

Введение Исследование динамики капель, движущихся в поле силы тяжести в вязких несжимаемых жидкостях, исследовалось в ряде работ [1, 2]. Как известно [3, 4], капли условно подразделяют на три группы: мелкие (), средние (), крупные (). Мелкие капли находятся в режиме ползучего течения, средние движутся в ламинарном потоке, а крупные капли находятся в турбулентном режиме движения. Здесь – число Рейнольдса для сплошной фазы; – критическое число Рейнольдса, варьируется в пределах от 100 до 300 и зависит от физико-химических свойств системы. Движение капель имеет ряд особенностей по сравнению с движением твердых тел. На подвижной поверхности раздела фаз касательная составляющая скорости отлична от нуля, вследствие чего внутри капли возникает циркуляция среды, что способствует лучшему обтеканию, и отрыв потока начинается при более высоких значениях числа , чем для твердой сферы. Вследствие этого скорость движения капель больше скорости твердой частицы того же диаметра и одинаковой плотности. Также следует учитывать, что при определенных значениях критериев Рейнольдса и Вебера капли начинают деформироваться и колебаться, из-за чего происходит резкое увеличение коэффициента сопротивления по сравнению с твердой сферой при одинаковых числах Рейнольдса. Аналитический расчет коэффициентов массоотдачи удастся лишь в немногих случаях. Математическое описание массообменных процессов основывается, главным образом, на эмпирических зависимостях. Экспериментальные исследования характеристик диффузионного пограничного слоя методом голографической интерферометрии в случае массоотдачи мелкодисперсной твердой фазой турбулентной жидкости позволили установить наличие автомодельности профиля концентрации при различных гидродинамических режимах. Кроме того, в структуре диффузионного пограничного слоя выявлены область с логарифмическим профилем концентрации и область диффузионного подслоя; пограничный слой на поверхности частицы в потоках с внешней турбулентностью сочетает в себе черты характерные для ламинарного и турбулентного слоев, поэтому он может быть классифицирован как псевдоламинарный [5]. Диффузия молекул с поверхности капли в ядро потока сплошной среды при уменьшении частицы и диффузия вещества из сплошной фазы к поверхности частицы при росте приводит к перемещению границы пограничного слоя. Координаты пограничного слоя изменяются во времени пропорционально скорости изменения размера капли. Перенос импульса и массы в пограничном слое является нестационарным [6]. Рассмотрим задачу нестационарного массопереноса в пограничном слое на капле со стороны сплошной фазы, пренебрегая сопротивлением внутри капли и конвективным переносом импульса и массы в пограничном слое. Теоретическая часть Уравнения нестационарного движения и переноса массы в пограничном слое на поверхности капли принимают вид: , (1) , (2) Увеличение и уменьшение размера капли по

диффузионному механизму начинается с начальной величины. Перенос вещества с поверхности капли приводит к увеличению, а перенос к поверхности к уменьшению размера. Увеличение и уменьшение размера сферической капли можно представить в виде изменения во времени продольной и поперечной координат пограничного слоя, причем: , . Введем подвижную систему координат: , . После преобразования переменных уравнение (1) примет вид: , (3) , Преобразуя аналогично уравнение (2) и подставляя значения выражений (3) в уравнения (1) и (2), получим: , (4) . (5) Введем безразмерные переменные: , , , , где U – скорость обтекания капли; C_s – концентрация вещества на поверхности капли и в ядре потока; δ – толщина динамического пограничного слоя; R – линейный размер капли; d – эквивалентный диаметр капли. Введение подвижной системы координат позволило перейти от трехмерной задачи к двумерной в координатах r, z и привело к появлению в уравнениях переноса (1) и (2) параметров U, C_s, δ, R, d . Уравнения (1) и (2) в безразмерных переменных принимают вид: , (6) , (7) где U, C_s, δ, R, d – толщина диффузионного слоя. Граничные условия для уравнений (6) и (7): при $r=0$: $C=C_s$; $U=0$; $\delta=0$; $R=0$; $d=0$. (8) Скорость движения жидкости по границе раздела фаз определяется по выражению: , где α – коэффициенты сопротивления капли и твердой частицы. Скорость изменения размеров капли по диффузионному механизму записывается в виде уравнения [7]: , (9) где α_s – поверхностный и объемный коэффициенты формы капли (для сферических $\alpha_s = 1$); ρ – плотность частицы; β – среднее значение коэффициента массоотдачи в сплошной фазе. Интегрируя уравнение (9), с начальным условием при $t=0$, получим размер капли в момент времени t : , (10) где C_s – концентрация экстрагируемого вещества в сплошной фазе; C_i – концентрация вещества на границе раздела фаз, величина постоянная при заданной температуре и давлении. Толщина динамического пограничного слоя определяется из условия при $z=0$. Решение уравнений переноса импульса. Решение уравнения (6) будем искать в виде разложения по ортогональным функциям: , (11) где f_n – неизвестные функции от r . Решение (11) удовлетворяет граничным условиям (8) по координате r . Функции должны удовлетворять уравнению (6) и граничным условиям (8) по координате z . Для определения подставим решение (11) в уравнение (6): (12) Умножим левую и правую части уравнения (12) на f_n и проинтегрируем его по r от 0 до 1, учитывая при этом следующие условия: , . (13) После преобразований получим систему уравнений для определения искомых функций f_n : (14) Здесь α_n . Таким образом, произведен переход от уравнения (6) в частных производных к системе обыкновенных дифференциальных уравнений (14) относительно f_n . Рассмотрим граничные условия (8) по координате z : . (15) Умножим левую и правую части уравнений (15) на f_n и проинтегрируем его по r от 0 до 1. В результате, получим, при $z=0$: , . (16) С граничным условием для f_n при $z=0$ проведем аналогичные преобразования: , (17) , (18) где Ввиду того, что f_n и g_n являются функциями от r , система уравнений (14) с граничными условиями (16) и (18) решается методом

последовательных приближений. Правую часть уравнения (14) обозначим через тогда: (19) где – переменные интегрирования. Константы интегрирования и находятся из граничных условий (16), (18). Общая схема решения следующая: задается первое приближение искомых функций, например, $u_0 = 0$. Затем определяем значения констант C_1 и C_2 , используя граничные условия (16) и (18). После этого из решения уравнения (19) получаем следующее приближение и так далее до достижения сходимости метода. Для определения толщины пограничного слоя используем значение скорости на границе пограничного слоя при $y = \delta$, (20) где δ – толщина пограничного слоя. Зависимость толщины пограничного слоя от x принимаем в виде степенной функции: $\delta = C_3 x^m$, (21) где C_3 и m – неизвестные функции от x . Таким образом, определение толщины слоя сводится к нахождению параметра m в уравнении (21). Параметр определяется из условия (20) в результате минимизации интегральной невязки: $J = \int_0^1 (u - u_0)^2 dx$. (22) Среднее значение толщины слоя определялось как средне-интегральная величина: $\bar{\delta} = \frac{1}{L} \int_0^L \delta dx$. Учитывая размерное выражение (21), уравнение (14) можно записать в виде: $\frac{d}{dx} \left(\frac{1}{\delta} \frac{d\delta}{dx} \right) = \frac{1}{\delta^3} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{\delta} \frac{d\delta}{dx} \right)$, где δ – толщина пограничного слоя. Решение уравнений переноса массы. Решение уравнения переноса массы (7) записывается в виде: $C_4 = \frac{1}{\delta} \frac{d\delta}{dx}$, (23) где C_4 – неизвестные функции от x , удовлетворяющие граничным условиям (8). Для определения подставим разложение (23) в (7): (24) Умножим левую и правую части уравнения (24) на δ^3 и проинтегрируем по x от 0 до 1. (25) С учетом выражений (13) уравнение (25) запишется следующим образом: (26) где C_5 и C_6 – неизвестные функции от x . Также как и при решении уравнения переноса импульса, от уравнения в частных производных (7) перешли к системе обыкновенных дифференциальных уравнений (26) относительно искомых функций C_4 и C_5 . Используя (8) получим граничные условия для C_4 и C_5 : (27) Умножим левую и правую части уравнения (27) на δ^3 и проинтегрируем по x от 0 до 1. (28) (29) Для граничного условия при $x = 1$ проведем аналогичные преобразования: $C_4 = 0$, (30) Решение системы уравнений (26) с граничными условиями (29) и (30) проводится методом последовательных приближений, аналогично уравнению (14). Толщина диффузионного пограничного слоя на поверхности капли жидкости определяется по толщине динамического в виде [1]: $\delta = \frac{1}{\sqrt{Pe}}$, где Pe – число Шмидта. При решении уравнений переноса импульса и массы в разложении (11) и (23) удерживалось конечное число членов ряда $(n=1)$, два $(n=2)$ и три $(n=3)$. Проведенные расчеты скорости и концентрации в области пограничного слоя показали, что решение уравнений (6), (7) в виде суммы трех членов ряда $(n=3)$ в разложениях (11) и (23) практически повторяет решение, представленное суммой двух членов ряда $(n=2)$. Тем не менее, для повышения точности получаемых результатов, предлагается представлять решение уравнений (6), (7) в виде: $u = \sum_{n=1}^N u_n$, где u_n – неизвестные функции, определяемые из уравнений (14), (26). Коэффициент массоотдачи рассчитывается по величине потока вещества в пограничном слое на поверхности капли и находится по следующему выражению [8]: (31) Среднее значение коэффициента массоотдачи определяется как среднеинтегральное по поверхности капли: $\bar{Sh} = \frac{1}{L} \int_0^L Sh dx$. (32) Результаты Для сравнения расчетных значений

коэффициента массоотдачи (32) с экспериментальными данными рассматривается стационарная задача: решение уравнений проводится в момент времени, скорость роста. Рис. 1 – Зависимость коэффициентов массоотдачи (м/с) в сплошной фазе от числа Рейнольдса при экстракции в системе вода (дисп. фаза) – бензойная кислота – бензол в распылительной колонне диаметром мм и высотой мм: 1 – расчет по предложенной модели; 2 – экспериментальные данные [9] На рис. 1, 2, 3 приведены результаты расчета коэффициентов массоотдачи, полученные по предложенной методике и сравнение их значений с экспериментальными данными [9, 10]. Экспериментальные данные в работе [9] получены в распылительной колонне мм и мм при экстракции бензойной кислоты из бензола водой. В работе [10] эксперимент проводился в стеклянной колонне диаметром мм и высотой мм при экстракции в системе вода – бензойная кислота – бензол и вода – анилин – ксилол. Диаметр капель изменяется в интервале мм. Рис. 2 – Зависимость безразмерного комплекса от числа Рейнольдса в сплошной фазе при экстракции в системе вода (спл. фаза) – бензойная кислота – бензол в стеклянной колонне диаметром мм и высотой мм: 1 – расчет по предложенной модели; 2 – экспериментальные данные [10] Рис. 3 – Зависимость безразмерного комплекса от числа Рейнольдса в сплошной фазе при экстракции в системе вода (спл. фаза) – анилин – ксилол в стеклянной колонне диаметром мм и высотой мм: 1 – расчет по предложенной модели; 2 – экспериментальные данные [10] Сравнение результатов расчета коэффициентов массоотдачи по предложенному методу показывает удовлетворительное согласование с результатами экспериментальных исследований. Приведенные результаты математического моделирования и их сравнение с экспериментальными данными на примере процессов экстракции в системах вода – бензойная кислота – бензол и вода – анилин – ксилол указывают на достоверность полученной математической модели.