Подоплелов Евгений Викторович,

к.т.н., доцент, Ангарский государственный технический университет, e-mail: uch_sovet@angtu.ru

Бальчугов Алексей Валерьевич,

д.т.н., профессор каф. МАХП, Ангарский государственный технический университет, e-mail: balchug@mail.ru

Дементьев Анатолий Иванович,

к.т.н., профессор каф. МАХП, Ангарский государственный технический университет, e-mail: anatdementev@mail.ru

Глотов Анатолий Андреевич,

обучающийся, Ангарский государственный технический университет

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОГРАВИТАЦИОННОЙ И ТЕРМОКАПИЛЛЯРНОЙ КОНВЕКЦИИ В ГАЗОЖИДКОСТНЫХ ПРОЦЕССАХ Podoplelov E.V., Balchugov A.V., Dement'ev A.I., Glotov A.A. MATHEMATICAL MODELING OF THERMOGRAVITATIONAL AND THERMOCAPILLARY CONVECTION IN GAS-LIQUID PROCESSES

Аннотация. Взаимодействие газовой и жидкой фазы в отдельных случаях сопровождается самопроизвольным возникновением конвективных потоков и турбулентных пульсаций на границе раздела фаз и в прилегающих областях. Гидродинамическая нестабильность позволяет ускорять межфазный перенос вещества и приводит к увеличению коэффициентов массоотдачи. Исследования в данной области носят не только теоретический характер, но имеют и практическое значение, т.к. поверхностная конвекция может искусственно создаваться в аппаратах для интенсификации процесса массообмена.

Ключевые слова: конвекция, 1,2-дихлорэтан, межфазный перенос, диффузия, жидкофазное хлорирование этилена.

Abstract. The interaction of gas and liquid phases in some cases is accompanied by the spontaneous occurrence of convective flows and turbulent pulsations at the phase boundary and in adjacent areas. Hydrodynamic instability allows to accelerate the interfacial transfer of matter and leads to an increase in mass transfer coefficients. Research in this field is not only theoretical, but also practical, since surface convection can be artificially created in apparatus for intensifying the mass exchange process.

Keywords: convection, 1,2-dichloroethane, interphase transfer, diffusion, liquid-phase chlorination of ethylene.

В газожидкостных процессах при некоторых условиях в жидкости возможно возникновение конвективных токов [1, 2], обычно ведущее к значительному повышению коэффициента массоотдачи. Явление нестабильности поверхности жидкости позволяет значительно ускорить процесс межфазного переноса [3, 4]. В работе проведено исследование механизма поверхностной конвекции в условиях химической реакции с большим тепловым эффектом в системе газ-жидкость. Примером такого процесса может являться жидкофазное хлорирование этилена в процессе получения 1,2-дихлорэтана. В процессе жидкофазного хлорирования этилена имеет место испарение 1,2-дихлорэтана в азот, содержащийся в абгазном хлоре. Теоретически выясним возможность возникновения конвективных структур на поверхности жидкости при испарении горячего 1,2-дихлорэтана в азот. Пусть ламинарный поток азота пропускается над горизонтальной поверхностью слоя неподвижного 1,2-дихлорэтана (рисунок 1). Скорость азота постоянна – *w*, м/с. Протяженность поверхности контакта 1,2-дихлорэтана и потока азота – *l*, м. Высота слоя азота – *h*, м. Высота слоя 1,2-дихлорэтана *d*, м. Ширина поверхности 1,2-дихлорэтана – *b*, м.

Начальная концентрация паров 1,2-дихлорэтана в азоте – *C_H* (моль/м³). Равновесная концентрация паров 1,2-дихлорэтана в азоте – *C**. Так как поток азота ламинарный, перенос паров 1,2-дихлорэтана в направлении оси *y* осуществляется только путем молекулярной диффузии. За начало координат по оси *y* принимается поверхность жидкости.

Диффузия паров в азоте описывается уравнением конвективной диффузии в безразмерной форме:

$$\partial^2 c / \partial x^2 + \partial^2 c / \partial y^2 = \alpha \, \partial c / \partial x \,, \tag{1}$$

где: $\alpha = wl/D$; c – безразмерная концентрация $c = C_{\Pi}/C_{\Pi}^*$; x = X/l; y = Y/l.

Граничные условия: при x=0 и при любом $y \ c=0$; при y=0 и при $x>0 \ c=1$; при x=1 и при любом $y \ \partial c/\partial x = 0$; при y=1 и при любом $x \ \partial c/\partial y = 0$.



Рисунок 1 – Схема движения азота над поверхностью 1,2-дихлорэтана

Применим к уравнению (1) метод конечных разностей. Этот метод основан на замене производных, входящих в дифференциальное уравнение, приближенными значениями, выраженными через разности значений функции в отдельных точках (узлах) сетки.

На поток азота нанесем сетку (рисунок 2). Точка О будет иметь координаты x и y. В точке О, а также в узлах сетки 1, 2, 3, 4 обозначим концентрацию c_0 , c_1 , c_2 , c_3 , c_4 соответственно.



Рисунок 2 – К выводу уравнения диффузии паров 1,2-дихлорэтана в азоте

Производная концентрации в точке О' запишется в следующем виде:

$$\left(\frac{\partial c}{dx}\right)_{x+\frac{\Delta x}{2},y} \cong \frac{c_0 - c_3}{\Delta x}.$$
(2)

Точность равенства (2) возрастает с уменьшением величины Δx .

Аналогично градиент температуры для точки О" имеет вид:

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \approx \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{x + \frac{\Delta x}{2}, y} - \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{x - \frac{\Delta x}{2}, y} \right] = \frac{1}{\Delta x^2} (c_1 + c_3 - 2c_0).$$
(3)

Точно также определяется вторая производная по координате *у* в точке О:

$$\frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \cong \frac{1}{\Delta y^2} (c_2 + c_4 - 2c_0).$$
(4)

Приближенное выражение для первой производной концентрации по координате *x* в точке О примет вид:

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{c_1 - c_3}{2\Delta x} \,. \tag{5}$$

Подставляя полученные приближенные выражения (3, 4, 5) в уравнение (1), получим:

$$\frac{1}{\Delta x^2} (c_1 + c_2 + c_3 + c_4 - 4c_0) = \alpha \frac{c_1 - c_3}{2\Delta x} \, .$$

Откуда концентрация в точке О:

$$c_0 = \frac{1}{4} (c_1 + c_2 + c_3 + c_4) - \frac{1}{8} \alpha \cdot \Delta x (c_1 - c_3).$$
(6)

Из последнего уравнения очевидно, что концентрация в точке O (рисунок 2) зависит от концентраций в четырех соседних точках (1, 2, 3 и 4), а также от значения α и шага сетки Δx .

Решение последнего уравнения (6) вместе с граничными условиями дает возможность рассчитать значения концентраций паров 1,2-дихлорэтана в лю-

бой точке потока азота (рисунок 2). Значения полученных концентраций паров 1,2-дихлорэтана в азоте будут тем точнее, чем меньше значение шага сетки. Сетка с малым шагом потребует большого числа вычислений, которые сложно выполнить вручную. Поэтому для расчета концентраций паров 1,2-дихлорэтана в азоте разработана программа в MathCad. Вычисления проводились при следующих параметрах: скорость азота над поверхностью 1,2-дихлорэтана 0,03 см/с, коэффициент диффузии паров 1,2-дихлорэтана в азоте $D=1.033\cdot10^{-5}$ м²/с, высота потока газа h=0,02 м, протяженность поверхности испарения l=0,07 м, начальная концентрация паров 1,2-дихлорэтана в потоке азота равна нулю, температура азота 79 °C, давление 1 ат. Шаг сетки выбран 0,5 мм. По высоте слоя газа разместилось 40 ячеек, по длине поверхности испарения – 140 ячеек.

Результаты расчета по компьютерной программе дают возможность определить изменение движущей силы вдоль поверхности испарения (рисунок 3) по следующему выражению:

$$\left(\frac{\partial c}{\partial y}\right)_{y=0} \approx \frac{c_{\Pi} - c_i}{\Delta y},$$

где: c_{II} – равновесная концентрация паров 1,2-дихлорэтана возле поверхности испарения; c_i – концентрация паров 1,2-дихлорэтана в узлах сетки, Δy – шаг сетки.



Рисунок 3 – Графическая зависимость движущей силы от длины поверхности испарения

Графическую зависимость движущей силы от длины поверхности испарения (рисунок 3) невозможно аппроксимировать с достаточной точностью каким-либо простым уравнением. Так как основное количество 1,2-дихлорэтана испаряется в самом начале поверхности, то нашли уравнение следующего вида:

$$\left(\frac{\partial c}{\partial y}\right)_{y=0} = f(x),$$

для начального участка поверхности 0<*x*<0,3.

Аппроксимирующее уравнение на начальном участке имеет вид:

$$\left(\frac{\partial c}{\partial y}\right)_{y=0} = 7,9042x^{-0.5213} \tag{7}$$

Последнее уравнение описывает графическую зависимость (рисунок 3) с погрешностью 0,34 %.

Линии постоянных концентраций паров 1,2-дихлорэтана в потоке азота (рисунок 4) можно построить по результатам расчетов по уравнению (6). Построенные графические зависимости дают возможность пространственно оценить изменение концентраций паров 1,2-дихлорэтана в потоке азота в установившемся режиме.



Рисунок 4 – Линии постоянной концентрации

В результате испарения верхний слой 1,2-дихлорэтана охлаждается и в пленке 1,2-дихлорэтана возникает разность температур, которая может привести к возникновению конвекции, вызванной термогравитационными силами [5–8]. Исследуем изменение температуры в неподвижной пленке испаряющегося 1,2-дихлорэтана. Пусть над пленкой 1,2-дихлорэтана проходит поток азота, режим движения – ламинарный. За начало координат возьмем по оси *у* дно слоя 1,2-дихлорэтана. Поскольку жидкость неподвижна до момента возникновения конвекции, то основным способом переноса тепла является теплопроводность.

Режим переноса теплоты стационарный, поэтому температура среды во времени не изменяется. Тогда

$$\frac{\partial^2 T}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial^2 Y} = 0.$$
(8)

Граничные условия: при *Y*=*d* (на поверхности жидкости) баланс теплоты

имеет вид:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial Y} = rD \frac{\partial C}{\partial Y} \,. \tag{9}$$

На дне пленки жидкости (Y=0) имеется источник теплоты – с постоянной начальной температурой T_0 . Принимаем, что прилегающие к нижней стенке слои жидкости имеют температуру T_0 .

При X=1 изменение температуры вдоль оси X прекращается и можно записать

$$\frac{\partial T}{\partial X} = 0 , \qquad (10)$$

при *X*=0 (в начале слоя жидкости) изменение температуры $\frac{\partial T}{\partial Y} = 0$. (11)

Уравнения (10) и (11) говорят о том, что стенки кюветы для 1,2дихлорэтана теплоизолированы. Приведем уравнение Лапласа (8) к безразмерному виду, сделав замену.

Безразмерная температура:

$$t = \frac{T - T_0}{T_0}$$

где *T*₀=200 °С – начальная температура жидкости и температура нижней грани пленки жидкости.

Уравнение Лапласа в безразмерном виде:

$$\frac{\partial^2 t}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 t}{\partial y^2} = 0.$$
(12)

Граничные условия в безразмерном виде:

при
$$y=1, \ \lambda \frac{T_0}{l} \frac{\partial t}{\partial y} = rD \frac{\partial C}{\partial Y};$$
 (13)

при
$$x=0$$
 и $x=1$, $\frac{\partial t}{\partial x}=0$. (15)

Из условия (13) очевидно, что интенсивность охлаждения поверхности 1,2-дихлорэтана зависит от движущей силы процесса испарения 1,2дихлорэтана в азот $\frac{\partial C}{\partial Y}$. Для определения движущей силы процесса испарения 1,2-дихлорэтана в азот применим уравнение (7).

Если учесть, что

$$\frac{\partial C}{\partial Y} = \frac{C^*}{l} \cdot \left(\frac{\partial c}{\partial y}\right)_{y=0}$$

то граничное условие (13) принимает вид:

$$\lambda \frac{T_0}{l} \frac{\partial t}{\partial y} = 7,9042 r D \frac{C^*}{l} x^{-0.5213}.$$
 (16)

Решим уравнение Лапласа (12) методом конечных разностей, предварительно подставив граничные условия (13), (14) и (15). Узлы сетки, нанесенной на поток азота, описываются с помощью уравнения (12). Согласно уравнению, температура в любом узле сетки равна среднеарифметическому значению от значений в четырех соседних узлах сетки, следовательно:

$$t_0 = \frac{t_1 + t_2 + t_3 + t_4}{4} \,. \tag{17}$$

Значение температуры в узлах внизу сетки равно нулю.

Запишем уравнение (16) в конечных разностях:

$$\lambda \frac{T_0}{l} \frac{t_1 - t_0}{\Delta x} \cong 7,9042 r D \frac{C^*}{l} (\kappa \cdot \Delta x)^{-0.5213}$$

где: Δx – шаг сетки ($\Delta x = \Delta y$, то есть шаг сетки в направлении осей *x* и *y* одинаков), *к* - номер узла, t_1 – температура во втором ряду сетки от поверхности 1,2дихлорэтана. С учетом последнего уравнения, уравнение распределения температур в узлах сетки на поверхности 1,2-дихлорэтана будет иметь вид:

$$t_0 = t_1 - b \cdot \kappa^{-0.5213} \cdot \Delta x^{0.4787}, \tag{18}$$

Здесь
$$b = 7,9042rD\frac{C^*}{\lambda T_0}$$
.

Температуры в узлах сетки определялись по уравнениям 17 и 18. Для вычисления температур в узлах сетки составлена компьютерная программа в MathCad. При расчетах были сделаны следующие допущения: равновесная концентрация C^* и температура поверхности T_0 вдоль поверхности 1,2-дихлорэтана не изменяются. Для расчетов был выбран шаг сетки равный 0,2 мм. В результате расчетов в MathCad, получено распределение температуры на поверхности 1,2-дихлорэтана (рисунок 5).



Рисунок 5 – Температура на поверхности 1,2-дихлорэтана

Изотермы в слое 1,2-дихлорэтана изображены на рисунке 6. Из графика видно, что градиент температуры по толщине пленки 1,2-дихлорэтана самый большой на начальном участке (рисунок 6).



Рисунок 6 – Градиент температуры в пленке жидкости

Выясним, имеет ли место в пленке жидкости термокапиллярная конвекция, то есть конвекция, вызванная градиентом поверхностного натяжения. Для определения критического градиента температуры в пленке 1,2-дихлорэтана воспользуемся числом Марангони:

$$Ma = \frac{\Delta T \varepsilon h^2}{\mu a}, \qquad (19)$$

где: Δ*T* – градиент температуры по высоте пленки 1,2-дихлорэтана, К; *h* – высота пленки 1,2-дихлорэтана, м; *μ* - коэффициент динамической вязкости 1,2-дихлорэтана, Па·с; *a* – коэффициент температуропроводности 1,2-дихлорэтана; м²/с, ε - температурный градиент:

$$\sigma(T) = \sigma_0 - \varepsilon T.$$

Из литературных данных [9] критическое значение числа Марангони $Ma_{KP} = 79,6$. При данном значении числа Марангони в слое 1,2-дихлорэтана возникнет термокапиллярная конвекция. Из формулы (19), предварительно подставив критическое значение числа Марангони, можно определить критический градиент температур в пленке 1,2-дихлорэтана, приводящий к термокапиллярной конвекции. При $\mu_{\mathcal{A}} = 0,44 \cdot 10^{-3}$ Па·с, $a = 7,49 \cdot 10^{-8}$ м²/с, $\varepsilon = 1,35 \cdot 10^{-4}$ Дж/м²·с, h = 0,007 м критический градиент температуры составит $\Delta T_{KP} = 0,4$ град. Из рисунка 6 видно, что такой перепад температур имеется на участке поверхности (при 0<*x*<21 мм). Следовательно, можно утверждать, что на участке поверхности протяженностью 21 мм имеет место конвекция, вызванная термокапиллярными силами.

Выполненные расчеты указывают на то, что при скорости азота 0,03 м/с поверхность испарения нестабильна и в пленке 1,2-дихлорэтана имеет место термокапиллярная конвекция, ускоряющая процесс массопереноса.

Данная модель может быть полезна и для расчета в других газожидкостных системах, а результаты расчетов использованы при проектировании теплои массообменных аппаратов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гершуни Г.З., Жуковицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.

2. Гетлинг А.В. Конвекция Рэлея-Бенара. Структуры и динамика. М.: Эдиториал УРСС, 1999. 248 с.

3. Подоплелов Е.В, Бальчугов А.В., Рахманин В.Ю., Подоплелова А.В. Поверхностные явления в газожидкостных химических процессах с большим тепловым эффектом // Математические методы в технике и технологиях (ММТТ-26). 2013. С. 59-61.

4. Подоплелов Е.В, Бальчугов А.В. Гидродинамическая нестабильность поверхности при испарении 1,2-дихлорэтана в азот // Сборник научных трудов Ангарского государственного технического университета. 2013. Т. 1. № 1. С. 114-116.

5. Подоплелов Е.В., Бальчугов А.В., Ульянов Б.А., Свиридов Д.П. Капиллярная конвекция при массообмене между газом и жидкостью в процессе получения 1,2-дихлорэтана // Сборник научных трудов Ангарского государственного технического университета. 2006. Т. 1. № 1. С. 180-183.

6. Бальчугов А.В., Подоплелов Е.В., Ульянов Б.А., Свиридов Д.П. Визуализация конвекции Рэлея-Бенара на поверхности испаряющейся жидкости // Сборник научных трудов Ангарского государственного технического университета. 2005. Т. 1. № 1. С. 24-27.

7. Бальчугов А.В., Семенов И.А., Подоплелов Е.В. Гидродинамическое состояние поверхности при испарении // Сборник научных трудов Ангарского государственного технического университета. 2005. Т. 1. № 1. С. 31-37.

8. Бальчугов А.В., Семенов И.А., Подоплелов Е.В. Массообмен при испарении жидкости в поток газа // Сборник научных трудов Ангарского государственного технического университета. 2005. Т. 1. № 1. С. 38-45.

9. Дильман В.В., Кулов Н.Н., Найденов В.И. Диффузионно-тепловая неустойчивость Марангони при абсорбции с химической реакцией // Теоретические основы химической технологии. 1999. Т. 33. №5. С. 495.