

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ЗНЕВОДНЕННЯ ТА ГРАНУЛЮВАННЯ У ПСЕВДОЗРІДЖЕНОМУ ШАРІ

Розглядаються підходи до математичного моделювання процесів зневоднення та гранулювання у псевдозрідженому шарі. Здійснена класифікація моделей за типами міжфазної взаємодії. Проаналізовано основні підходи до побудови математичних моделей зневоднення та гранулювання у псевдозрідженому шарі, основні припущення та особливості визначення технологічних параметрів, запропоновані різними авторами.

Ключові слова: псевдооживлений шар, обезвоживание, гранулирование, межфазное взаимодействие, математическое моделирование.

© Корнієнко Б. Я., 2016.

Постановка проблеми та аналіз попередніх досліджень. Гранулювання у псевдозрідженому шарі (особливо при отриманні багатоконпонентних мінеральних добрив) є складним фізико-хімічним процесом, інтенсивність перебігу якого залежить від багатьох факторів. До них слід віднести закономірності гідродинаміки псевдозрідженого шару, кінетику гранулоутворення, регулювання хімічного складу готового продукту, а також інтенсивність тепломасообмінних процесів.

У праці [1] розглянуто основні підходи до математичного моделювання процесів переносу у псевдозрідженому шарі, класифікацію моделей за типами міжфазної взаємодії, з урахуванням стохастичної і хаотичної гідродинаміки та класифікацію процесів в апараті з псевдозрідженим шаром за їх властивостями для гідродинамічних моделей.

Щоб створити ефективну систему управління виробництвом мінеральних добрив, **необхідно** проаналізувати математичні моделі зневоднення та гранулювання у псевдозрідженому шарі, визначити основні припущення та основні технологічні параметри.

Виклад основного матеріалу. Розглянемо математичні моделі процесів зневоднення та гранулювання у апаратах із псевдозрідженим шаром, необхідні для визначення основних параметрів, масштабування та керування процесами.

Дослідження здійснювали для псевдозрідженого шару з висхідним потоком теплоносія та з урахуванням турбулентності у псевдозрідженому шарі. Також використані моделі швидкого псевдозрідження.

Найбільш повно математичну модель можна охарактеризувати за кількістю фаз. Під терміном «фаза» розуміємо область, що містить тверду речовину або газ. Вони можуть відрізнятися за об'ємними частками твердої речовини, за зовнішнім виглядом і гідродинамічними характеристиками. Перші підходи до математичного моделювання апаратів для зневоднення та гранулювання у псевдозрідженому шарі ґрунтувалися на однофазних моделях. У такий спосіб намагалися встановити продуктивність апарата із псевдозрідженим шаром за розподілом тривалості перебування, тобто осьовим перемішуванням газів. Ця спроба виявилася невдалою, оскільки перетворення у псевдозрідженому шарі описувалися ще гірше, ніж у разі ідеального перемішування. Продуктивність апарата із псевдозрідженим шаром визначається контактом між газом та твердими частинками, з урахуванням наявності бульбашок.

Суттєвим є урахування особливостей гідродинаміки. Використовуючи моделі Девідсона та Харрісона для гетерогенних реакцій, пов'язані відмінностями між перетворенням однієї фази для апарата ідеального перемішування та двофазної моделі, можна отримати умовно повністю перемішану суцільну фазу [2]. З огляду на перебування процесів у дифузійній області, коли швидкість процесу визначається коефіцієнтом масопереносу, відмінності між цими двома моделями є незначними. Разом із цим переваги двофазних моделей є суттєвими. Саме відсутність урахування наявності газових бульбашок при однофазному підході призвела до появи двофазних моделей. Ці моделі містили всі важливі елементи, які були і в усіх більш пізніх моделях – існування різних фаз, розділення газових потоків, масообмін між фазами.

Проаналізуємо основні підходи до побудови таких моделей.

Модель Мая [3]. Основні припущення ранньої моделі В. Мая: розподіл потоку газу відбувається за двофазною теорією; передбачається, що потік бульбашок газу перебуває в загальному потоці; бульбашки газу не містять твердих тіл; потік газу в емульсійній фазі розганяється із загальним потоком; поруватість у фазі емульсії відповідає мінімальним умовам псевдозрідження. Коефіцієнт дисперсії і коефіцієнт масообміну встановлювали експериментально.

Модель Шелла [4–5] є напівемпіричною моделлю, заснованою на двофазній моделі Дж. Ван Дімтера [6], де зроблено такі припущення: газова фаза є вільною від твердих частинок, що перебувають у потоці; потік газу крізь фазу емульсії відсутній; змішування емульсії із газовою фазою моделюється за допомогою турбулентної дифузії. Використовуючи ці припущення, масові баланси за стаціонарних умов і з урахуванням кінетики першого порядку: $dc_b/dz + N_a(c_b - c_e) = 0$; $-d^2c_e/(N_a dz^2) - N_a(c_b - c_e) + N_c c_e = 0$, де c_b –

концентрація газової фази, моль · м⁻³; c_e – концентрація емульсійної фази, моль · м⁻³; N_a – безрозмірне число одиниць переносу; N_d – кількість блоків перемішування в емульсійній фазі; N_r – число одиниць реакції.

Модель Оркутта й Девідсона-Харрісона, запропонована Дж. Оркуттом [7] і відтворена Дж. Девідсоном і Д. Харрісоном [2], була однією з перших, де параметри пов'язані з динамікою газових бульбашок. Вона ґрунтується на таких припущеннях: розподіл газового потоку відбувається за двофазною теорією; потік газових бульбашок перебуває в спільному потоку; газові бульбашки не містять твердих тіл; структура потоку газу в щільній фазі – або повністю змішана, або витісняється; поруватість у фазі емульсії відповідає мінімальним умовам псевдозрідження; міжфазний масообмін складається з проникнення й дифузії. Коефіцієнт масо переносу $k_{be} = 0,75U_{mf} + 0,975g^{0,25}D_m^{0,5}d_{eq}^{-0,25}$, де U_{mf} – мінімальна швидкість псевдозрідження, м/с; D_m – коефіцієнт молекулярної дифузії, м²/с; d_{eq} – еквівалентний діаметр бульбашки, м. Пізніше цю модель було розширено Р. Дартеном [8] з урахуванням зростання бульбашок у шарі.

Модель Партріджа-Роу [9] принципово відрізняється від попередньої: потік газових бульбашок визначається двофазною теорією; потік газових бульбашок перебуває у спільному потоці; поруватість у спільному потоці відповідає мінімальним умовам псевдозрідження; але структура потоку газу в щільній фазі витісняється; поруватість у фазі емульсії відповідає мінімальним умовам псевдозрідження; міжфазний масоперенос визначається за формулою $Sh_c = k_{ce}d_c/D_m = 2 + 0,69Re_c^{0,5}Sc^{0,33}$, де k_{ce} – коефіцієнт масопереносу між хмарою та емульсією, м/с; d_c – діаметр хмари, м.

Модель Грейса [10], спирається на такі припущення: чистий вертикальний потік газу в щільну фазу відсутній; потік бульбашок газу імовірно витісняється; у застійних зонах щільної фази не відбувається змішування; поруватість у щільній фазі відповідає мінімальним умовам псевдозрідження; для обчислення масопереносу використовують напівемпіричні рівняння Грейса. Цю модель можна розглядати як спрощення моделі висхідного трифазного шару [11] і моделі протитечії зворотного перемішування [12]. Вважається, що фазою хмари в цій моделі було знехтувано. Припущення про відсутність вертикального потоку газу в щільній фазі, введене у [11], було прийнято. Модель Грейса припускає також наявність твердих тіл в межах фази бульбашок.

Модель Вертера [13–15]. Дж. Вертером запропоновані такі припущення: чистий вертикальний потік газу в щільну фазу відсутній; потік бульбашок газу імовірно витісняється; у застійних зонах щільної фази не відбувається змішування; поруватість в щільній фазі відповідає мінімальним умовам псевдозрідження. Цю модель засновано на більш ранній [16–18], де враховано зростання бульбашки. Коефіцієнт масопередачі вважається незалежним від осьових і радіальних позицій.

Модель Като-Вена [19] враховує зміни розміру бульбашок, що супроводжують процес міжфазного переносу. Основні припущення: чистий вертикальний потік газу в щільну фазу відсутній; псевдозріджений шар поділяється на n відсіків заввишки з діаметр бульбашки на відповідній висоті; кожен відсік складається з фази емульсії і хмари фази бульбашки, розмір якої розраховують за теорією Дж. Девідсона [20]: $V_c/V_b = (\alpha + 2)/(\alpha - 1)$, де V_c – об'єм хмари, м³; V_b – об'єм бульбашки, м³; α – частка об'єму, зайнята твердими частинками; газ повністю змішується на кожному етапі у кожному відсіку; зворотне перемішування між відсіками відсутнє; поруватість у фазі емульсії відповідає мінімальним умовам псевдозрідження; поруватість шару ϵ сталою і лінійно зростає до 1; масоперенос заснований на рекомендації Х.

Кобаяші $k_{be} = 0,11/d_b$, де d_b – діаметр бульбашки, м [21]; зміна розмірів бульбашки з висотою визначається за допомогою адаптації співвідношення Х. Кобаяші $d_b = 0,14\rho_p d_p xU/U_{mf} + d_{b,0}$, де ρ_p – густина матеріалу шару, кг/м³; d_p – діаметр частинок, м; U – поверхнева швидкість газу, м/с; $d_{b,0}$ – початковий діаметр бульбашки, м [22].

Модель Куній-Левенштіля [11]. Ця модель розглядає три окремі фази (бульбашки, хмара та емульсія) і два різні опори між ними. Зроблено такі припущення: чистий вертикальний потік газу у фазі емульсії відсутній; шар складається з трьох фаз: бульбашки, хмари та емульсії; розмір хмари розраховують за Дж. Девідсоном [20]; газ в бульбашці ймовірно витісняється; зворотне перемішування в емульсії відсутнє; поруватість в емульсії і хмарі відповідає мінімальним умовам псевдозрідження; масообмін між бульбашкою і хмарою є похідним від підходу Девідсона-Харрісона $k_{be} = 4,5U_{mf}/d_b + 5,85D_m^{0,5}g^{0,25}d_b^{-1,25}$ [2]; перенос із фази хмари до емульсії відбувається за теорією проникнення Хігбі:

$$k_{ce} = \frac{S_c}{V_b} \left(\frac{4D_{me}\epsilon_{mf}}{\pi} \frac{u_b}{d_b} \right)^{0,5} \cong 6,77 \left(\frac{D_m\epsilon_{mf}u_b}{d_b^3} \right)^{0,5} = 6,77 \left(\frac{0,711D_m\epsilon_{mf}\sqrt{gd_b}}{d_b^3} \right)^{0,5},$$

де k_{ce} – коефіцієнт масопереносу між хмарою та емульсією, м/с; ϵ_{mf} – поруватість шару за мінімального псевдозрідження; u_b – швидкість підйому бульбашки, м/с.

Висновки. За результатами досліджень зроблено такі узагальнення.

1. Модель Оркутта, що допускає поршневий режим потоку в обох фазах, дає непогані результати розподілу профілів концентрації завдяки врахуванню міжфазного масообміну, проте потребує уточнення параметрів для конкретних експериментальних даних.

2. Неврахування двофазної теорії є проблемою для моделі Партріджа-Роу. Прогнозована область фази бульбашок перевищує загальну площу шару. Спроби скоригувати газові потоки в фазах не долають проблему.

3. Модель Като-Вена задовільно визначає профіль розподілу концентрації в фазі бульбашок, але не може спрогнозувати концентрацію в емульсійній фазі й падіння концентрації біля поверхні шару.

4. Найкращу відповідність знайдено із застосуванням моделі Куній-Левеншпіля. За допомогою цієї моделі вірно спрогнозовано концентрацію в щільній фазі завдяки невисокій швидкості міжфазного масообміну. Встановлено, що загальний масообмін в моделі обмежений опором між хмарою та емульсією. Тому модель спрощено до двох фаз із об'єднанням фаз бульбашки і хмари.

Список використаної літератури

1. Корнієнко Б. Я. Особливості моделювання процесів переносу у дисперсних системах / Б. Я. Корнієнко // Вісн. Нац. техн. ун-ту України «Київ. політехн. ін.-т», сер. «Хім. інженерія, екологія та ресурсозбереження». – 2011. – № 2 (8). – С. 5–9.
2. Дэвидсон Дж. Псевдоожигение / Дж. Дэвидсон, Д. Харрисон. – М. : Химия, 1973. – 725 с.
3. May W. G. Fluidized-Bed Reactor Studies / W. G. May // Chem. eng. progress. – 1959. – 55, No. 12. – P. 49-56.
4. de Vries R. J. Design criteria and performance of the commercial reactor for the Shell chlorine process / R.J. de Vries, W.P.M. van Swaaij, C. Mantovani, A. Heijkoop // Proc. of 5th European Symp. on Chem. Reaction Eng., Amsterdam, Elsevier Publ. Corp., 1972. – P. B9–59–B9–69.
5. van Swaaij W. P. M. Investigation of Ozone decomposition in fluidized beds on the basis of a two-phase model / W. P. M. van Swaaij, F. J. Zuiderweg // 2nd Int. Symp. in Chem. Reaction Eng., Amsterdam, 1972. – P. B9-25.
6. van Deemter J. J. In fluidization / J. J. van Deemter, A. A. H. Drinkenburg (Ed.) // Netherlands University Press, Amsterdam, Netherlands, 1967. – P. 334–347.
7. Orcutt, J. C. Reaction time distribution in fluidized catalytic reactors / J. C. Orcutt, J. F. Davidson, R. L. Pigford // Chem. eng. progress symp. ser. – 1962. – Vol. 58, No. 38. – P. 1–15.
8. Darton R. C. A bubble growth theory of fluidized bed reactors / R.C. Darton // Transactions of the Institution of Chemical Engineers. – 1979. – Vol. 57. – P. 134–138.
9. Partridge B. A. Chemical reaction in a bubbling gas-fluidised bed / B.A. Partridge, P.N. Rowe // Transactions of the Institution of Chemical Engineers. – 1966. – Vol. 44. – P. 335–348.
10. Grace J. R. Fluidized beds as chemical reactors, in gas fluidization technology / J. R. Grace. – Chichester, New York, Brisbane, Toronto, Singapore : John Wiley & Sons, 1986. – 428 p.
11. Куний Д. Промышленное псевдоожигение / Д. Куний, О. Левеншпиль. – М. : Химия, 1976. – 448 с.
12. Fryer C. C. Experimental investigation of models for fluidized bed catalytic reactors / C. C. Fryer, O. E. Potter // AIChE Journal. – 1976. – Vol. 22. – P. 38–47.
13. Werther J. Influence of the distributor design on bubble characteristics, in fluidization / J. Werther // Davidson and Keairns (Eds.). – Cambridge, UK : Cambridge University Press, 1978. – P. 7–12.
14. Werther J. Mathematical modeling of fluidized bed reactors / J. Werther // Int. chem. eng. – 1980. – Vol. 20. – P. 529–541.
15. Werther J. Modeling and scale-up of industrial fluidized bed reactors / J. Werther // Chem. Eng. Sci. – 1980. – Vol. 35. – P. 372–379.
16. Werther J. Effect of gas distributor on the hydrodynamics of gas fluidized beds / J. Werther // German Chem. Eng. – 1978. – 1. – P. 166–174.
17. Werther J. Scale-up of fluidized bed reactors / J. Werther // German Chem. Eng. – 1978. – 1. – P. 243–251.
18. Werther J. Mathematische Modellierung von Wirbelschichtreaktoren / J. Werther // Chemie Ingenieur Technik. – 1978. – Vol. 50. – No. 11. – P. 850–860.
19. Kato K. Bubble assemblage model for fluidized bed catalytic reactors / K. Kato, C. Y. Wen // Chem. Eng. Sci. – 1969. – Vol. 24. – P. 1351–1369.
20. Davidson J. F. Symposium on Fluidization – Discussion / J. F. Davidson // Transactions of the Institution of Chemical Engineers. – 1961. – Vol. 39. – P. 230–232.
21. Kobayashi H. Fluidization models / H. Kobayashi, F. Arai, T. Sunawaga // Chem. Eng. Tokyo. – 1967. – Vol. 31. – P. 239.
22. Kobayashi H. Behavior of bubbles in a gas-solid fluidized bed / H. Kobayashi, F. Arai, T. Chiba // Chem. Eng. Tokyo. – 1965. – Vol. 29. – P. 858–863.

Надійшла до редакції 10.09.2015