

База данных раздела 1.2. Математическое моделирование процессов прогрева, испарения и распыления очищаемой воды с содержанием твердых нерастворимых примесей

Для наполнения базы данных с характеристиками процессов прогрева, испарения и распыления очищаемой воды с содержанием твердых нерастворимых примесей использовалась разработанная математическая модель, приведенная ниже.

Процесс прогрева капли воды с твердыми нерастворимыми примесями описывался нестационарным дифференциальным уравнением теплопроводности в сферической системе координат:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \left(\frac{\partial^2 T}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial T}{\partial R} \right) + P(t, R), \quad (1.2.4.1)$$

где $\kappa = k/(c\rho)$, k , c и ρ – температуропроводность, теплопроводность, удельная теплоемкость и плотность воды с твердыми нерастворимыми примесями, R – расстояние от центра капли, T – температура, t – время, $P(t, R)$ – дополнительный источник тепла (например, радиационный тепловой поток и химические реакции при взаимодействии активных металлов и воды).

Начальные и граничные условия:

$$T(t = 0) = T_{d0}(R), \quad (1.2.4.2)$$

$$h(T_{\text{eff}} - T_s) = k \left. \frac{\partial T}{\partial R} \right|_{R=R_d-0}, \quad (1.2.4.3)$$

где $h = \text{const}$ в течение короткого временного шага – коэффициент теплоотдачи, T_s – температура поверхности капли,

$$T_{\text{eff}} = T_g + \frac{\rho L \dot{R}_{d(e)}}{h}, \quad \dot{R}_{d(e)} = \frac{|\dot{m}_d|}{4\pi \rho R_d^2}, \quad L - \text{теплота парообразования} \quad (1.2.4.4)$$

воды.

Для оценки массовой скорости испарения $\dot{m}_d$ и коэффициента теплопередачи h использовались выражения:

$$\left| \dot{m}_d \right| = 2\pi R_d D_v \rho_{\text{total}} \ln(1 + B_M), \quad (1.2.4.5)$$

где D_v – коэффициент диффузии паров воды, ρ_{total} – плотность парогазовой смеси, B_M – массовое число Сполдинга.

Уравнение диффузии компонентов капли в сферической системе координат:

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 Y_i}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial Y_i}{\partial R} \right), \quad (1.2.4.6)$$

где D – коэффициент диффузии твердых нерастворимых частиц в капле воды, Y_i – относительная массовая концентрация i -го компонента, i – номер компонента ($i=1$ – вода, $i=2$ – твердые нерастворимые частицы).

Начальные и граничные условия:

$$Y_i(t = 0) = Y_{i0}(R), \quad (1.2.4.7)$$

$$\alpha(\varepsilon_i - Y_{is}) = -D \frac{\partial Y_i}{\partial R} \Big|_{R=R_d-0}, \alpha = \frac{|\dot{m}_d|}{4\pi\rho R_d^2}, \varepsilon_i = \frac{Y_{vis}}{\sum_i Y_{vis}}, \quad (1.2.4.8)$$

где Y_{is} – относительная массовая концентрация i -го компонента на поверхности капли воды с твердыми нерастворимыми примесями, Y_{vis} – относительная массовая концентрация паров i -го компонента.

Парциальное давление паров воды p_v определялось через закон Рауля:

$$p_v = X_{ls} p_v^{\text{sat}}, \quad (1.2.4.9)$$

где X_{ls} – относительная молярная масса воды на поверхности капли, p_v^{sat} – давление насыщенных паров воды.

Эффективные значения теплофизических свойств капли воды с твердыми нерастворимыми частицами определялись по следующим выражениям:

$$\rho = \left[\sum_{i=1}^{i=2} (Y_i / \rho_i) \right]^{-1}, c = \sum_{i=1}^{i=2} (Y_i c_i), k = \left[\sum_{i=1}^{i=2} (Y_i k_{li}^{-2}) \right]^{-1/2}, \quad (1.2.4.10)$$

где ρ_i , c_i и k_i – плотность, удельная теплоемкость и теплопроводность компонентов капли воды с твердыми нерастворимыми частицами.

Также здесь следует записать уравнения переноса (Навье-Стокса) и химической кинетики ($2\text{Me} + 2\text{H}_2\text{O} = 2\text{MeOH} + \text{H}_2$).

Рассматриваемая система уравнений решается аналитически, а результаты аналитического решения внедряются в численный код на каждом коротком шаге по времени. Использовался постоянный шаг по времени 0.000001 с. Характеристики ЭВМ: процессор Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2697 v3 @ 2.60GHz 2.60GHz (количество процессоров – 2), установленная ОЗУ 128 ГБ. Время вычислений от 1 до 5 минут.

При спрейнном распылении рассмотренная модель неоднородной капли инжектируется в область высоких температур. Предполагается, что поток газа находится в установившемся состоянии. Газовая фаза рассматривается в эйлеровой системе координат и описывается стационарными усредненными по Рейнольдсу уравнениями Навье – Стокса (RANS) и замкнутыми уравнениями модели турбулентности k-ε (1.2.4.11)–(1.2.4.13):

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (1.2.4.11)$$

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\vec{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (1.2.4.12)$$

$$\nabla \cdot (\vec{u}(\rho H + p)) = -\nabla \cdot \left(\sum_j h_j J_j \right) \quad (1.2.4.13)$$

Уравнение переноса турбулентной кинетической энергии k_t определяется как (1.2.4.14):

$$\text{div}(\rho k_t \vec{u}) = \text{div} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \text{grad} k_t \right] + G_k - \rho \varepsilon \quad (1.2.4.14)$$

Уравнение переноса вязкой диссипации ε определяется как (1.2.4.15):

$$\text{div}(\rho \varepsilon \vec{u}) = \text{div} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \text{grad} \varepsilon \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k_t} G_k - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k_t} \quad (1.2.4.15)$$

Уравнение переноса компонентов газа определяется как (1.2.4.16):

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u} Y) = -\nabla \cdot \vec{J} + R_{ch} \quad (1.2.4.16)$$

Уравнение баланса сил для неоднородной капли в газе имеет вид:

$$\frac{du_p}{dt} = F_D(u - u_p) + \frac{g(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + F \quad (1.2.4.17)$$

Коэффициент сопротивления F_D для сферической неоднородной капли определяется как:

$$F_D = \frac{18\mu}{\rho_p d_p^2} \frac{C_D Re}{24} \quad (1.2.4.18)$$

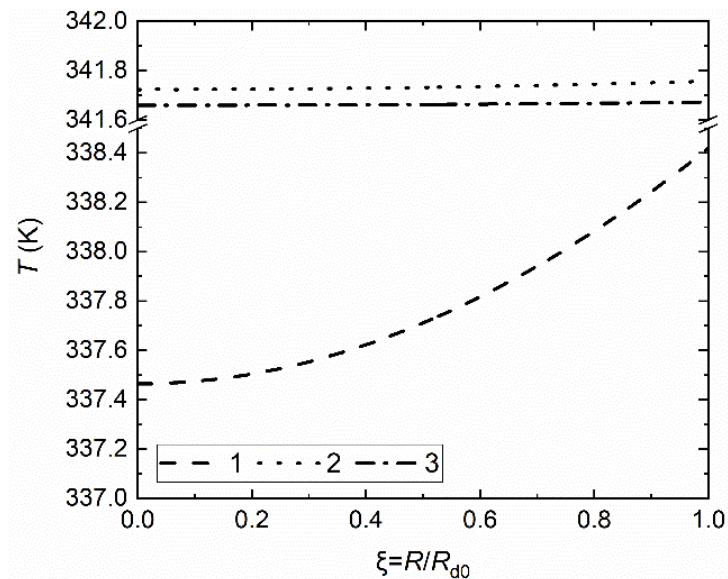
Число Рейнольдса Re определяется как:

$$Re = \frac{\rho d_p |u_p - u|}{\mu} \quad (1.2.4.19)$$

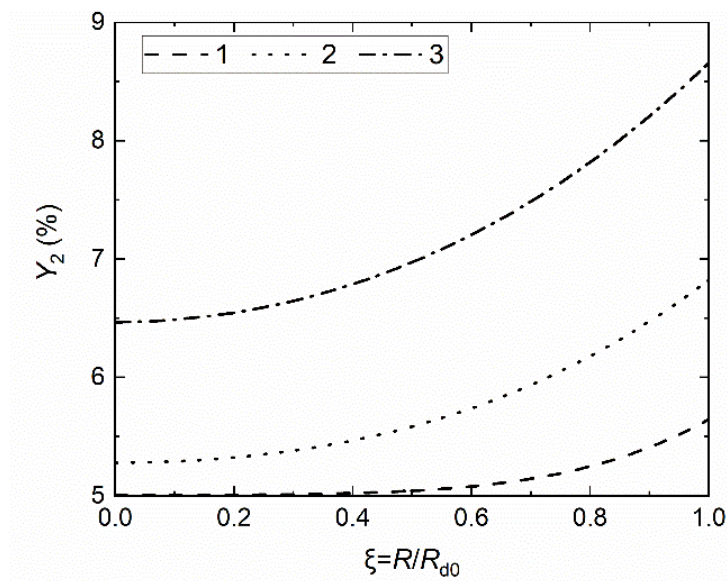
Основная задача при апробации разработанных моделей состояла в определении границ их применимости, учете группы основных процессов, факторов и эффектов, обеспечении удовлетворительного согласия прогнозируемых характеристик с экспериментальными данными, а также последующем переходе на существенно большие диапазоны варьирования параметров по сравнению с экспериментами с целью приближения условий протекания процессов в нагревательных камерах термической и огневой очистки жидкостей.

На рис. 1 представлены типичные распределения температуры и концентраций твердых примесей в разные моменты времени ($t=0.04$ с; 0.08 с; 0.12 с) при начальной относительной массовой концентрации 5%, $T_g=800$ К и $R_{d0}=50$ мкм. Отметим, что наиболее высокие температуры внутри капель наблюдаются вблизи их поверхности, а минимальные в центре на каждом шаге по времени. Аналогичные заключения можно сделать и для распределений концентраций твердых примесей, их максимальная доля сосредоточена вблизи поверхности капель, а минимальная – в центре. При этом видно, что градиенты температур внутри капель не высокие (менее 0.02 К/мкм), что говорит о возможности упростить вычисления за счет исключения из системы уравнений зависимостей температуры от координаты. Однако, этим нельзя

будет пренебречь при решении уравнения диффузии для получения распределений концентраций примесей.



a



б

Рисунок 1 –Типичные распределения температуры (*a*) и концентраций твердых примесей (*б*) в разные моменты времени ($t=0.04$ с (1); 0.08 с (2); 0.12 с (3)) при начальной относительной массовой концентрации 5%, $T_g=800$ К и $R_{d0}=50$ мкм.

На рис. 2 представлена типичная динамика изменения размеров капель воды с твердыми нерастворимыми примесями при начальной относительной массовой концентрации 5% (1) и 8% (2) в виде $(R_d/R_{d0})^2$ и их средней температуры в виде T_d/T_{d0} при $T_g=800$ К и $R_{d0}=50$ мкм. Хорошо видно, что чем выше относительная массовая концентрация твёрдых примесей в каплях воды, тем интенсивнее протекают процессы их прогрева и испарения. Так, например, при увеличении относительной начальной массовой концентрации твёрдых частиц в каплях воды с 5 до 8%, время их испарения снижается более чем на 25%. Это связано главным образом с ростом значения эффективной температуропроводности гетерогенной капли и, соответственно, увеличением коэффициента массоотдачи. Отметим, что конечные результаты моделирования соответствует моменту самоконсервации капель вследствие образования оболочки из твердых примесей вокруг капель воды. Экспериментальные данные при тех же условиях показаны маркерами (3 (5%), 4 (8%)). Эксперименты по регистрации условий и характеристик процессов прогрева и испарения капель воды с твердыми нерастворимыми примесями проведены с использованием схемы нагрева в потоке разогретого воздуха, аналогично применяемой в (доминирует конвективный теплообмен). Такой вариант схемы нагрева капель наиболее приближен к реальным условиям в системах термической и огневой очистки жидкостей от нерегламентированных примесей. Регистрация характеристик процессов прогрева и испарения капель воды с твердыми нерастворимыми примесями проводилась с помощью высокоскоростной видеокамеры Phantom Miro C110 (915 кадров в секунду при разрешении 1280 на 1024 пикселей). Полученные по результатам экспериментов видеокadres обрабатывались в программном обеспечении Phantom Camera Control. Регистрировались динамика изменения размеров и температуры капель во времени. Температура капель измерялась с помощью термопары (тип К). Систематические погрешности регистрации размеров и температуры капель не превышали 0.05 мм и 3 К соответственно. При сравнении результатов моделирования и опытов следует отметить более

высокие скорости прогрева и испарения неоднородных капель в экспериментах (до 20-30%). Это связано главным образом с отсутствием в модели рециркуляции конвективных течений, а также седиментации и агломерации твердых примесей.

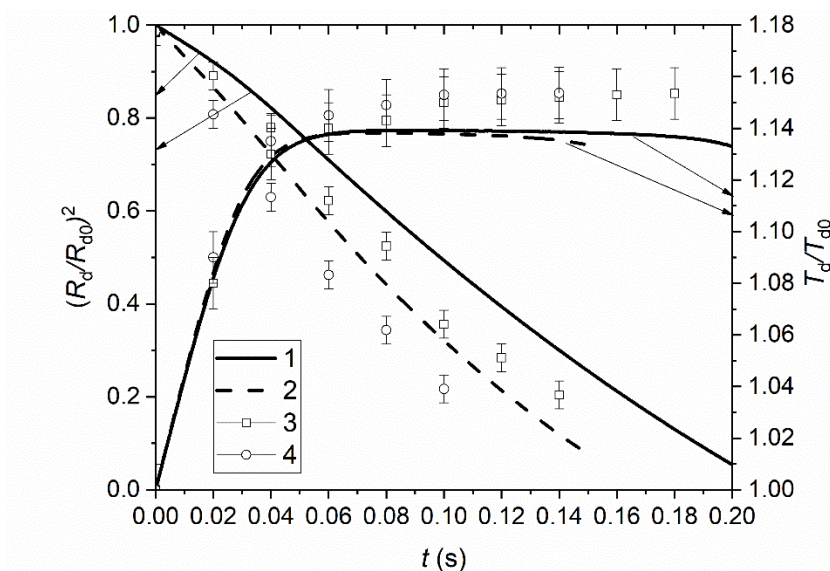


Рисунок 2 – Типичная динамика изменения размеров капель воды с твердыми нерастворимыми примесями относительной начальной массовой концентрацией 5% (1) и 8% (2) в виде $(R_d/R_{d0})^2$ и их средней температуры в виде T_d/T_{d0} при $T_g=800$ К и $R_{d0}=50$ мкм. Экспериментальные данные при тех же условиях показаны маркерами (3 (5%), 4 (8%)).

Варьируемые параметры и регулируемые характеристики

Для исследования поведения капель с примесями при испарении необходимо учитывать множество параметров, так как каждый из них может существенно влиять на динамику процесса. Важное значение имеет тип примесей, поскольку разные вещества обладают уникальными физико-химическими свойствами (теплопроводность, теплоемкость, плотность, молярная масса), которые могут изменять скорость испарения капли и её тепловые характеристики. Размер капель также играет критическую роль;

мелкие капли испаряются быстрее, тогда как крупные капли могут демонстрировать иную динамику.

Температура подаваемого газа и скорость его потока влияют на теплопередачу и конвективные процессы, которые усиливают или замедляют испарение. Концентрация примесей в каплях определяет, как они взаимодействуют с окружающей средой, а начальная температура капель служит отправной точкой для всех термодинамических процессов, происходящих во время испарения. Все эти факторы, действуя в совокупности, создают сложную динамическую систему, требующую тщательной настройки и изучения для оптимизации процессов, связанных с испарением капель с примесями и их применением в различных технологических областях.

Таким образом, варьирование происходит по:

1. Типу примесей (10 образцов);
2. Концентрации примесей (0; 0.5; 2; 5);
3. Размеру капель (1 мкм, 10 мкм, 100 мкм, 1 мм);
4. Температуре газа (500 К, 700 К, 900 К, 1200 К, 1500 К);
5. Начальной температуре капель (300, 320, 350);
6. Скорости движения потока газа (0, 1, 3, 5 м/с);
7. Подведенному к капле тепловому потоку (400, 800, 1200, 1800, 2400 кВт/м²).

Номенклатура

ER – скорость испарения капли, кг/(м²·с);

Fo – число Фурье, -;

M – молярная масса, г/моль;

n – концентрация примеси, %;

U – скорость подаваемого газа, м/с;

R_0 – начальный размер капли, мкм;

R_d – размер капли в процессе нагрева, мкм;

T_0 – начальная температура капли, К;

T_d – температура капли в процессе нагрева, К;

t_{er} – время испарения, с;

q – тепловой поток, кВт/м²;

c – удельная теплоемкость, Дж/(кг·К);

λ – теплопроводность, Вт/(м·К);

ρ – плотность, кг/м³.

Таблица 1 – Свойства и характеристики исследуемых примесей.

Название примеси	M , г/моль	λ , Вт/(м·К)	c , Дж/(кг·К)	ρ , кг/м ³
Диспергированная древесина	229.8	0.08	2512	2700
Fe	55.85	71	444	2000
Al	26.98	20	920	1120
Al ₂ O ₃	101.96	40	750	3500
Глина	280	0.7	920	1500
Шлам	208.26	1	1478	1250
Твердый остаток от сжигания натурального топлива	31.8	0.15	800	1360
Полиамид (типичный полимер)	242	0.23	91	1020
	242	0.23	91	1020
	242	0.23	91	1020

Таблица 2 – Результаты моделирования процессов прогрева и испарения капель с твердыми нерастворимыми примесями

№	t_{er} , с	n , %	R_d , мкм	T_g , К	T_0 , К	U , м/с	q , кВт/м ²	λ , Вт/(м·К)	c , Дж/(кг·К)	ρ , кг/м ³
---	--------------	---------	-------------	-----------	-----------	-----------	--------------------------	----------------------	-----------------	----------------------------

								Диспергированная древесина					
1	0.01775	0	10	900	300	0	1200	0.08	2512	2700			
2	0.01675	0.5											
3	0.0175	2											
4	0.01475	5											
5	0.000176	2	1	900	300	0	1200						
6	0.0175		10										
7	1.575		100										
8	166		1000										
9	0.072	2	10	500	300	0	400						
10	0.0295			700			800						
11	0.0175			900			1200						
12	0.0091			1200			1800						
13	0.0051			1500			2400						
14	0.0175	2	10	900	300	0	1200						
15	0.0171				320								
16	0.0155				350								
17	0.0175	2	10	900	300	0	1200						
18	0.0162					1							
19	0.0135					3							
20	0.0119					5							
№	t_{er}, C	$n, \%$	$R_d, \text{мкм}$	T_g, K	T_0, K	$U, \text{м/с}$	$q, \text{кВт/м}^2$	$\lambda, \text{Вт/(м·K)}$	$c, \text{Дж/(кг·K)}$	$\rho, \text{кг/м}^3$			
21	0.0178	0	10	900	300	0	1200	Fe					
22	0.018	0.5						71	444	2000			
23	0.0168	2											
24	0.015	5											
25	0.000175	2	1	900	300	0	1200						
26	0.0168		10										
27	1.75		100										
28	166		1000										
29	0.0735	2	10	500	300	0	400						
30	0.029			700			800						

31	0.01575			900			1200						
32	0.00925			1200			1800						
33	0.0058			1500			2400						
34	0.01575	2	10	900	300	0	1200						
35	0.015				320								
36	0.015				350								
37	0.01575	2	10	900	300	0	1200						
38	0.015					1							
39	0.0125					3							
40	0.012					5							
№	$t_{\text{er}}, \text{ c}$	$n, \%$	$R_{\text{d}}, \text{ мкм}$	$T_{\text{g}}, \text{ K}$	$T_0, \text{ K}$	$U, \text{ м/с}$	$q, \text{ кВт/м}^2$	$\lambda, \text{ Вт/(м} \cdot \text{K)}$	$c, \text{ Дж/(кг} \cdot \text{K)}$	$\rho, \text{ кг/м}^3$			
41	0.01775	0	10	900	300	0	1200	Al					
42	0.017	0.5											
43	0.01575	2											
44	0.01475	5											
45	0.000179	2	1	900	300	0	1200	20	920	1120			
46	0.01575		10										
47	1.76		100										
48	168		1000										
49	0.0735	2	10	500	300	0	400						
50	0.029			700			800						
51	0.01575			900			1200						
52	0.00925			1200			1800						
53	0.0058			1500			2400						
54	0.01575	2	10	900	300	0	1200						
55	0.015				320								
56	0.015				350								
57	0.01575	2	10	900	300	0	1200						
58	0.015					1							
59	0.0125					3							
60	0.012					5							
№	$t_{\text{er}}, \text{ c}$	$n, \%$	$R_{\text{d}}, \text{ мкм}$	$T_{\text{g}}, \text{ K}$	$T_0, \text{ K}$	$U, \text{ м/с}$	$q, \text{ кВт/м}^2$	$\lambda, \text{ Вт/(м} \cdot \text{K)}$	$c, \text{ Дж/(кг} \cdot \text{K)}$	$\rho, \text{ кг/м}^3$			

61	0.01775	0	10	900	300	0	1200	Al ₂ O ₃					
62	0.0175	0.5						40	750	3500			
63	0.01775	2											
64	0.015	5											
65	0.000145	2	1	900	300	0	1200						
66	0.01775		10										
67	1.45		100										
68	148		1000										
69	0.07	2	10	500	300	0	400						
70	0.027			700			800						
71	0.01775			900			1200						
72	0.0097			1200			1800						
73	0.0061			1500			2400						
74	0.01775	2	10	900	300	0	1200						
75	0.01525				320								
76	0.014				350								
77	0.01775	2	10	900	300	0	1200						
78	0.0145					1							
79	0.012					3							
80	0.0105					5							
№	<i>t</i> _{er} , с	<i>n</i> , %	<i>R</i> _d , мкм	<i>T</i> _g , К	<i>T</i> ₀ , К	<i>U</i> , м/с	<i>q</i> , кВт/м ²	λ , Вт/(м·К)	<i>c</i> , Дж/(кг·К)	ρ , кг/м ³			
81	0.01775	0	10	900	300	0	1200	Глина					
82	0.01725	0.5						0.7	920	1500			
83	0.016	2											
84	0.01575	5											
85	0.00016	2	1	900	300	0	1200						
86	0.016		10										
87	1.575		100										
88	166		1000										
89	0.072	2	10	500	300	0	400						
90	0.027			700			800						
91	0.016			900			1200						
92	0.0099			1200			1800						

93	0.00665			1500			2400						
94	0.016	2	10	900	300	0	1200						
95	0.0155				320								
96	0.0145				350								
97	0.016	2	10	900	300	0	1200						
98	0.01425					1							
99	0.0133					3							
100	0.0121					5							
№	$t_{\text{er}}, \text{ c}$	$n, \%$	$R_{\text{d}}, \text{ мкм}$	$T_{\text{g}}, \text{ K}$	$T_0, \text{ K}$	$U, \text{ м/с}$	$q, \text{ кВт/м}^2$	$\lambda, \text{ Вт/(м} \cdot \text{K)}$	$c, \text{ Дж/(кг} \cdot \text{K)}$	$\rho, \text{ кг/м}^3$			
101	0.01775	0	10	900	300	0	1200	Шлам					
102	0.0185	0.5						1	1478	1250			
103	0.01575	2											
104	0.016	5											
105	0.000168	2	1	900	300	0	1200						
106	0.01575		10										
107	1.775		100										
108	164		1000										
109	0.0735	2	10	500	300	0	400						
110	0.0275			700			800						
111	0.01575			900			1200						
112	0.01			1200			1800						
113	0.006			1500			2400						
114	0.01575	2	10	900	300	0	1200						
115	0.016				320								
116	0.01475				350								
117	0.01575	2	10	900	300	0	1200						
118	0.0145					1							
119	0.01225					3							
120	0.0123					5							
№	$t_{\text{er}}, \text{ c}$	$n, \%$	$R_{\text{d}}, \text{ мкм}$	$T_{\text{g}}, \text{ K}$	$T_0, \text{ K}$	$U, \text{ м/с}$	$q, \text{ кВт/м}^2$	$\lambda, \text{ Вт/(м} \cdot \text{K)}$	$c, \text{ Дж/(кг} \cdot \text{K)}$	$\rho, \text{ кг/м}^3$			

121	0.01775	0	10	900	300	0	1200	Твердый остаток от сжигания натурального топлива				
122	0.0185	0.5						0.15	800	1360		
123	0.01675	2										
124	0.015	5										
125	0.00016	2	1	900	300	0	1200					
126	0.01675		10									
127	1.575		100									
128	166		1000									
129	0.0735	2	10	500	300	0	400					
130	0.028			700			800					
131	0.01675			900			1200					
132	0.0095			1200			1800					
133	0.0053			1500			2400					
134	0.01675	2	10	900	300	0	1200					
135	0.0168				320							
136	0.0157				350							
137	0.01675	2	10	900	300	0	1200					
138	0.0163					1						
139	0.0135					3						
140	0.0119					5						
№	t_{er} , С	n , %	R_{d} , мкм	T_{g} , К	T_0 , К	U , м/с	q , кВт/м ²	λ , Вт/(м·К)	c , Дж/(кг·К)	ρ , кг/м ³		
141	0.01775	0	10	900	300	0	1200	Полиамид (типичный полимер)				
142	0.01675	0.5						0.23	91	1020		
143	0.016	2										
144	0.015	5										
145	0.000155	2	1	900	300	0	1200					
146	0.016		10									
147	1.575		100									
148	168		1000									
149	0.071	2	10	500	300	0	400					

150	0.0275			700			800			
151	0.016			900			1200			
152	0.0094			1200			1800			
153	0.0051			1500			2400			
154	0.016	2	10	900	300	0	1200			
155	0.01525				320					
156	0.01475				350					
157	0.016	2	10	900	300	0	1200			
158	0.0135					1				
159	0.0115					3				
160	0.0119					5				