_f через искомую функцию Φ и подставить это выражение в формулу (1), то тогда последняя превратится в уравнение для определения функции Φ . Связь между величинами Φ_f и Φ можно получить, если учесть, что изменение средней мольной доли целевого компонента внутри частицы в единицу времени определяется мольным потоком целевого компонента, пересекающим межфазную поверхность. Если плотность мольного потока целевого компонента в сплошной фазе можно выразить с помощью осредненного по поверхности частицы коэффициента массоотдачи β , то упомянутое выше балансовое соотношение можно представить следующим образом:

$$C_d V \frac{d}{dt} x_{dcp} = C_c \beta m (x_{cc} / m - x_{df}) S,$$

где C_d, C_c — мольные концентрации в дисперсной и сплошной фазах соответственно. Или в безразмерном виде

$$\Phi_f = 1 - \gamma (d\Phi / dt), \quad (2)$$

где $\gamma = C_d D_d V / C_c \beta m R^2 S$. Очевидно, что γ является функцией времени.

После подстановки выражения (2) в формулу (1) и интегрирования одного из слагаемых в подынтегральном выражении получается уравнение для определения функции Φ :

$$\Phi = \Phi_0 - \int_0^t \gamma(\lambda) \frac{d\Phi(\lambda)}{d\lambda} \frac{\partial\Phi_0(t-\lambda)}{\partial t} d\lambda. \quad (3)$$

4. Численное решение

Рассмотрим метод численного решения интегро-дифференциального уравнения (3). Пусть безразмерное время меняется от 0 до tk . Разобьем этот отрезок на N равных частей длиной $\Delta\lambda$. Значение произвольной функции на j -м отрезке будем брать в точке $t_j = j \Delta\lambda$. Тогда для вычисления функции Φ в точках $t_j, j = 1, \dots, N$ на основе уравнения (3) предлагаются формулы

$$\Phi_1 = \Phi'_{01} \Delta\lambda / (1 + \gamma_1 \Phi'_{01}),$$

$$\Phi_2 = (\gamma_1 \Phi_1 (\Phi'_{01} - \Phi'_{02}) + \Phi_{02}) / (1 + \gamma_1 \Phi'_{01}), \quad (4)$$

$$\Phi_j = \left(\Phi_{0j} + \gamma_{j-1} \Phi_{j-1} \Phi'_{01} - \sum_{m=2}^{j-1} \gamma_{m-1} \Phi'_{0j-m+1} (\Phi_m - \Phi_{m-1}) - \gamma_1 \Phi_1 \Phi'_{0j} \right) / (1 + \gamma_{j-1} \Phi'_{01}), \quad j = 3, \dots, N.$$

Здесь $\Phi'_{0j} = (d\Phi_0/dt)_j$ — значение производной по времени от функции Φ_0 в точке t_j .

5. Пример численного решения задачи при малых значениях числа Пекле

В качестве примера при конкретной временной зависимости коэффициента массоотдачи в сплошной фазе рассмотрим задачу о массообмене на сферической частице, обтекаемой ползущим потоком. Пусть значение числа Пекле в сплошной фазе $Pe_c = Ud/D_c < 0,5$, где U — скорость движения частицы относительно сплошной фазы; d — диаметр частицы; D_c — коэффициент диффузии в сплошной фазе. Тогда для определения числа Шервуда в сплошной фазе $Sh_c = \beta d/D_c$ можно воспользоваться формулой [2] $Sh_c = 2 + [Pe_c^2/4 + 4D_d/\pi D_c t]^{0,5}$. В этом случае зависимость величины γ от времени имеет вид

$$\gamma = \frac{1}{3} \frac{C_d}{C_c m} \frac{D_d}{D_c} \left(1 + \left(\frac{Pe_c^2}{16} + \frac{D_d}{D_c} \frac{1}{\pi t} \right)^{0,5} \right)^{-1}.$$

Очевидно, что γ зависит также от параметров Pe_c , $k = D_d/D_c$, $\gamma c = C_d/C_c m$.

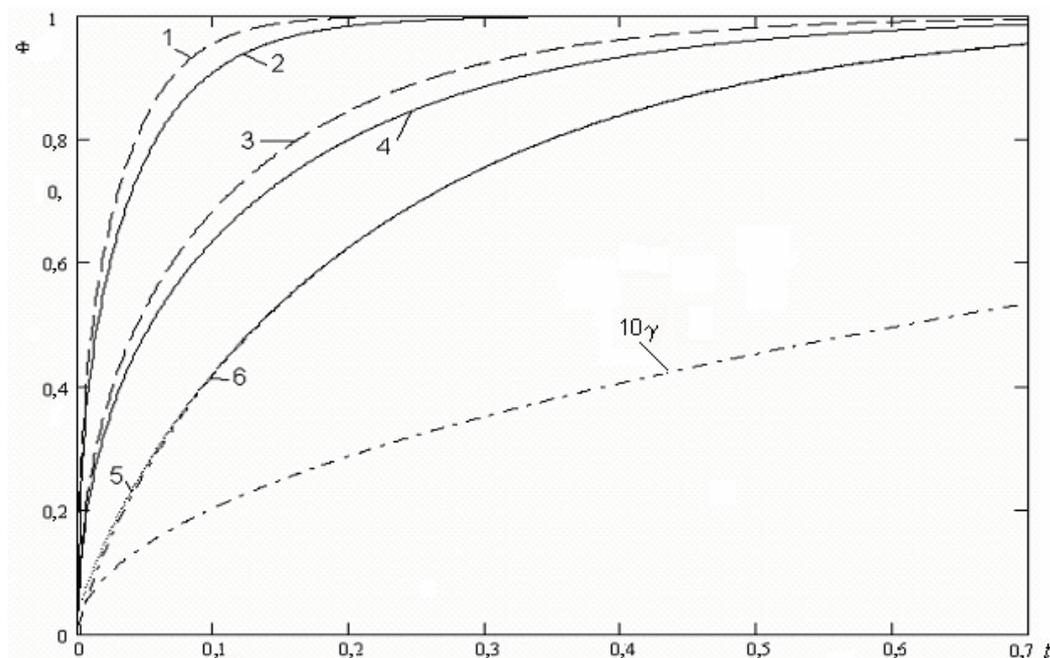
Если задача массопереноса внутри частицы при постоянном значении мольной доли целевого компонента на межфазной поверхности решается методом разделения переменных, то ее решение можно представить в виде

$$\Phi_0 = 1 - \sum_{i=1}^{\infty} A_i \exp(-\mu_i t), \quad (5)$$

где A_i и μ_i — постоянные коэффициенты, определяемые в рамках конкретной модели.

В качестве примеров можно взять модель Ньюмена [3], использующуюся при отсутствии движения внутри частицы, и модель Кронига — Бринк [4], которую применяют при наличии внутри частицы развитой циркуляции.

Для определенности рассмотрим случай абсорбции паров аммиака водой из газового пузырька. При этом $D_d = 17 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$, $D_c = 2,52 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$, $m = 0,44$, $C_d = 39 \text{ моль}/\text{м}^3$, $C_c = 55100 \text{ моль}/\text{м}^3$. Тогда $\gamma c = 0,0016$, $k = 6750$. Число Пекле в сплошной фазе принималось равным 0,2. Полученные для этого случая численным методом зависимости безразмерной средней мольной доли целевого компонента Φ от безразмерного времени t представлены на рисунке. Расчеты проводились с помощью программы Mathcad 11. Временной интервал от $t = 0$ до $t = 0,7$ разбивался на $N = 1000$ равных частей. В сумме выражения (5) при использовании модели Ньюмена бралось 100 слагаемых, а при использовании модели Кронига — Бринк — 7 слагаемых. Результаты расчетов представлены графиками 2 и 4 на рис.



Зависимость безразмерной средней мольной доли целевого компонента Φ (кривые 1-6) и параметра 10γ от безразмерного времени t . $Pe_c = 0,2$. Абсорбция паров аммиака водой из газового пузырька. 1 — решение внутренней задачи (модель Кронига — Бринк); 2 — соизмеримые фазовые сопротивления (модель Кронига — Бринк), $\gamma c = 0,0016$, $k = 6750$; 3 — решение внутренней задачи (модель Ньюмена); 4 — соизмеримые фазовые сопротивления (модель Ньюмена), $\gamma c = 0,0016$, $k = 6750$; 5 — аналитическое решение для модели Ньюмена при $\gamma = 0,086$; 6 — численное решение для модели Ньюмена при $\gamma = 0,086$

Для того, чтобы протестировать предложенный нами способ численного решения уравнения (3), сравнивались результаты численных расчетов с имеющимися аналитическими решениями [5,6] для случая, когда коэффициент теплоотдачи в сплошной фазе можно считать постоянным. Линии 5 и 6 на рис. представляют указанные зависимости при $\gamma = 0,086$, когда среду внутри частицы можно считать неподвижной. Эти линии заметно отличаются друг от друга только при малых значениях времени (меньше 5% при $t > 0,024$ и меньше 2% при $t > 0,046$). Аналогичные процедуры тестирования при различных значениях γ показали, что при уменьшении доли сопротивления массопереносу со стороны сплошной фазы погрешность численных расчетов уменьшается.

6. Аналитическое решение при малой доле сопротивления массопереносу со стороны сплошной фазы

Возьмем рассмотренный выше случай, когда число Пекле в сплошной фазе $Pe_c < 0,5$. Соотношение фазовых сопротивлений массопереносу определяется параметром γ . Когда $\gamma = 0$, все сопротивление массопереносу сосредоточено внутри частицы. При увеличении параметра γ возрастает доля сопротивления массопереносу со стороны сплошной фазы.

Предположим, что доля фазового сопротивления теплопереносу в сплошной фазе мала. В силу этого допущения во втором слагаемом выражения (3), которое учитывает вклад сплошной фазы, функцию $d\Phi/d\lambda$ заменим на $d\Phi_0/d\lambda$. Тогда уравнение (3) превратится в выражение для вычисления искомой функции $\Phi(t)$. Обозначим это ее приближение как $\Phi_1(t)$ и с учетом введенных обозначений представим в виде

$$\Phi_1 = \Phi_0 - \int_0^t \gamma(\lambda) \frac{d\Phi_0}{d\lambda} \frac{\partial \Phi_0(t-\lambda)}{\partial t} d\lambda.$$

После вычисления функции $\Phi_1(t)$ и подстановки ее производной вместо $d\Phi/d\lambda$ в выражение (3) можно получить второе приближение искомой функции $\Phi(t)$:

$$\Phi_2 = \Phi_0 - \int_0^t \gamma(\lambda) \frac{d\Phi_1}{d\lambda} \frac{\partial \Phi_0(t-\lambda)}{\partial t} d\lambda.$$

Этот итерационный процесс можно представить посредством общей формулы

$$\Phi_{j+1} = \Phi_0 - \int_0^t \gamma(\lambda) \frac{d\Phi_j}{d\lambda} \frac{\partial \Phi_0(t-\lambda)}{\partial t} d\lambda, \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (6)$$

Вычисления следует проводить до тех пор, пока последующие итерации не перестанут вносить заметный вклад в полученную функцию $\Phi_j(t)$.

Если решение внутренней задачи теплопереноса имеет вид (5), то в этом случае выражение (6) можно представить следующим образом:

$$\Phi_{j+1} = \Phi_0 - \sum_{i=1}^{\infty} A_i \mu_i e^{-\mu_i t} \int_0^t \gamma(\lambda) \frac{d\Phi_j}{d\lambda} e^{\lambda \mu_i} d\lambda, \quad j = 0, 1, 2, \dots$$

Для примера возьмем рассмотренный нами случай абсорбция паров аммиака водой из газового пузырька. При этом $\gamma_c = 0,0016$, $k = 6750$. А параметр γ , как это показано на рис. (линия 7), при изменении безразмерного времени от 0 до 0,7 меняется от 0 до 0,064.

Расчеты с помощью данного итерационного метода показывают достаточно быструю сходимость решения для всего интервала изменения времени, кроме начального участка, где сходимость ряда (5) наименьшая. Максимальное относительное отклонение первой итерационной функции $\Phi_1(t)$ от численно рассчитанной в соответствии с формулами (4) функции $\Phi(t)$ для всего интервала времени составляет 3% при $t = 0,007$, а для второй и третьей

итерационных функций не превышает 1,5%. При увеличении времени сходимость функций $\Phi_j(t)$ к значениям функции $\Phi(t)$ увеличивается. Так, уже при $t = 0,1$ указанные относительные отклонения соответственно составляют 0,72%, 0,64%, 0,54%.

7. Выводы

Предложен метод решения задачи массопереноса на частице дисперсной фазы при соизмеримых фазовых сопротивлениях, если известно решение внутренней задачи и средний по поверхности частицы коэффициент массоотдачи в сплошной фазе, который зависит от времени. При этом для определения изменения с течением времени средней мольной доли целевого компонента внутри частицы достаточно решить интегро-дифференциальное уравнение (3) от одной переменной. Предложен метод численного решения данного уравнения, который может быть реализован с помощью стандартной программы Mathcad 11. Данный метод протестирован для известных аналитических решений задач с постоянными коэффициентами массоотдачи в сплошной фазе и показал хорошую сходимость результатов, что позволяет рекомендовать его для расчета процессов массопереноса в дисперсных системах при зависящем от времени коэффициенте массоотдачи в сплошной фазе. При преобладании сопротивления массопереносу со стороны дисперсной фазы предложен аналитический приближенный итерационный метод решения уравнения (3), который показал достаточно быструю сходимость к численному решению. В качестве примера рассмотрена задача по абсорбции паров аммиака водой из газового пузырька, обтекаемого ползущим потоком.

1. Полянин А.Д. Справочник по линейным уравнениям математической физики. М.: Физматлит, 2001. 576 с.
2. Clift R., Grace J.R., Weber M.E. Bubbles, Drops and Particles. N.Y.: Academic Press, 1978. 380 p.
3. Newman A.B. // Trans. Inst. Chem. Engrs. 1931. V.27. №10. P.203-220.
4. Kronig R., Brink J.C. // Appl. Sci. Res. 1950. V.A2. N 2. P.142-148.
5. Лыков А.В. Теплообмен: Справочник. М.: Энергия, 1978. 480 с.
6. Муравьев А.Г., Протодяконов И.О., Размолодин Л.П., Коротков А.Л. // ЖПХ. 1985. Т.58. №8. С.1799-1803.