

## База данных с теоретическими характеристиками процессов нагрева, распыления, вторичного дробления очищаемой воды с содержанием твердых растворимых примесей

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

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

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \left( \frac{\partial^2 T}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial T}{\partial R} \right) + P(t, R), \quad (2.2.1.1)$$

где  $\kappa = k/(c\rho)$ ,  $k$ ,  $c$  и  $\rho$  – температуропроводность, теплопроводность, удельная теплоемкость и плотность воды с твердыми растворимыми 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 примеси и воды).

Начальные и граничные условия:

$$T(t = 0) = T_{d0}(R), \quad (2.2.1.2)$$

$$h(T_{\text{eff}} - T_s) = k \left. \frac{\partial T}{\partial R} \right|_{R=R_d-0}, \quad (2.2.1.3)$$

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

$$T_{\text{eff}} = T_g + \frac{\rho L \dot{R}_{d(e)}}{h}, \quad \dot{R}_{d(e)} = \frac{|\dot{m}_d|}{4\pi\rho R_d^2}, \quad L – \text{теплота парообразования} \quad (2.2.1.4)$$

воды.

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

$$\left| \dot{m}_d \right| = 2\pi R_d D_v \rho_{\text{total}} \ln(1 + B_M), \quad (2.2.1.5)$$

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

Уравнение диффузии компонентов капли в сферической системе координат:

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 Y_i}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial Y_i}{\partial R} \right), \quad (2.2.1.6)$$

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

Начальные и граничные условия:

$$Y_i(t = 0) = Y_{i0}(R), \quad (2.2.1.7)$$

$$\alpha(\varepsilon_i - Y_{is}) = -D \frac{\partial Y_i}{\partial R} \Big|_{R=R_d-0}, \quad \alpha = \frac{|\dot{m}_d|}{4\pi\rho R_d^2}, \quad \varepsilon_i = \frac{Y_{vis}}{\sum_i Y_{vis}}, \quad (2.2.1.8)$$

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

Парциальное давление паров воды  $p_v$  определялось через закон Рауля:

$$p_v = X_{1s} p_v^{sat}, \quad (2.2.1.9)$$

где  $X_{1s}$  – относительная молярная масса воды на поверхности капли,  $p_v^{sat}$  – давление насыщенных паров воды.

Эффективные значения теплофизических свойств капли воды с твердыми растворимыми солями определялись по следующим выражениям:

$$\rho = \left[ \sum_{i=1}^{i=2} (Y_i / \rho_i) \right]^{-1}, \quad c = \sum_{i=1}^{i=2} (Y_i c_i), \quad k = \left[ \sum_{i=1}^{i=2} (Y_i k_{li}^{-2}) \right]^{-1/2}, \quad (2.2.1.10)$$

где  $\rho_i$ ,  $c_i$  и  $k_i$  – плотность, удельная теплоемкость и теплопроводность компонентов капли воды с твердыми растворимыми частицами.

Также здесь следует записать уравнения переноса (Навье-Стокса) и химической кинетики ( $2Me + 2H_2O = 2MeOH + H_2$ ).

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  $k-\varepsilon$  (2.2.1.11)–(2.2.1.13):

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (2.2.1.11)$$

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\vec{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (2.2.1.12)$$

$$\nabla \cdot (\vec{u}(\rho H + p)) = -\nabla \cdot \left( \sum_j h_j J_j \right) \quad (2.2.1.13)$$

Уравнение переноса турбулентной кинетической энергии  $k_t$  определяется как (2.2.1.14):

$$div(\rho k_t \vec{u}) = div \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) grad k_t \right] + G_k - \rho \varepsilon \quad (2.2.1.14)$$

Уравнение переноса вязкой диссипации  $\varepsilon$  определяется как (2.2.1.15):

$$div(\rho \varepsilon \vec{u}) = div \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) grad \varepsilon \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k_t} G_k - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k_t} \quad (2.2.1.15)$$

Уравнение переноса компонентов газа определяется как (2.2.1.16):

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u} Y) = -\nabla \cdot \vec{J} + R_{ch} \quad (2.2.1.16)$$

Уравнение баланса сил для неоднородной капли в газе имеет вид:

$$\frac{du_p}{dt} = F_D(u - u_p) + \frac{g(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + F \quad (2.2.1.17)$$

Коэффициент сопротивления  $F_D$  для сферической неоднородной капли определяется как:

$$F_D = \frac{18\mu C_D Re}{\rho_p d_p^2 24} \quad (2.2.1.18)$$

Число Рейнольдса  $Re$  определяется как:

$$Re = \frac{\rho d_p |u_p - u|}{\mu} \quad (2.2.1.19)$$

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 зависимости времени испарения ( $t_{ev}$ ) от радиуса капель ( $R_d$ ), характер которых степенной. Выход на стационарное испарение происходит после нагрева капли. Установлено, что при увеличении температуры газа  $T_g$  от 700 до 2200 К время испарения ( $t_{ev}$ ) снижается на 80% при идентичном положении капель в пространстве. Влияние радиуса капли ( $R_d$ ) на время испарения ( $t_{ev}$ ) ослабляется с ростом температуры газа ( $T_g$ ) в 2-5 раз. Устойчивость жидкой фазы пропорционально увеличивается за счет уменьшения парциального давления над раствором. Это явление объясняется наличием твердой растворимой примеси хлорида натрия (NaCl). Полученные результаты могут быть использованы для прогнозирования времени испарения ( $t_{ev}$ ) капель в распылительных сушках и прочих пиролизных установках.

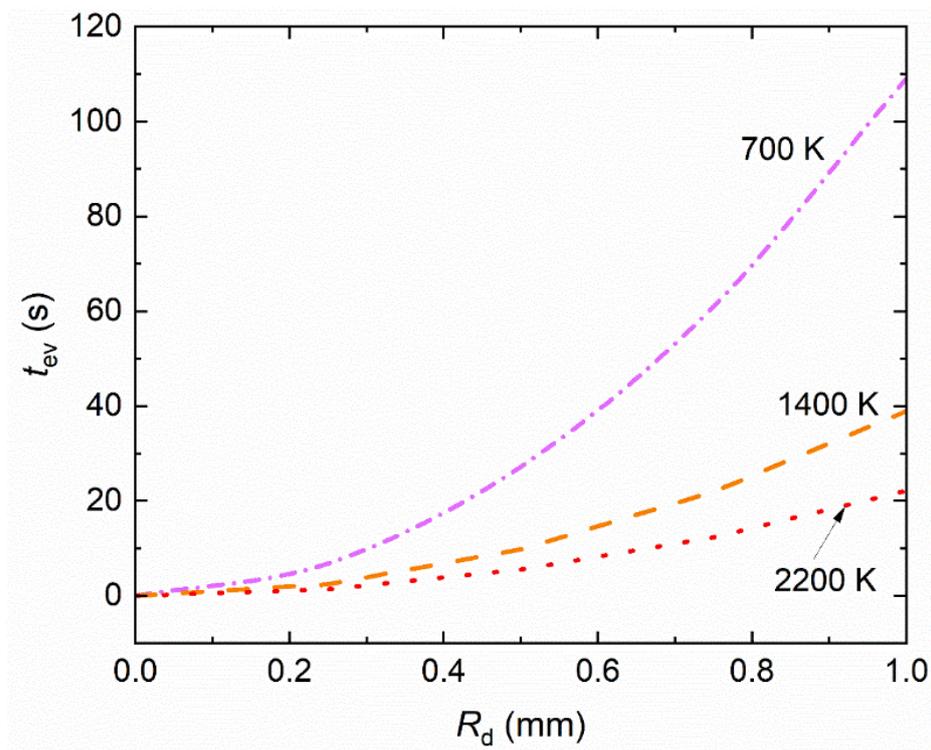


Рисунок 1 – Зависимость времени испарения ( $t_{ev}$ ) от радиуса солевых капель ( $R_d$ ) при различных температурах газа ( $T_g$ ). Параметры моделирования:  $T_0 = 300$  К,  $T_g = 700$  К,  $Y_{av} = 5$  wt.%

На рис.2 показано, что с увеличением начального радиуса капли ( $R_{d0}$ ) в пределах от 1 мкм до 1 мм безразмерное время испарения ( $Fo$ ) пропорционально возрастает. Значения температуры газа ( $T_g$ ) получены как температура газа на границе раздела фаз «капля-газовоздушная среда». В пределах изменения температуры газа ( $T_g$ ) от 700 К до 2200 К при фиксированном значении начального радиуса ( $R_{d0}$ ) капли зависимость принимает экспоненциально-убывающий характер для всех исследуемых случаев (1-3). Этот эффект обусловлен пропорциональным увеличением скорости испарения ( $ER$ ) на границе раздела фаз «капля-газовоздушная среда».

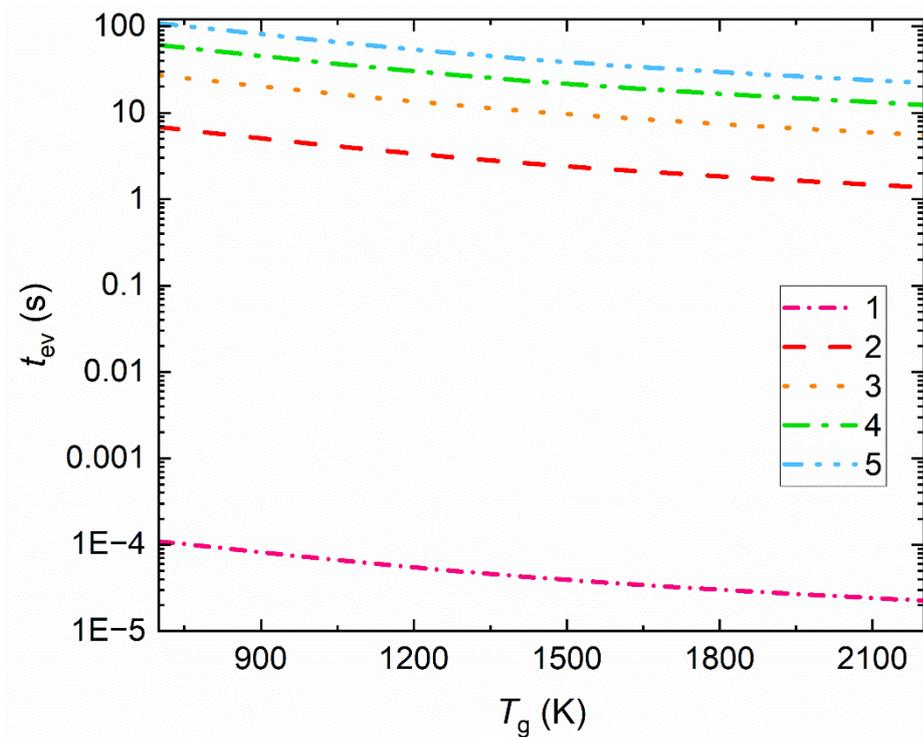


Рисунок 2 – Зависимость времени испарения ( $t_{ev}$ ) от температуры газа ( $T_g$ ) одиночной капли раствора с твердой растворимой примесью в качестве натрия хлорида (NaCl) при их прогреве и испарении с различными начальными радиусами ( $R_{d0}$ ): 1 –  $R_{d0} = 1 \text{ мкм}$ , 2 –  $R_{d0} = 0.25 \text{ мм}$ , 3 –  $R_{d0} = 0.5 \text{ мм}$ , 4 –  $R_{d0} = 0.75 \text{ мм}$ , 5 –  $R_{d0} = 1 \text{ мм}$ . Прочие параметры моделирования приняты согласно рис. 1

### 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 движения 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, в качестве варьируемых параметров выбраны:

1. Тип примесей (3 образца);
2. Концентрация примесей (0; 5 масс.%; 10 масс.%; 20 масс.%, 30 масс.%;);
3. Размер капель (1 мкм, 0.25 мм, 0.5 мм, 0.75 мм, 1 мм)
4. Температура газа (700 К, 1400 К, 2200 К).

### Номенклатура

$a$  – температуропроводность капли, м<sup>2</sup>/с;

$ER$  – скорость испарения капли, кг/(м<sup>2</sup>·с);

$Fo$  – число Фурье, -;

$M$  – молярная масса, г/моль;

$n$  – количество капель в пределах группы, шт.;

$U$  – скорость подаваемого газа, м/с;

$R_0$  – начальный размер капли, мкм;

$R_d$  – размер капли в процессе нагрева, мкм;

$R_p$  – радиус пористого каркаса, м;

$T_0$  – начальная температура капли, К;

$T_d$  – температура капли в процессе нагрева, К;

$t_{er}$  – время испарения, с;

$T_g$  – температура газа, К;

$T_s$  – температура в приповерхностном слое капли, К;

$\frac{\partial T}{\partial r}$  – градиент температуры, К/м;

$Y_{av}$  – массовая доля примеси в капле, wt.%.

$c$  – удельная теплоемкость, Дж/(кг·К);

$\lambda$  – теплопроводность, Вт/(м·К);

$\rho$  – плотность, кг/м<sup>3</sup>.

Таблица 1 – Свойства и характеристики исследуемых примесей

Название примеси	$M$ , г/моль	$\lambda$ , Вт/(м·К)	$c$ , Дж/(кг·К)	$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>
Хлорид натрия (NaCl)	58.44	0.56	870	2160
Сульфат меди (CuSO <sub>4</sub> )	159.62	0.40	390-620	2240
Хлорид аммония (NH <sub>4</sub> Cl)	53.50	0.25–0.32	970	1530

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

№	$t_{er}$ , с	$Y_{av}$ , wt.%	$R_d$ , мкм	$T_g$ , К	$T_0$ , К	$n$ , шт.	$\frac{L}{D}$	$\lambda$ , Вт/(м·К)	$c$ , Дж/(кг·К)	$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>
								Хлорид натрия (NaCl)		
1	0.010075	0	10	700	300	1	-	0.56	870	2160
2	0.010079	5								
3	0.00980	10								
4	0.00916	20								

Продолжение таблицы 2

5	0.00842	30								
6	$8.37 \cdot 10^{-5}$	5	1	700	300	1	-			
7	1.00449		100							
8	100.77663		1000							
9	0.00659	5	10	900	300	1	-			
10	0.00353			1400						
12	0.26129		100	1800						
13	0.20754			2200						
14	0.00995	5	10	700	310	1	-			
15	0.00971				330					
16	0.00929				350					
17	0.01101	5	10	700	300	2	1			
18	0.01092					3				
19	0.01274					5				
20	0.000335	5	10	700	300	2	2			
21	0.00033					3				
22	0.01274					5				
23	$7.7 \cdot 10^{-3}$	5	10	700	300	2	4			
24	$8.02 \cdot 10^{-3}$					3				
25	$2.7 \cdot 10^{-2}$					5				
№	$t_{er}, c$	$Y_{av},$ wt. %	$R_d,$ мкм	$T_g,$ К	$T_0,$ К	$n,$ шт.	$\frac{L}{D}$	$\lambda,$ Вт/(м·К)	$c,$ Дж/(кг·К)	$\rho,$ кг/м <sup>3</sup>
26	0.01063	0	10	700	300	1	-	Сульфат меди (CuSO <sub>4</sub> )		
27	0.00696	5								
28	0.01014	10								
29	0.00945	20								
30	0.00869	30								
31	0.000104	5	1	700	300	1	-	0.40	390-620	2240
32	1.04155		100							
33	104.4705		1000							
34	0.00683	5	10	900	300	1	-			
35	0.00365			1400						
36	0.27002		100	1800						

Продолжение таблицы 2

37	0.2149			2200						
38	0.01031				310					
39	0.01006	5	10	700	330	1	-			
40	0.00979				350					
41	0.010338					2				
42	0.010843	5	10	700	300	3	1			
43	0.012651					5				
44	0.00311					2				
45	0.003278	5	10	700	300	3	2			
46	0.011722					5				
47	$7.94 \cdot 10^{-3}$					2				
48	$8.27 \cdot 10^{-3}$	5	10	700	300	3	4			
49	$2.81 \cdot 10^{-2}$					5				
№	$t_{er}, c$	$Y_{av},$ wt. %	$R_d,$ мкм	$T_g,$ К	$T_0,$ К	$n,$ шт.	$\frac{L}{D}$	$\lambda,$ Вт/(м·К)	$c,$ Дж/(кг·К)	$\rho,$ кг/м <sup>3</sup>
50	0.01	0						Хлорид аммония (NH <sub>4</sub> Cl)		
51	0.00957	5								
52	0.00912	10	10	700	300	1	-			
53	0.00824	20								
54	0.00735	30								
55	$9.56 \cdot 10^{-5}$		1							
56	0.95522	5	100	700	300	1	-			
57	95.97216		1000							
58	0.00623		10	900						
59	0.00329	5		1400	300	1	-	0.25–0.32	970	1153
60	0.24220			1800						
61	0.19175		100	2200						
62	0.00932				310					
63	0.009197	5	10	700	330	1	-			
64	0.008903				350					
65	0.00956					2				
66	0.010027	5	10	700	300	3	1			
67	0.0116984					5				

Продолжение таблицы 2

68	0.002876	5	10	700	300	2	2			
69	0.003031					3				
70	0.01084					5				
71	$7.35 \cdot 10^{-3}$	5	10	700	300	2	4			
72	$7.65 \cdot 10^{-3}$					3				
73	$2.6 \cdot 10^{-2}$					5				