

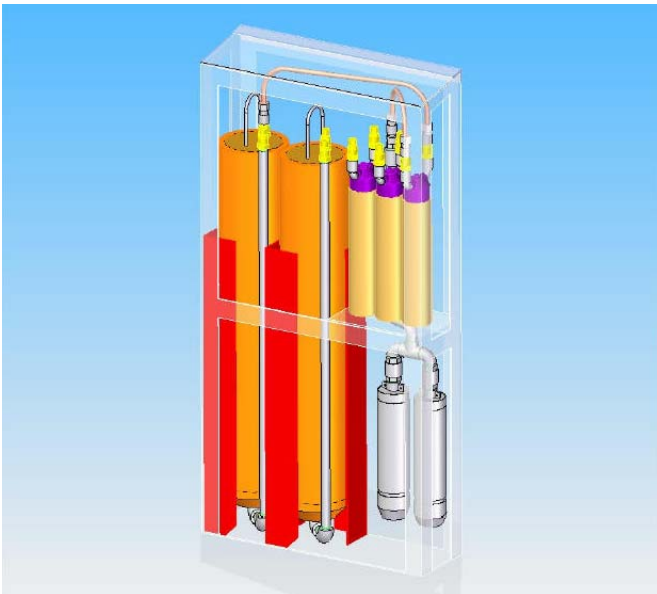
## MODELIRANJE PROCESA KONVEKTIVNE DESORPCIJE VODE IZ POLISTIRENSKE KATJONSKE SMOLE CG-8

Milan Stakić, Institut za nuklearne nauke „Vinča“, Centar NTI, mstakic@vin.bg.ac.yu  
Aleksandar Nikolić, Institut za nuklearne nauke „Vinča“, Centar NTI, anikolic@vin.bg.ac.yu

**Sadržaj** – U radu je predstavljen matematički model razvijen za određivanje uticaja strukturalnih i radnih parametara tokom procesa konvektivne dehidracije (desorpcije tečne faze iz čvrstog kapilarno-poroznog materijala), kao i mogućnost primene modela na slučaj desorpcije vode iz polistirenske katjonske smole CG-8. Model opisuje nestacionarni jednodimenzioni simultani prenos toplote i mase između gasa (vazduha) i čvrste faze (smole). Identifikacija efektivnih karakteristika prenosa urađena je za ispitivani nasuti sloj materijala (smola CG-8) korišćenjem podataka raspoloživih iz literature.

### 1. UVOD

Različiti tipovi katjonskih smola (Dowex 21K, GT73, CG-8 itd.) su u širokoj upotrebi u postupcima zaštite životne okoline. Kuglice ovih smola se koriste kao ispuna (adsorbent) za cilindrične adsorbicione kolone uređaja za prečišćavanje voda (Slika1).

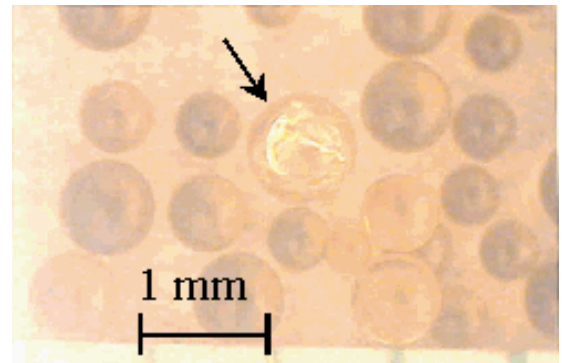


Sl.1. Uređaj za prečišćavanje vode

Nakon upotrebe, potrebno je smolu (najčešće sa kolonom) bezbedno odložiti uz uslov da takav otpad ne sme sadržati više od 1% (volum.) slobodno vezane vode [1].

U vezi sa predviđenim korišćenje polistirenske katjonske smole CG-8 (Slika 2) u uređaju za prečišćavanje vode iz bazena za odlaganje isluženih nuklearnih gorivih elemenata korišćenih u istraživačkom nuklearnom reaktoru RA Instituta za nuklearne nauke „Vinča“ u cilju smanjivanja koncentracije cezijuma tokom postupka prepakivanja, u toku je ispitivanje mogućnosti primene procedure konvektivnog procesa desorpcije vode iz smole, što se u trenutnoj fazi razrade pre

svega odnosi na modeliranje procesa i odgovarajuće preliminarnu proračune.



Sl.2. Smola CG-8 pre sorpcije (upijanja) vode

Neki važniji aspekti modela, kao što je identifikacija efektivnih karakteristika prenosa, biće posebno diskutovani.

### 2. MODEL

#### Osnovne postavke

Osnovne postavke modela su:

- nestacionaran, jednodimenzioni problem (posmatrane promene parametara u smeru strujanja gasa),
- kruta struktura kapilarno-poroznog materijala,
- otpor prenosu toplote i mase je u čvrstoj fazi zanemaren,
- lokalna ravnoteža (na površini čvrste faze).

#### Bilansne jednačine

Nestacionarni jednodimenzioni simultani prenos toplote i mase između gasne i čvrste faze može se u opštoj formi opisati diferencijalnom jednačinom održanja opšte zavisno-promenljive veličine  $\phi$ :

$$\frac{\partial}{\partial t}(M\phi) + \text{div}(Mu\phi) = \text{div}(\Gamma_{\phi} \text{grad}\phi) + S_{\phi} \quad (1)$$

Na levoj strani jednačine su nestacionarni i konvektivni član, dok su na desnoj strani jednačine difuzioni član (gde  $\Gamma_{\phi}$  predstavlja generalizovani difuzioni koeficijent) i izvorni član (izvor ili ponor).

Na osnovu jednačine (1), saglasno prethodno izloženim postavkama, može se napisati sledeći sistem parcijalnih diferencijalnih jednačina (korišćene oznake definisane su u poglavlju “OZNAKE”).

Održanje vlage, čvrsta faza:

$$\frac{\partial}{\partial t}(M_{s,d}X) = -\dot{M}_L \quad (2)$$

Održanje vlage, gasna faza (fluid):

$$\frac{\partial}{\partial t}(M_{G,d}Y) + \frac{\partial}{\partial z}(M_{G,d}u_G Y) = \dot{M}_L \quad (3)$$

Održanje entalpije čvrste faze:

$$\frac{\partial}{\partial t}[M_{S,d}(c_{S,d} + c_L X)T_S] = \alpha_{S,G} a_b V (T_G - T_S) - \Delta h \dot{M}_L \quad (4)$$

Održanje entalpije gasne faze:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}[M_{G,d}(c_{G,d} + c_v Y)T_G] \\ + \frac{\partial}{\partial z}[M_{G,d}u_G(c_{G,d} + c_v Y)T_G] = \\ \alpha_{S,G} a_b V (T_S - T_G) + c_v (T_S - T_G) \dot{M}_L \end{aligned} \quad (5)$$

Jednačina kontinuiteta za gasnu fazu:

$$\frac{\partial}{\partial t}(M_G) + \frac{\partial}{\partial z}(M_G u_G) = \dot{M}_L \quad (6)$$

Stvarna (lokalna) brzina gasa  $u_G$  jednaka je  $u_0/\psi$ , gde je  $u_0$  brzina gasa u slobodnom preseku (pre nasutog sloja smole).

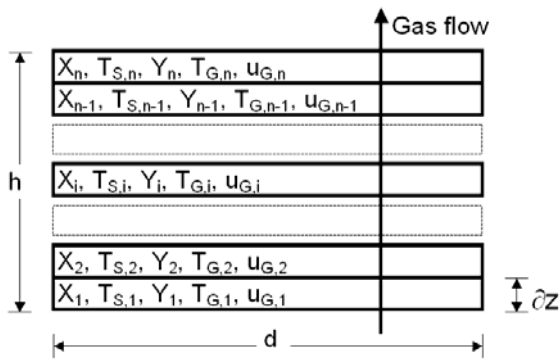
Izvorni članovi

Izvorni član ( $\dot{M}_L$ ), koji predstavlja brzinu isparavanja vode (desorpcije), može se izraziti na sledeći način:

$$\dot{M}_L = M_{G,d} \beta_{S,G} a_b (Y - Y_{eq}) \quad (7)$$

Ravnotežne vrednosti ( $Y_{eq}$ ) potrebno je odrediti iz izoterme desorpcije za odgovarajući sistem adsorbens-adsorbat.

Numerički metod



Sl.3. Zavisne veličine procesa i diskretizacija duž visine (dužine) kolone ispunjene smolom

Metod kontrolnih zapremina (Slika 3) prema Patankar-u [3] korišćen je za diskretizaciju parcijalnih diferencijalnih jednačina u sistem linearnih algebarskih jednačina, koji je rešavan pomoću TDMA (TriDiagonal-Matrix Algorithm).

### 3. KARAKTERISTIKE PRENOSA

Efektivna termička provodljivost

S obzirom da u dostupnoj literaturi nije pronađeno dovoljno podataka o termičkim osobinama sloja smole CG-8 tokom

zagrevanja (hlađenja), neophodno je ustanoviti preovlađujući mehanizam prenosa toplote. S tim u vezi je korišćen model Zehner-a, Bauer-a i Schlünder-a [4] za definisanje efektivne termičke provodljivosti sloja ( $\lambda_b$ ):

$$k_b = \frac{\lambda_b}{\lambda_F}, \quad k_b = 1 - \sqrt{1 - \psi} + \sqrt{1 - \psi} \cdot k_c, \quad (8)$$

gde je:

$$k_c = \frac{2}{N} \left( \frac{B}{N^2} \cdot \frac{k_S - 1}{k_S} \ln \frac{k_S}{B} - \frac{B + 1}{2} - \frac{B - 1}{N} \right), \quad (9)$$

$$N = 1 - \frac{B}{k_S}, \quad B = 1.25 \left( \frac{1 - \psi}{\psi} \right)^{10/9}, \quad k_S = \lambda_S / \lambda_F \quad (10)$$

Preovlađujući mehanizam prostiranja toplote

Prostiranje toplote u kapilarno-poroznim sredinama je u osnovi uslovljeno sledećim mehanizmima, koji se međusobno dopunjuju [5]:

1) Prenos toplote u aksijalnom pravcu ( $A_1$ ):

$$A_1 = \frac{(1 + K^*)^2}{Pe_0} \cdot \frac{\lambda_{ax}}{\lambda_F}, \quad (11)$$

gde je:

$$\frac{\lambda_{ax}}{\lambda_F} = \frac{\lambda_b}{\lambda_F} + \frac{Pe_0}{2}, \quad (12)$$

$$K^* = \frac{(1 - \psi)(\rho c)_S}{\psi(\rho c)_F}, \quad Pe_0 = \frac{u_0(\rho c)_F d_p}{\lambda_F} \quad (13)$$

2) Prenos (prelaz) toplote između čvrste i gasne faze ( $A_2$ ):

$$A_2 = \frac{K^* Pe_0}{Nu a_b d_p}, \quad (14)$$

gde je [2]:

$$Nu = 2 + \sqrt{Nu_{lam}^2 + Nu_{turb}^2}, \quad (15)$$

odnosno:

$$Nu_{lam} = 0.664 \sqrt[3]{Pr} \sqrt{Re}, \quad (16)$$

$$Nu_{turb} = \frac{0.037 Re^{0.8} Pr}{1 + 2.443 Re^{-0.1} (Pr^{2/3} - 1)} \quad (17)$$

3) Prenos toplote u unutrašnjosti čestica ( $A_3$ ):

$$A_3 = \frac{K^* Pe_0}{60(1 - \psi) \lambda_S / \lambda_F} \quad (18)$$

Uticaj opisanih mehanizama za smolu CG-8 je prikazan na slici 4, sa koje je očigledno da konvektivni prenos toplote (između čvrste i gasne faze) preovlađuje za uobičajene vrednosti Péclet-ovog kriterijuma ( $u_0 > 1,0$  m/s).

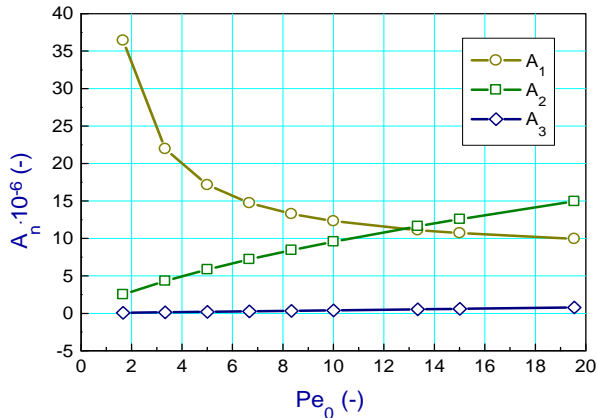
Moguće je, naravno, uključiti sve opisane mehanizme u jedan uvođenjem ekvivalentnog Nusselt-ovog kriterijuma

$$Nu^* = \frac{K^* Pe_0}{(A_1 + A_2 + A_3) a_b d_p}, \quad (19)$$

koji tada treba koristiti za računanje prenosa toplote.

Definicije mehanizama prenosa mase su slične definicijama za prenos toplote, ali sa odgovarajućim efektivnim koeficijentom difuzije ( $\delta_b$ ) i "molekulskim" Pécelet-ovim kriterijumom ( $Pe_0 = u_0 d_p / \delta$ ). Na primer, aksijalna disperzija mase ( $D_{ax}$ ) se definiše iz:

$$\frac{D_{ax}}{\delta} = \frac{\delta_b}{\delta} + \frac{Pe_0}{2} \quad (20)$$



Sl.1.4. Uticaj prenosa toplote u aksijalnom pravcu ( $A_1$ ), prenosa (prelaza) toplote između čvrste i gasne faze ( $A_2$ ) i prenosa toplote u unutrašnjosti čestica CG-8 smole ( $A_3$ )

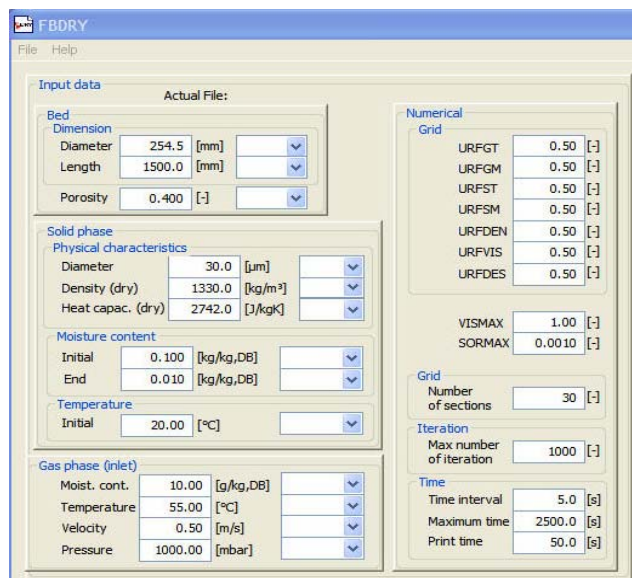
#### Empirijske zavisnosti

Koeficijent prenosa (prelaza) toplote između čvrste i gasne faze se može izračunati na osnovu sledećih eksperimentalnih korelacija:

$$\alpha_{s,G} = \frac{Nu \lambda_G}{d_p} \quad (21)$$

gde je:  $Nu = C \sqrt[3]{Pr} \cdot Re^m$ ,  $Re = \frac{u_G d_p}{\mu_G} = \frac{u_0 d_p}{\psi \mu_G}$  (22)

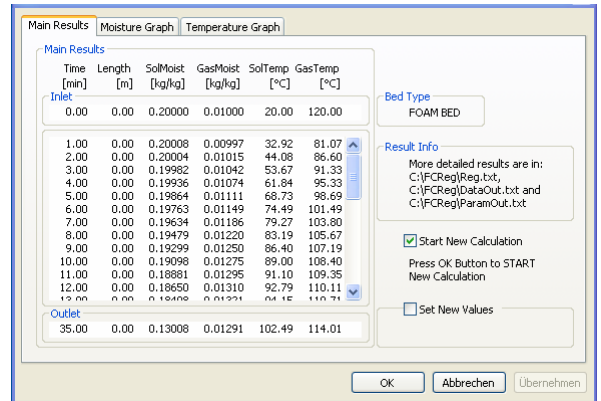
Na osnovu poznate analogije prenosa toplote i mase, koeficijent prelaza mase se može računati korišćenjem odgovarajućih bezdimenzionih kriterijuma (Sherwood-ov umesto Nusselt-ovog i Schmidt-ov umesto Prandtl-ovog) sa identičnim vrednostima odgovarajućih parametara (koeficijent C i eksponent m).



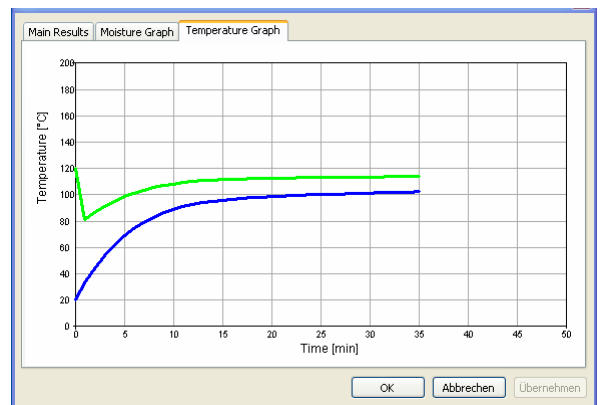
Sl.1.5. Ulazni („Input Data“) dijalog za program “FBDRY”

## 4. RAČUNARSKI PROGRAM

Računarski program “FBDRY” je pisan u Visual C++ programskom jeziku (Microsoft Visual Studio.Net) u formi pogodnog korisničkog dijaloga (Slike 5 - 7), sa različitim mogućnosti-ma za unos početnih i prikaz dobijenih podataka (“Edit-box control” za unos brojevnih podataka, “Combo-box control” za izbor mernih jedinica, “List-box” i dijagrami za prikaz dobijenih rezultata itd.).



Sl.1.6. Izlazni („Main Results“) dijalog za program “FBDRY”



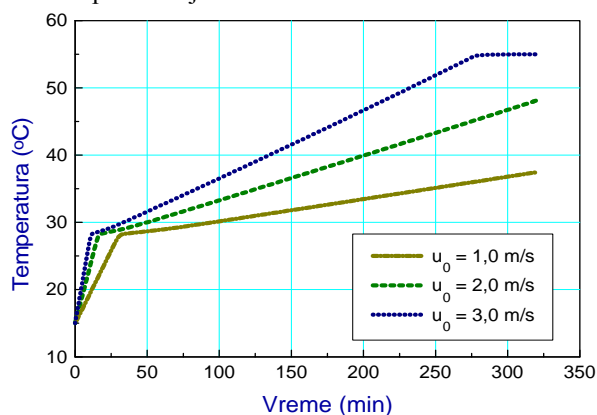
Sl.1.7. Izlazni („Temperature Graph“) dijalog za program “FBDRY”

## 5. REZULTATI

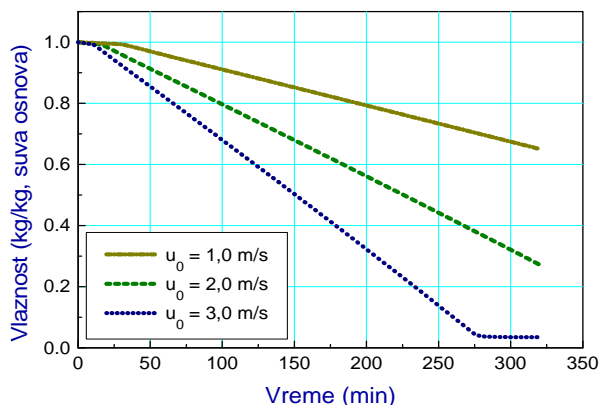
Deo početnih testova mogućnosti korišćenja razvijenog modela (računarskog programa) za proračun operacionih parametara tokom procesa konvektivne desorpcije vode iz polistirenske katjonske smole CG-8 su predstavljeni na slikama 8 - 9. Osnovni problem u ovoj fazi testiranja predstavljao je nedostatak podataka za karakterističnu krivu (ili koeficijent unutrašnjeg transporta) procesa desorpcije za smolu, kao i izoterme desorpcije sistema smola-vazduh, tako da je otpor prenosu toplote i mase u smoli zanemaren (postavke modela). Na osnovu poznatih podataka [6] za proračun su korišćeni sledeći parametri: srednji prečnik kuglica smole  $d_p = 300 \mu m$ , nasipna gustina sloja smole  $\rho_b = 800 kg/m^3$ , specifični toplotni kapacitet suve smole  $c_{s,d} = 2742 J/(kgK)$ , koeficijent provođenja toplote  $\lambda = 0,3436 W/(mK)$ , količina upijene vode  $X = 1,0 kg/kg$  ( $47 \div 54\%$  po vlažnoj osnovi – jonski hidrogenski oblik smole).

Proračunavani su slučajevi prostrujavanja vazduhom uobičajene vlažnosti ( $Y = 8 g/kg$ ) i prethodno osušenim vazduhom ( $Y = 0 g/kg$ ) temperature ambijenta ( $20 \text{ }^\circ C$ ), kao i najviše dozvoljene temperature smole ( $T_{max} = 55 \text{ }^\circ C$  - u cilju spreča-

vanja degradacije smole [1], odnosno 30 °C - u cilju izbegavanja isparavanja cezijuma prisutnog u vodi). Manji deo proračuna prikazan je na slikama 8 i 9.



Sl.8. Promena temperature smole tokom konvektivne desorpcije vode;  $d = 254,5$  mm,  $h = 1,5$  m,  $d_p = 0,3$  mm,  $T_S = 15$  °C,  $T_G = 55$  °C,  $Y = 8$  g/kg.



Sl.9. Promena sadržaja vlage smole tokom konvektivne desorpcije vode;  $d = 254,5$  mm,  $h = 1,5$  m,  $d_p = 0,3$  mm,  $T_S = 15$  °C,  $T_G = 55$  °C,  $Y = 8$  g/kg.

Karakter promena dobijenih proračunom (Sl. 8 i 9) ukazuje da usled relativno značajne visine sloja pri prostrujavanju sloja dolazi do zasićenja agensa sušenja tokom celog trajanja procesa desorpcije (osim za brzine 3 m/s).

## 6. ZAKLJUČAK

Analiza predstavljena u ovom radu je pre svega usmerena na određivanje preovlađujućeg mehanizma prenosa toplote za relativno nedovoljno poznat (sa stanovišta procesa prenosa toplote i mase) kapilarno-porozni materijal (polistirenska katjonska smola CG-8). Ova smola se koristi kao adsorbens u tehnologijama zaštite životne sredine (prečišćavanje voda), gde efikasnost procesa zavisi u najvećoj meri od desorpcione faze (postupka uklanjanje tečnosti), što potencira važnost sveobuhvatnijeg sagledavanja problema, odnosno poznavanja karakteristične krive (ili koeficijenta unutrašnjeg transporta) procesa desorpcije za dati materijal.

Razvijeni jednodimenzioni nestacionarni matematički model konvektivne desorpcije je implementiran u korisnički računarski program i za sada korišćen za dobijanje početnih podataka o parametrima procesa.

### OZNAKE

|   |                               |                  |
|---|-------------------------------|------------------|
| a | specifična površina           | $m^2m^{-3}$      |
| c | specifični toplotni kapacitet | $Jkg^{-1}K^{-1}$ |

|              |                                    |                 |
|--------------|------------------------------------|-----------------|
| d            | prečnik                            | m               |
| D            | koeficijent difuzije mase          | $m^2s^{-1}$     |
| h            | specifična entalpija               | $Jkg^{-1}$      |
| M, $\dot{M}$ | masa, maseni protok                | kg, $kg s^{-1}$ |
| t            | vreme                              | s               |
| T            | temperatura                        | K, °C           |
| u            | brzina                             | $ms^{-1}$       |
| X            | vlažnost čvrste faze (suva osnova) | -               |
| Y            | vlažnost gasa (suva osnova)        | -               |
| z            | koordinata dužine                  | m               |
| Grčka slova  |                                    |                 |
| $\alpha$     | koeficijent prelaza toplote        | $Wm^{-2}K^{-1}$ |
| $\beta$      | koeficijent prelaza mase           | $ms^{-1}$       |
| $\delta$     | koeficijent difuzije               | $m^2s^{-1}$     |
| $\lambda$    | koeficijent provođenja toplote     | $Wm^{-1}$       |
| $\mu$        | koeficijent dinamičke viskoznosti  | Pa s            |
| $\rho$       | gustina                            | $kgm^{-3}$      |
| $\psi$       | poroznost                          | -               |

### Indeksi

ax – aksialni, b – sloj, d – suv, eq – ravnotežni, F – fluid, G – gas, L – tečnost, p – čestice, S – čvrsta faza, v – para, 0 – slobodni prostor.

### LITERATURA

- [1] D.Kaplan and G.Iversen, "Evaluation of Free Moisture in Resin Used at the F-and H-Area Groundwater Treatment Units", Report of the U.S. Department of Energy.
- [2] V.Gnielinski, Section Gj1, *VDI-Wärme-atlas*, 9<sup>th</sup> edition, Berlin: Springer, 2002.
- [3] S.V.Patankar, *Numerical heat transfer and fluid flow*, New York: Hemisphere P.C., 1980.
- [4] E.Tsotsas, Section Dee9, *VDI-Wärme-atlas*, 9<sup>th</sup> edition, Berlin: Springer, 2002.
- [5] E.Tsotsas, Section Mh6, *VDI-Wärme-atlas*, 9<sup>th</sup> edition, Berlin: Springer, 2002.
- [6] [http://www.caitechnologies.com/water-softeners/material\\_specifications.htm](http://www.caitechnologies.com/water-softeners/material_specifications.htm)

*Abstract:* This study presents a mathematical model developed to evaluate the influence of structural and operational factors on convective dehydration process (desorption of liquid phase from capillary-porous material), as well as the possibility to utilize this model for the case of water desorption from polystyrene cation resin CG-8. The model accounts for unsteady one-dimensional simultaneous heat and mass transfer between the gas (air) and the solid phase (resin). The identification of effective transport properties for the considered fixed bed of material (resin CG-8) is discussed. To this purpose available data from the literature are used.

## MODELLING OF CONVECTIVE PROCESS OF WATER DESORPTION FROM POLYSTYRENE CATION RESIN CG-8

Milan Stakić, Aleksandar Nikolić