

А.М. Архаров, М.А. Колосов (МГТУ им.Н.Э.Баумана),
С.И. Арафайлов, А.Н. Белоглазкин, В.Д. Котелкин
(МГУ им. М.В. Ломоносова) Р.В. Дей, А.К. Роби (PRAXAIR INC.,
USA)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИКИ В БАРБОТАЖНОМ ХИМИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ

Изложена математическая модель процесса в химическом реакторе непрерывного действия с мешалкой в виде импеллера. Движение смеси жидкости и газа описано уравнением Навье—Стокса. Модель учитывает скольжение пузырей относительно жидкости и процесс растворения пузырей в ней. Такая модель справедлива для химических аппаратов, в которых реакции протекают в диффузионной области. Приведены результаты компьютерного моделирования барботажного процесса в осесимметричном реакторе окисления с интенсивной принудительной циркуляцией смеси. Рассчитаны поля скоростей жидкости и газа, а также распределение пузырей в объеме реактора.

В практике химического и нефтехимического производства широко применяются реакторы непрерывного действия с мешалкой и барботажом газообразного компонента [1], например реакторы для окисления. Принципиальная конструкция такого реактора приведена на рис.1. В реактор непрерывно подаются исходные компоненты и продукты реакции непрерывно отводятся в жидком или газообразном виде. Интенсивное перемешивание мешалкой обеспечивает выравнивание концентраций, что создает условия для индивидуальной химической реакции. Для правильного анализа работы и расчета такого реактора необходимо учитывать

много факторов, и прежде всего, — кинетику химической реакции и гидродинамику потоков в его объеме.

Во многих практически важных случаях достаточно рассматривать изолированно влияние одного из факторов. Например, иногда можно пренебречь кинетикой химической реакции, когда скорость реакции велика и значительно превосходит скорость диффузии, т.е. скорость поступления исходных компонентов в зону химической реакции. В случае простейшего описания химической реакции учитывают только скорости материального и теплового обменов. Характер всего процесса определяется соотношениями между этими скоростями. Можно выделить три случая:

скорость материального обмена (подвод компонентов и отвод продуктов реакции) значительно больше скорости реакции. Тогда скорость всего процесса определяется стадией химического превращения, законами кинетики химического процесса. Массообмен не влияет на скорость химической реакции и говорят, что

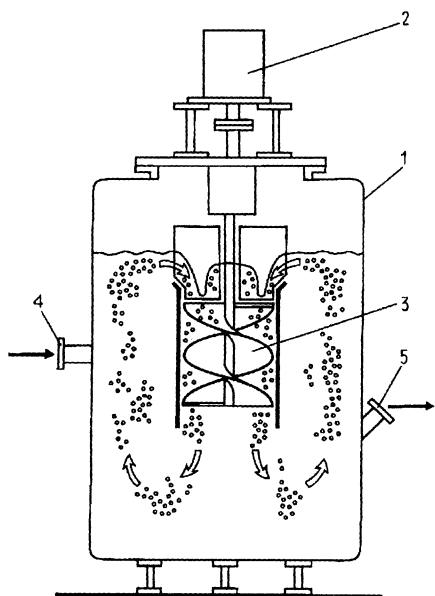


Рис.1. Принципиальная конструкция барботажного химического реактора:

1 — резервуар реактора; 2 — привод импеллера; 3 — импеллер, выполненный в виде шнека, помещенного в цилиндрический корпус. На входе импеллера поток формируется плоскими направляющими; 4 — канал подачи жидкого реагента; 5 — канал отвода жидкого продукта

реакция протекает в кинетической области;

скорость материального обмена значительно меньше скорости химического превращения. Скорость всего процесса определяется стадией массообмена, скоростью подвода компонентов в зону реакции и стадией диффузии. Скорость реакции находят по законам кинетики диффузионного процесса. Реакция протекает в диффузионной области;

при сопоставимых значениях скоростей реакции и диффузии, процесс протекает в переходной области и его скорость сложным образом зависит от скоростей материального обмена и химического превращения.

Как видно, результирующая скорость всего процесса зависит от скорости самой медленной элементарной стадии. Если реакция протекает в диффузионной области, т.е. скорость реакции значительно больше скорости подвода и отвода компонентов реакции, то перемешивание может значительно улучшить массообмен, особенно в газожидкостных системах. При перемешивании в таких системах фазы диспергируются, что увеличивает поверхность контакта. При установившемся процессе количество прореагировавшего вещества равно количеству вещества, перешедшему, продиффундировавшему из одной фазы в другую. Точное время пребывания реагирующих частиц в реакторе неопределенно и можно говорить только о среднем времени пребывания частиц в реакторе.

Поскольку исходные материалы непрерывно подаются, а продукты реакции непрерывно выводятся, их концентрации не будут постоянны по объему реактора. Но можно пренебречь флуктуациями в отдельной точке объема и считать эти концентрации постоянными во времени. Скорость реакции будет стационарной и пропорциональной концентрации в точке, т.е. будет переменной в пространстве, по объему реактора.

Работает барботажный химический реактор следующим образом (см.рис.1). В резервуар реактора через канал 4 непрерывно подается жидкий реагент. Жидкость непрерывно перемешивается импеллером 3, работающим от привода 2. На выходе импеллера в жидкость впрыскивается газообразный реагент, который диспергируется в мелкие пузырьки и барботируя через жидкость, растворяется. Жидкость насыщается веществом, переходящим из газообразной фазы, в жидкости протекает химическая реакция. Жидкий продукт непрерывно отводится через канал 5. Приведенные ниже расчеты выполнены для случая растворения газообразного кислорода в воде.

Модель динамики газожидкостной смеси. Динамику смеси жидкости с пузырьками будем описывать в целом, не разделяя ее на составляющие фазы. Альтернатива этому способу описания динамики многофазных сред — это модель взаимопроникающих континуумов, при формулировании которой требуется знание сил, с которыми фазы действуют друг на друга, что связано с дополнительными сложностями. Поэтому в настоящей работе реальные параметры фаз заменены средними параметрами гомогенной смеси как однородной среды, для которой записаны уравнения сохранения. Тогда силы взаимодействия фаз не будут влиять на динамику смеси, поскольку для смеси они внутренние и их сумма равна нулю. Аналогичным образом физико — химические превращения между фазами в целом не входят в уравнение баланса масс смеси.

Обозначим через ε газосодержание смеси, т.е. долю объема, занятого газовыми пузырями, тогда $(1 - \varepsilon)$ — доля объема, занятого жидкостью. Заметим, что найти функцию $\varepsilon(\bar{r}, t)$ в зависимости от координаты $\bar{r}$ и времени t , значит найти распределение газовых пузырей в реакторе. Будем отмечать индексами "f" и "g" величины, относящиеся к жидкой и газовой фазам. Тогда в общем случае плотность ρ и скорость v гомогенной смеси определяют как

$$\rho = (1 - \varepsilon) \rho_f + \varepsilon \rho_g ;$$
$$\rho \bar{v} = (1 - \varepsilon) \rho_f \bar{v}_f + \varepsilon \rho_g \bar{v}_g .$$

Учитывая, что плотность газа при нормальном давлении на три порядка меньше плотности жидкости ($\rho_g \ll \rho_f$), эти определения упрощаются:

$$\begin{aligned}\rho &= (1 - \varepsilon) \rho_f, \quad \rho_f = \text{const}; \\ \bar{v} &= \bar{v}_f.\end{aligned}\quad (1)$$

Используем для описания движения гомогенной среды уравнение Навье – Стокса

$$\rho \left[\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + (\bar{v} \nabla) \bar{v} \right] = - \bar{\nabla} p - \rho g \bar{e}_z + \mu \Delta \bar{v}, \quad (2)$$

где g — значение ускорения свободного падения; $\bar{e}_z$ — единичный вектор, направленный вертикально вверх по оси OZ ; μ — эффективный динамический коэффициент вязкости смеси. Поскольку основную долю смеси составляет жидкость, то ограничимся соотношением $\mu \approx \mu_f$. К уравнению (2) следует добавить уравнение неразрывности для смеси

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \bar{v}) = 0. \quad (3)$$

Уравнения (2) и (3) моделируют динамику смеси, они позволяют находить распределения скорости $\bar{v}$ и давления p , если предполагать распределение газовых пузырей ε известным. Для построения замкнутой модели барботажного процесса надо получить уравнения, позволяющие находить величину ε , если, в свою очередь, считать распределения $\bar{v}$ и p известными.

Для определения ε используем уравнение баланса массы газовой фазы. Так как скорости движения пузырей зависят от их размеров, то возможны пересечения траекторий пузырей, что значительно осложняет общую картину движения пузырей, делает ее неоднозначной. Нетрудно догадаться, что если бы из импеллера выходили пузыри одинакового размера, то (несмотря на то, что их размер изменялся при движении), траектории пузырей не пересекались бы. Воспользуемся этим обстоятельством для построения нашей модели. Сначала рассортируем выходящие из импеллера пузыри на несколько категорий таким образом, чтобы в одну категорию входили пузыри близких размеров. Затем будем считать, что все пузыри одной категории имеют строго одинаковый размер. Распределение пузырей каждой категории в объеме реактора ε_i будем вычислять отдельно. Тогда газосодержание

$$\varepsilon = \sum \varepsilon_i. \quad (4)$$

Для пузырей одной категории

$$\varepsilon = n V_B, \quad (5)$$

где индексы "i" для упрощения записи опущены; n — число пузырей в единице объема смеси; V_B — объем одного пузыря, индексом "B" отмечены величины, относящиеся к одиночному пузырю. Соотношение (5) позволяет разделить процессы разной природы, влияющие на изменение ε . Движение пузырей — механический процесс и его можно описать уравнением

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div}(n \bar{v}_q) = 0, \quad \text{при } V_B > 0. \quad (6)$$

В процессе пузырек газа может полностью раствориться в жидкости, что означает $n = 0$ при $V_B = 0$. Входящая в уравнение (6) скорость газа v_q складывается из скорости жидкости и собственной скорости пузырька относительно жидкости $\bar{v}_B$:

$$\bar{v}_q = \bar{v} + \bar{v}_B. \quad (7)$$

Изменение объема пузыря (входящий в уравнение (6) второй сомножитель) определяется фазовыми переходами, идущими на поверхности пузыря, прежде всего переходом газа из пузыря в жидкость, т.е. его растворением или наоборот. Эти переходы имеют физико-химическую природу. Такие процессы подробно рассмотрены в статье Архарова А.М., Лаврова Н.А., Котелкина В.Д., Дея Р.В. и Роби А.К. "Моделирование процессов массообмена при движении газовых пузырей через слой жидкости", помещенной в этом же журнале. В случае, когда растворение газа в жидкости не происходит, объем пузыря все таки немного изменяется, так как при перемещении пузыря изменяется давление в окружающей его жидкости. Давление в пузыре p_B

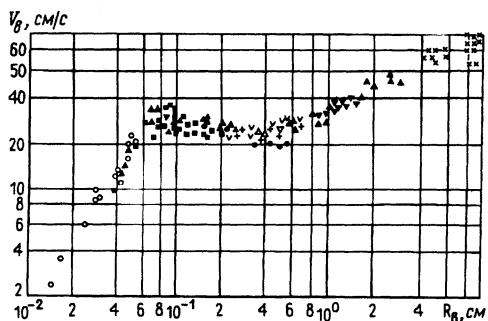


Рис.2. Относительная скорость всплытия одиночного пузырька воздуха в покоящейся объеме воды при давлении $p = 10^5$ Па

определяют по формуле Лапласа $p_B = p + \frac{2 \cdot \sigma}{R_B}$ где σ — коэффициент поверхностного натяжения; R_B — радиус пузыря. Оценки показывают, что для пузырей, размеры которых больше 1 мм, вклад в давление сил поверхностного натяжения пренебрежимо мал по сравнению с внешним атмосферным давлением. Поэтому будем считать $p_B = p$. Так как при постоянной температуре газа $pV = \text{const}$, то при отсутствии растворения газа

$$V_B = B_B^n \frac{p^H}{p}, \quad (8)$$

где V_B^H и p^H — объем пузыря и давление в месте инъекции газа в объем реактора. В расчетах, приведенных ниже, газ инжектируется на выходе из импеллера.

Отметим, что все приведенные выше соотношения выполняются с высокой точностью, тогда как последующие замыкающие соотношения для $\bar{V}_B$ и V_B будут содержать приближенные экспериментальные данные, степень приближенности которых и будет определять точность модели.

Вопрос об относительной скорости движения пузыря представляет собой в теоретическом плане очень сложную задачу. Поэтому целесообразно использовать для определения скорости пузыря более надежные экспериментальные данные [2]. На рис.2 приведены экспериментальные данные о скорости всплытия одиночных пузырей в покоящейся жидкости.

Из этого рисунка видно, что в интересующем нас диапазоне размеров пузырей от 1 до 10 мм эксперименты дают очень слабую зависимость скорости пузырей от их размера. Это можно использовать в дальнейшем для сокращения объема вычислений. Скорость всплытия пузыря зависит еще от градиента давления в окружающей жидкости. Причем распределение давления в окружающей жидкости влияет не только на величину скорости пузыря, то и на ее направление. Будем считать, что скорость пузыря в каждый момент времени направлена противоположно градиенту давления в жидкости.

Таким образом, для относительной скорости пузыря можно написать соотношение

$$\bar{V}_B = -B(|\bar{\nabla} p|, R_B) \frac{\nabla p}{|\nabla p|}, \quad (9)$$

в котором зависимость $B(|\bar{\nabla} p|, R_B)$ обобщает экспериментальные данные. Известно, что скорость одновременного всплытия нескольких пузырей оказывается

несколько больше скорости всплытия одиночного пузыря. При необходимости учета этого эффекта в дальнейшем можно ввести в формулу (9) коэффициент, зависящий от газосодержания ε .

Соотношения (1)...(9) в совокупности составляют математическую модель барботажного процесса. Из этих соотношений только (2), (3) и (6) — дифференциальные уравнения, требующие численного решения. Эти уравнения позволяют рассчитать распределение $\bar{v}$, ρ и n в реакторе. Все остальные переменные ρ , ε , V_B , $\bar{v}_q$, $\bar{v}_B$ выражаются через них по простым формулам (1), (4), (5), (7), (8) и (9).

При наличии растворения газа в жидкости формулу (8), учитывающую изменение объема пузыря, надо также заменить на дифференциальное уравнение. Газосодержание связано не только с движением пузырей, но и с интенсивностью растворения газа в жидкости. В этом случае газосодержание описывают уравнением неразрывности вида:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \operatorname{div} \varepsilon (v + \bar{v}_B) = -m (c_{\max} - c).$$

Интенсивность массообмена определяется коэффициентом массопереноса m и разностью предельной концентрации $c_{\max}$ насыщения реагента в жидкости и текущей концентрации c этого реагента в жидкости. Коэффициент массопереноса рассчитывают по критериальным зависимостям, обобщающим данные экспериментов. При моделировании работы этого реактора начальную газовую нагрузку задавали на выходе из импеллера. Далее газ растворялся в жидкости. Растворение возможно только до тех пор, пока текущая концентрация реагента в жидкости меньше предельной концентрации насыщения.

Подчеркнем, что уравнения (2), (3) и (6) содержат производные по времени и записаны в инвариантной векторной форме. Это значит, что они пригодны для моделирования произвольных барботажных процессов как стационарных, так и нестационарных, в том числе турбулентных; как осесимметричных, в том числе и закрученных течений, так и трехмерных течений. При этом сложности численного расчета разных случаев будут существенно различаться.

Критерии подобия. Для выявления критериев механического подобия барботажного процесса выберем характерные масштабы измерения величин и перейдем к безразмерным переменным. Для измерения длин целесообразно ввести два масштаба, за макромасштаб удобно взять радиус танка R_T , а за микромасштаб — средний радиус пузыря R_B^H на выходе из импеллера ($R_B^H = 2,5$ мм). В реакторе исследуемой конструкции скорости жидкости в разных частях танка отличаются на порядок, поэтому можно за масштаб скорости v_0 взять скорость всплытия пузыря среднего размера, что согласно рис.2 составляет около 30 см/с. Отметим, что такой выбор совпадает со средней скоростью жидкости в резервуаре лабораторной установки. За масштаб плотности взята плотность жидкой фазы ρ_f , т.е. воды. За масштаб градиента давления в смеси $|\bar{\nabla} p|$ принят гидростатический градиент давления в жидкости, равный $\rho_f g$.

Переходя к безразмерным переменным, путем деления прежних переменных на выбранные значения характеристики, запишем уравнения в виде

$$\left[\rho \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + (\bar{v} \bar{\nabla}) \bar{v} \right] = -\frac{1}{Fr} (\rho \bar{e}_z + \bar{\nabla} p) + \frac{1}{Re} \Delta \bar{v}; \quad (10)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \bar{v}) = 0; \quad (11)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \operatorname{div} (n \bar{v}_q) = 0; \quad (12)$$

$$\bar{v}_q = \bar{v} + B \bar{e}_p; B = B(|\bar{\nabla} p|, R_B); \bar{e}_p = -\frac{\bar{\nabla} p}{|\bar{\nabla} p|}; \quad (13)$$

$$\rho = 1 - \varepsilon; \varepsilon = \sum \varepsilon_i; \varepsilon_i = n V_B; V_B = V_B^* \frac{\rho^H}{\rho}, \quad (14)$$

где $Fr = \frac{v_0^2}{g R_T}$ — число Фруда; $Re = \frac{\rho_f v_0 R_T}{\mu_f}$ — число Рейнольдса.

Уравнения (10), (11) описывают динамику смеси, они содержат два критерия подобия Fr и Re . Для резервуара радиусом 1 м, заполненного водой и при характерных скоростях $\sim 0,3$ м/с, $Fr \sim 10^{-2}$, $Re \sim 3 \cdot 10^4$.

Уравнение (12) описывает распределение пузырей. Формулы (13) учитывают влияние, которое динамика смеси оказывает на распределение пузырей, а формулы (14) — обратное влияние, которое распределение пузырей оказывает на динамику смеси.

Система уравнений (10)...(14) описывает барботажный процесс в целом. Для учета растворения пузырей эта система должна быть дополнена соотношением, определяющим скорость изменения объема пузыря.

Подготовка модели для компьютерного моделирования. Для описания осесимметричной конструкции барботажного химического реактора с мешалкой в виде шнека (см.рис.1), воспользуемся цилиндрической системой координат r, φ, z , вертикальная ось z которой совпадает с осью симметрии реактора. В общем случае $\bar{v} = \{v_r, v_\varphi, v_z\}$. Дополнительно предположим, что течение в ней осесимметрично, т.е. не зависит от угла φ и не закручено, т.е. $v_\varphi = 0$. Тогда уравнение движения (10) в проекциях на оси r и z можно записать следующим образом:

$$\rho \left(\frac{\partial v_r}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} \right) = -\frac{1}{Fr} \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{Re} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_r}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} - \frac{v_r}{r^2} \right]; \quad (15)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = -\frac{1}{Fr} \left(\rho + \frac{\partial p}{\partial z} \right) + \frac{1}{Re} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right]. \quad (16)$$

Уравнения баланса (11) и (12) запишем в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho v_r) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho v_z) = 0; \quad (17)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r n v_r) + \frac{\partial}{\partial z} (n v_z) = 0. \quad (18)$$

Из выражения (13) получим

$$v_{qr} = v_r + \frac{B}{|\bar{\nabla} p|} \frac{\partial p}{\partial r}; v_{qz} = v_z + \frac{B}{|\bar{\nabla} p|} \frac{\partial p}{\partial z}; |\bar{\nabla} p| = \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial p}{\partial r} \right)^2}. \quad (19)$$

Подставляя выражение (19) в (18), исключив скорости газа v_{qr}, v_{qz} , получим вместо уравнений (18) и (19) одно:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r n (v_r + B_1 \frac{\partial p}{\partial r}) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[n (v_z + B_1 \frac{\partial p}{\partial z}) \right] = 0, \quad B_1 = \frac{B}{|\nabla p|}. \quad (20)$$

В компьютерном моделировании гидродинамических течений применяют два метода. Первый метод заключается в том, что по уравнениям (15)...(17) непосредственно рассчитывают величины v_z , v_r и p [3]. Второй метод заключается в том, что для установившихся течений вместо v_z , v_r и p по формулам

$$v_r = \frac{1}{\rho r} \frac{\partial \Phi}{\partial z}; \quad v_z = -\frac{1}{\rho r} \frac{\partial \Phi}{\partial r}; \quad (21)$$

$$\omega = \frac{\partial v_r}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial r} \quad (22)$$

вводят новые переменные — функцию тока Φ и вихрь ω , и все расчеты выполняют относительно этих переменных. Уравнение переноса для ω получают перекрестным дифференцированием уравнений (15) и (16), согласно соотношению (22), оно имеет вид

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + v_r \frac{\partial \omega}{\partial r} + v_z \frac{\partial \omega}{\partial z} + \omega \left(\frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = \frac{1}{\text{Re}} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \omega}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \omega}{\partial z^2} - \frac{\omega}{r^2} \right]. \quad (23)$$

В результате подстановки уравнения (21) в (22) получим уравнение для функции тока Φ

$$\omega = \frac{1}{\rho r} \left[r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \right] + \frac{1}{\rho^2 r} \left[\frac{\partial \Phi}{\partial r} \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} + \frac{\partial \Phi}{\partial z} \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right]. \quad (24)$$

После вычисления Φ , ω по выражениям (23) и (24), скорость находят из уравнения (21), а для определения градиента давления $\frac{\partial p}{\partial z}$, $\frac{\partial p}{\partial r}$ используют соотношение (15) и (16).

При составлении алгоритмов задавали следующие граничные условия. На оси реактора задавали условия симметрии. На стенках реактора, включая дно, и на стенках импеллера выполнялось условие непротекания и условие прилипания.

Верхняя поверхность жидкости моделируется горизонтальной плоской границей, непроницаемой для жидкости, но проницаемой для газа. Силы трения на верхней границе отсутствуют. Пространство, занятое импеллером, не включается в расчетную область. Выход из импеллера одновременно является входом в расчетную область, на этой границе заданы значения всех искомых величин. Эти значения могут быть произвольными функциями радиальной координаты, что позволяет моделировать различные газораспределительные и жидкостно-газораспределительные устройства, с помощью которых можно улучшить работу реактора.

Численное моделирование динамики жидкости и учет турбулентной вязкости. Наиболее сложная часть модели — уравнения, описывающие движение жидкости. Это обстоятельство проявилось в настоящей работе, больше всего сил и времени понадобилось для того, чтобы воспроизвести в расчетах реальную картину течения.

Так как числа Re исследуемого течения лежат в диапазоне от 10^4 до 10^6 , а современные численные методы позволяют рассчитывать течения только с числами $\text{Re} < 10^3 \dots 10^4$, то сначала мы моделировали отрывное течение в реакторе по схеме Бетчелора без учета вязких членов. Получаемые при этом результаты были далеки

от реальной картины течения. На следующем шаге был учтен турбулентный характер течения.

Принимая во внимание известный факт, что "турбулентная вязкость" значительно превосходит обычную молекулярную вязкость, мы дополнили уравнения движения вязкими членами и провели расчеты при меньших, т.е. турбулентных

числах Рейнольдса $Re_{\tau} = \frac{\rho_f v_0 R_{\tau}}{\mu_{\tau}}$, где μ_{τ} — коэффициент эффективной турбулентной вязкости.

Результаты этих расчетов показаны в виде линий тока на рис.3. Эти результаты компьютерного моделирования хорошо соответствовали визуальной картине течения, наблюдаемой в экспериментах на лабораторной модели химического реактора. Хорошее согласование расчетов с экспериментом имеет место в достаточно широком диапазоне значений Re_{τ} .

Для определения величины коэффициента турбулентной вязкости можно исходить из требования наилучшего совпадения получаемых численно результатов с экспериментальными данными. При компьютерном моделировании удобнее вместо коэффициента турбулентной вязкости подбирать непосредственно значение турбулентного числа Re_{τ} . Наилучшее совпадение результатов для реакторов данного типа достигали при $Re_{\tau} \sim 100$.

Обобщая опыт гидродинамических исследований, можно отметить, что определяющее влияние на получаемую картину течения оказывает трение на стенках. В расчетах с граничным условием на стенках, включающим коэффициент проскальзывания, мы получали существенно различные картины течений в реакторе.

Моделирование работы химического реактора окисления. Компьютерное моделирование процесса насыщения воды кислородом, осуществляемого в барботажном химическом реакторе, предполагает выполнение некоторых принципиальных гипотез.

Предполагается, что концентрация растворенного в воде кислорода, изменяясь в ходе процесса, остается однородной во всем объеме аппарата, т.е. принимается модель идеального смешения. Для принятия этого допущения имеются веские причины. Локальные неоднородности концентрации быстро выравниваются за счет турбулентного характера течения и активного перемешивания жидкости импеллером. Кроме того, локальные неоднородности концентрации связаны с пузырями. Время существования отдельного пузыря, примерно равное периоду циркуляции жидкости в аппарате, во много раз меньше, чем время полного насыщения жидкости кислородом. Естественно считать, что пузыри с равной вероятностью появляются во всем объеме жидкости. Правда, последнее обстоятельство относится только к жидкости, проходящей через импеллер, и не относится к жидкости, захваченной торoidalным вихрем в нижней части аппарата.

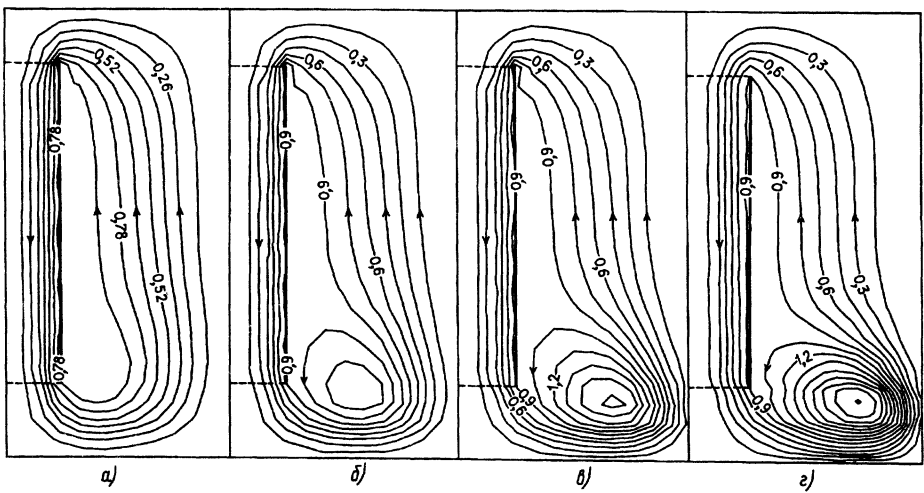


Рис.3. Влияние числа Рейнольдса на динамику жидкости и структуру потока в химическом реакторе окисления

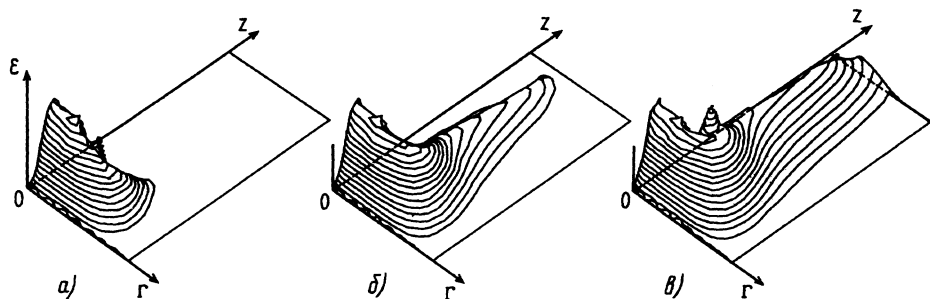


Рис.4. Влияние коэффициента массопередачи m на распределение газосодержания в объеме реактора при $v_H = 1,5$ м/с; $Re_T = 100$

Другая используемая в модели гипотеза заключается в том, что массообмен каждого из пузырей, движущихся вместе с жидкостью, близок к массообмену одиночного пузыря, всплывающего в покоящейся жидкости.

Указанные допущения позволяют моделировать движение пузырей в реакторе с учетом процесса растворения пузырей, т.е. моделировать работу барботажного химического реактора.

Ясно, что распределение газовых пузырей в реакторе зависит не только от гидродинамических условий, но и от скорости растворения пузырей, которая в свою очередь убывает по мере насыщения жидкости кислородом. Поэтому одним из направлений работы было выбрано исследование влияния скорости растворения пузырей на гидродинамику потоков.

Моделирование динамики смеси. Распределение газовых пузырей. Выше было представлено движение жидкости без пузырей. После конкретизации турбулентного числа Рейнольдса и получения на модели картины течения жидкости, адекватной картине течения в лабораторном реакторе, можно было перейти к описанию движения газожидкостной смеси, т.е. жидкости с пузырями.

Расчеты показали, что при газовой нагрузке до 15 % добавление к жидкости пузырей оказывает слабое влияние на картину течения смеси. На рис.4 показана зависимость распределения газовых пузырей от скорости их растворения при неизменных гидродинамических условиях. Другими словами, поверхности на рис.4 представляют собой эволюцию технологического процесса в барботажном химическом реакторе с течением времени. Рис.4,а иллюстрирует распределение газосодержания в начальный период работы реактора, а рис.4,в — на заключительной стадии работы реактора, когда жидкость насыщенная.

Моделирование показало существенную зависимость движения пузырей от динамики жидкости, причем не только от картины течения, т.е. расположения линий тока, но и от скорости течения жидкости, т.е. от числа оборотов импеллера. Картина распределения газовых пузырей в реакторе приведена в виде стереографического изображения функции $\varepsilon(r, z)$ на рис.5. Объемная доля ε , приходящаяся на газ, показана в виде поверхности над координатной плоскостью r, z , чем больше содержание газа, тем выше проходит изображающая поверхность.

На этих рисунках показана динамика распределения газовых пузырей в реакторе при изменении скорости жидкости. Из рис.5 видно, что компьютерное моделирование качественно дает ожидаемый результат: при малой скорости течения жидкости всплытие пузырей происходит вблизи стенки импеллера, с увеличением скорости жидкости область, в которой имеются пузыри, расширяется.

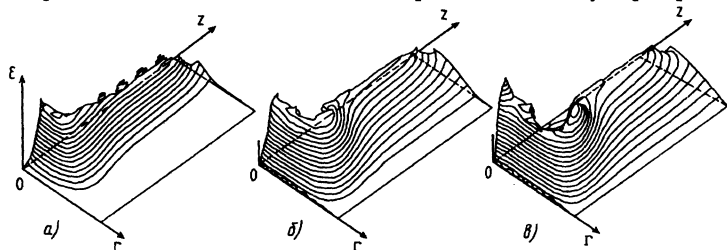


Рис.5. Влияние скорости нагнетания v_H на распределение газосодержания при $\varepsilon_H = 0,15$; $Re_T = 100$

1. Брайнес Я. М. Введение в теорию и расчеты химических и нефтехимических реакторов. — М.: Химия, 1968. — 248 с.
2. Кутателадзе С. С. Теплопередача и гидродинамическое сопротивление. Справочное пособие. — М.: Энергоатомиздат, 1990 г. — 367 с.
3. Роч П. Вычислительная гидродинамика. — М.: Энергоатомиздат, 1984 г.

Статья поступила в редакцию 8.07.96

Михаил Анатольевич Колосов родился в 1956 г., окончил в 1980 г. МВТУ им. Н.Э. Баумана. Канд.техн.наук, доцент кафедры "Криогенная техника и кондиционирование" МГТУ им. Н.Э. Баумана. Имеет более 20 научных работ в области техники низких температур.

M.A. Kolosov (b.1956) graduated from Bauman Moscow Higher Technical School in 1980. PhD(Eng), ass.professor of "Cryogenics and Air Conditioning" Department of Bauman Moscow State Technical University. Author of more than 20 publications in the field of low temperature technology.



Сергей Игоревич Арафайлов родился в 1961 г., окончил в 1983 г. МГУ им. М.В. Ломоносова. Канд.физ.-мат.наук, доцент кафедры "Аэромеханика и газовая динамика" МГУ им. М.В. Ломоносова. Имеет 15 научных работ. Специализируется в области сверхзвукового течения газа.

S.I. Arafaylov (b.1961) graduated from Lomonosov Moscow State University in 1983. PhD(Phys.-Math.), ass.professor of "Aeromechanics and Gas Dynamics" Department of Lomonosov Moscow State University. Author of 15 publications. Specializes in the field of supersonic gas streams.

Александр Николаевич Белоглазкин родился в 1960 г., окончил в 1983 г. МГУ им. М.В. Ломоносова. Канд.физ.-мат.наук, научный сотрудник отдела компьютеризации библиотечных процессов научной библиотеки МГУ. Имеет 10 научных работ в области дозвуковых и транзвуковых течений.

A.N. Beloglazkin (b.1960) graduated from Lomonosov Moscow State University in 1983. PhD(Phys.-Math.), researcher of computerization department of the Lomonosov MSU scientific library. Author of 10 publications in the field of subsonic and transonic streams.

Вячеслав Дмитриевич Котелкин родился в 1950 г., окончил в 1972 г. МГУ им. М.В. Ломоносова. Канд.физ.-мат.наук, доцент кафедры "Аэромеханика и газовая динамика" МГУ им. М.В. Ломоносова. Имеет более 30 научных работ в области аэродинамики химико-технологических аппаратов, проектирования крыловых профилей.

V.D. Kotyelkin (b.1950) graduated from Lomonosov Moscow State University in 1972. PhD(Phys.-Math.), ass.professor of "Aeromechanics and Gas Dynamics" Department of Lomonosov Moscow State University. Author of more than 30 publications in the field of aerodynamics of chemical technology apparatus, airfoil designing.

Анна Роби является менеджером по маркетингу в области химических продуктов и очистки компании "Праксэйр" в городе Денбери, штат Коннектикут, США. Получила ученую степень доктора философии (химия) в Делаверском университете и бакалавра химии в Виллановском университете. Д-р Роби проработала 5 лет в отделе прикладных исследований и развития компании "Праксэйр" по направлению исследования процессов органического окисления в жидкой фазе.

Anne Roby is a Marketing Manager of chemicals and refinery for "PRAXAIR Inc." in Danbury, Connecticut, USA. She received a PhD (Chemical Eng.) from the University of Delaware and a Bachelor's of Chem.Eng. from Villanova University. Dr. Roby has worked for 5 years in the Department of Applied Research and Development at "PRAXAIR" in the research field of liquid phase organic oxidation processes.



Роджер Дей является заместителем директора компании "Праксэйр" в городе Территаун, штат Нью-Йорк, США. Получил ученую степень доктора философии (химия полимеров) в Теннесском университете и бакалавра химии в Чарлестонском колледже. Доктор Дей проработал четыре года в отделе прикладных исследований и развития компании "Праксэйр" по направлению новых применений промышленных газов для химической промышленности.

Roger Day is an Associate Director of "PRAXAIR Inc." in Terrytown, New-York, USA. He received a PhD (Polymer Chemistry) from the University of Tennessee and a Bachelor's in Chemistry from College Charleston. Dr. Day has worked for four years in the Department of Applied Research and Development at "PRAXAIR" for the field of new applications of industrial gases for chemical industry.

