

МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ МАССОПЕРЕДАЧИ В УСЛОВИЯХ САМОПРОИЗВОЛЬНОЙ МЕЖФАЗНОЙ КОНВЕКЦИИ НА ПЛОСКОЙ ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ФАЗ

Л.А. Стенин, С.А. Ермаков

*Кафедра «Процессы и аппараты химической технологии»,
ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого
Президента России Б.Н. Ельцина», г. Екатеринбург; leonidd123@el.ru*

Представлена членом редколлегии профессором В.И. Коноваловым

Ключевые слова и фразы: массопередача; метод Монте-Карло; самопроизвольная межфазная конвекция.

Аннотация: Представлен способ аппроксимации кинетических кривых массопередачи в условиях самопроизвольной межфазной конвекции с помощью метода Монте-Карло. С помощью численных экспериментов найдены границы его применимости.

Обозначения

<p>c – концентрация, кмоль/м³; K_m – коэффициент массопередачи, м/с; L – концентрация переносимого вещества в режиме самопроизвольной межфазной конвекции в нулевой момент времени, кмоль/м³; M – концентрация переносимого вещества в «диффузионном» режиме в нулевой момент времени, кмоль/м³;</p>	<p>$S_{уд}$ – удельная межфазная поверхность, м⁻¹; t – время, с; β_d – подэкспоненциальный множитель для «диффузионного» режима; $\beta_{смк}$ – подэкспоненциальный множитель для режима самопроизвольной межфазной конвекции.</p>
--	---

В данной работе показано моделирование переноса масляной кислоты из бензола в водный раствор гидроксида натрия в условиях самопроизвольной межфазной конвекции. При описании процессов массопередачи вещества через плоскую границу раздела фаз можно применять [1] двухэкспоненциальную функцию

$$c(t) = Le^{-\beta_{смк} S_{уд} t} + Me^{-\beta_d S_{уд} t} \quad (1)$$

Предполагается, что массопередача состоит из двух процессов; каждое слагаемое в уравнении (1) описывает отдельный процесс. Первый процесс – это массоперенос в режиме самопроизвольной межфазной конвекции (СМК). Второй процесс – это массоперенос по диффузионно-конвективному механизму («диффузионный» режим). Оба процесса идут одновременно.

Поиск решения осуществлялся методом Монте-Карло. Для каждого эксперимента было проведено 700 000 бросков случайных чисел L , M , $\beta_{смк}$ и β_d , рассчитывалась сумма квадратов отклонения расчетной кривой от экспериментальной. Результатом работы программы является минимальная сумма квадратов отклонений расчетной кривой от экспериментальной и соответствующие ей коэффициенты L , M , $\beta_{смк}$ и β_d .

В настоящей работе была поставлена задача: оценить надежность аппроксимации экспериментальных данных и установить границы применимости данного метода. Для этого использовались коэффициенты L , M , $\beta_{\text{смк}}$ и $\beta_{\text{д}}$, экспериментально полученные при массопереносе масляной кислоты концентрацией $1,58 \text{ кмоль/м}^3$ из бензола в водный раствор гидроксида натрия концентрацией $1,56 \text{ кмоль/м}^3$, так как при этой концентрации был проведен эксперимент. Коэффициенты $L = 1,04 \text{ кмоль/м}^3$, $M = 0,54 \text{ кмоль/м}^3$, $\beta_{\text{смк}} = 1,05 \cdot 10^{-4} \text{ м/с}$, $\beta_{\text{д}} = 1,01 \cdot 10^{-5} \text{ м/с}$ были приняты за «эталон». С их помощью была построена эталонная кривая изменения концентрации в отдающей фазе от времени. Кривая была построена по тринадцати точкам, что согласовано с экспериментальными данными. Затем к каждой точке эталонной кривой случайным образом добавлялась абсолютная погрешность в диапазонах ± 2 , ± 4 , ± 6 , ± 8 и ± 10 %. Таким способом проводилось «зашумление» эталонных данных (рис. 1).

Затем с помощью программы были найдены коэффициенты L , M , $\beta_{\text{смк}}$ и $\beta_{\text{д}}$ и суммы квадратов отклонений. Данные представлены в табл. 1.

Из табл. 1 можно видеть, что при абсолютной погрешности экспериментальных данных ± 6 % погрешность расчета коэффициентов L , M , $\beta_{\text{смк}}$ и $\beta_{\text{д}}$ не превышает ± 5 %. Показателем достоверности аппроксимации может служить сумма квадратов отклонений расчетной и экспериментальной кривых. При удовлетворительной достоверности аппроксимации, как видно из табл. 1, сумма может быть

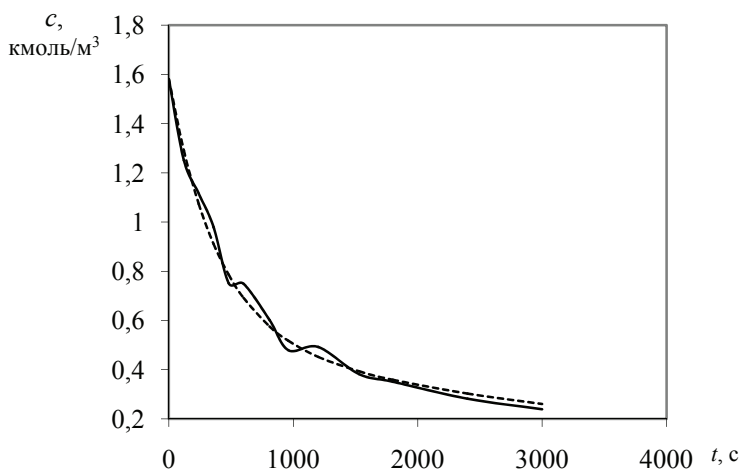


Рис. 1. Моделирование зависимости концентрации масляной кислоты в отдающей фазе (бензоле) от времени:
 - - - - эталонная кривая; — — — кривая, полученная добавлением к эталонной кривой абсолютной погрешности в диапазоне ± 10 %

Таблица 1

Степень отклонения расчетных коэффициентов от эталонных при различной степени «зашумления» эталонных данных

Степень «зашумления» (\pm), %	ΔL , %	ΔM , %	$\Delta \beta_{\text{смк}}$, %	$\Delta \beta_{\text{д}}$, %	Сумма квадратов отклонений
2	0,96	1,85	1,49	1,76	$9,24 \cdot 10^{-4}$
4	1,44	2,78	3,90	3,41	$1,08 \cdot 10^{-3}$
6	2,40	4,63	4,17	4,98	$5,73 \cdot 10^{-3}$
8	18,3	35,2	24,3	59,8	$1,03 \cdot 10^{-2}$
10	6,73	13,0	8,08	24,4	$7,99 \cdot 10^{-3}$

**Отклонение массового потока первого и второго процессов
в зависимости от погрешности, прибавляемой к эталонной кривой**

Степень «зашумления» эталонной кривой (\pm), %	Отклонение массового потока, %	
	1 процесс	2 процесс
2	0,55	2,96
4	0,83	5,40
6	2,28	3,66
8	13,6	99,5
10	3,7	32,0

порядка 10^{-3} , но не выше $5,73 \cdot 10^{-3}$. При суммарном влиянии различных факторов (абсолютной погрешности) на процесс переноса вещества более 8–10 % отклонения коэффициентов значительны и сумма квадратов отклонений велика – от $8 \cdot 10^{-3}$ до значений порядка 10^{-2} .

В присутствии быстрой химической реакции массопередача осуществляется из лимитирующей фазы, и коэффициент массопередачи рассчитывают по формуле (2)

$$k_m = \frac{dc(t)}{dt S_{уд} c(t)}. \quad (2)$$

Интересно было оценить отклонение массового потока (площадь под кривой в координатах коэффициент массопередачи – движущая сила) в зависимости от степени «зашумления» эталонной кривой. Площадь под кривой во всех случаях была найдена численным интегрированием по рассчитанным коэффициентам L , M , $\beta_{смк}$ и β_d . Площадь под эталонной кривой для первого процесса равна $1,362 \cdot 10^{-4}$ кмоль/(м²·с). Для второго процесса – $6,77 \cdot 10^{-5}$ кмоль/(м²·с).

Таким образом, из табл. 2 можно сделать выводы о границах применимости аппроксимации двухэкспоненциальной кривой с помощью метода Монте-Карло. Данный метод применим при абсолютной погрешности экспериментальных данных не более ± 6 %. При абсолютной погрешности до ± 6 % массовые потоки в режиме СМК и в диффузионно-конвективном режиме можно рассчитать с погрешностью не более ± 4 %. Основным ориентиром, свидетельствующим о величине погрешности, может служить сумма квадратов отклонения расчетных данных от эталонной кривой. Полученная информация может быть полезна при исследованиях массопередачи, сопровождаемой быстрой химической реакцией в условиях СМК.

Список литературы

1. Вайсов, Д.В. Аппроксимация двухэкспоненциальной кривой экспериментальных данных процесса массопередачи с химической реакцией в условиях межфазной конвекции / Д.В. Вайсов, С.А. Ермаков // Тр. СвердНИИХиммаш. Сер. Оборудование для оснащения технолог. производств. – 2000. – № 7. – С. 134–141.

Modeling of Kinetics of the Mass Transfer under Conditions of Spontaneous Interfacial Turbulence on the Plane Interfacial Boundary

L.A. Stenin, S.A. Ermakov

*Department "Processes and Devices of Chemical Engineering",
Ural Federal University named after First President of Russia B.N. Eltsin,
Ekaterinburg; leonidd123@e1.ru*

Key words and phrases: mass transfer; Monte-Carlo method; spontaneous interfacial turbulence.

Abstract: The paper presents the approximation technique of kinetic curves of mass transfer using Monte-Carlo method in conditions of spontaneous interfacial turbulence. Its applicability boundaries are determined via numerical experiments.

Modellierung der Kinetik des Massenübergang in den Bedingungen der spontanen zwischenphasischen Konvektion auf der flachen Grenze der Phasenteilung

Zusammenfassung: Es ist das Verfahren der Approximation der kinetischen Kurven des Massenübergang bei den Bedingungen der spontanen zwischenphasischen Konvektion mit Hilfe der Methode von Monte-Karlo dargelegt. Mit Hilfe der Zahlexperimenten sind die Grenze seiner Benutzung gefunden.

Modélage de la cinétique du transfert de masse dans les conditions de la convection spontanée interfaciale sur une interface plate des phases

Résumé: Est présenté le moyen de l'approximation des courbes cinétiques du transfert de masse dans les conditions de la convection spontanée interfaciale à l'aide de la méthode Monte-Carlo. A l'aide des expériences numériques sont trouvées les limites de son application.

Авторы: *Стенин Леонид Алексеевич* – ведущий инженер кафедры «Процессы и аппараты химической технологии»; *Ермаков Сергей Анатольевич* – доктор технических наук, профессор кафедры «Процессы и аппараты химической технологии», ФГАОУ ВПО «УрФУ им. первого Президента России Б.Н. Ельцина», г. Екатеринбург.

Рецензент: *Ермаков Анатолий Александрович* – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой «Процессы и аппараты химической технологии», ФГАОУ ВПО «УрФУ им. первого Президента России Б.Н. Ельцина», г. Екатеринбург.