

ВОЗМОЖНОСТЬ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СУШКИ РАСПЫЛЕНИЕМ С ПОМОЩЬЮ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Т. Вираг, Я. Желев* и Г. Халас

Научно Исследовательский институт технической химии ВАН

Поступило: 11 сентября 1986 г

Представлено проф. д-ом Ш. Сентдьерди

Abstract

General modelling of spray drying by differential equations and classical mixing models encounters difficulties. Application of integral equations enables us to surmount problems. Formulation of transport equations as Hammerstein-type integral equations, numerical method for their solution and their application for modelling of spray drying have been discussed.

Распылительная сушка является одной из самых распространенных в промышленности технологий сушки. Ее основное преимущество — возможность сушки термочувствительных материалов при большом температурном градиенте без перегрева материала — делает ее незаменимой в микробиологической, пищевой и химической промышленности. Многолетние исследования процессов, протекающих в распылительных сушилках, не привели к созданию надежной методики расчета. В настоящее время большинство исследователей работают над созданием единой методики расчета на базе совместного решения дифференциальных уравнений движения сушильного агента и дисперсной фазы с уравнениями турбулентного тепло- и массообмена. Основным стремлением является сделать методики универсальными, то есть чтобы они описывали с одинаковой точностью аппараты различной конструкции, различного подвода сушильного агента, различного места и способа распыления и т. д. [1]. Этот подход связан со следующими трудностями: — невозможность замкнуть и решить систему дифференциальных уравнений турбулентного тепло- и массообмена даже такого простого случая, как круглая струя [12];

* Институт химического машиностроения — Девня, Болгария. Настоящий адрес: Кафедра химического машиностроения Будапештского Политехнического Университета.

— невозможность точного учета влияния характерных для распылительной сушки эффектов (распыления, испарения и т. д.) на коэффициенты турбулентного обмена [1, 3];

— наличие больших различий в поведении различных материалов при одних и тех же условиях среды.

Решение этих проблем требует столько времени и средств, что вряд ли это произойдет в ближайшее время. В таких случаях отсутствие конкретных знаний, как правило, заменяется упрощениями, которые основываются, прежде всего, на инженерной интуиции и проверяются только для ограниченного числа конкретных случаев. Точность результатов при применении этих методов в новых ситуациях явно не гарантирована. Это относится и к большинству критериальных зависимостей для определения диаметра факела распыления, объемного коэффициента тепло- и массообмена и т. д. Этим объясняется и тот факт, что и в настоящий момент проектант не располагает существенно новыми сведениями по сравнению с фундаментальными исследованиями Маршалла [9, 10, 11] пятидесятых годов.

Комплексное решение подобных сложных проблем может быть осуществлено путем системного анализа процессов тепло- и массообмена [2, 4], подкрепленного надежной методикой экспериментального определения исходных данных. Основу анализа представляют различные модели перемешивания. В разработанных до настоящего момента методах аппарат разделяется на псевдосекции с идеальным перемешиванием, которые связаны каскадно. Число псевдосекций определяется эмпирическими уравнениями [4, 5, 6]. Этот подход более точен, чем произвольное рассматривание сушилки как аппарата идеального перемешивания или идеального вытеснения. Недостатком при этом является то, что для описания сушилок различных типоразмеров используются одни и те же модели перемешивания. Существенные различия в гидродинамике учитываются через число псевдосекций. На этой основе учитывается влияние перемешивания на движущую силу массообмена, которая принимается одинаковой для всего объема аппарата. Поэтому результаты вычислений имеют ориентировочный характер и не совсем обоснованную эмпирическую основу.

Применение единой модели перемешивания с помощью ядерной функции интегральных уравнений [13] устраняет эти недостатки, облегчая и численное решение задачи [7, 8]. Модель основывается на теории систем. Система рассматривается как единое целое и исследуются выходы, которые соответствуют данным воздействиям, берущимся в качестве входа. Ведется поиск общей зависимости между входящими и выходящими параметрами и определение экспериментов, которые необходимо провести, чтобы определить эту зависимость. Под системой

понимаем данную совокупность подобранных пар вход-выход. Система имеет некоторое внутреннее свойство — состояние системы $x(t)$, которое под воздействием какого-либо входного параметра $u(t)$, или независимо от него, изменяется каким-то образом во времени, однозначно характеризуя выход системы $y(t)$:

$$x(t) = \varphi[t, \tau, x(\tau), \{y(t')\}_{t' \in [\tau, t]}] \quad (1)$$

$$y(t) = \eta[t, x(\tau)], \quad t \geq \tau \quad (2)$$

Система является инвариантной по отношению ко времени и также линейной. Независимость от времени означает, что φ может быть функцией только $(t - \tau)$, а в η не участвует t . Система является линейной, когда множества входных величин, состояния и возможных выходов являются линейными пространствами; φ — линейное преобразование произведения пространства состояний и входов, а η — пространства состояний.

В этом случае уравнения (1) и (2) могут быть записаны в следующем виде:

$$x(t) = \int_{\tau}^t T(t-t') B u(t') dt' + T(t-\tau) x(\tau) \quad (3)$$

$$y(t) = L x(t). \quad (4)$$

Здесь B является фиксированным линейным оператором, трансформирующим пространство входных параметров в пространство состояний, $\{T(t)\}_{t \in [0, \infty)}$ есть такое семейство операторов, каждый элемент которого трансформирует пространство состояний на себя — он описывает изменение системы во времени. L — линейный оператор, трансформирующий поле состояния в поле возможных выходов.

$$T(0) = E \quad (5)$$

В момент t система характеризуется однозначно состоянием в момент τ и входом в течение периода $(t - \tau)$, что в линейном случае выражается через

$$T(t-\tau) = T(t) \cdot T(\tau) \quad (6)$$

На основе вышесказанного ясно, что модель описывает аппараты с непрерывным режимом работы, которые являются аэро- (или гидро-) динамически линейными и независимыми от времени.

Аэродинамическая линейность при традиционном описании дифференциальными уравнениями выражается в том, что коэффициенты, участвующие в балансе импульса, не зависят от плотности остальных экстенсивных величин, т. е. поле скоростей является независимым от

баланса компонент и может быть определено предварительно. Система является аэродинамически независимой от времени тогда, когда поле скоростей и коэффициенты кондуктивных потоков не зависят от времени (это, однако, не означает, что процесс должен быть стационарным). Необходимо обратить внимание на тот факт, что исполнение этих предположений требуется и при применении классических моделей перемешивания, несмотря на то, что при них не подчеркивается важность линейности и независимости системы от времени.

Для рассматриваемой модели фундаментальное значение имеет предположение о том, что распределение плотности характерных экстенсивных величин является состоянием системы.

В [13] доказано, что если выполнено условие асимптотической стабильности равновесного состояния, то через введение оператора:

$$\mathbf{K} = \int_0^{\infty} \mathbf{T}(s) ds \quad (7)$$

система (3) и (4) эквивалентна

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{K}\mathbf{u}(t) - \frac{d}{dt} \mathbf{K}\mathbf{x}(t) \quad (8)$$

Это общая форма реляции состояние — вход для линейных, независимых от времени и достаточно «быстро опорожняющихся» систем. Выражение (8) можно считать обобщением математических моделей аэродинамического линейного химического оборудования. В нем \mathbf{K} — один конечный линейный оператор, характеризующий гидродинамику процесса, протекающего в конкретном оборудовании.

Для каждого постоянного во времени входа системы, отвечающего предыдущим требованиям, существует одно асимптотическое стабильное состояние. Связь между постоянным входом и стационарным состоянием осуществляется оператором \mathbf{K} :

$$\mathbf{x} = \lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{x}(t) = \int_0^{\infty} \mathbf{T}(t') \mathbf{u} dt' = \mathbf{K}\mathbf{u} \quad (9)$$

Для одномерного случая уравнение (8) может быть записано в следующем виде:

$$x(z, t) = \int_0^L K(z, \zeta) \left[u(\zeta, t) - \frac{d}{dt} x(\zeta, t) \right] d\zeta \quad (10)$$

Тогда в стационарном случае, если с $\delta(\zeta - z_0)$ обозначим дельта-функцию Дирака, центрированную в точке z_0 , то

$$x(z) = \int_0^L K(z, \zeta) \delta(\zeta - z_0) d\zeta = K(z, z_0) \quad (11)$$

Следовательно, функция ядра $K(z, z_0)$, характеризующая поведение системы, имеет конкретный физический смысл: дает плотность экстенсивной величины x в точке z в стационарном состоянии, если в точке z_0 установлен единичный точечный источник. Этот факт можно использовать для непосредственного измерения функции ядра.

Если отделить действительный источник экстенсивной величины от количества, поступающего в аппарат вместе с инертным носителем, то обобщенную математическую модель одномерного аэродинамического линейного аппарата можно выразить с помощью интегрального уравнения:

$$x(z, t) = \frac{G}{v} + \int_0^L K(z, \zeta) \left[F(\zeta, z) - \frac{d}{dt} x(\zeta, t) \right] d\zeta \quad (12)$$

В уравнении (12) $x(z, t)$ — плотность экстенсивной величины в соответствующих аргументам моменту времени и места; G — входящий в аппарат поток; $K(z, \zeta)$ — функция ядра, характеризующая перемешивание, а $F(\zeta, z)$ — рассматриваемая в качестве входного параметра плотность источника экстенсивной величины.

Традиционным моделям перемешивания отвечает каждый раз специальная форма K , т. е. модель, описанная с помощью интегрального уравнения (12) действительно является общей формой знакомых моделей [2]. Например, модели аппарата с идеальным вытеснением соответствует функция ядра

$$K(z, \zeta) = \begin{cases} \frac{1}{v}, & \text{если } 0 \leq \zeta \leq z \leq L \\ 0, & \text{если } 0 \leq z < \zeta \leq L \end{cases} \quad (13)$$

Идеальному перемешиванию отвечает функция ядра

$$K(z, \zeta) = \frac{1}{v} (0 \leq z \leq L, \quad 0 \leq \zeta \leq L) \quad (14)$$

Если исследуется стационарный обмен J экстенсивных величин, то необходимо решить следующую нелинейную систему интегральных уравнений Гамерштейна:

$$x_j(z) = x_{0j} - \int_0^L K_j(z, \zeta) F_j[x_1(\zeta), x_2(\zeta), \dots, x_J(\zeta)] d\zeta \quad j = 1, 2, \dots, J \quad (15)$$

Она отличается тем, что функция ядра и функция источника могут быть сепарированы. Функция источника является нелинейной по отношению

x_j и границы интегрирования — константы. Для численного решения системы (15) разработан новый, численно стабильный метод [7, 8], сущность которого коротко состоит в следующем:

Интеграл в уравнении (15) выражается по методу прямоугольника (причем, конечно интегрирование нельзя выполнить). В [13] доказано, что этот подход эквивалентен замене оригинальной функции ядра соответствующей «ступенеобразной» функцией ядра, т. е., с инженерной точки зрения — работаем с некоторой модифицированной моделью перемешивания. Там же дана оценка возникающей при этом ошибки. Функция распределения x_j аппроксимируется рядом ступенеобразных функций в точках ($n=1, 2, \dots, N$), которые определяются итеративно. Пусть на m -той ступени итерации распределение будет $x_j^m(z_n)$. Тогда из разности правой и левой сторон уравнения (15) формируется следующая функция:

$$\Delta_j(z_n, x^m) = x_j^m(z_n) - x_{0j} + \int_0^L K_j(z_n, \zeta) F_j[x^m(\zeta)] d\zeta \quad (16)$$

Значения Δ образуют матрицу из J рядов и N столбцов.

Квадрат евклидовой нормы этой функции есть

$$I(x^m) = \|\Delta(z, x)\|^2 = \langle \Delta(z, x); \Delta(z, x) \rangle \quad (17)$$

или в развернутом виде:

$$I(x^m) = \sum_{n=1}^N \sum_{j=1}^J [\Delta_j(z_n, x^m)]^2 \quad (18)$$

Место минимума функционала $I(x^m)$ совпадает с решением уравнения (15). Для его определения необходимо образовать производную по направлению функционала $I(x)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial I(x)}{\partial w} &= \left. \frac{\partial I(x + a \cdot w)}{\partial a} \right|_{a=0} = \\ &= 2 \langle \Delta(z, x); \omega + \int_0^L K(z, \zeta) (F \circ \nabla) w d\zeta \rangle. \end{aligned} \quad (19)$$

Скалярное произведение в уравнении (19) имеет максимум, т. е. функционал изменяется наиболее быстро в том направлении, в котором:

$$\Delta(z, x) = w + \int_0^L K(z, \zeta) (F \circ \nabla) w d\zeta. \quad (20)$$

Отсюда необходимо определить w .

Решение этого линейного интегрального уравнения Фредгольма второго рода сводится к решению системы линейных уравнений:

$$\Delta_j(z_n, x) = w_j(z_n) + \frac{L}{N} \sum_{i=1}^N (z_n, \zeta_i) \sum_{l=1}^N \frac{\partial F_j(x(\zeta_i))}{\partial x_l} w_l(\zeta_i). \quad (21)$$

Функция w , полученная как решение уравнения (21), показывает направление, в котором необходимо модифицировать функцию распределения x , чтобы получить наиболее быстрое уменьшение функционала J :

$$x^{m+1} = x^m + a \cdot w^m \quad (22)$$

Степень коррекции a определяется таким образом, чтобы функционал I имел минимум в направлении w . Поиск экстремума производится с помощью упрощенного численного метода.

На основании опыта, накопленного при работе с численными методами и на основании физических соображений, итерации начинаются с гомогенного распределения температуры и концентрации, соответствующих равновесным значениям, вычисленным из входных данных.

Основные шаги алгоритма следующие:

1. С помощью распределения $z_n \rightarrow x_j^m(z_n)$, $n = 1, 2, \dots, N; j = 1, 2, \dots, J$ из уравнения (18) определяется $I(x_0^m)$.

2. Имея заданные F и K и вычисленную функцию Δ , решается уравнение (21) по отношению w .

3. На основании рассуждений, подобных итеративному методу Ньютона, принимая $a = 1$, с помощью (22) вычисляется модифицированное распределение x^{m+1} .

4. Из уравнения (18), на основании x^{m+1} , определяется $I(x^{m+1})$. Если $I(x^m) < I(x^{m+1})$, то повторяются вычисления с третьего шага с $a = a/2$, в противном случае — с первого шага, пока не получится $I(x) < \text{EPS}$.

При этом численном методе функции начального (пускового) распределения и функции ядра задаются, функция источника вычисляется и конечное распределение искомых экстенсивных величин определяется как ступенеобразная функция (набор дискретных значений). При использовании упрощенных моделей перемешивания, вроде данных из уравнений (13) и (14), функция ядра тоже вычисляется.

Описанная общая модель (12) и численный метод могут послужить для математического моделирования распылительной сушки. С этой целью сушильная камера разделяется на кольцеобразные псевдосекции с идеальным перемешиванием. Так как вид высушиваемого материала и скорость испарения слабо влияют на перемешивание, то аппарат можно рассматривать как аэродинамически линейный. Процессы являются

стационарными, следовательно, и независимыми от времени. Перемешивание сушильного агента (между псевдосекциями) существенно различается для аппаратов различного размера. Из-за этого в литературе сушилки небольшой производительности рассматриваются как аппараты с идеальным перемешиванием, а крупные распылительные сушилки — как аппараты с идеальным вытеснением (т. е. без перемешивания) [1, 4, 5]. В промышленных сушилках большой производительности разбивку можно сделать так, чтобы область факела охватывалась одной псевдосекцией. Так как вне ее относительная скорость сушильного агента и дисперсной фазы пренебрежимо мала, то можно считать, что обе фазы взаимно не перемешиваются, т. е. характеризуются одной и той же функцией ядра. Для сушилок диаметром до 2—3 м это не может быть выполнено и поэтому необходимо прибегать к аналитическому вычислению функции ядра для дисперсной фазы. Однако, в этом случае масштабирование значительно проще.

Необходимо подчеркнуть, что до настоящего времени не создана ни одна методика, которая обеспечила бы конструктора со всеми необходимыми данными, без проведения экспериментов на пилотной распылительной сушилке. Предлагаемая модель тоже не представляет исключения. Процессы обмена в области факела моделируются хорошо, а основное различие между пилотной и промышленной сушилками состоит в том, что вид перемешивания, т. е. движущая сила процесса различны. Используя общую модель перемешивания с интегральными уравнениями, можно на основе одного эксперимента для данного типоразмера надежно учесть этот эффект.

В каждой псевдосекции отдельно определяется плотность источников характерных экстенсивных величин — внутренняя энергия и влагосодержание дисперсной фазы, энтальпия и влагосодержание сушильного агента (в уравнениях (12) и (15) модели обозначены как F_j , $J=4$):

$$F_E = S\beta r[p - p_g - c(T_s - T_g)], \quad (23)$$

$$F_{xs} = -S\beta(p - p_g), \quad (24)$$

$$F_H = -BF_E, \quad (25)$$

$$F_{xg} = -BF_{xs}. \quad (26)$$

На основании этой концепции создан первый, упрощенный вариант вычислительной программы на ФОРТРАНе IV. Средний объемно-поверхностный диаметр распыленных капель вычисляется по формуле Фридмана—Маршалла [10]. Коэффициенты обмена определяются из критериальной зависимости Ранца—Маршалла [11]

$$\text{Nu} = 2 + 0,6 \text{Pr}^{1/3} \text{Re}^{1/2} \quad (27)$$

$$\text{Sh} = 2 + 0,6 \text{Sc}^{1/3} \text{Re}^{1/2} \quad (28)$$

В области витания частиц принимается

$$\text{Nu} = 2; \quad \text{Sh} = 2. \quad (29)$$

Зависимости применяются при условии, что частицы являются сферическими и что тепло- и массообмен протекает одинаково в каждой точке поверхности частиц. Предполагается, что испаряется чистая вода с поверхности инертного носителя.

Парциальное давление насыщенных паров над каплями определяется из эмпирической формулы ($T = 273 - 373 \text{ K}$)

$$p = \exp(25,5 - 5200/T_s). \quad (30)$$

Парциальное давление водяных паров в сушильном агенте вычисляется по формуле

$$p_g = x_g p_0 / (x_g + M_1), \quad (31)$$

где $M_1 = 0,62$ — отношение молекулярных масс водяного пара и воздуха.

При проведении вычислений по формулам (23)—(28) учитывается уменьшение диаметра в процессе испарения.

С помощью этой программы вычислено температурное и концентрационное поле в сушилке, диаметром 3,8 м. Камера разделена на 11 исевдосекций. Функция ядра вычислена аналитически, причем ее форма приближается до двухпараметрической диффузионной модели перемешивания с застойными зонами. Расчет проведен на IBM-370. Полученные результаты качественно совпадают с известными экспериментальными данными.

Обозначения

B, T, L — линейные операторы
 B — отношение масс инертного носителя и сухого воздуха

$$c = \frac{\alpha}{\beta \cdot r}$$

c_p — удельная теплоемкость, $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
 d — диаметр капель, m
 E — удельная внутренняя энергия дисперсной фазы, $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$
 $F(x(\zeta))$ — плотность источника
 F_E, F_H, F_{xg} — плотность источника соответственно E, H, x_g, x_s
 F_{xs}

G	— входящий в аппарат поток
H	— удельная энтальпия сушильного агента, $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$
$I = \ \Delta \ ^2$	— функционал
J	— число неизвестных экстенсивных величин
$K(z, \zeta)$	— функция ядра
L	— длина аппарата
M	— молекулярный вес растворителя
N	— число псевдосекций
Nu	— число Нуссельта
p	— парциальное давление насыщенных паров над частицей Pa
p_0	— полное давление, Pa
p_g	— парциальное давление паров в сушильном агенте, Pa
Pr	— критерий Прандтля
r	— удельная теплота испарения, kJ/kg
Re	— критерий Рейнольдса
S	— удельная поверхность фазового контакта, $\text{m}^2 \cdot \text{kg}^{-1}$
Sc	— критерий Шмидта
Sh	— число Шервуда
t, t', τ	— время, s
T_s, T_g	— температура частиц и газа, K
$u(t)$	— входной параметр системы
v	— скорость, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
w	— направление наиболее быстрого изменения
$x(t)$	— удельное значение характерной экстенсивной величины, состояние системы
x_s, x_g	— Влагосодержание частиц и газа
$y(t)$	— выход системы
z, ζ	— координата по длине аппарата
α	— коэффициент теплоотдачи, $\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
β	— коэффициент массоотдачи, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$

Литература

1. Долинский, А. А.—Мудриков, В. Н.—Дамский, Л. М.: Состояние и некоторые пути развития аналитических методик расчета распылительных аппаратов. в кн. Интенсификация тепло влагопереноса в процессах сушки. Киев, стр. 28—45 (1979).
2. Кафаров, В. В.—Дорохов, И. Н.: Системный анализ процессов химической технологии — Основы стратегии. Наука, Москва, стр. 199—280 (1976).
3. Раушенбах, Б. В.—Белы, С. А.—Беспалов, И. В.—Бородачев, В. Я.—Волынский, М. С.—Прудников, А. Г.: Физические основы рабочего процесса в камерах сгорания

- воздушно-реактивных двигателей. Машиностроение, Москва, стр. 140—174 (1964).
4. Фокин, А. П.—Балашов, Е. В.—Пирогов, Е. С.—Мартыненко, В. А.—Пронякин, Н. М.: Тепло- и массообменные распылительные аппараты для получения реактивов и особо чистых веществ. Обзорная информация. НИИТЭХИМ, Москва, стр. 1—39 (1980).
 5. Фокин, А. П.—Плановский, А. Н.—Акопян, Л. А.: ИФЖ, 8(1), 116—118 (1965).
 6. Фокин, А. П.—Ульянов, В. М.—Пирогов, Е. С.: К теории и расчета распылительных сушилок. В кн. Опыт применения распылительных сушильных установок. Киев, стр. 44—53 (1976).
 7. HALÁSZ, G.: *Alkalmazott Mat. Lapok*, 10, 125—148 (1984).
 8. HALÁSZ, G., VIRÁG, T.: *Computers and Chem. Eng.*, 177—179 (1982).
 9. HERRING, W. M.—MARSHALL, W. R.: *A. I. Ch. E. Journal*, 200—209 (1955).
 10. MARRSHALL, W. R.: *Chem. Eng. Progr. Monograph Series*, 50, No 2 (1954).
 11. RANZ, W. E.—MARSHALL, W. R.: *Chem. Engn. Progr.* 48, 141—146 173—180. (1952).
 12. SPALDING, D. B.: *Int. J. Heat Mass Transfer.* 23, 580 (1980).
 13. VIRÁG, T.: Ph. D. Thesis, Budapest, 1980.

Dr. Tibor VIRÁG }
Dr. Gábor HALÁSZ } H-8201 Veszprém POB 125
János ZHELEV H-1521 Budapest