

УДК 66.061.35

© Т. С. Камалиев, Д. В. Елизаров, В. В. Елизаров

КИНЕТИКА МАССОПЕРЕНОСА В ПОГРАНИЧНОМ СЛОЕ НА ВНУТРЕННЕЙ ПОВЕРХНОСТИ КАПЛИ В ПРОЦЕССЕ ЖИДКОСТНОЙ ЭКСТРАКЦИИ

Ключевые слова: капля, внутренняя задача, коэффициент массоотдачи.

Рассматривается математическая модель процесса жидкостной экстракции в пограничном слое на внутренней поверхности капли. Произведен расчет коэффициентов массоотдачи по предложенной модели, построены графики зависимостей, проведено сравнение расчетных данных с результатами экспериментов при экстракции в системах 1,3-гептиловый спирт – соляная кислота – вода, вода – уксусная кислота – бензол и амиловый спирт – фенол – вода.

Keywords: drop, inner layer problem, mass transfer coefficient.

It is considered a mathematical model of the process liquid-liquid extraction on the inner boundary layer of the drop. On the basis of the proposed model calculated mass transfer coefficients in systems 1,3-heptanol – hydrochloric acid – water, water – acetic acid – benzene and amyl alcohol – phenol – water, these calculated data were used to build charts and compare with experimental results.

Введение

Описание процессов массоотдачи в сплошной и дисперсной фазах при свободном движении капель имеет ряд различий. Они вызваны тем, что внутри каждой из фаз имеются различные гидродинамические условия массоотдачи: сплошная фаза турбулируется за счет движения дисперсных частиц, а циркуляция жидкости внутри капель обусловлена трением между каплями и сплошной фазой, возникающим в результате относительного движения фаз [1].

При движении капли жидкости в ламинарном потоке сплошной среды на внутренней и внешней сторонах ее поверхности образуются диффузионные пограничные слои. Жидкость в этих пограничных слоях движется по направлению из области передней критической точки к области задней критической точки и затем уносится от поверхности в ядро сплошной фазы, образуя внешний диффузионный след, и в приосевую область капли, образуя внутренний диффузионный след.

Внутренняя задача конвективного массообмена существенно отличается от внешней структурой внутренних потоков, линий тока, образующихся при обтекании капли сплошной средой.

Во внешней задаче все линии тока разомкнуты. При этом линии, расположенные вдоль оси движения капли, приносят из ядра сплошной фазы необходимую концентрацию, проходят вдоль поверхности капли, на которой происходит поглощение извлекаемого компонента и обеднение раствора, и далее вновь уходят в ядро потока сплошной среды.

Во внутренней задаче все линии тока замкнуты, поэтому извлекаемый компонент, проходя вблизи границы раздела фаз, частично поглощается и попадает далее в ядро капли по линиям тока, расположенным вблизи оси потока. В

ядре капли происходит перемешивание фазы с необходимой концентрацией. Линии тока, выходя из приосевой области, начинают вновь проходить вблизи поверхности капли [2].

Известен целый ряд моделей, описывающих массоотдачу с различными допущениями, однако, не во всех случаях удается провести аналитический расчет коэффициентов массоотдачи. Поэтому математическое описание строится, в основном, на эмпирических зависимостях.

Наиболее перспективным является путь описания массоотдачи в двухфазных системах с подвижной границей раздела, основанный на представлениях теории диффузионного пограничного слоя [3].

Перенос импульса и массы в пограничном слое является нестационарным [4]. Рассмотрим задачу нестационарного массопереноса в пограничном слое внутри капли, пренебрегая конвективным переносом импульса и массы в пограничном слое.

Теоретическая часть

Уравнения переноса импульса и массы в пограничном слое на внутренней поверхности капли в подвижной системе координат записываются в виде:

$$\omega \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{\eta}} + u_{\Gamma P} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{\xi}} = \nu_D \left(\frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{\xi}^2} + \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{\eta}^2} \right), \quad (1)$$

$$\omega \frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{\eta}} + u_{\Gamma P} \frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{\xi}} = D_D \left(\frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial \bar{\xi}^2} + \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial \bar{\eta}^2} \right), \quad (2)$$

где $\bar{\xi} = \bar{x} + u_{\Gamma P} \tau$, $\bar{\eta} = \bar{y} \pm \omega \tau$ – продольная и поперечная координаты пограничного слоя в подвижной системе координат; $dx/d\tau = u_{\Gamma P}$, $dy/d\tau = \pm \omega$ – изменение продольной $\bar{x}$ и поперечной $\bar{y}$ координат пограничного слоя во времени;

Введем безразмерные переменные:

$$u = \frac{u_{ГР} - \bar{u}}{u_{ГР}}, \quad c = \frac{c_{ГР} - \bar{c}}{c_{ГР} - c_0}, \quad \eta = \frac{\bar{\eta}}{\delta}, \quad \xi = \frac{\bar{\xi}}{l},$$

где $u_{ГР} = u_{\infty} \left(1 - \sqrt{\xi_k / \xi_{сф}}\right)$ – скорость движения жидкости по границе раздела фаз; $u_{\infty} = Re_c \nu / d_3$ – скорость поступательного движения в сплошной среде; $\xi_k, \xi_{сф}$ – коэффициенты сопротивления капли и твердой частицы; $c_{ГР}, c_0$ – концентрация распределяемого компонента на границе раздела фаз и в ядре капли; δ – толщина динамического пограничного слоя внутри капли; $l = \pi d_3 / 2$ – линейный размер капли; Re_c – число Рейнольдса в сплошной фазе; d_3 – эквивалентный диаметр капли.

Уравнения (1) и (2) в безразмерных переменных принимают вид:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} + \frac{\bar{\delta}^2}{l^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} = \pm Re_{\omega} \frac{\partial u}{\partial \eta} + \frac{\bar{\delta}}{l} Re_{ГР} \frac{\partial u}{\partial \xi}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial \eta^2} + \frac{\bar{\delta}^2}{l^2} \frac{\partial^2 c}{\partial \xi^2} = \pm Pe_{\omega} \frac{\partial c}{\partial \eta} + \frac{\bar{\delta}_D}{l} Pe_{ГР} \frac{\partial c}{\partial \xi}, \quad (4)$$

где $Re_{\omega} = \omega \bar{\delta} / \nu_D$, $Re_{ГР} = u_{ГР} \bar{\delta} / \nu_D$,
 $Pe_{\omega} = \omega \bar{\delta}_D / D_D$, $Pe_{ГР} = u_{ГР} \bar{\delta}_D / D_D$,
 $\bar{\delta}_D = \bar{\delta} \cdot Sc_D^{-1/2}$ – толщина диффузионного слоя.

Граничные условия для уравнений (3) и (4):

при $\eta = 0$: $u = 0$, $c = 0$; $\eta = 1$: $\frac{\partial u}{\partial \eta} = \frac{\partial c}{\partial \eta} = 0$;

$\xi = 0$: $u = \frac{u_{ГР} - \bar{u}_0}{u_{ГР}}$, $c = 1$; $\xi = 1$: $\frac{\partial u}{\partial \xi} = \frac{\partial c}{\partial \xi} = 0$. (5)

Здесь $\bar{u}_0$ – средняя скорость в ядре капли, которая определяется из уравнения расхода в поперечном сечении капли от ее границы до центра R :

$$\int_0^{\bar{\delta}} \bar{u} d\bar{\eta} = \int_0^R \bar{u}_0 d\bar{\eta} = \bar{u}_0 (R - \bar{\delta}),$$

$$\int_0^{\bar{\delta}} u_{ГР} \left(1 - \sum_{m=1}^{\infty} u_m(\xi) \sin \frac{m\pi \bar{\eta}}{2\bar{\delta}}\right) d\bar{\eta} = \bar{u}_0 (R - \bar{\delta}),$$

$$u_{ГР} \left(\bar{\delta} - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2\bar{\delta}}{m\pi} u_m(\xi)\right) = \bar{u}_0 (R - \bar{\delta}).$$

Откуда:

$$\bar{u}_0 = \frac{u_{ГР} \bar{\delta} \left(1 - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2}{m\pi} u_m(\xi)\right)}{(R - \bar{\delta})}, \quad (6)$$

где $R = d_3 / 2$ – радиус капли.

Толщина динамического пограничного слоя определяется при $\eta = 1$ из условия $\bar{u} = \bar{u}_0$:

$$\bar{u}_0 = u_{ГР} (1 - u), \quad u = 1 - \frac{\bar{u}_0}{u_{ГР}}.$$

Решение уравнения переноса импульса.

Решение уравнения (3) имеет вид [5]:

$$u = \sum_{k=1}^{\infty} u_k(\xi) \sin \frac{k\pi}{2} \eta, \quad (7)$$

где $k = 1, 3, 5, \dots, 2n + 1, \dots$; $u_k(\xi)$ – неизвестные функции от ξ .

Решение (7) удовлетворяет граничным условиям (5) по координате η . Функции $u_k(\xi)$ должны удовлетворять уравнению (3) и граничным условиям (5) по координате ξ . Подставляя решение

(7) в уравнение (3), умножая его на $\sin \frac{m\pi}{2} \eta$, где $m = 1, 3, 5, \dots, 2n + 1, \dots$, интегрируя по координате η от 0 до 1 и учитывая при этом следующие условия:

$$\int_0^1 \sin \frac{k\pi}{2} \eta \sin \frac{m\pi}{2} \eta d\eta = \begin{cases} 0 & \text{при } m \neq k \\ \frac{1}{2} & \text{при } m = k \end{cases},$$

$$\int_0^1 \cos \frac{k\pi}{2} \eta \sin \frac{m\pi}{2} \eta d\eta = \frac{2}{\pi} \frac{1}{m + k(-1)^{\frac{m+k+2}{2}}}. \quad (8)$$

получим систему уравнений для определения искомых функций $u_m(\xi)$ ($m = 1, 3, 5, \dots, 2n + 1, \dots$):

$$u_m'' = \frac{l^2}{\bar{\delta}^2} u_m(\xi) \left(\frac{m\pi}{2}\right)^2 + \frac{l}{\bar{\delta}} Re_{ГР} u_m'(\xi) +$$

$$+ 2Re_{\omega} \frac{l^2}{\bar{\delta}^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k u_k(\xi)}{m + k(-1)^{\frac{m+k+2}{2}}} \quad (9)$$

Здесь $u_m'' = \frac{d^2 u_m}{d\xi^2}$.

Для определения толщины пограничного слоя δ используем значение скорости на границе пограничного слоя при $\eta = 1$:

$$u(\xi, \eta)|_{\eta=1} = \sum_{m=1}^{\infty} u_m(\xi) \sin \frac{m\pi}{2} = 1 - \frac{\bar{u}_0}{u_{ГР}}, \quad (10)$$

где $m = 1, 3, 5, \dots, 2n + 1, \dots$

Зависимость толщины пограничного слоя от ξ имеет вид:

$$\delta(\xi) = a \xi^b, \quad (11)$$

где $a = \text{const}$, $b = \text{const}$ ($b = 0.5$).

В соответствии с решением (6) при $\xi = 0$ $\delta = 0$, получим $u_0 = 0$ и граничное условие (5) для скорости $u = 1$.

Граничные условия (5) по координате ξ :

$$\text{при } \xi = 0: u_m|_{\xi=0} = 1, \quad (12)$$

$$\text{при } \xi = 1: u_m'|_{\xi=1} = 0, \quad (13)$$

где $m = 1, 3, 5, \dots, 2n + 1, \dots$

Таким образом, определение толщины слоя δ сводится к нахождению параметра a в уравнении (11). Параметр a определяется из условия (10) в результате минимизации интегральной невязки:

$$\int_0^1 \left| 1 - \frac{\bar{u}_0}{u_{ГР}} - \sum_{m=1}^{\infty} u_m(\xi) \sin \frac{m\pi}{2} \right| d\xi \rightarrow \min. \quad (14)$$

Среднее значение толщины слоя $\bar{\delta}$ определяется интегрированием по координате ξ пограничного слоя:

$$\bar{\delta} = \int_0^1 \delta(\xi) d\xi.$$

Решение уравнения переноса массы.

Решение уравнения переноса массы (4) в пограничном слое внутри капли записывается в виде:

$$c = \sum_{k=1}^{\infty} c_k(\xi) \sin \frac{k\pi}{2} \eta, \quad (15)$$

где $k = 1, 3, 5, \dots, 2n + 1, \dots$; $c_k(\xi)$ – неизвестные функции от ξ , удовлетворяющие граничным условиям (5).

Поступая аналогично, как и при решении уравнения переноса импульса приходим к системе обыкновенных дифференциальных уравнений (16) относительно искомых функций $c_m(\xi)$.

$$c_m''(\xi) = \frac{l^2}{\bar{\delta}_D^2} \left(\frac{m\pi}{2} \right)^2 c_m(\xi) + \frac{l}{\bar{\delta}_D} Pe_{ГР} c_m(\xi) + \frac{2l^2}{\bar{\delta}_D^2} Pe_{\omega} \sum_{k=1}^{\infty} c_m(\xi) \frac{k}{m+k} \frac{(-1)^{\frac{m+k+2}{2}}}{2} \quad (16)$$

где $m = 1, 3, 5, \dots, 2n + 1, \dots$

Граничные условия для $c_m(\xi)$:

$$\text{при } \xi = 0: c_m(0) = \frac{4}{\pi m}, \quad (17)$$

$$\text{при } \xi = 1: c_m'(\xi) \Big|_{\xi=1} = 0. \quad (18)$$

Системы уравнений (9), (16) с граничными условиями (12), (13) и (29), (10) решаются методом последовательных приближений.

Коэффициент массоотдачи $\beta_D(\xi)$ в диффузионном пограничном слое дисперсной фазы определяется из условия [6]:

$$\beta_D(\xi) = D \frac{\pi}{2\bar{\delta}_D} \sum_{m=1}^{\infty} m c_m(\xi), \quad (19)$$

где $\bar{\delta}_D(\xi) = \bar{\delta}(\xi) Sc_D^{-1/2}$ – толщина диффузионного пограничного слоя на внутренней поверхности капли; $Sc_D = \nu_D / D_D$ – число Шмидта в капле; ν_D – коэффициент кинематической вязкости дисперсной фазы; D_D – коэффициент молекулярной диффузии в дисперсной фазе.

Среднее значение коэффициента массоотдачи β_D определяется интегрированием по координате ξ пограничного слоя:

$$\beta_D = \int_0^1 \beta(\xi) d\xi. \quad (20)$$

Результаты

Для проверки адекватности полученной модели рассматривается решение внутренней стационарной задачи в момент времени $\tau = 0$, полученные расчетные значения коэффициента массоотдачи β_D сравниваются с экспериментальными данными.

На рис. 1–6 приведены зависимости коэффициента массоотдачи в дисперсной фазе β_D , скорости движения жидкости по границе раздела фаз $u_{ГР}$ и средней скорости в ядре капли $\bar{u}_0$ от числа Рейнольдса сплошной среды Re_c . Полученные результаты сравнивались с экспериментальными данными [7, 8, 9]. Эксперименты [7] проводились в колоннах диаметром $D_a = 100$ мм, с высотой рабочей части, равной $H = 1060$ мм. Экспериментальные данные [8] получены при экстракции в распылительной колонне $D_a = 30$ мм и высотой $H = 650$ мм системы вода (спл. фаза) – уксусная кислота – бензол. Эксперименты [9] проводились в распылительной колонне $D_a = 24$ мм и $H = 65$ мм: система амиловый спирт – фенол – вода (дисп. фаза), $D_D = 0.84 \cdot 10^{-9}$ м²/с.

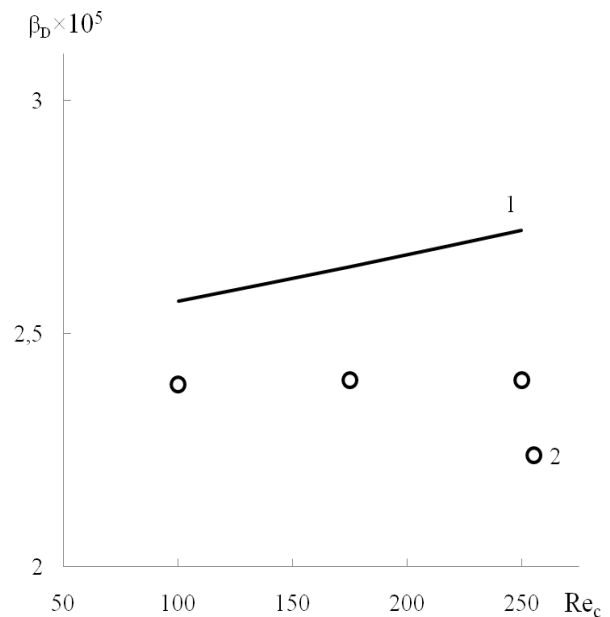


Рис. 1 – Зависимость коэффициента массоотдачи β_D (м/с) в дисперсной фазе от числа Рейнольдса Re_c при экстракции в системе 1,3-гептиловый спирт – соляная кислота – вода (спл. фаза) в колонне диаметром $D_a = 100$ мм и высотой $H = 1060$ мм: 1 – расчет по предложенной модели; 2 – экспериментальные данные [7]

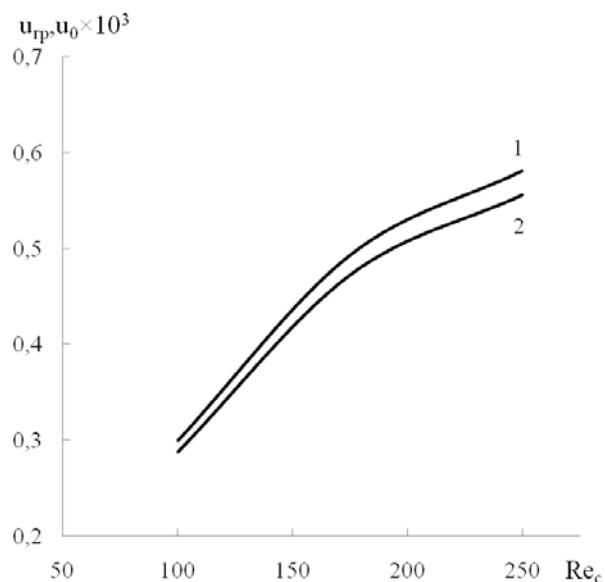


Рис. 2 – Зависимость граничной скорости $u_{гр}$ (м/с) и скорости в ядре капли $\bar{u}_0$ (м/с) от числа Рейнольдса Re_c при экстракции в системе 1,3-гептиловый спирт – соляная кислота – вода (спл. фаза) в колонне диаметром $D_a = 100$ мм и высотой $H = 1060$ мм: 1 – скорость движения жидкости по границе раздела фаз $u_{гр}$; 2 средняя скорость в ядре капли $\bar{u}_0$

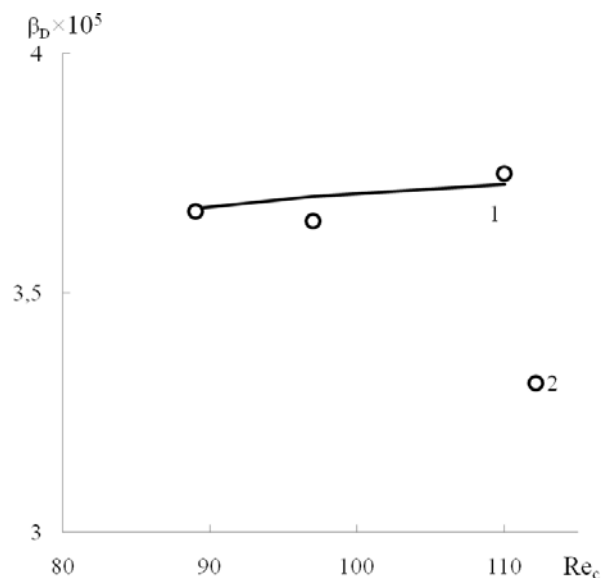


Рис. 3 – Зависимость коэффициента массоотдачи β_D (м/с) в дисперсной фазе от числа Рейнольдса Re_c при экстракции в системе вода (спл. фаза) – уксусная кислота – бензол в распылительной колонне диаметром $D_a = 30$ мм и высотой $H = 650$ мм: 1 – расчет по предложенной модели; 2 – экспериментальные данные [8]

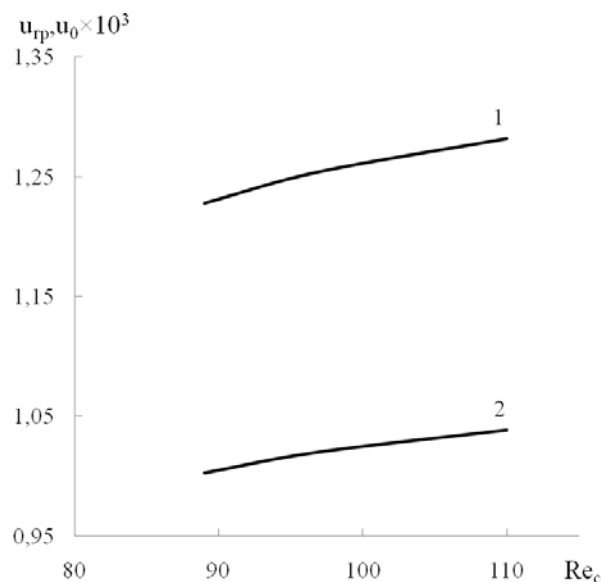


Рис. 4 – Зависимость граничной скорости $u_{гр}$ (м/с) и скорости в ядре капли $\bar{u}_0$ (м/с) от числа Рейнольдса Re_c при экстракции в системе вода (спл. фаза) – уксусная кислота – бензол в распылительной колонне диаметром $D_a = 30$ мм и высотой $H = 650$ мм: 1 – скорость движения жидкости по границе раздела фаз $u_{гр}$; 2 средняя скорость в ядре капли $\bar{u}_0$

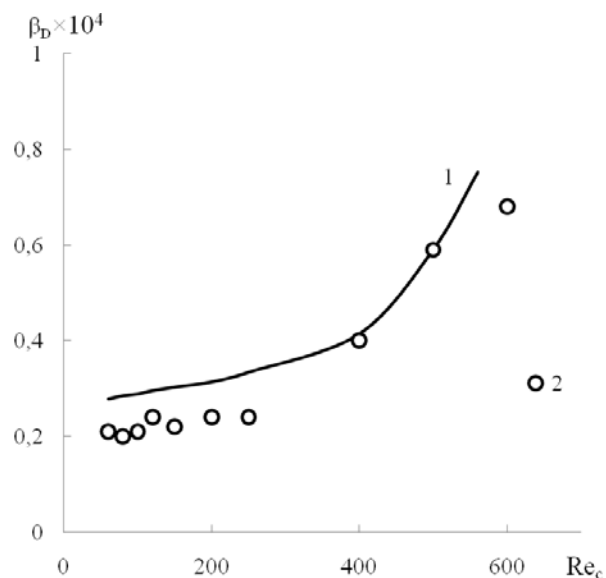


Рис. 5 – Зависимость коэффициента массоотдачи β_D (м/с) в дисперсной фазе от числа Рейнольдса Re_c при экстракции в системе амиловый спирт – фенол – вода (дисп. фаза) в распылительной колонне диаметром $D_a = 24$ мм и высотой $H = 65$ мм: 1 – расчет по предложенной модели; 2 – экспериментальные данные [9]

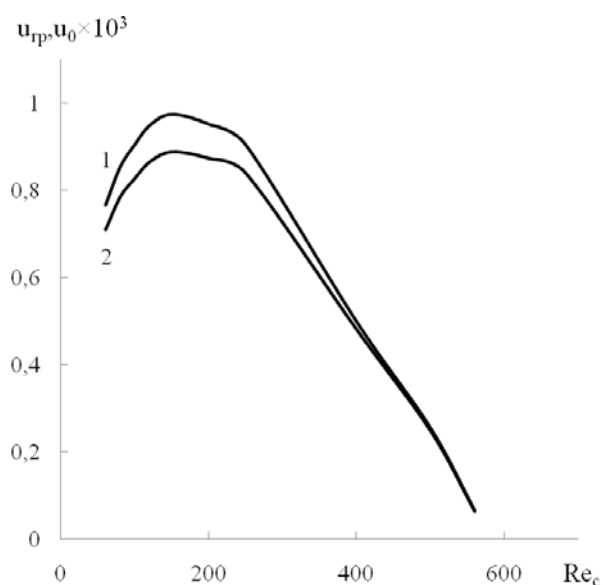


Рис. 6 – Зависимость граничной скорости $u_{гр}$ (м/с) и скорости в ядре капли $\bar{u}_0$ (м/с) от числа Рейнольдса Re_c при экстракции в системе амиловый спирт – фенол – вода (дисп. фаза) в распылительной колонне диаметром $D_a = 24$ мм и высотой $H = 65$ мм: 1 – скорость движения жидкости по границе раздела фаз $u_{гр}$; 2 – средняя скорость в ядре капли $\bar{u}_0$

Из графиков видно, что полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными. Погрешность расчетов не превышает 15 %, что подтверждает достоверность предложенной математической модели.

Результаты работы получены в рамках федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы (соглашение №14.В37.21.0591).

Литература

1. Б. И. Броунштейн, А. С. Железняк, *Физико-химические основы жидкостной экстракции*. Химия, Москва, 1966, 317 с.
2. А. Д. Полянин, *ТОХТ*, 18, 3, 284–296 (1984).
3. Ю. П. Гупало, А. Д. Полянин, Ю. С. Рязанцев, *Массотеплообмен реагирующих частиц с потоком*. Наука, Москва, 1985, 336 с.
4. Т. С. Камалиев, Д. В. Елизаров, *Вестник Казан. технол. ун-та*, 14, 9, 127–131 (2011).
5. С. Г. Дьяконов, В. В. Елизаров, Д. В. Елизаров, Д. А. Кириллов, *ТОХТ*, 45, 4, 400–408 (2011).
6. Д. В. Елизаров, В. В. Елизаров, Т. С. Камалиев, С. Г. Дьяконов, *ЖПХ*, 86, 2, 246–252 (2013).
7. А. М. Розен, А. И. Беззубова, *ТОХТ*, 2, 6, 850–862 (1968).
8. А. С. Железняк, Б. И. Броунштейн, *ЖПХ*, 36, 11, 2437–2445 (1963).
9. Н. И. Каденская, А. С. Железняк, Б. И. Броунштейн, *Процессы хим. технологии*, 215–218 (1965).

© Т. С. Камалиев – аспирант кафедры процессов и аппаратов химических технологий ФГБОУ ВПО «КНИТУ», timur_kamaliyev@mail.ru; Д. В. Елизаров – канд. техн. наук, доцент кафедры автоматизации технологических процессов и производств НХТИ ФГБОУ ВПО «КНИТУ», В. В. Елизаров – д-р техн. наук, профессор кафедры автоматизации технологических процессов и производств НХТИ ФГБОУ ВПО «КНИТУ»