

ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССОВ ТЕЧЕНИЯ ЧЕРЕЗ ПОРИСТУЮ СРЕДУ ПРИ АДСОРБЦИИ НА ОСНОВАНИИ МОДЕЛИ ЗАПЫЛЕННОГО ГАЗА

А. Айбатова

*Научный руководители профессор кафедры ТХНГ ИПР, доктор ф.-м. наук С.Н. Харламов,
Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия*

В газовой промышленности ежегодно значительная доля расходов идет на предварительную подготовку газа до его закачки в магистральный газопровод. Поэтому к составу природного газа, отправляемого на дальнейшую переработку или транспортировку, предъявляются серьезные требования. В ходе развития газодобывающей промышленности возникла проблема отложения газовых гидратов, осложняющая технологию добычи, переработки, хранения и транспортировки газов. [2].

Присутствие жидкости в газе, помимо опасности выпадения гидратов, чревато проявлениями коррозии стенок трубопровода или арматуры, а наличие в газе кислых компонентов, таких как CO_2 и H_2S только ускоряют процесс разрушения металла. Поэтому для обеспечения подачи соответствующего требованиям нормативных документов газа в систему магистральных трубопроводов требуется проводить предварительную обработку газа.

В этом аспекте подготовка газа методом адсорбционной осушки является одним из самых эффективных методов. Данный процесс обеспечивает надежную очистку от кислых компонентов, а так же качественную осушку с достижением точки росы -90°C . [4].

Адсорбция — это поглощение вещества на поверхности раздела фаз. Исходя из этого в роли адсорбентов выступают вещества с большой удельной поверхностью, такие как активные угли и минеральные адсорбенты: силикагель, а так же цеолиты.

Для описания процесса переноса газа в пористой структуре адсорбента существует ряд подходов, один из которых применение модели запыленного газа. В рамках этих представлений пористая среда рассматривается как один из компонентов газовой смеси который состоит из фиксированных в пространстве гигантских молекул, равномерно распределенных в пространстве. Если в газе имеется градиент давления, то для обеспечения неподвижности частиц пыли к ним необходимо приложить некоторую внешнюю силу. Для математической формулировки модели не нужно знать истинную природу этой внешней силы; в экспериментах внешняя сила обычно бывает обусловлена каким-либо креплением, обеспечивающим неподвижность пористого тела.

В основе теории лежит утверждение о том, что перенос газа в пористом теле (или в капилляре) осуществляется следующими независимыми механизмами:

1. Свободно-молекулярное, или кнудсеновское, течение, реализующееся при столь малой плотности газа, что частотой столкновений между молекулами можно пренебречь по сравнению с частотой их столкновений с поверхностями каналов пористого тела или капилляра. [1].
2. Вязкое течение, при котором газ течет как сплошная среда под действием градиента давления и межмолекулярные столкновения преобладают над столкновениями молекул с поверхностью. Этот механизм иногда называют также конвективным или переносом газа как целого .
3. Диффузия в режиме сплошной среды, когда отдельные компоненты смеси перемещаются относительно друг друга под действием градиента концентрации (обычная диффузия), градиента температуры (термодиффузия) или внешних сил (силовая диффузия). Здесь снова межмолекулярные столкновения происходят чаще, чем столкновения молекул с поверхностью.
4. Поверхностная диффузия, при которой молекулы газа перемещаются вдоль поверхности твердого тела, не покидая адсорбционного слоя.

Каждому из указанных выше механизмов переноса соответствует свой кинетический коэффициент: коэффициент кнудсеновской диффузии D_{ki} (для i -го компонента), коэффициент динамической вязкости μ , обычный коэффициент D_{ij} взаимной диффузии под действием градиента концентрации и внешних сил (для бинарной смеси i -го и j -го компонентов), связанное с D_{ij} термодиффузионное отношение a_{ij} для термодиффузии в режиме сплошной среды и коэффициент поверхностной диффузии D_{si} . Механизмы переноса могут встречаться в различных комбинациях, и задача теории – отыскать унифицированный способ описания течения при одновременном действии различных механизмов путем использования математического аппарата, развитого для описания каждого из них в отдельности.

В предлагаемом формализме структурные особенности среды учитываются в выражениях для кинетических коэффициентов или простых коэффициентов пропорциональности. Трем основным механизмам переноса соответствуют три параметра, характеризующие свойства среды: параметр кнудсеновского течения K_0 , параметр вязкого течения V_0 и параметр пористости — извилистости ε/q для объемной диффузии.

Для реального пористого тела эти соотношения как правило, неизвестны, поэтому все три параметра для заданной геометрии тела не рассчитываются, а извлекаются обычно из экспериментальных данных. Также из экспериментальных данных обычно находят и коэффициент поверхностной диффузии D_{si} .

Уравнения диффузии для многокомпонентной смеси выглядят проще, если при их формулировке выражать не плотности потока компонента через градиенты концентраций всех компонентов смеси, а градиент концентрации компонента i через плотности потоков всех компонентов. При такой записи уравнения для смеси N компонентов выглядят следующим образом [4]:

$$-d_i = \sum_{j=1}^N (x_j J_{iD} - x_i J_{jD}) / n \quad (1)$$

где градиентный член d_i равен

$$d_i = \nabla x_i + x_i \frac{\bar{m} - m_i}{\bar{m}} \nabla \ln p - \frac{x_i}{p} \left(n F_i - \frac{m_i}{\bar{m}} \sum_{j=1}^N n_j F_j \right) + \sum_{j=1}^N x_i x_j a_{ij} \nabla T \quad (2)$$

средняя молекулярная масса смеси определяется равенством

$$\bar{m} = \sum_{j=1}^N x_j m_j \quad (3)$$

F_i - внешняя сила, действующая на молекулы i -го компонента. Четыре слагаемых в правой части равенства (2) описывают соответственно обычную диффузию, бародиффузию, силовую диффузию и термодиффузию.

При расчете вязкого течения будем придерживаться идеи, что если газ движется без ускорения, то полная сила, действующая на произвольный элемент его объема, должна быть равна нулю, так что сила вязкого сопротивления полностью компенсируется силой, обусловленной перепадом давления на концах этого элемента.

$$J_{visc} = \frac{-n B_o}{\mu} \nabla p \quad (4)$$

где J_{visc} - плотность вязкого потока в единицах молекула/(см²·с), n - число молекул в единице объема, B_o - параметр вязкого течения (постоянная, характеризующая геометрию канала и выраженная в единицах см²), μ - коэффициент динамической вязкости газа (г/(см·с)), p - давление (г/(см·см²)).

Если имеются внешние силы, то уравнение их баланса :

$$n_d F_d + \sum_{j=1}^N n_j F_j = \nabla p \quad (5)$$

где сумма берется только по компонентам газа и под F подразумеваются все силы, включая удерживающие частицы в равновесии. При наличии внешних сил должно быть изменено и уравнение вязкого течения

$$J_{visc} = \frac{-n B_o}{\mu} \left(\nabla p - \sum_{i=1}^N n_i F_i \right) \quad (6)$$

В итоге уравнение переноса, после преобразований в (2), для модели запыленного газа выглядит следующим образом:

$$c \sum_{j=1}^N \frac{n_j}{n D_{ij}} \left(\frac{J_i}{n_i} - \frac{J_j}{n_j} \right) + \frac{1}{D_{ik}} \left(\frac{J_i}{n_i} + \frac{B_o}{\mu} \left(\nabla p - \sum_{j=1}^N n_j F_j \right) \right) = -\nabla \ln \frac{n_i}{n} - \nabla \ln p + \frac{F_i}{k_B T} - \frac{1}{n'} \left(\sum_{j=1}^N n_j (a'_{ij})_{tr} + n_d (a'_{id})_{tr} \right) \nabla \ln T \quad (7)$$

Последнее слагаемое в левой части равенства (7) описывает вклад вязкого течения в полную скорость перемещения компонентов. Первые три слагаемых правой части равенства (7) описывают обычную диффузию, бародиффузию и силовую диффузию соответственно. Слагаемое, содержащее $(a'_{ij})_{tr}$, ответственно за термодиффузию, осложненную присутствием частиц пыли, а слагаемое, содержащее $(a'_{id})_{tr}$, учитывает термическую транспирацию (или термомолекулярную разность давлений), осложненную термодиффузией истинных молекулярных компонентов. [3].

В итоге для полного изучения переноса многокомпонентной смеси через пористую структуру необходимо составить систему из N дифференциальных уравнений типа и задать начальные условия. Граничные условия: скорость газа на поверхности каналов адсорбционных элементов равно нулю. Все N написанных уравнений независимы, поскольку уравнение для частиц пыли исключено.

Для описания процесса течения газа в адсорбере необходимо:

1. Составить на основе формулы (7) систему уравнений для основных компонентов смеси
2. Экспериментальным или приближенным расчетным путем определить параметры, характеризующие пористость-извилистость структуры адсорбента, оценить структурные и гидродинамические параметры пористого тела.
3. Рассмотреть влияние каждого слагаемого на результаты расчетов.

Литература

1. В. Э. Борзых, Б. В. Семенов, С. Н. Соколки. Организация вычислительного эксперимента для задач моделирования отработанных газов через пористую структуру выпускной системы автомобиля // Материалы

- всероссийской научно-технической конференции. – 2009.
2. Артур Л. Коуль, Фред С. Ризенфельд. Очистка газа. - М.: Государственное научно-техническое издательство нефтяной и горно-топливной литературы, 1962. – 48 с.
 3. Мейсон Э., Малинаускас А. Перенос в пористых средах: модель запыленного газа. — М.: Мир, 1986. 200 с.
 4. Серпионова Е. Н. Промышленная адсорбция газов и паров. Изд. 2-е переработ, и доп. Учеб. пособие для студентов химико-технологических специальностей вузов. М., «Высш. школа», 1969.

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ГИДРОДИНАМИКИ И ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В ВЯЗКИХ СРЕДАХ

А.В. Аксёнов, Р.В. Шмурыгин

*Научный руководитель, д. физ-мат.н., профессор кафедры ТХНГ С.Н. Харламов
Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия*

Как известно гидродинамика является разделом гидравлики, в котором изучаются законы движения несжимаемой жидкости и её взаимодействие с неподвижными и подвижными поверхностями. В рамках гидродинамики рассматривается переход от реальной среды, состоящей из разнообразия отдельных атомов или молекул, к абстрактной сплошной среде, для которой и составляется уравнения движения для дальнейших исследований.

Для описания движения вязкой ньютоновской жидкости используются уравнения Навье-Стокса (1), которые представляют собой систему дифференциальных уравнений в частных производных:

$$\begin{aligned} \frac{dV_x}{dt} &= g_x - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 V_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V_x}{\partial z^2} \right); \\ \frac{dV_y}{dt} &= g_y - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 V_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V_y}{\partial z^2} \right); \\ \frac{dV_z}{dt} &= g_z - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \left(\frac{\partial^2 V_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V_z}{\partial z^2} \right), \end{aligned}$$

где V_x, V_y, V_z – проекции вектора скорости; g_x, g_y, g_z – проекции ускорения массовых сил; p – гидродинамическое давление; ρ – плотность жидкости; ν – коэффициент кинематической вязкости [2].

Для исследования течения вязкой жидкости в дополнение к системе (1) используется уравнение неразрывности потока:

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \nabla(\rho V) = 0. \quad (2)$$

В проекциях на оси и с учетом несжимаемости жидкости ($\rho = const$) уравнение (2) примет следующий вид:

$$\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial V_z}{\partial z} = 0. \quad (3)$$

Физический смысл уравнения (3) заключается в том, что сумма изменений проекций скоростей в направлении соответствующих координатных осей равна нулю. Это означает, что объем несжимаемой жидкости, втекающей в данную область, мысленно выделенную в исследуемом потоке, равен объему жидкости, вытекающей из нее.

Для расчёта конкретной задачи по исследованию течения вязкой жидкости необходимо совместно решать систему дифференциальных уравнений (1) и (3). Решения данной системы будут иметь произвольные функции, для определения которых необходимо задаться начальными и граничными условиями. Начальные условия задаются при изучении неустановившегося движения жидкости (при таком движении скорость и давление в каждой точке изменяются с течением времени). В таком случае должны быть заданы распределение скоростей и давления жидкости в любой определенный момент времени.

В качестве граничного условия может быть принято условие прилипания частиц вязкой жидкости к поверхности твердого тела, которое имеет следующий вид:

$$V_c = V_T \quad (4)$$

где V_c – скорость частицы жидкости; V_T – скорость стенки в точке контакта с частицей.

Для описания тепловых процессов, в которых осуществляется перенос, как массы, так и энергии используются такие выражения, как уравнение Фурье - Кирхгофа, уравнения Навье - Стокса и уравнения неразрывности и уравнения переноса массы и энергии.

Явление теплообмена прослеживается в телах или системах тел с различной температурой. Наблюдения за процессами теплообмена дали понять, что теплообмен является сложным явлением, которое можно расчленить на ряд простых. Теплота в жидкостях может передаваться теплопроводностью и конвективным переносом. Явление теплопроводности заключается в переносе теплоты структурными частицами вещества – молекулами, атомами, электронами – в процессе их теплового движения. В жидкостях перенос теплоты происходит благодаря передаче теплового движения молекул и атомов соседним частицам вещества.

В жидкостях также наблюдается явление конвективного переноса, которое представляет собой