

*М.П. Архипова, А.А. Ермаков**

КОНВЕКТИВНО-ДИФFUЗИОННАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ПОГЛОЩЕНИЯ ДИОКСИДА УГЛЕРОДА ХИМИЧЕСКИМ ПОГЛОТИТЕЛЕМ

При разработке математического описания сложных процессов применяют блочный принцип математического моделирования [1]. На первой стадии исследования проводятся анализ гидродинамики процесса, его кинетических закономерностей, тепловых процессов, возможных химических реакций. Затем отдельно исследуются «блоки» с учетом взаимного влияния на систему математического описания. Завершающей стадией метода является разработка алгоритма решения уравнений математического описания с использования вычислительных машин. Протекание химической реакции в процессе хемосорбции оказывает влияние как на равновесие между фазами, так и на кинетику хемосорбции.

Большое распространение, при описании хемосорбционного процесса, получила зонная модель [2], согласно которой процесс хемосорбции рассматривается с учетом области его протекания [3].

Кинетика хемосорбции может определяться:

- 1) внешней диффузией, так называемая внешнедиффузионная область;
- 2) внутренней диффузией – внутридиффузионная;
- 3) скоростью самой реакции – кинетическая область;
- 4) кинетика хемосорбции может находиться в переходных областях.

Химический поглотитель на основе гидрата оксида кальция на подложке, получен по способу, описанному в [4], представляет собой лист белого цвета, который легко взаимодействует с диоксидом углерода. На рис. 1 схематично изображена физическая модель поглощения диоксида углерода химическим поглотителем на пористой подложке, при этом входными параметрами будут являться W_s – скорость газовой смеси, м/с; $[C_{Ca(OH)_2}]$ – содержание $Ca(OH)_2$ в продукте, ммоль/л; $[C_{CO_2}]$ – содержание диоксида углерода в газовой смеси, ммоль/л; $[C_{H_2O}]_s$ – концентрация воды в газовой смеси, %; $[C_{H_2O}]_o$ – концентрация воды в хемосорбенте, %; T – температура процесса хемосорбции, °С. Выходными параметрами в данном случае будут $[C_{CaCO_3}]$ – концентрация $CaCO_3$ в хемосорбенте, ммоль/л; $[C_{CO_2}]$ – содержание диоксида углерода на выходе из динамической трубки, ммоль/л.

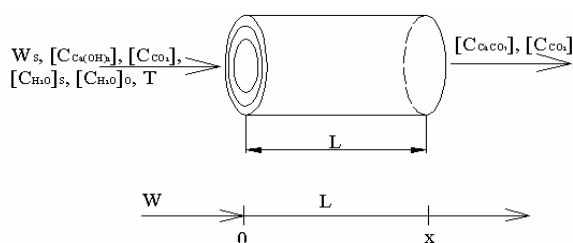


Рис. 1. Схема физической модели поглощения диоксида углерода химическим поглотителем на пористой подложке

Для описания данной системы нами были найдено уравнение

$$\frac{\partial C(x, \tau)}{\partial \tau} = 250 \cdot 257 \cdot 263 \exp\left[\frac{-57 \cdot 863}{RT}\right] \times \\ \times [C_{H_2O}]_s^{0.92} [C_{H_2O}]_o^{2.8} [C_{Ca(OH)_2}] [C_{CO_2}].$$

* Под руководством д-ра техн. наук, проф. ТГТУ С.И. Дворецкого, канд. хим. наук ОАО «Корпорации «Росхимзащита» Н.Ф. Гладышева.

Используя программы Femlab 2.3 и Matlab 6.0 разработана математическая модель конвективно-диффузионного типа [6], поглощения диоксида углерода хемосорбентом на пористой подложке.

При этом граничные условия будут иметь следующий вид:

– при $x = 0$

$$\frac{\partial C_{\text{Ca(OH)}_2}(x, \tau)}{\partial \tau} = -250 \cdot 257 \cdot 263 \exp\left[\frac{-57 \cdot 863}{RT}\right] \times \\ \times [C_{\text{H}_2\text{O}}]_S^{0,92} [C_{\text{H}_2\text{O}}]_O^{2,8} [C_{\text{Ca(OH)}_2}] [C_{\text{CO}_2}];$$

$$\frac{\partial C_{\text{CaCO}_3}(x, \tau)}{\partial \tau} = 250 \cdot 257 \cdot 263 \exp\left[\frac{-57 \cdot 863}{RT}\right] \times \\ \times [C_{\text{H}_2\text{O}}]_S^{0,92} [C_{\text{H}_2\text{O}}]_O^{2,8} [C_{\text{Ca(OH)}_2}] [C_{\text{CO}_2}];$$

$$\frac{\partial C_{\text{CO}_2}(x, \tau)}{\partial \tau} = C_{\text{CO}_2}^H,$$

где $C_{\text{CO}_2}^H$ – входная концентрация CO_2 , моль/л;

– при $x = L$

$$\frac{\partial C_{\text{Ca(OH)}_2}(x, \tau)}{\partial \tau} = -250 \cdot 257 \cdot 263 \exp\left[\frac{-57 \cdot 863}{RT}\right] \times \\ \times [C_{\text{H}_2\text{O}}]_S^{0,92} [C_{\text{H}_2\text{O}}]_O^{2,8} [C_{\text{Ca(OH)}_2}] [C_{\text{CO}_2}];$$

$$\frac{\partial C_{\text{CaCO}_3}(x, \tau)}{\partial \tau} = 250 \cdot 257 \cdot 263 \exp\left[\frac{-57 \cdot 863}{RT}\right] \times \\ \times [C_{\text{H}_2\text{O}}]_S^{0,92} [C_{\text{H}_2\text{O}}]_O^{2,8} [C_{\text{Ca(OH)}_2}] [C_{\text{CO}_2}];$$

$$\frac{\partial C_{\text{CO}_2}(x, \tau)}{\partial \tau} = 7,3 \times 10^{-6} T^{1,75} \varepsilon \frac{\partial^2 C_{\text{CO}_2}(x, \tau)}{\partial x^2} + W_S \frac{\partial C_{\text{CO}_2}(x, \tau)}{\partial x} - \\ - 250 \cdot 257 \cdot 263 \exp\left[\frac{-57 \cdot 863}{RT}\right] \times \\ \times [C_{\text{H}_2\text{O}}]_S^{0,92} [C_{\text{H}_2\text{O}}]_O^{2,8} [C_{\text{Ca(OH)}_2}] [C_{\text{CO}_2}].$$

Начальные условия при $\tau = 0$ описываются уравнениями:

$$C_{\text{CO}_2}(x, \tau) = 0;$$

$$C_{\text{CaCO}_3}(x, \tau) = 0;$$

$$C_{\text{Ca(OH)}_2}(x, \tau) = C_{\text{Ca(OH)}_2}^H,$$

где $C_{Ca(OH)_2}^H$ – начальная концентрация гидрата оксида кальция в хемосорбенте, ммоль/л.

На рисунках 2 – 5 изображены графики изменения содержания CO_2 , $Ca(OH)_2$ и $CaCO_3$ от длины слоя хемосорбента и времени в процессе динамики на динамической установке, построенные с помощью разработанной математической модели.

Для определения рассогласования расчета экспериментальных данных и математической модели в качестве сравнительного опыта был взят один из опытов, где сорбционная емкость хемосорбента равна 115,26 л/кг; по результатам расчета математической модели сорбционная емкость поглотителя равна 127,16 л/кг. Таким образом, рассогласование расчета не превышает 10 %.

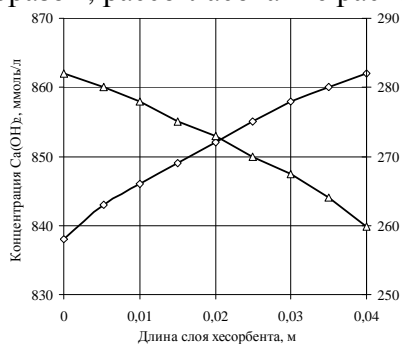


Рис. 2. График изменения концентрации $CaCO_3$ и $Ca(OH)_2$ от длины слоя хемосорбента в процессе хемосорбции:
 —◇— — концентрация $Ca(OH)_2$, ммоль/л;
 —▲— — концентрация $CaCO_3$, ммоль/л

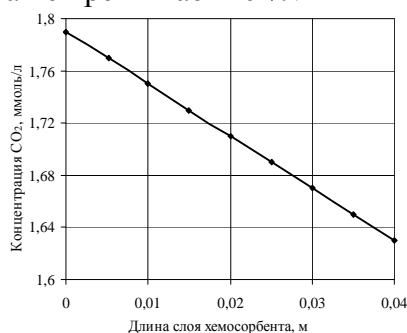


Рис. 3. График изменения концентрации CO_2 от длины слоя хемосорбента в процессе хемосорбции

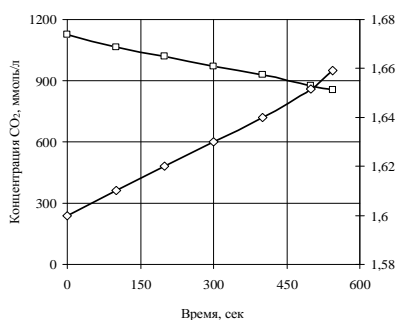


Рис. 4. График изменения концентрации CO_2 , $Ca(OH)_2$ от времени процесса хемосорбции:
 —□— — концентрация $Ca(OH)_2$, ммоль/л;
 —◇— — концентрация CO_2 , ммоль/л

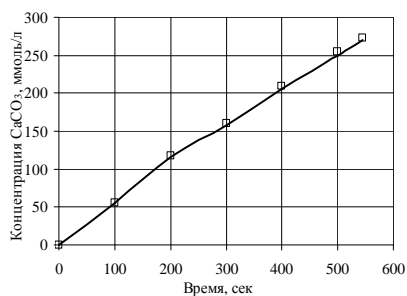


Рис. 5. График изменения концентрации $CaCO_3$ от времени процесса хемосорбции

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кафаров, В.В. Метод кибернетики в химии и химической технологии / В.В. Кафаров. – М. : Химия, 1985.
2. Романцова, О.Н. Математическое моделирование хемосорбционного процесса : дис. ... канд. хим. наук : 02.00.76: защищена 20.01.76: утв. 07.08.76 / О.Н. Романцова. – М., 1976.
3. Рамм, В.М. Абсорбция газов / В.А. Рамм. – 2-е изд. перераб. и доп. – М. : Химия, 1976. – 655 с.
4. Исследование возможности нанесения гидроксида кальция на пористые материалы / Н.Ф. Гладышев, Т.В. Гладышева, С.И. Дворецкий, М.П. Архипова // Вестник Тамбовского государственного технического университета. – 2006. – Т. 12, № 4А. – С. 1065 – 1070.
5. Касаткин, А.Г. Основные процессы и аппараты химической технологии : учебник. – 7-е. изд. / А.Г. Касаткин. – М. : Госхимиздат, 1960. – 829 с.
6. Дворецкий, Д.С. Расчет и оптимизация процессов и аппаратов химических производств в среде Матлаб : учебное пособие / Д.С. Дворецкий, А.А. Ермаков, Е.В. Пешкова. – Тамбов : Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2005. – 80 с.

*Кафедра «Технологическое оборудование и пищевые технологии»,
ОАО «Корпорация «Росхимзащита»*