

## САНИТАРНАЯ ТЕХНИКА

УДК 628.52/53.001.24

М.И. ШИЛЯЕВ, Е.М. ХРОМОВА, А.Р. БОГОМОЛОВ, С.Н. ШИРОКОВА

### АДАПТАЦИЯ МОДЕЛИ АБСОРБЦИОННОЙ ОЧИСТКИ ГАЗОВ В ФОРСУНОЧНЫХ СКРУББЕРАХ НА ХЕМОСОРБЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ\*

Проводятся доказательства возможности использования абсорбционной модели для хемосорбционных процессов, реализуемых в форсуночных скрубберах, с предварительным экспериментальным определением констант фазового равновесия конкретных пар абсорбент–абсорбат в рамках решения обратной задачи уравнений абсорбционной модели.

Ключевые слова: форсуночные скрубберы, абсорбция, хемосорбция, математическое моделирование.

**1. Постановка задачи.** Математическая модель абсорбционной очистки газов от вредных газовых компонентов (далее абсорбционная математическая модель — АММ), разработанная в [1, 2], может быть адаптирована на хемосорбционные процессы. В рамках решения обратной задачи уравнений АММ по экспериментальным значениям входных и выходных параметров очищаемого газового потока в газоочистном аппарате определяются эффективные коэффициенты фазового равновесия для пары абсорбент — абсорбат для процесса хемосорбции. При найденных эффективных коэффициентах равновесия, зависящих от температуры и концентрации хемосорбционных добавок в водном растворе абсорбента, представляется возможность проводить оптимизацию режимных и геометрических параметров газоочистных установок на основе решения прямой задачи. На первом этапе исследований была использована АММ для пенных аппаратов (ПА) [2, 3], с помощью которой проведена тестовая проверка самой идеи на экспериментальных данных [4] хемосорбционного процесса, реализующегося в барботажной колонне при извлечении  $\text{SO}_2$  на водный раствор  $\text{NH}_4\text{HCO}_2$ . Сравнение опытных и расчетных результатов извлечения  $\text{SO}_2$  подтвердило правильность постановки задачи в целом. Оценка расходных параметров очищаемых газов от  $\text{SO}_x$  и  $\text{NO}_x$  на ТЭС затрудняет использование ПА в качестве основных промышленных газоочистных устройств в силу их прежде всего ограниченности по объему пропускаемых газов, а также громоздкости и сложности обслуживания форсуночного хозяйства. Для этих целей наиболее подходящими являются скрубберы Вентури (СВ), широко используемые на ТЭС как газоочистители от пыли и вредных газовых компонентов одновременно, эффективность и экономичность очистки газов в них может быть существенно повышена за счет оптимизации этого комплексного процесса с помощью математического моделирования. Скорости газов в горловине трубы Вентури (ТВ) могут достигать 200–300 м/с.

\* Статья выполнена в рамках соглашения № 14.583.21.0004 ФЦП.

На втором этапе исследований была поставлена задача адаптировать АММ для форсуночных скрубберов и, в частности, для СВ для хемосорбционного процесса в рамках решения обратной задачи по нахождению коэффициентов фазового равновесия, отработав алгоритм на верифицированных расчетах в [1, 2] абсорбционного процесса извлечения  $\text{SO}_2$  на воду.

Значение коэффициента фазового равновесия в рамках поставленной обратной задачи определяется как решение уравнения

$$\eta(m_{px}) = \eta_{\text{экс}},$$

где  $m_{px}$  — коэффициент фазового равновесия;

$\eta_{\text{экс}}$  — экспериментальное значение эффективности извлечения целевого газового компонента.

Значение функции  $\eta(m_{px})$  при заданном значении аргумента  $m_{px}$  находится из решения обыкновенных дифференциальных уравнений АММ для форсуночных скрубберов. В качестве такового устройства была выбрана модель трубы Вентури (ТВ) со следующими параметрами: диаметр горловины ТВ  $d_r = 0,02$  м, длина диффузора  $l = 0,2$  м, угол раствора диффузора  $\alpha = 6^\circ$ . Параметры конфузальной части не имеют значения для расчетов. Эти параметры заложены в экспериментальную установку со скоростью воздуха в горловине ТВ 80–100 м/с. Алгоритм численного решения вышеприведенного уравнения складывается из следующих шагов:

1) исходя из произвольно заданного начального приближения  $m_{px}^0$ , методом проб определяется интервал изоляции корня уравнения  $[m_{px}^{\text{лев}}, m_{px}^{\text{прав}}]$ ;

2) методом половинного деления с заданной точностью  $\varepsilon$  находится корень  $m_{px}$ ;

3) критерием завершения расчета служит выполнение неравенства

$$\frac{m_{px}^{\text{прав}} - m_{px}^{\text{лев}}}{m_{px}^{\text{прав}} + m_{px}^{\text{лев}}} < \varepsilon. \quad (1)$$

Для проверки работоспособности алгоритма были выполнены расчеты с использованием в качестве  $\eta_{\text{экс}}$  теоретических значений, полученных в результате решения прямой задачи с заданной зависимостью  $m_{px}$  (для  $\text{SO}_2$ ) от температуры [2]:

$$m_{px} = 2976,58T^2 - 1594158T + 215090898, \text{ Па}. \quad (2)$$

Решение обратной задачи (определение эффективного значения  $m_{px}$ ) проводилось при  $\varepsilon = 10^{-5}$ . Сопоставление полученных из решения обратной задачи значений  $m_{px}$  с зависимостями, использовавшимися при решении прямой задачи, подтвердили работоспособность алгоритма. При этом проведены расчеты прямой задачи с полученными значениями  $m_{px}$  и с табличными данными, отличия в результатах расчетов термодинамических параметров парогазового потока на всем протяжении диффузора ТВ, а также в концентрациях растворяемого при абсорбции  $\text{SO}_2$  в каплях диспергированной воды не обнаружено.

**2. Результаты расчетов.** Численная реализация алгоритма решения обратной задачи АММ, сформулированной в п. 1, осуществлялась при следующих граничных условиях для трубы Вентури (ТВ) на входе в диффузор (в горловине трубы):

— коэффициент орошения  $q$ ,  $\text{м}^3/\text{м}^3$  — 0,015;

- начальная скорость капель  $V_{k0}$ , м/с — 4,0;
- начальный размер капель  $d_{k0}$ , мкм — 136,83 (вычислялся по формуле Нукиямы—Танасавы, приведенной в [1, 2]);
- начальная температура капель  $T_{k0}$ , К — 333;
- начальная скорость парогазового потока  $U_0$ , м/с — 80;
- начальная концентрация  $SO_2$   $d_{10}$ , кг/кг сух. воздуха — 0,1;
- начальное влагосодержание  $d_{п0}$ , кг/кг сух. воздуха — 0,2;
- диаметр горловины ТВ, м — 0,02;
- длина диффузора  $l$ , м — 0,2;
- угол раствора диффузора, град. — 6;
- концентрация  $SO_2$  в капле  $c_{k1,0}$ , кг/кг воды — 0;
- концентрация частиц пыли в потоке  $C$ , г/м<sup>3</sup> — 0.

На выходе из диффузора трубы (по решению прямой задачи при аппроксимационной зависимости табличных данных для  $m_{px}$  (для  $SO_2$ )) задавалось расчетное значение эффективности извлечения  $SO_2$  на капли воды, в данном случае  $\eta_{SO_2} = 0,13491$ .

В соответствии с изложенным в п. 1 алгоритмом расчета найдено эффективное значение  $(m_{px})_{эф} = 2278087,616$  Па для данного варианта на всю длину диффузора, который меняется по длине при решении прямой задачи от  $1,9570 \cdot 10^6$  до  $2,2911 \cdot 10^6$  Па (рис. 1).

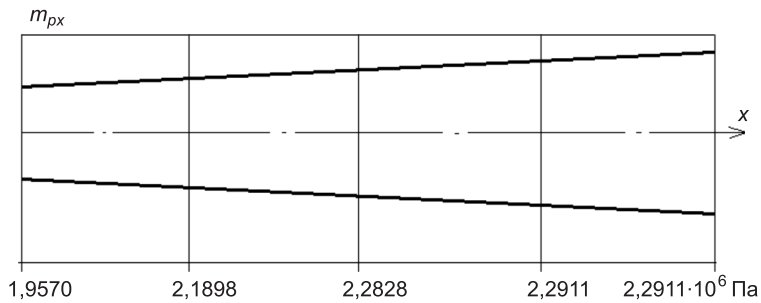


Рис. 1. Изменение  $m_{px}$  для  $SO_2$  по длине диффузора трубы Вентури

На рис. 2, 3 приведены результаты численного решения прямой задачи при табличных значениях  $m_{px}$  и эффективном значении  $(m_{px})_{эф}$  по извлечению  $SO_2$  на воду в трубе Вентури. Как видно из рис. 2, 3, результаты расчетов практически не отличаются. При этом значение эффективности извлечения  $SO_2$  при заданных условиях получается тем же:  $\eta = 0,13491$ .

**3. Обоснование правомерности использования законов Генри и Вант-Гоффа для хемосорбционного процесса.** В [5] отмечается: «При хемосорбции (абсорбция, сопровождаемая химической реакцией) абсорбируемый компонент связывается в жидкой фазе в виде химического соединения. При необратимой реакции равновесное давление компонента над раствором ничтожно мало и возможно полное его поглощение. При обратимой реакции над раствором существует заметное давление компонента, хотя и меньшее, чем при физической абсорбции».

Изотерма адсорбции Ленгмюра имеет вид [6]

$$A = A_{\infty} \frac{K_p P}{1 + K_p P}, \quad (3)$$

где  $A$  — величина абсорбции;

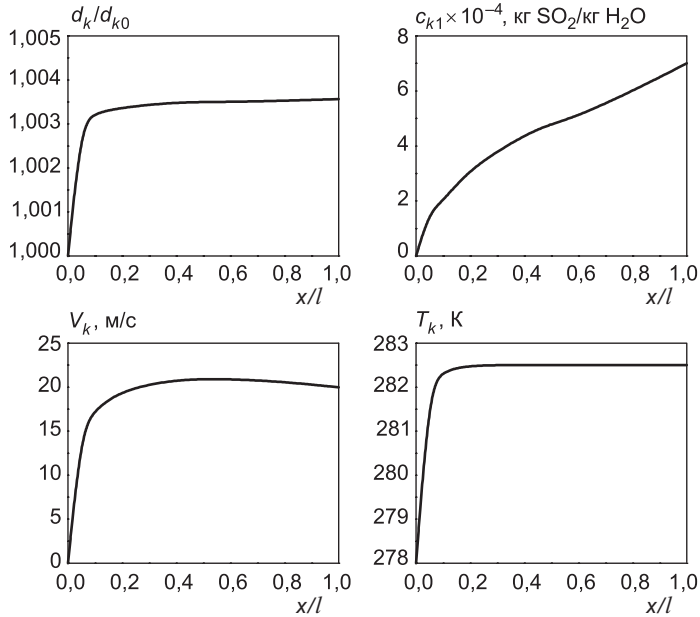


Рис. 2. Решение прямой задачи при табличных значениях  $m_{px}(T)$  для SO<sub>2</sub>

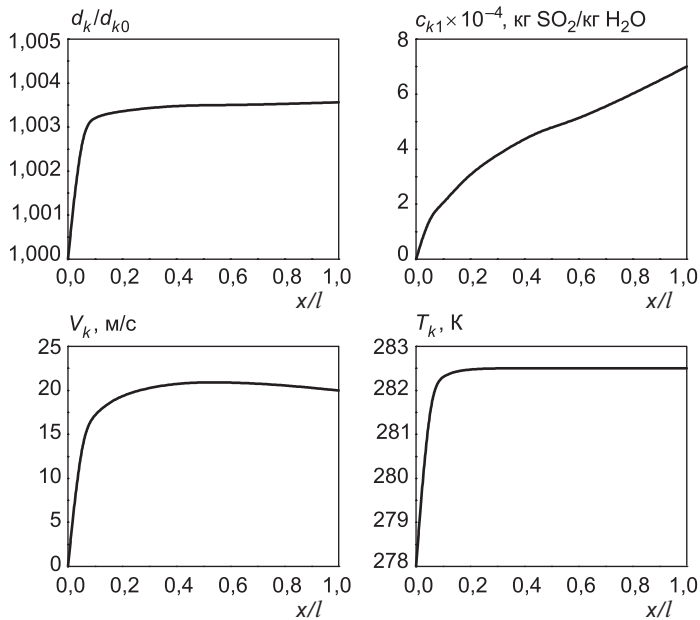


Рис. 3. Решение прямой задачи при  $(m_{px})_{эф} = 2,278087616 \cdot 10^6$  Па

$A_\infty$  — емкость абсорбционного монослоя или число абсорбционных центров, приходящихся на единицу площади поверхности или на единицу массы адсорбента;

$K_p$  — константа адсорбционного равновесия, чем сильнее взаимодействие адсорбата с адсорбентом, тем больше константа абсорбционного равновесия;

$P$  — парциальное давление газов и паров на границе раздела фаз.

При малых концентрациях или давлениях изотерма Ленгмюра переходит в закон Генри:

$$P = \frac{1}{K_p} \frac{A}{A_\infty}, \quad (4)$$

где  $\frac{1}{K_p}$  — есть аналог коэффициента равновесия  $m_{px}$  для физической абсорбции [5], а  $A/A_\infty$  соответствует мольной доле газового компонента по отношению к общему количеству вещества в жидкой фазе.

Тепловой эффект абсорбции определяется на основе известного уравнения Вант-Гоффа [6]. Однако здесь же замечается, что для хемосорбционного процесса этот эффект может быть на порядок большим, вместо 10–40 кДж/моль для физической адсорбции он может составлять для хемосорбции 40–400 кДж/моль. С целью выяснения влияния этого фактора на термодинамический процесс в целом и на абсорбционно-конденсационную газоочистку были проведены расчеты с повышенным тепловым эффектом в 10 раз и с обычным, вычисляемым по уравнению [5]:

$$r_i = \frac{RT^2}{M_i} \frac{d \ln m_{px,i}}{dT}, \text{ кДж/кг}, \quad (5)$$

где  $R = 8,314 \text{ кДж/кмоль} \cdot \text{К}$  — универсальная газовая постоянная;  $M_i$  — молекулярная масса  $i$ -го газового компонента.

Расчеты проводились для скруббера Вентури с параметрами трубы Вентури:

- длина диффузора  $l$ , м — 10;
- диаметр горловины  $D$ , м — 1,0;
- угол раствора диффузора, град. — 7;
- коэффициент орошения  $q$ , м<sup>3</sup>/м<sup>3</sup> — 0,015;
- скорость капель в горловине ТВ  $V_{k0}$ , м/с — 4,0;
- начальная температура капель  $T_{k0}$ , К — 278;
- скорость парогазового потока в горловине ТВ  $U_0$ , м/с — 62,1;
- влагосодержание  $d_{п0}$ , кг/кг сух. воздуха — 0,1;
- концентрация SO<sub>2</sub>  $d_{SO_2}$ , кг/кг сух. воздуха — 0,1; 0,5;
- входная концентрация пыли  $C_0$ , г/м<sup>3</sup> — 3,25;
- размер частиц пыли  $\delta_0$ , мкм — 0,1;
- температура парогазового потока в горловине ТВ  $T_{00}$ , К — 393; 1473.

Результаты сведены в таблицу. Тепловой эффект, увеличенный в 10 раз, на абсорбционный процесс проявляется незначительно, на конденсационное улавливание пыли влияет сильнее, но в обоих случаях со снижением газосодержания (в данном случае  $d_{SO_2}$ ) эти проявления становятся заметно слабее.

#### Результаты расчета эффективностей газо-и пылеочистки в СВ

№ п/п	$d_{п0}$ , кг/кг	$T_{00}$ , К	$\eta_{SO_2}$ , %, при $r_i$	$\eta_{SO_2}$ , %, при $10r_i$	$\Delta\eta_{SO_2}$ , %	$\eta_{п}$ , %, при $r_i$	$\eta_{п}$ , %, при $10r_i$	$\Delta\eta_{п}$ , %
1	0,1	393	57,455	56,239	1,216	35,325	40,757	5,432
2		1473	81,952	82,811	0,859	61,55	66,489	4,939
3	0,05	1473	83,202	82,581	0,621	65,263	65,526	0,263

Из проведенного анализа можно сделать вывод, что предлагаемая адаптация абсорбционной модели в форсуночных скрубберах на процессы хемосорбции для практических расчетов имеет все основания как с точки зрения применения закона Генри для равновесных параметров на границе раздела фаз, так и с точки зрения использования теплового эффекта абсорбции в форме уравнения (5).

Следует отметить, что в случае расчетов варианта 3 (см. таблицу) поведение и количественные значения всех термодинамических параметров (размеров капель, «образований» — частиц пыли с конденсатом на поверхности, температур капель, «образований», парогазового потока, концентраций  $\text{SO}_2$  в каплях и конденсате «образований», распределений потоков частиц пыли) незаметно отличаются друг от друга при  $r_i$  и  $10 r_i$ .

Это обстоятельство обосновывает возможность разработанную абсорбционную модель [1, 2] использовать для получения коэффициентов равновесия и для хемосорбционного процесса с помощью решения обратной задачи по опытным значениям концентраций целевого газового компонента и других теплофизических параметров на входе и выходе из экспериментальной установки. Алгоритм расчета и его проверка представлены выше.

**Выводы.** Предложенный алгоритм решения обратной задачи АММ на примере абсорбционного извлечения  $\text{SO}_2$  на воду в модельной трубе Вентури численно оправдался и может служить для экспериментального определения неизвестных коэффициентов фазового равновесия  $m_{px}$  процесса абсорбции для любых пар абсорбент — абсорбат в лабораторных условиях. Есть основание полагать, что этот алгоритм может быть формализовано использован и для определения эффективных коэффициентов равновесия хемосорбционных процессов также для любых пар абсорбент — абсорбат при задании на выходе из диффузора ТВ экспериментальных значений эффективности извлечения целевого компонента.

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Shilyaev, M.I. Modeling of heat and mass transfer and absorption-condensation dust and gas cleaning in jet scrubbers [Текст] / M.I. Shilyaev, E.M. Khromova // Mass Transfer — Advances in Sustainable Energy and Environment Oriented Numerical Modeling, Edited by Hironori Nakajima. — Vienna, Austria : In Tech, 2013. — P. 163–194.
2. Ш и л я е в, М.И. Контактный тепло- и массообмен в форсуночных и барботажных аппаратах. Моделирование, оптимизация тепломассообмена и абсорбционно-конденсационной пылегазоочистки [Текст] / М.И. Ш и л я е в, Е.М. Хромова, А.В. Толстых. — Германия : LAP LAMBERT Academic Publishing, 2012. — 273 с.
3. Ш и л я е в, М.И. Моделирование процессов абсорбции газов в барботажных аппаратах [Текст] / М.И. Ш и л я е в, А.В. Толстых // Теплофизика и аэромеханика. — 2013. — Т. 20, № 3. — С. 575–587.
4. Xiaolei, Li. Mass transfer of  $\text{SO}_2$  absorption with an instantaneous chemical reaction in a bubble column [Текст] / Li Xiaolei, Zhu Chunying, Lu Sumin, Ma Younguang // Brazilian Journal of Chemical Engineering. — 2013. — Vol. 30, № 03. — P. 551–562.
5. Р а м м, В.М. Абсорбция газов [Текст] / В.М. Рамм. — М. : Изд-во «Химия», 1976. — 655 с.
6. Ф р о л о в, Ю.Г. Курс коллоидной химии (Поверхностные явления и дисперсные системы) [Текст] / Ю.Г. Фролов. — М. : Химия, 1982. — 400 с.

*ШИЛЯЕВ Михаил Иванович, д-р техн. наук, проф.*

*Томский государственный архитектурно-строительный университет*

*ХРОМОВА Елена Михайловна, канд. физ.-мат. наук, доц.  
Томский государственный архитектурно-строительный университет  
БОГОМОЛОВ Александр Романович, д-р техн. наук, проф.  
Кузбасский государственный технический университет, г. Кемерово  
ШИРОКОВА Светлана Николаевна, асп.  
Томский государственный архитектурно-строительный университет*

Получено 13.02.15

**Shilyaev Mikhail Ivanovich**, doctor of technical sciences, professor, Tomsk State University of Architecture and Civil Engineering, Russia

**Khromova Elena Mikhaylovna**, candidate of physical and mathematical sciences, assistant professor, Tomsk State University of Architecture and Civil Engineering, Russia

**Bogomolov Alexander Romanovich**, doctor of technical sciences, professor, Kuzbass State Technical University, Kemerovo, Russia

**Shirokova Svetlana Nikolaevna**, post-graduate student, Tomsk State University of Architecture and Civil Engineering, Russia

### **ADAPTATION OF THE MODEL OF ABSORPTION GAS TREATMENT IN THE NOZZLE SCRUBBERS FOR CHEMISORPTION PROCESSES**

Validation is given to prove the possibility of using an absorption model for chemisorption processes implemented in the nozzle scrubbers, with preliminary experimental determination of phase equilibrium constants of specific pairs of absorbent–absorbate within the inversion equations absorption model.

**Key words:** nozzle scrubbers, absorption, chemisorption, mathematical modeling.

#### REFERENCES

1. Shilyaev, M.I. Modeling of heat and mass transfer and absorption-condensation dust and gas cleaning in jet scrubbers [Text] / M.I. Shilyaev, E.M. Khromova // Mass Transfer — Advances in Sustainable Energy and Environment Oriented Numerical Modeling, Edited by Hironori Nakajima. — Vienna, Austria : In Tech, 2013. — P. 163–194.
2. Shilyaev, M.I. Contact heat and mass transfer in the nozzle and bubble-agitated liquid coolers. Modeling, optimization of heat and mass transfer and absorption-condensing gas treatment [Text] / M.I. Shilyaev, E.M. Khromova, A.V. Tolstykh. — Germany : LAP LAMBERT Academic Publishing, 2012. — 273 p.
3. Shilyaev, M.I. Modeling of gases adsorption in bubble-agitated liquid coolers [Text] / M.I. Shilyaev, A.V. Tolstykh // Thermophysics and Aeromechanics. — 2013. — Vol. 20, N 3. — P. 575–587.
4. Xiaolei, Li. Mass transfer of SO<sub>2</sub> absorption with an instantaneous chemical reaction in a bubble column [Text] / Li Xiaolei, Zhu Chunying, Lu Sumin, Ma Younguang // Brazilian Journal of Chemical Engineering. — 2013. — Vol. 30, N 03. — P. 551–562.
5. Ramm, V.M. Absorption of gases [Text] / V.M. Ramm. — M. : Publishing house «Chemistry», 1976. — 655 p.
6. Frolov, Yu.G. Course of Colloid Chemistry (Surface phenomena and disperse systems) [Text] / Yu.G. Frolov. — M. : Chemistry, 1982. — 400 p.