МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ

РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

РОССИЙСКИЙ
ХИМИКО–ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА

НОВОМОСКОВСКИЙ ИНСТИТУТ

Д.П. ВЕНТ, А.Г. ЛОПАТИН, С.И. СИДЕЛЬНИКОВ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Допущено Учебно-методическим объединением по химическому образованию в области химической технологии и биотехнологии в качестве учебного пособия для подготовки бакалавров, магистров и дипломированных специалистов высших учебных заведений, обучающихся по химико-технологическим направлениям: "Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии и биотехнологии", "Химическая технология и биотехнология"

Новомосковск 2013

УДК 66.0.001.57
ББК 35.В6
В 296

Рецензенты:
доктор технических наук, профессор Комиссаров Ю.А.
(РХТУ им. Д. И. Менделеева)
кандидат технических наук, доцент Силин А.В.
(НИ РХТУ им. Д. И. Менделеева)

Вент Д.П., Лопатин А.Г., Сидельников С.И.
Математическое моделирование химико-технологических систем: Учебно–методическое пособие / РХТУ им. Д. И. Менделеева, Новомосковский ин-т. Новомосковск, 2013.–96 с.
ISBN 978-5-7237-0804-4

Учебно-методическое пособие посвящено математическому моделированию химико-технологических процессов. Рассмотрены гидромеханические, тепловые, массообменные и химические процессы. Изложенный материал позволяет освоить студентам методы математического моделирования, включая составление математического описания и моделирование объекта по каналам управления.

Предназначено для студентов, обучающихся по направлениям 240100 Химическая технология и 220700 Автоматизация технологических процессов и производств, а так же будет полезна всем лицам, занимающимся математическим моделированием химико-технологических систем.

Табл. 1. Ил. 65. Библиогр.: 6 назв.

УДК 66.0.001.57
ББК 35.В6
ISBN 978-5-7237-0804-4
© Новомосковский институт Российского химико–технологического университета им. Д. И. Менделеева, 2012

СОДЕРЖАНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ 6

ВВЕДЕНИЕ 7

1 ОСНОВЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ 8

1.1 Понятие модели 8

1.2 Математическое моделирование 8

1.3 Химико – технологический процесс как объект математического моделирования 9

1.4 Основные стадии математического моделирования 11

1.5 Основные группы уравнений, входящих в математическое описание процесса 11

1.6 Материальный и тепловой балансы химико-технологического процесса 12

1.7 Блочный принцип построения математической модели 15

1.7.1 Основные типы моделей гидродинамических структур потоков в аппаратах химической технологии 16

1.7.1.1 Модель идеального вытеснения 16

1.7.1.2 Модель идеального смешениея 18

1.7.1.3 Однопараметрическая диффузионная модель 19

1.7.1.4 Двухпараметрическая диффузионная модель 22

1.7.1.5 Ячеечная модель 22

1.7.1.6 Диффузионная модель с застойными зонами 23

1.7.1.7 Ячеечная модель с застойными зонами 26

1.7.1.8 Ячеечная модель с обратным потоком 27

1.7.1.9 Комбинированные модели 28

2 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ТЕПЛООБМЕННЫХ АППАРАТОВ 30

2.1 Модель типа «смешение – смешение» 31

2.2 Модель типа «вытеснение – вытеснение» 33

2.3 Модель «вытеснение – смешение» 36

2.4 Составление математического описания теплообменного аппарата 37

2.2 Контрольные задания по моделированию теплообменных аппаратов 46

3 Математическое описание массообменных аппаратов 53

3.1 Математическое описание процесса абсорбции в насадочном аппарате 53

3.1.1 Построение ячеечной модели для насадочного абсорбера 54

3.1.2 Построение модели идеального вытеснения для процесса абсорбции 56

3.1.3 Построение диффузионной однопараметрической модели процесса абсорбции 57

3.1.4 Построение математического описания процесса абсорбции на основе диффузионной модели с застойными зонами 57

3.1.5 Построение модели в случае неизотермической абсорбции 59

3.1.6 Математическое описание тарельчатой ректификации бинарной смеси ... 60

3.2.1 Математическое описание тарелок ректификации 61

3.2.2 Математическое описание куба колонны 63

3.2.3 Математическое описание конденсатора 64

3.3 Пример составления математической модели насадочного абсорбера 65

3.4 Контрольные задания по моделированнию массобменных аппаратов 68

4 Моделирование химических реакторов 77

4.1 Механизм химической реакции. Простые и сложные реакции..... 78

4.2 Математическое описание изотермического реактора идеального смешения 81

4.3 Математическое описание адиабатического реактора идеального вытеснения 81

4.4 Построение однопараметрической диффузионной модели для политропического реактора 82

4.5 Пример составления математической модели химической реакции..... 83

4.6 Контрольные задания по моделированию химических реакторов 86

Библиографический список..... 93

Приложение А..... 94

Выбор варианта курсовой работы 94

ПРЕДИСЛОВИЕ

Создание высокоэффективных технологических процессов современных производств и управление ими, а так же модернизация действующих, в настоящие время не мыслима без получения и анализа математических моделей с последующей их оптимизацией, поэтому курс "Моделирование систем" занимает особое место в системе подготовки бакалавров по направлениям 240100 Химическая технология и 220700 Автоматизация технологических процессов и производств.

Необходимая информация по данному курсу представлена в большом количестве изданий, посвященных отдельным, конкретным, вопросам математического моделирования систем управления, причем литература по некоторым разделам является по ряду причин малодоступной для студентов. Этим и была вызвана необходимость разработки и написания данного учебно–методического пособия.

В настоящем учебно–методическом пособии излагаются основные аспекты получения математических моделей, технологических объектов управления аналитическим методом.

Данное учебное пособие предназначено для студентов обучающихся по направлениям подготовки 240100 Химическая технология и 220700 Автоматизация технологических процессов и производств всех форм обучения.

ВВЕДЕНИЕ

Химическое производство состоит из целого ряда взаимосвязанных единичных процессов химической технологии и представляет собой сложную систему, характеризующуюся большим объемом информации. Изучение и разработка химико-технологических систем (ХТС) в настоящее время ведутся на основе методов математического моделирования и направлены на создание высокопродуктивных, высококачественных, экологически безопасных и экономичных производств.

Моделирование – метод экспериментально-теоретического исследования сложных систем, позволяющий в качестве объекта рассматривать не подлинное явление, а некоторую его модель. Под *моделью* подразумевается такая упрощенная система, которая отражает совокупность свойств объекта, соответствующих поставленной задаче моделирования, и дает возможность получить новые сведения об объекте.

В частности под математической моделью химико-технологического процесса следует понимать совокупность качественных и количественных представлений и математических соотношений, характеризующих отдельные, ограниченные в нужном направлении явления моделируемого процесса, а также взаимодействия этих явлений с учетом возмущающих факторов. Математические соотношения, составленные в результате теоретического анализа моделируемого процесса, представляют собой математическое описание.

Изучение объекта моделирования (химико-технологического процесса, отдельного аппарата, физико-химического явления и т.д.) сводится к анализу его математического описания в явном виде, т.е. к анализу зависимостей между определяющими и определяемыми переменными процесса. Эти зависимости можно получить только в результате решения уравнений математического описания. Для решения даже относительно простого математического описания, не говоря уже о сложных математических моделях, обычно требуются большие объемы вычислительных операций.

Данное учебно–методическое пособие рассматривает аналитические методы получения математических моделей ХТС. Теоретический материал подкреплен большим количеством практических заданий, позволяющих студенту приобрести практические навыки по составлению математических моделей, и проведению компьютерного моделирования полученных моделей с использованием средств вычислительной техники.

1 ОСНОВЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

1.1 Понятие модели

Познание процессов невозможно без теоретических обобщений. Первым в процессе познания являются результаты наблюдений. Опираясь на наблюдения, строится модель исследуемого явления, на основе которой методом проб и ошибок создается теория. Эта теория содержит в себе предполагаемое представление об исследуемом явлении природы. Руководствуясь этой теорией, планируются новые эксперименты и т. д.

Разработка теории как предполагаемого представления об исследуемом явлении может быть названа построением модели. Тогда теория становится математической моделью исследуемого процесса.

В зависимости от источника информации, используемого при построении модели, различают аналитические (физико-химические) и статические (эмпирические) модели.

Статические модели получаются в результате статической обработки экспериментальных данных, собранных на исследуемом объекте. Статические модели имеют относительно простую структуру и часто представляются в виде полиномиальных зависимостей. Однако, область их применения ограничена ближайшей окрестностью рабочих точек, в которых проводился эксперимент.

Аналитические модели строятся на основе изучения природы микропроцессов, протекающих в объекте. При этом используются фундаментальные законы природы. Применение этих законов позволяет получить наиболее общие связи между существенными параметрами явлений.

Аналитические модели позволяют достаточно точно описывать процессы. Однако они представляются в виде сложных систем уравнений, часто в обыкновенных или частных производных.

1.2 Математическое моделирование

Математическое моделирование является методом описания процессов с количественной и качественной стороны с помощью математических моделей. При построении математической модели реальное явление упрощается, схематизируется, и полученная схема описывается в зависимости от сложности явления с помощью того или иного математического аппарата. Таким образом, построение модели представляет собой формализацию, необходимую для определения основных признаков, связей, закономерностей, присущих объекту-оригиналу, и отсеивания второстепенных признаков.

При формализации изучаемого процесса используется аналитическая теория исследования, которая характеризуется следующими особенностями:

1. Потоки в аппаратах рассматриваются как сплошная непрерывная среда (континуум), поэтому микроструктура его и микроскопический механизм процесса выпадают из рассмотрения. Это упрощение значительно облегчает изучение процесса.

2. Для составления математического описания изучаемого процесса используют основные законы природы: законы сохранения массы, энергии, количества движения и др. Однако при этом получают дифференциальные уравнения, число неизвестных в которых превышает число уравнений, т.е. полученная система уравнений не замкнута. Это происходит потому, что основные законы природы не отражают всех частных особенностей микроскопического механизма протекания процесса, присущих конкретному веществу.

3. Для составления замкнутой системы дифференциальных уравнений привлекают гипотезы о дополнительных связях между искомыми величинами. Такие гипотезы возникают в результате непосредственных наблюдений, эксперимента. Однако, эти дополнительные связи между искомыми величинами содержат коэффициенты пропорциональности, без определения которых система уравнений остается незамкнутой.

4. Значения коэффициентов пропорциональности в дополнительных уравнениях, полученных в результате привлечения гипотез, определяют экспериментальным путем. Эти коэффициенты называют физическими параметрами, если их значения зависят только от давления и от температуры (для анизотропных тел физические параметры зависят также от направления из данной точки, а для неоднородных тел – от координат этой точки). В качестве примера физических параметров можно привести теплоемкость, плотность и т.д. Если коэффициенты пропорциональности зависят еще и от скорости движения, условий перемешивания и т.д., то их называют гидродинамическими параметрами, например, коэффициенты массопередачи, теплоотдачи. Таким образом экспериментальное определение параметров компенсирует отказ от рассмотрения микроскопического механизма процесса.

1.3 Химико – технологический процесс как объект математического моделирования

Объектом химической технологии условимся называть типовой химико-технологический процесс, идущий в аппаратуре определенного конструктивного оформления (простой объект: теплообменник, реактор и т. д.), или технологическую цепочку, охватывающую несколько процессов и аппаратов (сложный объект). Объекты химической технологии обычно находятся под влиянием различных факторов (рис 1.1). При этом воздействие, поступающее на вход объекта, называют вектором входных переменных X, а реакцию на выходе объекта – вектором выходных переменных Y. Между входом и выходом существует взаимосвязь, которая характеризует протекающий в объекте процесс. Объект обычно подвергается возмущениям Z. Для их компенсации используют управляющее воздействие U.

При изучении объекта ищутся связи между параметрами в виде следующих соотношений: $Y_i = f_i(X,U,Z)$, i = 1,2,…,s

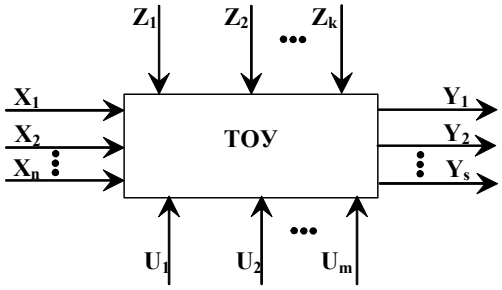

Рис. 1.1 – Схема технологического объекта управления

На рис. 1.1 $X = (X_1, X_2, ..., X_n)$ – входные параметры – параметры, значения которых могут быть измерены, но возможность воздействия на них отсутствует. Например, состав исходного сырья (природный газ) и др.

$U = (U_1, U_2, ..., U_m)$ – управляющие параметры – параметры, на которые можно оказывать прямое воздействие в соответствии с некоторыми требованиями, что позволяет управлять процессом. Например, расход сырья и др.

$Z = (Z_1, Z_2, ..., Z_k)$ – возмущающие параметры – параметры, значения которых случайным образом изменяются с течением времени и которые недоступны для измерения. Например, активность катализатора.

$Y = (Y_1, Y_2, ..., Y_s)$ – выходные параметры – параметры, величины которых определяются режимом процесса и которые характеризуют состояние процесса, возникающее в результате суммарного воздействия входных, управляющих и возмущающих параметров.

В качестве случайных рассматриваются обычно параметры, которые по тем или иным причинам невозможно (или очень трудно) учесть, например падение активности катализатора, изменение состояния поверхности теплообменной аппаратуры, колебания наружной температуры воздуха и т.п. Такое подразделение входных параметров на основные и случайные условно. Случайным будет любой параметр, не вошедший в основной комплекс входных параметров, даже если он хорошо изучен. В зависимости от постановки задачи и технических возможностей некоторые измеряемые параметры относят к «шуму» объекта. Однако при этом уменьшается точность математической модели. В качестве выходных величин рассматриваются любые технологические или экономические показатели процесса.

По степени влияния случайных возмущающих воздействий в объектах принято различать:

1. Детерминированные процессы, в которых определяющие величины изменяются непрерывно по вполне определенным закономерностям. При этом предполагается, что значения выходных величин, характеризующих процесс, однозначно определяются заданием входных и управляющих воздействий. Например, процесс в проточном реакторе с мешалкой.

2. Стохастические процессы, в которых изменение определяющих величин происходит случайным образом. При этом значение выходных величин находятся в вероятностном соответствии с входными и не определяются ими однозначно. Например, контактно – каталитический процесс, в котором выход

продукта изменяется в зависимости от активности катализатора, степени перемешивания исходной смеси.

Объекты химической технологии могут быть описаны статическими и динамическими моделями.

Статические модели описывают стационарные, т.е. не изменяющиеся во времени, процессы. Динамические модели описывают переходные процессы, т.е. нестационарные, изменяющие во времени состояния.

1.4 Основные стадии математического моделирования

Математическое моделирование включает три этапа:

1) формализацию изучаемого процесса - составление математического описания;

2) построение алгоритма расчета;

3) установление адекватности модели изучаемому процессу.

При построении математической модели используется блочный принцип математического описания. Согласно этого принципа выделяется ряд типовых элементарных процессов и каждый из этих процессов исследуется отдельно (по блокам). Вначале исследуется гидродинамика процесса - основа будущей модели. Гидродинамика отражает поведение так называемого «холодного» объекта, т. е. объекта без физико-химических превращений, но с реальными нагрузками. Гидродинамика изучает распределение масс в потоках, связанное с перемещением жидкости или газа. Далее изучают кинетику химических реакций, скорости процессов массы переноса и теплопереноса, кинетику фазовых переходов и т. д.

Второй этап заключается в разработке и реализации на ЭВМ моделирующего алгоритма. Моделирующий алгоритм определяется как последовательность операций, которые необходимо выполнить над уравнениями математического описания для того, чтобы найти значения интересующих нас параметров процесса.

Необходимо также, чтобы модель достаточно верно описывала качественно и количественно свойства исследуемого процесса, т.е. она должна быть адекватна моделируемому процессу. Для проверки адекватности математической модели реальному процессу нужно сравнить результаты измерения в ходе процесса с результатами предсказания модели в идентичных условиях (при определенных значениях параметров). При этом используют статистические методы.

1.5 Основные группы уравнений, входящих в математическое описание процесса

В составе математического описания, разработанного на основе физической природы исследуемого объекта, можно выделить следующие группы уравнений:

1. Уравнения баланса масс и энергии, записанные с учетом гидродинамической структуры движения потоков. Данная группа уравнений

характеризует распределение в потоках температур, составов и связанных с ними свойств: плотности, теплоемкости и т.д.

2. Уравнения кинетики процессов. Сюда относятся описания элементарных процессов протекания химической реакции, теплопереноса, массопереноса. Для записи уравнений используются гипотезы дополнительных связей между основными переменными процесса.

3. Теоретические, эмпирические или полуэмпирические соотношения между различными параметрами процесса – уравнения для физических или гидродинамических параметров: теплоемкости, вязкости, коэффициентов теплоотдачи и т.д.

4. Ограничения на параметры процесса, например, температура в зоне катализатора не может быть выше некоторой заданной, иначе катализатор потеряет свои свойства и т. д.

Данные группы уравнений входят в состав математической модели любой химико-технологической системы. Они представляют аналитическую теорию исследования физико-химических процессов. Кроме того, модель строится так, чтобы она наиболее полно отражала характер поведения потоков вещества и энергии при одновременно достаточно простом математическом описании.

1.6 Материальный и тепловой балансы химико-технологического процесса

Исходным соотношением математического описания процессов в аппарате является общий материальный баланс, составленный для отдельных компонентов потока.

Если концентрации веществ неодинаковы в различных точках аппарата, то уравнение материального баланса составляют для элементарного объема. Для элемента объема аппарата материальный баланс записывается в соответствии с законом сохранения массы:

$$\begin{bmatrix} \text{Количество вещества} \\ \text{накапливаемого в} \\ \text{элементарном объеме} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{Количество вещества} \\ \text{поступающего в} \\ \text{элементарный объем} \\ \text{за данный промежуток} \\ \text{времени} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{Количество вещества} \\ \text{выходящего из} \\ \text{элементарного объема} \\ \text{за данный промежуток} \\ \text{времени} \end{bmatrix}$$

Математически закон сохранения массы можно представить в виде следующего соотношения

$$\Delta M = M_{вх}\Delta t - M_{вых}\Delta t \qquad (1.1)$$

где $M_{вх}$, $M_{вых}$ – массовые потоки [кг/с] на входе и выходе рассматриваемого элементарного объема, Δt – элементарный промежуток времени (время наблюдения), ΔM – накопление массы [кг] в рассматриваемом объеме за время Δt.

Если можно принять, что концентрации веществ в каждой точке объема аппарата одинаковы (хорошее перемешивание), уравнение (1.1) относят ко всему объему аппарата. В этом случае уравнение закона сохранения массы

можно представить в дифференциальном виде. Для этого разделим уравнение на Δt и перейдем к приделу при $\Delta t \to 0$. Учитывая, что

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta M}{\Delta t} = \frac{dM}{dt}$$

скорость накопления массы в рассматриваемом объеме, получим

$$\frac{dM}{dt} = M_{вх} - M_{вых} \qquad (1.2)$$

т.е. скорость накопления массы вещества в некотором объеме равна разности массовых потоков $\left[\frac{кг}{с}\right]$ на входе и выходе этого объема.

При составлении уравнений материального баланса исследуемого химико-технологического процесса используют или уравнение (1.1) – получают математическое описание в виде дифференциальных уравнений в частных производных, или уравнение (1.2) – получают обыкновенные дифференциальные уравнения. Необходимо также заметить, что уравнение (1.2) – частный случай уравнения (1.1).

Для элементарного объема аппарата, в котором протекает химическая реакция материальный баланс в соответствии с законом сохранения массы будет иметь вид:

$$\begin{bmatrix} \text{Количество вещества} \\ \text{накапливаемого в} \\ \text{элементарном объеме} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{Количество вещества} \\ \text{поступающего в} \\ \text{элементарный объем} \\ \text{за данный промежуток} \\ \text{времени} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{Количество вещества} \\ \text{выходящего из} \\ \text{элементарного объема} \\ \text{за данный промежуток} \\ \text{времени} \end{bmatrix} \pm \begin{bmatrix} \text{Количество веществаа} \\ \text{образующегося за счет} \\ \text{химического превращения} \\ \text{за данный промежуток} \\ \text{времени} \end{bmatrix}$$

Математически закон сохранения массы для химической реакции записывается следующим образом:

$$\frac{dM}{dt} = M_{вх} - M_{вых} \pm M_{хр} \qquad (1.3)$$

Аналогично составляется тепловой баланс, используя закон сохранения энергии.

$$\begin{bmatrix} \text{Количество энергии} \\ \text{накапливаемой в} \\ \text{элементарном объеме} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{Количество энергии} \\ \text{поступающей в} \\ \text{элементарный объем} \\ \text{за данный промежуток} \\ \text{времени} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{Количество энергии} \\ \text{выходящей из} \\ \text{элементарного объема} \\ \text{за данный промежуток} \\ \text{времени} \end{bmatrix}$$

Для элементарного объема закон сохранения записывают в приращениях, т.е.

$$\Delta Q = Q_{вх} \cdot \Delta t - Q_{вых} \cdot \Delta t \qquad (1.4)$$

Если можно принять, что температура и связанные с ней свойства потока в каждой точке всего объема аппарата одинаковы, то закон сохранения записывают для всего рассматриваемого объема в дифференциальной форме

$$\frac{dQ}{dt} = Q_{вх} - Q_{вых} \qquad (1.5)$$

Здесь ΔQ [*Дж*] – накопление энергии в элементарном объеме; $Q_{вх}$, $Q_{вых}$ $\left[\frac{Дж}{с}\right]$ – энергетические потоки на входе и выходе рассматриваемого объема, $\frac{dQ}{dt}$ - скорость накопления энергии в исследуемом объеме.

Уравнения (1.4, 1.5) используются при составлении энергетических балансов химико-технологических процессов. Также, как и уравнение (1.1), соотношение (1.4) приводит к математическому описанию в виде дифференциальных уравнений в частных производных, а уравнение (1.5) – к обыкновенным дифференциальным уравнениям.

Аналогично с материальным составляется энергетический баланс для химической реакции:

$$\begin{bmatrix}\text{Количество энергии}\\ \text{накапливаемой в}\\ \text{элементарном объеме}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\text{Количество энергии}\\ \text{поступающей в}\\ \text{элементарный объем}\\ \text{за данный промежуток}\\ \text{времени}\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}\text{Количество энергии}\\ \text{выходящей из}\\ \text{элементарного объема}\\ \text{за данный промежуток}\\ \text{времени}\end{bmatrix} \pm \begin{bmatrix}\text{Количество энергии}\\ \text{образующейся за счет}\\ \text{химического превращения}\\ \text{за данный промежуток}\\ \text{времени}\end{bmatrix}$$

Математически энергетический баланс химической реакции записывается следующим образом:

$$\frac{dQ}{dt} = Q_{вх} - Q_{вых} \pm Q_{хр} \qquad (1.6)$$

Тип используемого математического аппарата определяет структуру будущей математической модели. Для установления структуры модели необходимо выявить особенности гидродинамической структуры потоков, которая проявляется в характере распределения времени пребывания частиц потока в аппарате, так как движение частиц определяет условия переноса энергии и массы.

В реальной непрерывной системе в силу стохастической природы движения ее частиц на микроуровне всегда имеет место неравномерность распределения частиц по времени пребывания в аппарате. К наиболее существенным источникам неравномерности распределения элементов потока по времени пребывания в промышленных аппаратах можно отнести: неравномерность профиля скоростей, турбулизацию потоков, молекулярную диффузию, наличие застойных областей в потоках, байпасные и перекрестные потоки, температурные градиенты движущихся сред и т.д. Перечисленные причины, существующие в технологических аппаратах и действующие в различных комбинациях, обусловливают специфический характер неравномерности в каждом конкретном случае.

Для оценки неравномерности потоков вводится ряд статистических функций распределения, так как характер распределения частиц подвержен статистическим законам. Функции распределения находятся по виду сигнала, проходящего через систему. В качестве такого сигнала используется подача вещества – индикатора на вход аппарата в виде возмущения. На основе статистической обработки экспериментальных данных распределения индикатора по аппарату устанавливают функции распределения.

Исследуя статистические функции распределения для различных по конструкции аппаратов получены, различные модели гидродинамической структуры распределения частиц, которые и используются для составления материальных и тепловых балансов процесса, т.е. построения математической модели.

1.7 Блочный принцип построения математической модели

При построении математической модели широко используют блочный принцип, суть которого состоит в том, что модель строится из отдельных логически законченных блоков, отражающих обычно ту или иную сторону рассматриваемого процесса. Это может быть блок кинетики массопередачи, блок гидродинамики, блок фазового равновесия и т.п. Блочный принцип построения моделей позволяет: а) разбивать общую задачу построения математической модели на отдельные подзадачи и тем самым упростить ее решение; б) использовать разработанные блоки в других моделях; в) модернизировать и заменять отдельные блоки на новые, не касаясь при этом остальных.

Представление математической модели процесса в виде совокупности подсистем (блоков) позволяет представить общее математическое описание как совокупность математических описаний отдельных блоков. Тогда общая структура математической модели может иметь вид, изображенный на рис.1.2

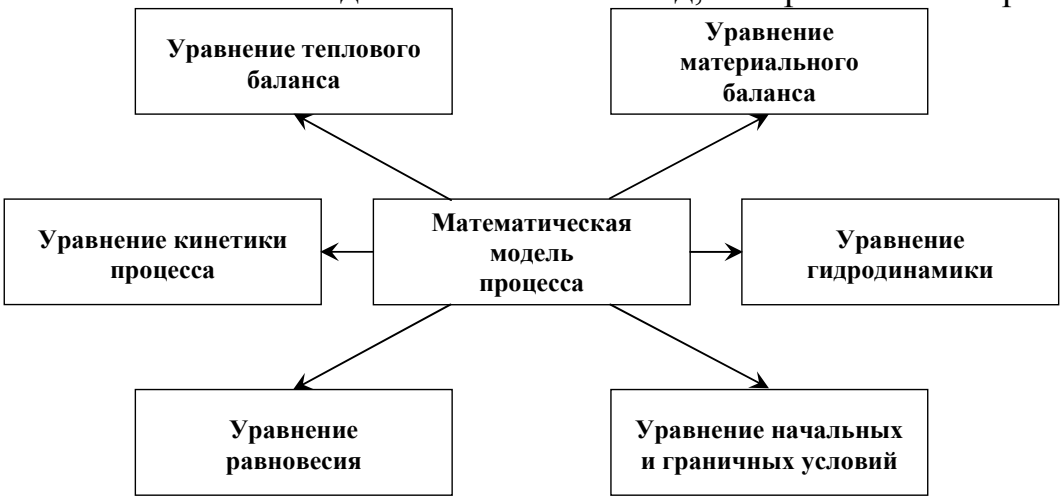

Рис. 1.2 – Блочный принцип построения модели

Применение блочного принципа построения математических моделей, который, в свою очередь, основан на системном подходе, позволяет во многих случаях также принципиально решить проблему масштабирования процессов. С точки зрения математического моделирования масштабный переход есть не что иное, как деформация математической модели при изменении геометрических размеров, характеризующих аппаратное оформление процесса. При использовании блочного принципа построения математической модели влияние геометрических размеров на свойства процесса отражается лишь в одной подсистеме (блоке) – блоке «гидродинамика». Поэтому при наличии достаточно корректного в качественном и количественном отношении

математического описания этого блока становится возможным осуществить масштабный переход.

Принципиально каждый блок математической модели может иметь различную степень детализации математического описания. Важно лишь, чтобы входные и выходные переменные всех блоков модели находились во взаимном соответствии, что обеспечит получение замкнутой системы уравнений математической модели процесса в целом. Что касается состава внутренних переменных блоков, то здесь существует достаточно большая свобода выбора. В идеале математическое описание каждого блока должно включать уравнения, параметрами которых являются только физико-химические свойства веществ. Однако получить такое фундаментальное описание отдельных блоков при недостаточной исследованности отдельных явлений во многих случаях в настоящее время не представляется возможным. Это связано, как правило, с чрезвычайным усложнением математического описания блока, что само по себе приводит к резкому усложнению математической модели процесса в целом и, кроме того, может вызвать определенные вычислительные трудности. Поэтому при практическом использовании блочного принципа в математическом описании каждого блока на том или ином уровне его детализации приходится применить эмпирические соотношения.

1.7.1 Основные типы моделей гидродинамических структур потоков в аппаратах химической технологии

Выше было сказано, что при составлении материального и теплового балансов ХТП необходимо учитывать неравномерность движения потоков. Для учета неравномерности движения потоков разработан ряд типовых идеализированных структур гидродинамической обстановки в аппарате, составляющих основу математического описания процессов. Каждая из структур отражает тот или иной вид движения субстанции. Для химико-технологических объектов описание движения потоков важно большей частью лишь в отношении распределения и перемещения масс компонентов в рассматриваемых потоках. Поэтому модели гидродинамических структур потоков ниже будут даны преимущественно в виде уравнений, характеризующих изменение концентрации вещества в потоке, обусловленное его движением.

1.7.1.1 Модель идеального вытеснения

Данной модели соответствует структура поршневого движения потоков, при котором перемешивание субстанции в направлении движения потоков отсутствует, а в точках сечения, ортогонального направлению движения, свойства потока одинаковы (рис.1.3).

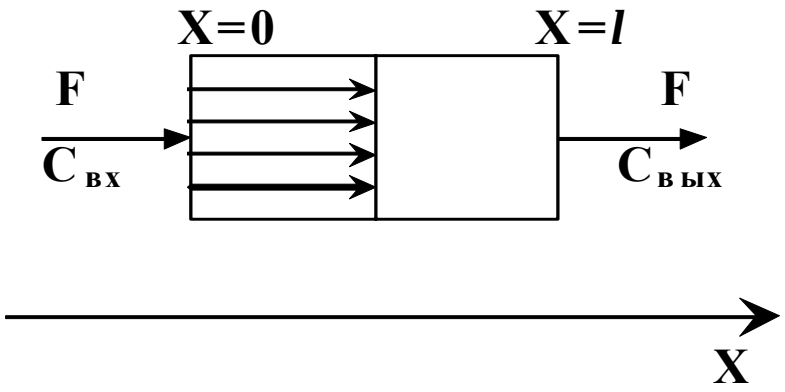

Рис. 1.3 – Схематическое изображение аппарата идеального вытеснения

F – объемный расход, $\left[\frac{м^3}{с}\right]$;

C – концентрация некоторого компонента в потоке, $\left[\frac{кг}{м^3}\right]$;

l – длина аппарата, $[м]$.

Используя закон сохранения массы (1.1), получим математическое описание модели. Для этого выделим элементарный объем толщиной ΔX и сечением S (рис. 1.4).

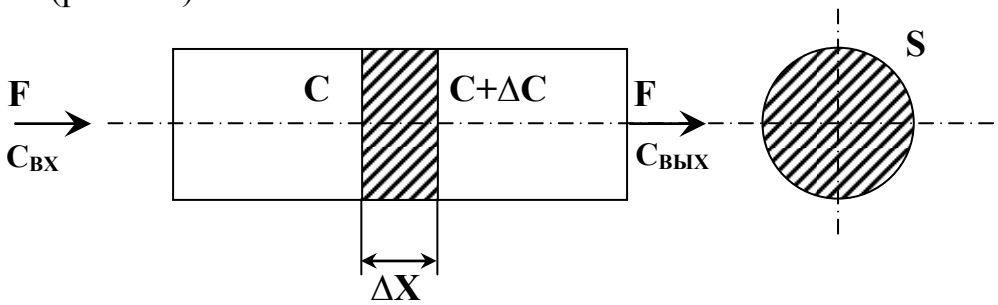

Рис. 1.4 – Элементарный объем

Концентрация вещества ΔC в элементарном объеме $\Delta V = S \cdot \Delta X$ изменяется в результате движения субстанции. Определим отдельные слагаемые материального баланса (1.1).

Концентрация распределенного в потоке вещества в выделенном объеме ΔV изменилась на величину ΔC, поэтому

$$\Delta M = \Delta V \cdot \Delta C = S \cdot \Delta X \cdot \Delta C = \left[м^2 \cdot м \cdot \frac{кг}{м^3} \right] = [кг] \qquad (1.7)$$

Массовые потоки на входе $M_{вх}$ и выходе $M_{вых}$ рассматриваемого элементарного объема представляют собой потоки, которые характеризуют вынужденную конвекцию, т.е. конвективный перенос вещества в потоке, имеющем концентрацию C на входе и C+ΔC на выходе ΔV

$$M_{вх} = F \cdot C = \left[\frac{м^3}{с} \cdot \frac{кг}{м^3} \right] = \left[\frac{кг}{с} \right] \qquad (1.8)$$

$$M_{вых} = F \cdot (C + \Delta C) = \left[\frac{м^3}{с} \cdot \frac{кг}{м^3} \right] = \left[\frac{кг}{с} \right] \qquad (1.9)$$

Подставим уравнения 1.7, 1.8 и 1.9 в уравнение 1.1 получим:

$$S \cdot \Delta X \cdot \Delta C = F \cdot C \cdot \Delta t - F(C + \Delta C)\Delta t = -F \cdot \Delta C \cdot \Delta t \qquad (1.10)$$

Разделив левую и правую часть уравнения 1.10 на произведение (ΔXΔt), получим уравнение в приращениях:

$$S \cdot \frac{\Delta C}{\Delta t} = -F \frac{\Delta C}{\Delta x} \qquad (1.11)$$

В пределе при $\Delta t \to 0$ и $\Delta X \to 0$ это уравнение примет вид:

$$S \cdot \frac{\partial C}{\partial t} = -F \frac{\partial C}{\partial x} \qquad (1.12)$$

Вводя обозначение $\omega = F / S \quad \left[\frac{м}{с}\right]$ (линейная скорость), получим окончательно математическое описание модели идеального вытеснения

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\omega \frac{\partial C}{\partial x} \qquad (1.13)$$

Решением данного уравнения является функция $C(t, X)$

$$C(t,0) = C_{вх} \text{ при } X = 0,\ t \geq 0$$

$$C(t,l) = C_{вых} \text{ при } X = l,\ t > 0$$

Данной модели соответствует распределение частиц в трубчатых аппаратах с отношением длины к диаметру свыше 20.

1.7.1.2 Модель идеального смешения

Данная модель соответствует структуре потока, в котором частицы вещества, поступающего на вход зоны идеального смешения, распределяются равномерно по всему объему зоны, так что концентрация распределяемого вещества во всех точках зоны и на выходе из нее одинакова.

Так как концентрация вещества во всех точках объема аппарата (рис. 1.5) одинакова, математическое описание получаем, используя закон сохранения массы в виде соотношения (1.2), где

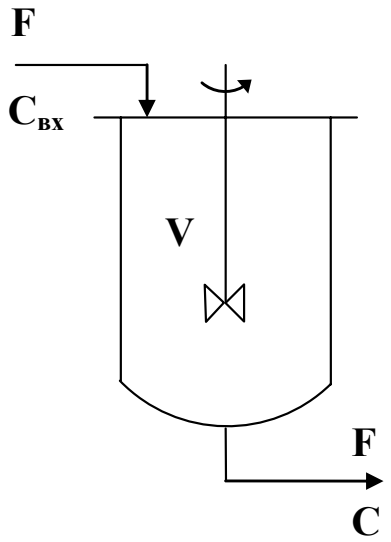

Рис. 1.5 – Схематическое изображение аппарата идеального смешения

$$M_{вх} = Fc_{вх} = \left[\frac{м^3}{с} \cdot \frac{кг}{м^3}\right] = \left[\frac{кг}{с}\right] \quad (1.14)$$

$$M_{вых} = Fc = \left[\frac{м^3}{с} \cdot \frac{кг}{м^3}\right] = \left[\frac{кг}{с}\right] \quad (1.15)$$

$$\frac{dM}{dt} = \frac{d}{dt}(VC) = V\frac{dC}{dt} = \left[м^3 \cdot \frac{кг}{м^3 \cdot с}\right] = \left[\frac{кг}{с}\right] \quad (1.16)$$

Подставив уравнения 1.14, 1.15 и 1.16 в уравнение 1.2 получим уравнение материального баланса для модели идеального смешения

$$V\frac{dC}{dt} = Fc_{вх} - Fc = F(c_{вх} - c) \quad (1.17)$$

Решением этого уравнения является функция C=C(t). Начальное условие интегрирования $C(0)=C_{вх}$.

Модель применяется для математического описания цилиндрических аппаратов со сферическим дном, с отражательными перегородками при небольшом отношении длины к диаметру $l/D < 20$.

Модель идеального вытеснения и смешения характеризуют крайние идеальные системы: движение субстанции без перемешивания и абсолютно полное перемешивание.

В потоках поршневого типа частицы среды проходят один и тот же путь с одинаковой скоростью, так что время пребывания $\tau = V/F$ всех элементов среды в аппарате одно и то же. Система идеального перемешивания характеризуется тем, что частицы, поступающие в аппарат извне, в каждый данный момент времени распределяются по всему объему аппарата равномерно.

Большинство реальных систем по неравномерности распределения времени пребывания частиц в потоках занимают промежуточное положение между этими крайними системами: вытеснения и смешения.

В настоящее время для описания структуры потоков в аппаратах промежуточного типа наиболее широко используют диффузионную и ячеечную модели.

1.7.1.3 Однопараметрическая диффузионная модель

Данная модель соответствует гидродинамической структуре поршневого потока с перемешиванием в продольном направлении. При этом принимается, что продольное перемешивание может быть описано уравнением, аналогичным уравнению молекулярной диффузии (первый закон Фика), т.е. всякое отклонение распределения времени пребывания частиц потока от распределения при идеальном вытеснении, независимо от причины, вызвавшей это отклонение, считают следствием продольного перемешивания (вдоль оси потока), условно описываемого уравнением диффузии с некоторым

коэффициентом диффузии.

В соответствии с принятой аналогией, если в движущемся (например, по трубе) потоке окрасить тонкий поперечный слой жидкости, то краска будет размываться в обе стороны от движущегося окрашенного сечения, как и в случае обычной молекулярной диффузии, размывание краски в этих направлениях обусловлено наличием градиента ее концентрации. Однако скорость такого размывания больше, чем в случае молекулярной диффузии, поэтому для количественной характеристики скорости продольного перемешивания вместо коэффициента диффузии, используемого в известных законах Фика, вводят некоторый фиктивный коэффициент диффузии, называемый также коэффициентом продольного перемешивания.

Для получения математического описания используем закон сохранения массы и дополнительную гипотезу связи для определения диффузионного потока – первый закон Фика

$$M = -DS\frac{dC}{dX} \qquad (1.18)$$

где D – коэффициент диффузии, $\left[\frac{м^2}{с}\right]$; S – площадь сечения аппарата, $[м^2]$.

В данном случае принимается, что концентрация вещества изменяется в результате движения (вынужденной конвекции), а также в результате продольного перемешивания (диффузии) (рис. 1.6).

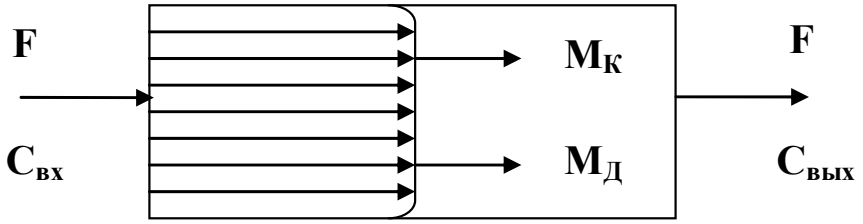

Рис. 1.6 – Схематическое изображение аппарата

$M_К$ – массовый поток в результате вынужденной конвекции, $M_Д$ – массовый поток в результате продольного перемешивания. Выделим элементарный объем ΔV (рис. 1.7)

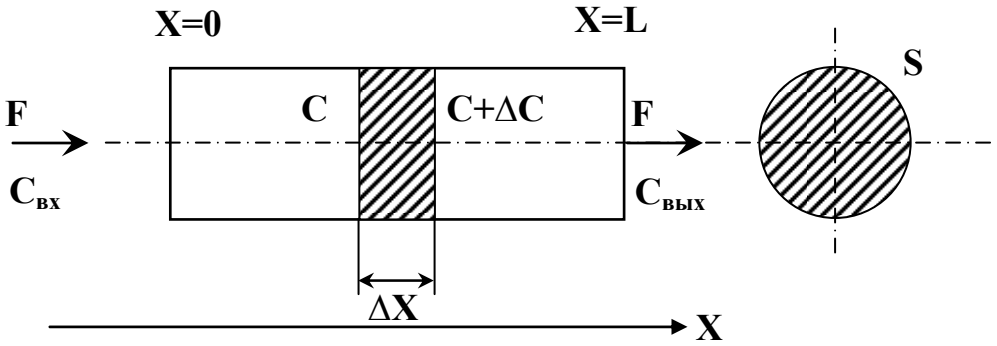

Рис. 1.7 – Элементарный объем

Согласно блочного принципа необходимо определить: $M_к^{вх}, M_к^{вых}, M_Д^{вх}, M_Д^{вых}$

Общее уравнение материального баланса будет иметь вид:

$$\Delta M = (M_к^{вх} + M_Д^{вх})\cdot\Delta t - (M_к^{вых} + M_Д^{вых})\cdot\Delta t \qquad (1.19)$$

Определим отдельные слагаемые этого уравнения

$$M_{к}^{вх} = F \cdot C = \left[\frac{м^3}{с} \cdot \frac{кг}{м^3} \right] = \left[\frac{кг}{с} \right] \tag{1.20}$$

$$M_{к}^{вых} = F \cdot (C + \Delta C) = \left[\frac{м^3}{с} \cdot \frac{кг}{м^3} \right] = \left[\frac{кг}{с} \right] \tag{1.21}$$

$$M_{Д}^{вх} = -D_X \cdot S \cdot \frac{dC}{dX} = \left[\frac{м^2}{с} \cdot м^2 \cdot \frac{кг}{м^3 \cdot м} \right] = \left[\frac{кг}{с} \right] \tag{1.22}$$

$$M_{Д}^{вых} = -D_X \cdot S \frac{d(C + \Delta C)}{dX} = \left[\frac{м^2}{с} \cdot м^2 \cdot \frac{кг}{м^3 \cdot м} \right] = \left[\frac{кг}{с} \right] \tag{1.23}$$

Здесь C и C+ΔC концентрация вещества соответственно на входе и выходе выделенного объема $\Delta V = S \cdot \Delta X$.

Накопление вещества ΔM в выделенном объеме, т.е. изменение массы вещества объема ΔV, связанное с изменением концентрации ΔC, определится из уравнения:

$$\Delta M = \Delta V \cdot \Delta C = S \cdot \Delta X \cdot \Delta C = \left[м^2 \cdot м \cdot \frac{кг}{м^3} \right] = [кг] \tag{1.24}$$

С учетом уравнений 1.20 – 1.24 уравнение 1.19 примет вид:

$$S \cdot \Delta X \cdot \Delta C = \left[FC - D_X \cdot S \frac{dC}{dX} \right] \Delta t - \left[F(C + \Delta C) - D_X \cdot S \frac{d(C + \Delta C)}{dX} \right] \cdot \Delta t \tag{1.25}$$

Выполнив сокращения в данном уравнении, разделив на (ΔtΔX) и учитывая, что

$$\lim_{\Delta X \to 0} \frac{\frac{d(C + \Delta C)}{dX} - \frac{dC}{dX}}{\Delta X} = \frac{\partial^2 C}{\partial X^2}$$

получим при $\Delta t \to 0, \Delta X \to 0$

$$-F \frac{\partial C}{\partial X} + D_X \cdot S \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} = S \frac{\partial C}{\partial t} \tag{1.26}$$

или с учетом $\omega = F / S$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_X \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} - \omega \cdot \frac{\partial C}{\partial X} \tag{1.27}$$

В этом уравнении D_X – основной параметр, характеризующий модель и являющийся коэффициентом продольного перемешивания. Коэффициент продольного перемешивания по смыслу и размерности аналогичен коэффициенту молекулярной диффузии.

Функция C(t, X) является решением данного уравнения, причем

$$C(t,0) = C_{вх}, t \geq 0$$

$$C(t,l) = C_{вых}, t > 0$$

Модель применяется для математического описания трубчатых аппаратов, аппаратов колонного типа с насадкой и без насадки при осевом рассеивании вещества.

При выборе однопараметрической диффузионной модели принимаются следующие допущения: концентрация вещества является непрерывной

функцией пространственной и временной координат, концентрация во всех точках сечения, ортогонального направлению движения, одинакова, скорость потока и коэффициент продольного перемешивания не изменяются по длине и поперечному сечению потока.

1.7.1.4 Двухпараметрическая диффузионная модель

В двухпараметрической модели учитывается перемешивание потока как в продольном, так и в радиальном направлении. Как и в однопараметрической модели, процесс перемешивания описывается уравнениями молекулярной диффузии. Модель характеризуется двумя параметрами: коэффициентом продольного D_X и радиального D_R перемешивания. Принимается, что эти коэффициенты не изменяются по длине и поперечному сечению аппарата.

Для случая одномерного движения потока в аппарате цилиндрической формы уравнение двухпараметрической диффузионной модели имеет вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_X \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} + \frac{D_R}{R}\frac{\partial}{\partial R}\left(R\frac{\partial C}{\partial R}\right) - \omega\frac{\partial C}{\partial X} \qquad (1.28)$$

Решение данной модели – функция от трех переменных C(t, X, R) – является сложным, поэтому используется редко.

Моделью описываются трубчатые аппараты, аппараты колонного типа с небольшим отношением длины к диаметру с большой поперечной неравномерностью скоростей потоков.

1.7.1.5 Ячеечная модель

В данной модели поток условно разбивается на ряд последовательно соединенных ячеек (рис. 1.8). При этом в каждой из этих ячеек имеет место полное перемешивание потока, а перемешивание между ячейками отсутствует. Количество таких идеальных ячеек (m) является параметром, характеризующим модель реального процесса. Когда $m \to \infty$ имеет место модель идеального вытеснения при $m = 1$ – идеальное смешение.

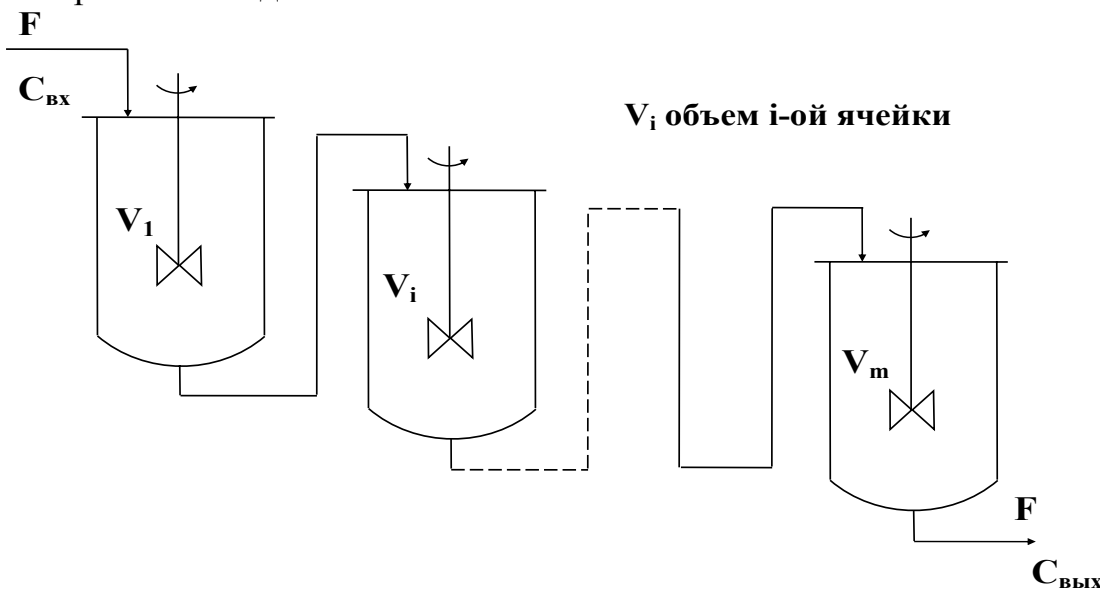

Рис. 1.8 – Схематическое изображение ячеечной модели

Ячеечная модель описывается системой уравнений идеального смешения

$$V_i \frac{dC_i}{dt} = F(C_{i-1} - C_i), i = 1,2,...,m$$
$$C^{вх} = C_0(t) \quad C^{вых} = C_m(t) \qquad (1.29)$$

Применяется модель для описания каскадов реакторов, тарельчатых колонн, аппаратов с псевдоожиженными слоями, насадочных колонн.

Рассмотренные выше модели гидродинамических структур потоков являются основными.

Иногда существенный вклад в неравномерность распределения элементов потоков по времени пребывания в аппарате вносят застойные объемы жидкости в системе, а также такие явления, как адсорбция и десорбция вещества на поверхности элементов насадки, диффузия вещества в пленке, поры твердых частиц и т.д. При этом погрешности математического описания с помощью простых моделей резко возрастают. Для учета перечисленных явлений используют более сложные модели. К таким моделям относятся диффузионная модель с застойными зонами и ячеечная модель с застойными зонами.

1.7.1.6 Диффузионная модель с застойными зонами

В данной модели объем потока в аппарате V представляется (рис. 1.9) в виде суммы $V=V_1+V_2$, где V_1 – эффективно используемый объем, V_2 – объем, который может служить источником или стоком массы. К V_2 относится объем застойных зон: объем пор в частицах, элементах насадки и т.д.

Между зонами V_1 и V_2 происходит обмен веществом $\left(M_3^{вх}, M_3^{вых}\right)$, причем, характер обмена может быть различным. Наиболее вероятными видами обмена могут быть конвективный, диффузионный, а также виды обмена адсорбции и десорбции.

Пусть между диффузионной и застойной зонами имеет место конвективный вид обмена, другие виды обмена будут рассматриваться далее.

Наличие в системе конвективного обмена означает, что существует объемный расход потока F_K из проточной части системы в застойную. Ввиду предполагаемого постоянства объемов проточной и застойной зон существует точно такой же расход потока и в обратном направлении.

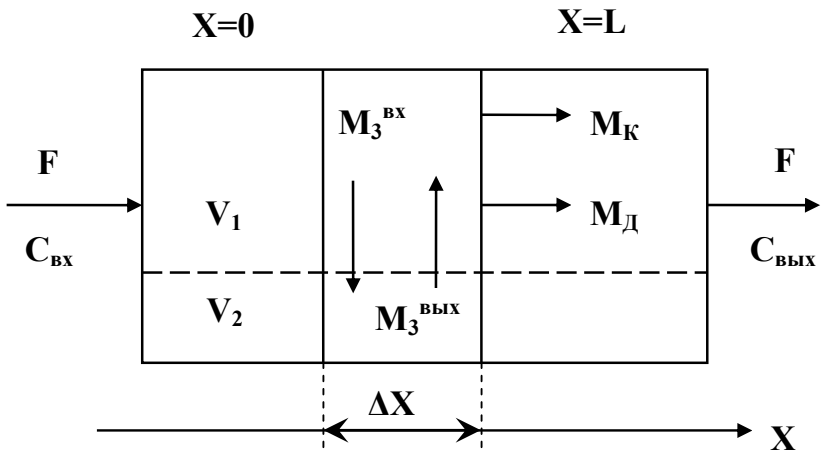

Рис. 1.9 – Структура модели

$M_К$, $M_Д$ – конвективный и диффузионный массовые потоки, как и для простой диффузионной модели

При вводе уравнений, характеризующих распределение частиц потока в аппарате, необходимо учесть в материальном балансе конвективный обмен веществом между застойной и диффузионной зоны будет иметь вид:

$$\Delta M_Д = (M_к^{вх} + M_Д^{вх} + M_3^{вых}) \cdot \Delta t - (M_к^{вых} + M_Д^{вых} + M_3^{вх})\Delta t \qquad (1.30)$$

Аналогично запишется уравнение для застойной зоны

$$\Delta M_3 = M_3^{вх} \cdot \Delta t - M_3^{вых} \cdot \Delta t \qquad (1.31)$$

Обозначим концентрацию в проточной части аппарата С $\left[\frac{кг}{м^3}\right]$, а в застойной зоне - C_1. Введем величину $\varepsilon = \frac{V_1}{V}$ - доля объема всего аппарата, занимаемого диффузионной зоной, соответственно $1-\varepsilon = \frac{V_2}{V}$ доля объема аппарата занимаемого застойной зоной.

С учетом этих обозначений соотношения, определяющие конвективные массовые потоки в направлении: проточная часть аппарата – застойная зона $M_3^{вх}$, а также в обратном направлении $M_3^{вых}$ будут иметь вид:

$$M_3^{вх} = F_k \cdot C \qquad (1.32)$$

$$M_3^{вых} = F_k \cdot C_1 \qquad (1.33)$$

Величина ε позволяет представить соотношения, определяющие накопление массы $\Delta M_Д$ и ΔM_3 в виде:

$$\Delta M_Д = \Delta V_1 \cdot \Delta C = \Delta V \cdot \varepsilon \cdot \Delta C = S \cdot \Delta X \cdot \varepsilon \cdot \Delta C_1 \qquad (1.34)$$

$$\Delta M_3 = \Delta V_2 \cdot \Delta C_1 = \Delta V(1-\varepsilon)\Delta C_1 = S \cdot \Delta X(1-\varepsilon)\Delta C \qquad (1.35)$$

Учитывая эти соотношения, а также соотношения, используемые при выводе уравнения (1.27), уравнения (1.30), (1.31) преобразуются:

$$S \cdot \Delta X \cdot \varepsilon \cdot \Delta C = \left[F \cdot C - D_X \cdot S \cdot \varepsilon \frac{\partial C}{\partial X} + F_K \cdot C_1\right]\Delta t - \left[F(C+\Delta C) - D_X \cdot S \cdot \varepsilon \frac{\partial (C+\Delta C)}{\partial X} + F_K \cdot C\right] \cdot \Delta t \qquad (1.36)$$

$$S \cdot \Delta X \cdot (1-\varepsilon)\Delta C_1 = F_K \cdot C \cdot \Delta t - F_K \cdot C_1 \cdot \Delta t \qquad (1.37)$$

Разделив уравнения 1.36 и 1.37 на $S \cdot \Delta X \cdot \Delta t$. Величину $\frac{V_K}{(S \cdot \Delta X)}$ обозначим $\alpha_К$ – объемный коэффициент скорости конвекционного обмена [C^{-1}], определяется экспериментально. В пределах $\Delta t \to 0$ и $\Delta X \to 0$ получим уравнение материального баланса для проточной части аппарата:

$$\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} = \varepsilon \cdot D_X \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} - \omega \frac{\omega C}{\omega X} - \alpha_K (C - C_1) \qquad (1.38)$$

и уравнение материального баланса для застойной зоны

$$(1-\varepsilon)\frac{dC_1}{dt} = \alpha_K (C - C_1) \qquad (1.39)$$

Решением этой системы уравнений является функция C(t,X) причем

$$C_{вх} = C(t,0) \quad \text{при} \quad X=0, \quad t \geq 0$$
$$C_{вых} = C(t,l) \quad \text{при} \quad X=l, \quad t > 0$$

где l – длина аппарата.

Полученная модель имеет три параметра D_K, α_K, ε, определяемые экспериментально.

Теперь рассмотрим диффузионный вид обмена (рис. 1.9) между проточной частью аппарата и застойной зоной.

При диффузионном обмене интенсивность диффузионного потока можно оценить на основе уравнения конвективной диффузии Щукарева

$$M_3 = \beta \cdot S_K (C - C_S) = M_3^{вх} - M_3^{вых} \tag{1.40}$$

где M_3 – результирующий массовый поток в направлении: диффузионная зона (при условии $C>C_1$), если $C<C_1$, то направление изменяется на обратное; β - коэффициент массопередачи; S_K – поверхность контакта двух зон; C_S – концентрация на поверхности раздела двух зон.

Принимая во внимание, что перемешивание в застойной зоне идеальное, C_S можно определить как $C_S=C_1$ (в соответствии с допущениями модели смешения). Таким образом, результирующий массовый поток определяется из соотношения

$$M_3 = \beta \cdot S_K (C - C_1) \tag{1.41}$$

а уравнения (1.30 и 1.31) преобразуются к виду:

$$\Delta M_Д = (M_K^{вх} + M_Д^{вх})\Delta t - (M_K^{вых} + M_Д^{вых} + M_3)\Delta t \tag{1.42}$$

$$\Delta M_3 = M_3 \cdot \Delta t \tag{1.43}$$

Эти соотношения позволяют получить математическое описание модели, если между зонами существует диффузионный вид обмена.

$$\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} = D_X \cdot \varepsilon \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} - \omega \frac{\partial C}{\partial X} - \alpha_D \cdot (C - C_1) \tag{1.44}$$

$$(1-\varepsilon)\frac{dC_1}{dt} = \alpha_D \cdot (C - C_1) \tag{1.45}$$

где $\alpha_D = \dfrac{\beta F_K}{S \Delta X}$ – константа диффузионного обмена, [C^{-1}].

Если диффузионная и застойная зоны аппарата обмениваются веществом путем адсорбции – десорбции, то результирующий поток можно определить, используя уравнение массопередачи

$$M_3 = K_a \cdot S_K (C - C^*) \tag{1.46}$$

где K_a – коэффициент массопередачи, S_K – поверхность контакта фаз, C^* - равновесная концентрация, характеризующая концентрацию вещества в застойной зоне. В момент равновесия массовый поток, которым обмениваются диффузионная и застойная зона, отсутствует ($M_3=0$), так как $C=C^*$ и движущая сила процесса равна нулю. Пусть m – константа равновесия адсорбции, т.е. $C^* = m \cdot C_1$

тогда

$$M_3 = K_a \cdot S_K (C - m \cdot C_1) \tag{1.47}$$

Если, как и в предыдущих случаях, ввести обозначение $\alpha_a = \frac{K_a F_K}{F \Delta X}$ - коэффициент скорости [C^{-1}] процесса адсорбции – десорбции, то можно получить следующие уравнения математического описания

$$\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} = \varepsilon \cdot D_X \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} - \omega \frac{\partial C}{\partial X} - \alpha_a C + \alpha_a \cdot m \cdot C_1 \qquad (1.48)$$

$$(1-\varepsilon)\frac{dC_1}{dt} = \alpha_a \cdot C - \alpha_a \cdot m \cdot C_1 \qquad (1.49)$$

В действительности, в системе могут иметь место все перечисленные виды обмена одновременно. Исходя из принципа аддитивности, можно предположить, что общий обменный поток М определяется как сумма отдельных потоков за счет действия каждого из рассмотренных явлений обмена:

$$\begin{aligned} M &= (\alpha_K + \alpha_Д + \alpha_a)C - (\alpha_K + \alpha_Д + \alpha_a \cdot m)C_1 = \\ &= K \cdot C - K_1 \cdot C_1 \end{aligned} \qquad (1.50)$$

где $K = \alpha_K + \alpha_Д + \alpha_a$; $K_1 = \alpha_K + \alpha_Д + \alpha_a \cdot m$ - общие коэффициенты обмена в прямом и обратном направлении.

В общем случае уравнения, характеризующие распределение частиц в соответствии с диффузионной моделью при наличии застойных зон, запишутся в виде:

$$\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} = \varepsilon \cdot D_X \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} - \omega \frac{\partial C}{\partial X} - K \cdot C + K_1 \cdot C_1 \qquad (1.51)$$

$$\begin{gathered} (1-\varepsilon)\frac{dC_1}{dt} = KC - K_1 C_1 \\ C(t,0) = C_{вх}; \qquad C(t,l) = C_{вых} \end{gathered} \qquad (1.52)$$

l - длина аппарата.

Применяется модель для описания потоков в зернистой среде, в насадке.

1.7.1.7 Ячеечная модель с застойными зонами

Данная модель как и диффузионная с застойными зонами позволяет учесть относительно застойные обмены в системе.

Объем i – ой ячейки представляется в виде суммы двух объемов: объема проточной зоны V_{1i} и объема застойной зоны V_{2i}. Между зонами происходит обмен веществом, характер которого может быть различен.

Математическое описание в данном случае можно получить на основе тех же соотношений, что были использованы при выводе уравнений материального баланса для диффузионной модели с застойными зонами.

Для i – ой ячейки (рис. 1.10) уравнения материального баланса имеют вид

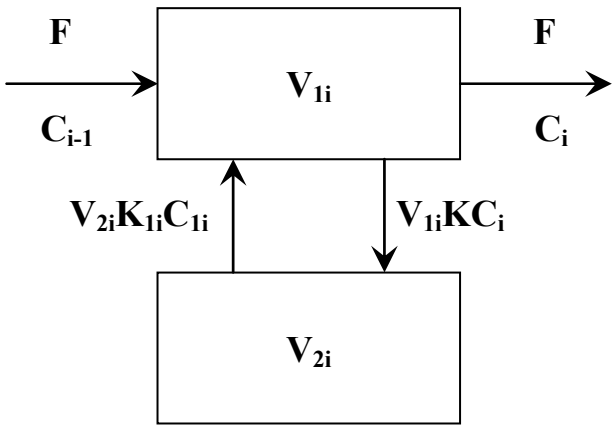

Рис.1.10 – Структурная схема модели

$$V_{1i}\frac{dC_i}{dt} = F \cdot C_{i-1} - F \cdot C_i + V_{2i} \cdot K_{1i} \cdot C_{1i} - V_{1i}KC_i \qquad (1.53)$$

$$V_{2i}\frac{dC_{1i}}{dt} = V_{1i} \cdot K_1 \cdot C_i - V_{2i} \cdot K_1 C_{1i}$$
$$C_0(t) = C_{вх} \qquad C_m(t) = C_{вых} \qquad (1.54)$$

где C_{1i} – концентрация вещества в застойной зоне i – ой ячейки, C_i – концентрация вещества в проточной части i – ой ячейки.

Величины KC_i и K_1C_{1i} характеризуют обменные потоки, приходящиеся соответственно на 1м^3 объема застойной зоны и на 1м^3 объема проточной части ячейки.

Здесь К и $К_1$ – суммарные коэффициенты обмена в прямом и обратном направлении имеют тот же физический смысл, что и в предыдущей модели. Если $К=К_1$ имеет место конвективный и диффузионный обмен веществом, если $К \neq К_1$ имеет место обмен путем адсорбции-десорбции.

Описываются данной моделью потоки в зернистой среде, насадке, потоки в любой технологической аппаратуре, где наблюдаются относительно неподвижные объемы жидкости и газа.

1.7.1.8 Ячеечная модель с обратным потоком

Простая ячеечная модель является моделью однонаправленного действия и не воспроизводит явлений заброса вещества в направлении, обратном основному потоку. Ячеечной моделью с обратным потоком описываются аппараты, где наблюдается заброс вещества (рис. 1.11) в сторону, обратную направлению основного потока.

Материальный баланс для i – ой ячейки запишется в виде

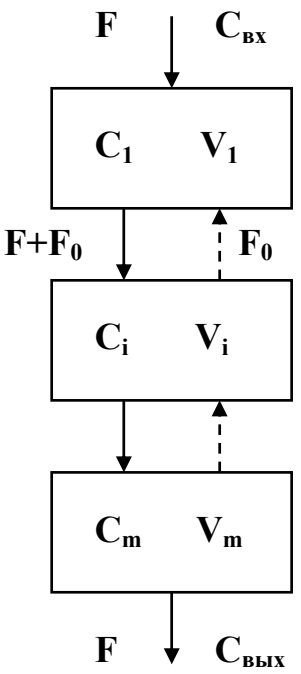

Рис. 1.11 – Структурная схема модели

$$\Delta M = (M_к^{вх} + M_0^{вх})\Delta t - (M_к^{вых} + M_0^{вых})\Delta t \qquad (1.55)$$

Величина $(M_к^{вх} - M_к^{вых})$ характеризует конвективный перенос вещества, величина $(M_0^{вх} - M_0^{вых})$ характеризует величину обратного потока.

В пределе при $\Delta t \to 0$ уравнение материального баланса будет иметь вид:

$$V_i \frac{dC_i}{dt} = (F + F_0)C_{i-1} - (F + F_0)C_i + F_0 C_{i+1} - F_0 C_i \qquad (1.56)$$

Вводя обозначения $\frac{F_0}{F} = f$ - доля обратного потока, получим:

$$\frac{V_i}{F}\frac{dC_i}{dt} = fC_{i+1} - (1 + 2f)C_i + (1 + f)C_{i-1} \qquad (1.57)$$

i=1,2…..,m

где V_i – объем i – ой ячейки; m – количество ячеек; F_0 – объемный расход в направлении потока $\left[\frac{м^3}{c}\right]$.

Данная модель широко используется при математическом описании структуры гидродинамических потоков в секционированных аппаратах: в пульсационных тарельчатых, роторно-дисковых экстракторах, в аппаратах с псевдоожиженными слоями, в реакторах барботажного типа. Применение данной модели оправдано в некоторых случаях для насадочных аппаратов.

1.7.1.9 Комбинированные модели

При анализе гидродинамической обстановки в реальных аппаратах широкое распространение получили комбинированные модели. В общем случае комбинированную модель рассматривают как совокупность ячеек идеального смешения, вытеснения, застойных зон, связанных между собой перекрестными, байпасными и рециркуляционными потоками. Комбинированные модели

получили широкое распространение для описания структуры потоков жидкости и газа в тарельчатых аппаратах.

Рассмотрим две комбинированные модели. Первая модель состоит из ячеек вытеснения, смешения, застойной зоны и байпасного потока (рис. 1.12).

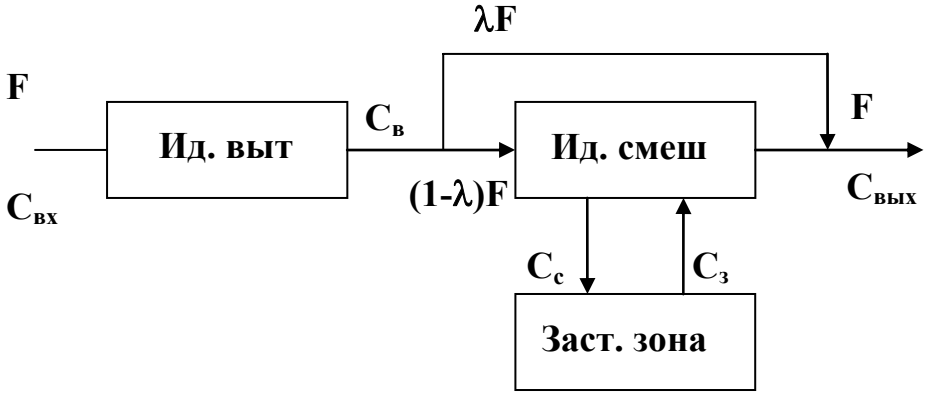

Рис. 1.12 – Структурная схема модели

λF - величина байпасного потока, $\left[\frac{м^3}{с}\right]$.

Введем обозначения $C_в$, $C_с$, $C_з$ – концентрация на выходе соответственно ячеек вытеснения, смешения, застойной зоны, $\left[\frac{кг}{м^3}\right]$. Материальный баланс составляем отдельно для ячейки идеального вытеснения, ячейки смешения, охваченной байпасом, застойной зоны.

1. Материальный баланс ячейки идеального вытеснения

$$M_к^{вх} = FC_B \tag{1.58}$$

$$M_к^{вых} = F(C_B + \Delta C_B) \tag{1.59}$$

$$\Delta M = b \cdot S \cdot \Delta X \cdot C_B \tag{1.60}$$

где S – сечение аппарата, b – доля объема, приходящегося на ячейку вытеснения

$$Sb\frac{\partial C_B}{\partial t} = -\omega\frac{\partial C_B}{\partial X} \tag{1.61}$$

2. Материальный баланс ячейки идеального смешения, охваченной байпасным потоком

$$M_к^{вх} = (1-\lambda)\cdot F \cdot C_B \tag{1.62}$$

$$M_к^{вых} = (1-\lambda)\cdot F \cdot C_c \tag{1.63}$$

$$\Delta M = m \cdot V \cdot \Delta C_c \tag{1.64}$$

где: V – объем рассматриваемой системы, m – доля объема, приходящегося на ячейку идеального смешения.

$$M_з^{вых} = \beta \cdot V \cdot K_2 \cdot C_з \tag{1.65}$$

$$M_з^{вх} = m \cdot V \cdot K_1 C_c \tag{1.66}$$

где β - доля объема, приходящегося на застойную зону, K_1, K_2 – коэффициенты обмена

$$mV\frac{dC_c}{dt} = (1-\lambda)F(C_в - C_c) - m \cdot V \cdot K_1 C_c + \beta \cdot V \cdot K_2 C_з \tag{1.67}$$

3. Материальный баланс для застойной зоны

$$\beta V \frac{dC_S}{dt} = mVK_1C_c - \beta V \cdot K_2C_3 \qquad (1.68)$$

Таким образом, модель в данном случае описывается следующей системой уравнений

$$\begin{gathered} Sb\frac{\partial C_B}{\partial t} = -\omega\frac{\partial C_B}{\partial X} \\ mV\frac{dC_c}{dt} = (1-\lambda)V(C_B - C_c) - mV \cdot K_1C_c + \beta VK_2C_3 \\ \beta\frac{dC_3}{dt} = mK_1C_c - \beta K_2C_3 \\ C_{вых} = (1-\lambda)C_c + \lambda C_B \\ C_в(t,0) = C_{вх}(t) \qquad t \ge 0 \end{gathered} \qquad (1.69)$$

Данная модель используется для математического описания аппаратов с мешалкой, потоков в трубах, псевдоожижанных слоев, колонных аппаратов.

Вторая модель состоит из ячеек идеального смешения, вытеснения и рециркуляционного потока (рис. 1.13).

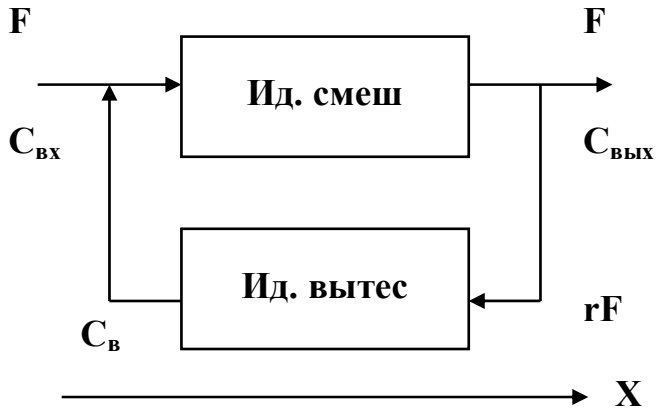

Рис. 1.13 – Структурная схема модели

rF – величина рециркуляционного потока.

Материальный баланс составляется по аналогии с предыдущим случаем: ячейка идеального смешения

$$mV\frac{dC_{вых}}{dt} = FC_{вх} + rFC_в - (1+r)FC_{вых} \qquad (1.70)$$

ячейка идеального вытеснения

$$b\frac{\partial C_в}{\partial t} = r\omega\frac{\partial C_в}{\partial X} \qquad (1.71)$$

Применяется данная модель для математического описания аппаратов с мешалкой, аппаратов при больших объемных скоростях потоков и близко расположенных входе и выходе.

2 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ТЕПЛООБМЕННЫХ АППАРАТОВ

Математические модели химико-технологических процессов составляют на основе гидродинамической структуры потоков в аппаратах, от которой зависит распределение массы и энергии в потоках, с учетом физико-

химических явлений теплопереноса, массопереноса, химического превращения в соответствии с блочным принципом.

При моделировании теплообменных аппаратов установлено, что движение потоков теплоносителя и хладоагента математически описывается с достаточной степенью адекватности двумя простейшими гидродинамическими моделями: идеальное вытеснения и идеальное смешение. В зависимости от того, какой моделью описывается движение теплоносителя и хладоагента, можно получить 3 типа моделей теплообменных аппаратов: 1) смешение – смешение, 2) вытеснение – вытеснение, 3) вытеснение – смешение. Значительно реже используются ячеечная и диффузионная модели. Более сложные модели практически не применяются. Кроме того, существуют модели теплообменников с учетом тепловой инерционности стенки аппарата и модели, в которых тепловой инерционностью стенки пренебрегают.

Понятие тепловой инерционности стенки связано с допущениями, которые принимаются по отношению к разделяющей теплоноситель и хладоагент стенки (рис.2.1).

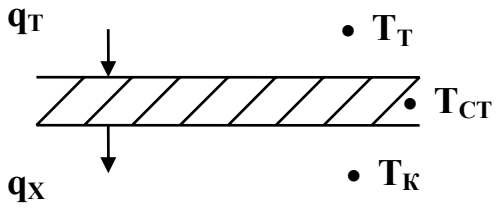

Рис. 2.1 – Фрагмент стенки теплообменника

Тепло от теплоносителя (тепловой поток q_T $\left[\frac{Дж}{c}\right]$, температура T_T) передается через разделяющую стенку (температура T_{CT}) к хладоагенту (тепловой поток q_X $\left[\frac{Дж}{c}\right]$, температура T_X).

При этом возможны следующие допущения:

1. Тепловой инерционностью стенки пренебрегаем, т.е. считаем, что разделяющая стенка не оказывает никакого влияния на перенос тепла от теплоносителя к хладоагенту. В этом случае все тепло от теплоносителя передается к хладоагенту, т.е. $q_T=q_X$ и $T_{CT}=const$.

2. Разделяющая стенка аккумулирует часть тепла, передаваемого от теплоносителя к хладоагенту. В этом случае $q_T \neq q_X$ и $T_{CT} = f(t) \neq const.$ В простейших моделях, как правило, принимается, что, благодаря большому коэффициенту теплопроводности, температура по длин стенки выравнивается мгновенно.

Ниже будут рассмотрены рад примеров математического описания теплообменных аппаратов, отражающих общую методику построения математической модели. Для всех моделей примем, что потерями тепла в окружающую среду можно пренебречь.

2.1 Модель типа «смешение – смешение»

Примем, что тепловая емкость разделяющей стенки мала, т.е. $T_{CT} = const.$ Математическая модель в данном случае представляет собой систему состоящую из 2-х дифференциальных уравнений теплового баланса, записанных для теплоносителя и хладоагента.

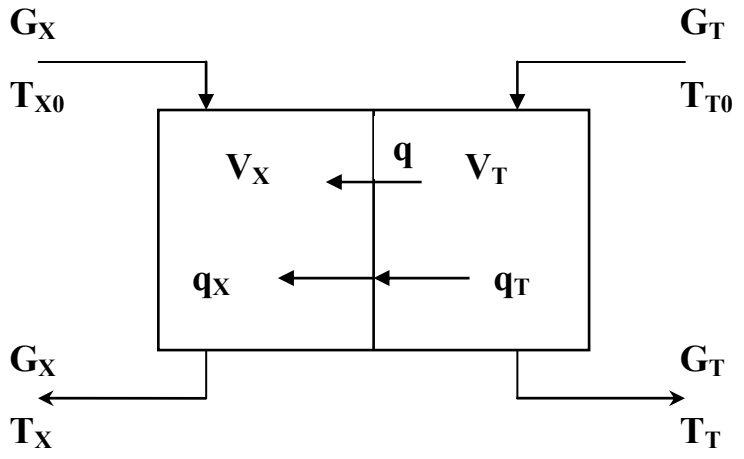

Рис. 2.2 – Схематическое изображение теплообменника смешение-смешение

G_T, G_X – массовые расходы теплоносителя и хладоагента, $\left[\frac{кг}{с}\right]$; V_T, V_X – объемы, в которых движутся теплоноситель и хладоагент, $[м^3]$.

Так как тепловая емкость стенки мала $q_X=q_T=q$, где q – тепловой поток, характеризующий теплопередачу через стенку от теплоносителя к хладоагенту; q_X, q_T – тепловые потоки, характеризующие теплоотдачу соответственно от стенки к хладоагенту и от теплоносителя к стенке.

Так как в качестве основы модели принято допущение об идеальном смешении, температура во всех точках объема аппарата одинакова и поэтому тепловые балансы записываем для всего объема (V_T), занятого теплоносителем 1 – ое уравнение - и для всего объема (V_X), занятого хладоагентом 2 – ое уравнение, в соответствии с уравнением (1.5). В данном случае необходимо учесть конвекционный перенос тепла в пределах каждого потока (вынужденная конвекция) и передачу тепла через стенку аппарата. Конвективный перенос тепла в пределах одной фазы связан с транспортом вещества, движением отдельных элементов потока. Для математического описания теплопереноса используем основное уравнение теплопередачи:

$$q = K \cdot S(T_T - T_X) \qquad (2.1)$$

где К – коэффициент теплопередачи, $\left[\frac{Вт}{м^2 \cdot К}\right]$, S – поверхность теплопередачи, $[м^2]$.

Запишем тепловые балансы для теплоносителя и хладоагента. Для теплоносителя, используя рис. 2.2, уравнение (1.5) можно представить в виде

$$\frac{dQ_T}{dt} = Q^к_{вх} - Q^к_{вых} - q \qquad (2.2)$$

где $Q^к_{вх}, Q^к_{вых}$ - тепловые потоки, отражающие изменение температуры в потоке, связанное с вынужденной конвекцией, т.е. $Q^к_{вх} = G_T \cdot C_{PT} \cdot T_{T0}$ - количество тепла

поступающего на вход аппарата в единицу времени в месте с потоком теплоносителя; $Q^{к}_{вых} = G_T \cdot C_{PT} \cdot T_T$ - количество тепла, уходящее из аппарата в единицу времени с теплоносителем.

Таким образом, уравнение 2.2 можно переписать в виде:

$$\frac{dQ_T}{dt} = G_T C_{PT} T_{T0} - G_T C_{PT} T_T - KS(T_T - T_X) \qquad (2.3)$$

В этом уравнении $\frac{dQ_T}{dt}$ - скорость накопления тепла в объеме V_T, поэтому

$$\frac{dQ_T}{dt} = \frac{d}{dt}(V_T \rho_T C_{PT} T_T) \qquad (2.4)$$

Причем, плотность ρ_T и теплоемкость C_{PT} теплоносителя не зависят от температуры. С учетом этих допущений

$$\frac{dQ_T}{dt} = V_T \rho_T C_{PT} \frac{dT_T}{dt}$$

и окончательно можно записать тепловой баланс теплоносителя:

$$V_T \rho_T C_{PT} \frac{dT_T}{dt} = G_T C_{PT}(T_{T0} - T_T) - KS(T_T - T_X) \qquad (2.5)$$

Аналогично, используя закон сохранения тепла, для хладоагентов можно записать:

$$\frac{dQ_X}{dt} = Q^{к}_{вх} - Q^{к}_{вых} + q \qquad (2.6)$$

или

$$V_X \rho_X C_{PX} \frac{dT_X}{dt} = G_X C_{PX}(T_{T0} - T_X) + KS(T_T - T_X) \qquad (2.7)$$

Система уравнений 2.5, 2.7 представляет собой математическое описание теплообменного аппарата, для которого можно принять модель типа смешение – смешение без учета тепловой инерционности стенки.

2.2 Модель типа «вытеснение – вытеснение»

Примем, как в предыдущем случае, что тепловая емкость стенки мала. В соответствии с моделью вытеснения нельзя принять, что во всех точках объема аппарата температура одинакова, поэтому выделим элементарный объем и запишем тепловые балансы для теплоносителя и хладоагента.

Моделью вытеснение – вытеснение описываются, например, аппараты типа труба в трубе

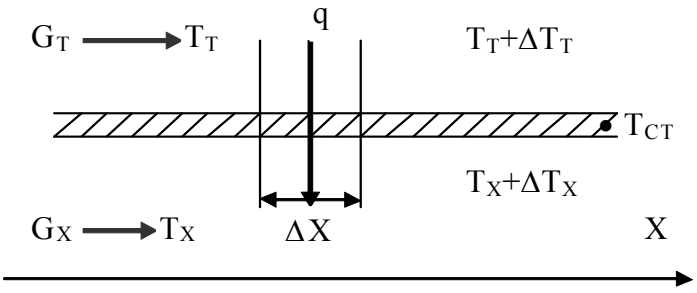

Рис. 2.3 – Схематическое изображение элементарного участка

трубы в случае прямотока

Причем, что имеет место прямоток (рис. 2.3).

$\Delta V_T = S_T \Delta X$ – элементарный объем, занимаемый теплоносителем; $\Delta V_X = S_X \Delta X$ – элементарный объем, занимаемый хладоагентом.

Причем, что теплоемкости и плотности в процессе изменяются незначительно, и запишем тепловые балансы.

Тепловой баланс теплоносителя

$$\Delta Q_T = Q_{вх} - Q_{вых} - q \tag{2.8}$$

$$\Delta Q_T = S_T \Delta X \rho_T C_{PT} \Delta T_T \tag{2.9}$$

$$Q_{вх} = G_T C_{PT} T_T \tag{2.10}$$

Основное уравнение теплопередачи:

$$q = K\Pi\Delta X(T_T - T_X) \tag{2.11}$$

$$Q_{вых} = G_T C_{PT}(T_T + \Delta T_T) + K\Pi\Delta X(T_T - T_X) \tag{2.12}$$

где $\Pi\Delta X$ – элемент поверхности теплопередачи, Π - периметр поверхности теплопередачи, S_T – площадь сечения, в котором движется теплоноситель.

Подставив уравнения 2.9-2.12 в уравнение 2.8 получим

$$S_T \Delta X \rho_T C_{PT} \Delta T_T = G_T C_{PT}(T_T - T_T - \Delta T_T)\Delta t - K\Pi\Delta X(T_T - T_X)\Delta t \tag{2.13}$$

Разделив правую и левую часть уравнения 2.13 на $\Delta t \Delta x$ и переходя к пределу $\Delta t \to 0$ и $\Delta X \to 0$, получим:

$$S_T \rho_T C_{PT} \frac{\partial T_T}{\partial t} = -G_T C_{PT} \frac{\partial T_T}{\partial X} - K\Pi(T_T - T_X) \tag{2.14}$$

Тепловой баланс хладоагента

$$\Delta Q_X = Q_{вх} - Q_{вых} + q \tag{2.15}$$

$$\begin{aligned} \Delta Q_X &= S_X \Delta X \rho_X C_{PX} \Delta T_X \\ Q_{вх} &= G_X C_{PX} T_X + K\Pi\Delta X(T_T - T_X) \\ Q_{вых} &= G_X C_{PX}(T_X + \Delta T_X) \end{aligned} \tag{2.16}$$

где S_X - площадь сечения, в котором движется хладоагент.

Подставив систему 2.16 в уравнение 2.15, получим второе уравнение математической модели

$$S_X \rho_X C_{PX} \frac{\partial T_X}{\partial t} = -G_X C_{PX} \frac{\partial T_X}{\partial X} + K\Pi(T_T - T_X) \tag{2.17}$$

Система уравнений 2.14, 2.17 описывает не стационарный режим теплообмена в случае прямотока. При противотоке необходимо учесть, что направление движения одного из теплоносителей не совпадает с направлением оси абсцисс (рис. 2.4).

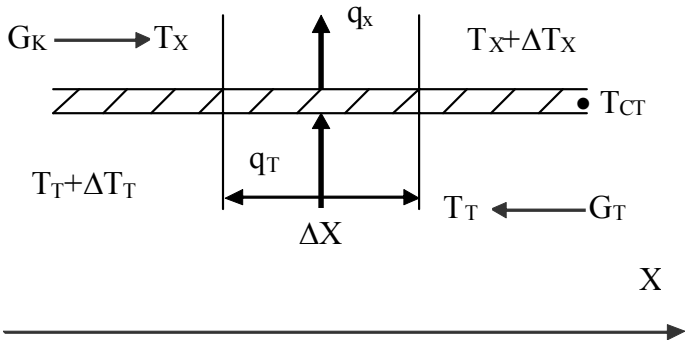

Рис. 2.4 – Схематическое изображение элементарного участка трубы в случае противотока

Пусть температуры хладоагента и теплоносителя на выходе из элементарного объема получают приращение соответственно на величины и ΔT_T. Направление оси абсцисс задает направление интегрирования. Поэтому для теплоносителя

$$Q_{вх}^{к} = G_T C_{PT}(T_T + \Delta T_T) \tag{2.18}$$

$$Q_{вых}^{к} = G_T C_{PT} T_T \tag{2.19}$$

для хладоагента

$$Q_{вх}^{к} = G_X C_{PX} T_X \tag{2.20}$$

$$Q_{вых}^{к} = G_X C_{PX}(T_X + \Delta T_X) \tag{2.21}$$

Подставим уравнение (2.18 и 2.19) в уравнение (2.8) с учетом уравнения (2.11), получим тепловой баланс теплоносителя

$$F_T \rho_T C_{PT} \frac{\partial T_T}{\partial t} = G_T C_{PT} \frac{\partial T_T}{\partial x} - K\Pi(T_T - \Delta T_T) \tag{2.22}$$

Аналогичным образом подставив уравнение (2.20 и 2.21) в уравнение 2.15 и с учетом уравнения 2.1 получим тепловой баланс для хладоагента уравнение 2.17.

Уравнение 2.22 и 2.17 описывают не стационарный режим теплообменника в случае противотока.

Построим модель противоточного теплообменника с учетом тепловой инертности стенки. В этом случае $q_T \neq q_X$, поэтому для определения величин q_T и q_X воспользуемся законом теплоотдачи Ньютона

$$\begin{aligned} q_T &= \alpha_T \Pi_T \Delta X (T_T - T_{CT}) \\ q_X &= \alpha_X \Pi_X \Delta X (T_{CT} - T_X) \end{aligned} \tag{2.23}$$

где $\Pi_T\Delta X$, $\Pi_X\Delta X$ – элементы поверхности теплоотдачи соответственно со стороны теплоносителя и хладоагента; α_T, α_X – коэффициенты теплоотдачи со стороны теплоносителя и хладоагента, $\left[\frac{Вт}{м^2 К}\right]$.

Определяя накопление в выделенном элементарном объеме (рис. 2.4) в виде:

$$\begin{aligned} \Delta Q_T &= S_T \Delta X \rho_T C_{PT} \Delta T_T \\ \Delta Q_X &= S_X \Delta X \rho_X C_{PX} \Delta T_X \end{aligned} \tag{2.24}$$

и учитывая соотношения 2.18-2.21, можно записать уравнение теплового баланса для теплоносителя и хладоагента.

$$S_T \rho_T C_{PT} \frac{\partial T_T}{\partial t} = V_T C_{PT} \frac{\partial T_T}{\partial X} - \alpha_T \Pi_T (T_T - T_{CT}) \qquad (2.25)$$

$$S_X \rho_X C_{PX} \frac{\partial T_X}{\partial t} = -V_X C_{PX} \frac{\partial T_X}{\partial X} + \alpha_X \Pi_X (T_{CT} - T_X) \qquad (2.26)$$

Необходимо обратить внимание, что первые члены правых частей уравнений 2.14 и 2.25 имеют разные знаки.

Система уравнений 2.25, 2.26 содержит три неизвестных функции T_T, T_{CT} и T_X, поэтому необходимо записать третье уравнение – тепловой баланс стенки (рис. 2.4):

$$\frac{dQ_{CT}}{dt} = Q_{вх} - Q_{вых} = q_T - q_X \qquad (2.27)$$

откуда с учетом системы 2.23 получим:

$$\frac{dQ_{CT}}{dt} = \frac{d}{dt}(S_{CT} \Delta X \rho_{CT} C_{PCT} T_{CT}) = S_{CT} \rho_{CT} C_{PCT} \frac{dT_{CT}}{dt} = \alpha_T \Pi_T (T_T - T_{CT}) - \alpha_X \Pi_X (T_{CT} - T_X) \qquad (2.28)$$

2.3 Модель «вытеснение – смешение»

Модель вытеснение – смешение можно описать, например, теплообменный аппарат змеевикового типа. Движение потока в змеевике характеризуется моделью вытеснения, а межтрубное пространство – моделью смешения.

Пусть теплоноситель движется по змеевику. Тогда в соответствии с моделью вытеснения уравнение теплового баланса теплоносителя можно записать в виде уравнения 2.14, если тепловой инерционностью стенки можно пренебречь, или в виде уравнения 2.25, если тепловой емкостью стенки пренебречь нельзя с учетом знака при конвективном тепловом потоке.

Тепловой баланс хладоагента в соответствии с моделью смешения можно составлять или, выделяя элементарный объем, или для всего пространства, занимаемого хладоагентом. В любом случае целесообразно использовать уравнение теплоотдачи Ньютона. Независимо от того, учитывается тепловая емкость стенки или нет, математическая модель типа вытеснение – смешение представляется тремя уравнениями теплового баланса. Третье уравнение составляется для стенки аппарата (уравнение 2.27).

Если тепловой инерционностью стенки можно пренебречь, то имеются варианты моделей, когда нет необходимости записывать тепловой баланс стенки. Нетрудно получить такую модель:

$$\begin{aligned} S_T \rho_T C_{PT} \frac{\partial T_T}{\partial t} &= -G_T C_{PT} \frac{\partial T_T}{\partial X} - K \Pi_T (T_T - T_X) \\ V_X \rho_X C_{PX} \frac{dT_X}{dt} &= G_X C_{PX} (T_{X0} - T_X) + \int_0^L K \Pi_T (T_T - T_X) dX \end{aligned} \qquad (2.29)$$

где L – длина теплопередающей поверхности.

Иногда при решении практических задач требуется получить систему уравнений, описывающих отрицательный режим теплообмена. Эта система

уравнений получается, если учесть, что в стационарном режиме процесс протекает при условии $T_T \neq f(t)$ и $T_X \neq f(t)$. Например, модель прямоточного теплообменника, «труба в трубе» в стационарном режиме имеет следующий вид, исходя из уравнений 2.14 и 2.17:

$$\begin{aligned} \frac{dT_T}{dX} &= -\frac{K\Pi}{V_T C_{PT}}(T_T - T_X) \\ \frac{dT_X}{dX} &= \frac{K\Pi}{V_X C_{PX}}(T_T - T_X) \end{aligned} \qquad (2.30)$$

2.4 Составление математического описания теплообменного аппарата

Покажем процедуру получения математической модели теплообменного аппарата для целей управления им и соответственно получение модели в виде передаточных функций по каналам регулирования.

Жидкость в проточном баке подогревается с помощью ряда горизонтальных труб. Уровень в баке поддерживается постоянным. Построить математическую модель, используя однопараметрическую диффузионную модель для характеристики движения в трубном пространстве. Потерями тепла в окружающую среду пренебречь. Тепловую инерционность стенок труб учесть.

Математическую модель строим для одиночной трубы, принимая, что в каждой трубе процесс протекает одинаково.

Можно принять, что отношение L/D для бака маленькое и для жидкости справедливо идеальное смешение. Схематично процесс можно представить в следующем виде:

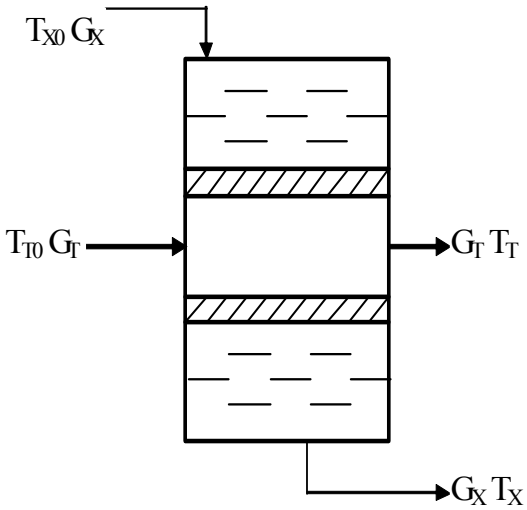

Рис. 2.5 – Схематическое изображение проточного бака

G_T – массовый расход теплоносителя, приходящийся на одну трубку, $\left[\frac{кг}{с}\right]$; G_x – массовый расход хладоагента, $\left[\frac{кг}{с}\right]$; T_{x0}, T_{T0}, T_x, T_T – соответственно температуры хладагентов и теплоносителя на входе и выходе аппарата, $[K]$.

При решении задачи примем, что изменения теплоемкости и плотности потоков в процессе незначительно.

Выделим элементарный объем и составим тепловой баланс для теплоносителя.

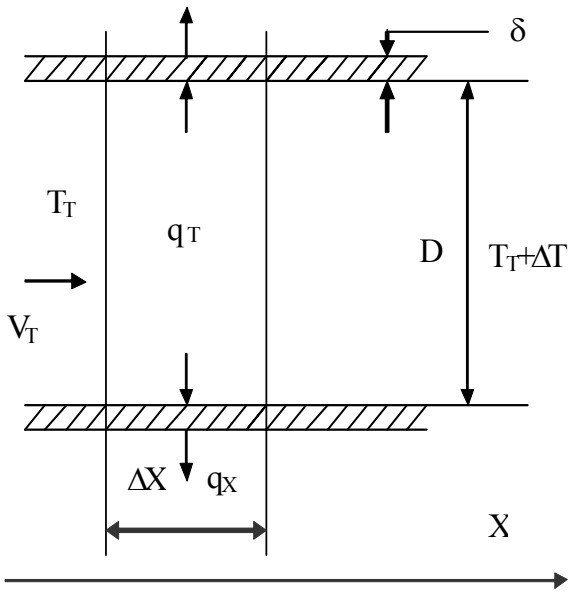

Рис. 2.6 – Схематическое изображение элементарного участка трубы

В данном случае q_x – тепловой поток, характеризующий теплоотдачу от теплоносителя к элементарной площадке трубы, $\left[\frac{Вт}{м^2 К}\right]$; D – внутренний диаметр трубы, $[м]$; δ – толщина стенки, $[м]$. Примем, что температура стенки T_C моментально выравнивается по всей длине и толщине, благодаря большому коэффициенту теплопроводности металла. Запишем уравнение закона сохранения тепла в общем виде, учитывая, что температура в потоке изменяется в результате действия причин: 1 – вынужденной конвекции, 2 – продольного перемешивании, 3 – теплоотдачи. Таким образом

$$\Delta Q = \left(Q^{К}_{ВХ} + Q^{Д}_{ВХ}\right)\Delta t - \left(Q^{К}_{ВЫХ} + Q^{Д}_{ВЫХ}\right)\Delta t - q_T \Delta t \qquad (2.31)$$

где ΔQ – накопление тепла в выделяемом элементарном объеме, [Дж]; $Q^{к}_{вх}$, $Q^{к}_{вых}$ - тепловые потоки, действующие на входе и выходе элементарного объема и характеризующие вынужденную конвекцию, $[Вт]$; $Q^{д}_{вх}$, $Q^{д}_{вых}$ - тепловые потоки, характеризующие продольное перемешивание на входе и выходе элементарного объема, $[Вт]$; Δt – элементарный промежуток времени, [с]. Определим отдельные слагаемые этого уравнения:

$$\Delta Q = \Delta\left(\Delta V \rho_T C_{PT} T_T\right) = S_T \Delta X \rho_T C_{PT} \Delta T_T \qquad (2.32)$$

где ΔV – элементарный объем теплообменного пространства, ρ_T, $C\rho_T$, плотность $\left[\frac{кг}{м^3}\right]$ и теплоемкость $\left[\frac{Дж}{кг \cdot К}\right]$ теплоносителя; S_T - сечение в котором движется теплоноситель, $\left[м^2\right]$.

$$S_T = \frac{\pi \cdot D^2}{4} \qquad (2.33)$$

$$Q^{к}_{вх} = V_T C_{PT} \cdot T_T \qquad (2.34)$$

$$Q^{к}_{вых} = V_T C_{PT} \cdot (T_T + \Delta T_T) \qquad (2.35)$$

Для определения $Q^{д}_{вх}$ и $Q^{д}_{вых}$ используем первый закон Фика (распределение температуры совпадает с распределением массы) в виде

$$Q = -\lambda_T \cdot S \cdot \frac{\partial T_T}{\partial X} \qquad (2.36)$$

где λ_T - коэффициент продольного перемешивания по температуре, $\left[\frac{Вт}{м \cdot К}\right]$

$$Q^{д}_{вх} = -\lambda_T \cdot S_T \cdot \frac{\partial T_T}{\partial X} \qquad (2.37)$$

$$Q^{д}_{вых} = -\lambda_T \cdot S_T \cdot \frac{\partial (T_T + \Delta T_T)}{\partial X} \qquad (2.38)$$

Используя закон теплоотдачи Ньютона, определим q_T

$$q_T = \alpha_T \Delta S_T (T_T - T_{ст}) \qquad (2.39)$$

где α_T - коэффициент теплоотдачи со стороны теплоносителя, $\left[\frac{Вт}{м^2 \cdot К}\right]$; ΔF_T - элементарная площадка теплоотдачи со стороны теплоносителя, $[м^2]$.

$$\Delta S_T = \pi \cdot D \cdot \Delta X$$

Таким образом, получим следующее уравнение теплового баланса:

$$\begin{aligned} &\frac{\pi \cdot D^2}{4} \cdot \Delta X \cdot \rho_T \cdot C_{PT} \cdot \Delta T_T = \left(G_T \cdot C_{PT} \cdot T_T - \lambda_T \cdot \frac{\pi \cdot D^2}{4} \cdot \frac{\partial T_T}{\partial X} \right) \cdot \Delta t - \\ &- \left(G_T \cdot C_{PT} (T_T + \Delta T_T) - \lambda_T \cdot \frac{\pi \cdot D^2}{4} \times \frac{\partial (T_T + \Delta T_T)}{\partial X} \right) \cdot \Delta t - \alpha_T \cdot \pi \cdot D \cdot \Delta X (T_T - T_{CT}) \cdot \Delta t \end{aligned} \qquad (2.40)$$

Разделим это уравнение на $(\Delta t \cdot \Delta X)$ и перейдем к пределу при $\Delta t \to 0$, $\Delta X \to 0$. Учитывая, что

$$\lim_{\Delta X \to 0} \frac{\Delta T}{\Delta X} = \frac{\partial T}{\partial X}$$

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta T}{\Delta t} = \frac{\partial T}{\partial t}$$

$$\lim_{\Delta X \to 0} \frac{\frac{\partial (T + \Delta T)}{\partial X} - \frac{\partial T}{\partial X}}{\Delta X} = \frac{\partial^2 T}{\partial X^2}$$

получим:

$$\frac{\pi \cdot D^2}{4} \cdot \rho_T \cdot C_{PT} \frac{\partial T_T}{\partial t} = -G_T C_{PT} \frac{\partial T_T}{\partial X} + \lambda_T \frac{\pi \cdot D^2}{4} \cdot \frac{\partial^2 T_T}{\partial X^2} - \alpha_T \cdot \pi \cdot D (T_T - T_{CT}) \qquad (2.41)$$

Составим уравнение теплового баланса для хладагента. Уравнение составляем для всего объема жидкости. Это уравнение имеет вид:

$$\frac{dQ}{dt} = Q^{к}_{вх} - Q^{к}_{вых} + Q_X \qquad (2.42)$$

где $\frac{dQ}{dt}$ - скорость накопления тепла в объеме жидкости, $[Вт]$; Q_X - полное количество тепла, отдаваемое всей поверхностью трубы к жидкости в единицу времени;

Используя закон теплопередачи, определим q_X как

$$q_X = \alpha_X \Delta S_X \cdot (T_{CT} - T_X) \tag{2.43}$$

где α_X – коэффициент теплоотдачи со стороны хладагента, $\left[\frac{Вт}{м^2 \cdot K}\right]$; ΔS_X – элемент поверхности теплоотдачи со стороны хладагента, $[м^2]$.

$$\Delta S_X = \pi(D + 2\delta) \cdot \Delta X$$

По определению $Q_X = \sum_{i=1}^{\infty} q_{xi}$, поэтому

$$Q_X = \int_0^L \alpha_X \pi(D + 2\delta) \cdot (T_{TC} - T_X) dX \tag{2.44}$$

где L – длина труб, $[м]$.

В соответствии с допущениями

$T_{CT} \neq f(x)$; $T_X \neq f(x)$, следовательно

$$Q_X = \alpha_X \cdot \pi \cdot (D + 2\delta) L (T_{CT} - T_X) \tag{2.45}$$

Определим остальные слагаемые уравнения теплового баланса

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(V_X \cdot \rho_X \cdot C_{PX} \cdot T_X) = V_X \rho_X C_{PX} \frac{\partial T_X}{\partial t} \tag{2.46}$$

где V_X – объем жидкости.

$$Q^{к}_{вых} = G_X C_{PX} T_X \tag{2.47}$$

$$Q^{к}_{вх} = G_X C_{PX} T_{X0} \tag{2.48}$$

окончательно получим:

$$G_X \rho_X C_{PX} \frac{dT_X}{dt} = G_X C_{PX} (T_{X0} - T_X) + \alpha_X \cdot \pi(D + 2\delta) \cdot L(T_{CT} - T_X) \tag{2.49}$$

В уравнениях 2.47,2.49 3 неизвестные величины: T_{CT}, T_X, T_T - поэтому составляем третье уравнение – тепловой баланс стенки. Уравнение составляем для элементарного объема стенки

$$\Delta Q = q_T \cdot \Delta t - q_X \cdot \Delta t$$
$$\Delta Q = \Delta\left(S_{CT} \rho_{CT} C_{PCT} \Delta X T_{CT}\right) = S_{CT} \rho_{CT} C_{PCT} \Delta X \cdot \Delta T_{CT} \tag{2.50}$$

$$F_{CT} = \frac{\pi(D + 2\delta)^2}{4} - \frac{\pi \cdot D^2}{4} \tag{2.51}$$

где S_{CT} – сечение стенки, ρ_{CT}, C_{PCT} - плотность и теплоемкость материала стенки. Комбинируя уравнения (2.39, 2.43, 2.51), выполнив соответствующие сокращения, разделив на Δt и переходя к пределу $\Delta t \to 0$, получим:

$$\left(\frac{\pi(D + 2\delta)^2}{4} - \frac{\pi D^2}{4}\right) \rho_{CT} C_{PCT} \frac{dT_{CT}}{dt} = \alpha_T \cdot \pi \cdot D\left(T_T - T_{CT}\right) - \alpha_X \pi\left(D + 2\delta\right) L\left(T_{CT} - T_X\right) \tag{2.52}$$

По условию задачи необходимо построить модель с учетом тепловой инерционности стенки, поэтому $\frac{dT_{CT}}{dt} \neq 0$. Таким образом, построена математическая модель заданного процесса, представляющая собой следующую систему дифференциальных уравнений:

$$\frac{\pi \cdot D^2}{4} \cdot \rho_T C_{PT} \frac{\partial T_T}{\partial t} = -G_T C_{PT} \frac{\partial T_T}{\partial X} + \lambda_T \frac{\pi D^2}{4} \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial X^2} - \alpha_T \pi D (T_T - T_{CT})$$

$$G_X \rho_X C_{PX} \frac{dT_T}{dt} = G_X C_{PX} (T_{X0} - T_X) + \alpha_X \pi (D + 2\delta) L (T_{CT} - T_X) \qquad (2.53)$$

$$\frac{\pi}{4}\left[(T_{CT} - T_X)^2 - D^2\right] \rho_{CT} C_{PCT} \frac{dT_{CT}}{dt} = \alpha_T \pi D (T_T - T_{CT}) - \alpha_X \pi (D + 2\delta)(T_{CT} - T_X)$$

Трубное пространство представлено однопараметрической диффузионной моделью, межтрубное – моделью идеального перемешивания. Для синтеза системы автоматического управления удобнее представить математическую модель проточного бака в виде системы передаточных функций.

Передаточные функции можно получить только из дифференциальных уравнений в обычных производных, поэтому однопараметрическую диффузионную модель для трубного пространства, которая описывается дифференциальным уравнением в частных производных, необходимо заменить на ячеечную модель. Ячеечная модель описывается системой дифференциальных уравнений в обычных производных. При правильном выборе количества ячеек замена диффузионной модели гидродинамики потока на ячеечную не приводит к потере адекватности модели объекта.

При решении задач рекомендуется разбивать объект на три ячейки. Схематическое изображение трубы показано на рис. 2.7

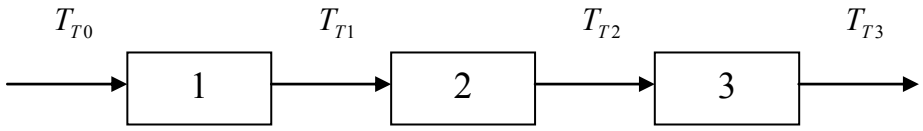

Рис. 2.7 – Схематическое изображение трубы в виде ячеек

Дифференциальные уравнения, описывающие ячеечную модель трубного пространства, можно получить непосредственно из уравнения 2.41. Членом, учитывающим продольное перемешивание, можно пренебречь, т.к. для каждой ячейки принимается модель идеального перемешивания, и производная $\partial T / \partial x$ заменяется на разностное выражение

$$\frac{\partial T}{\partial x} \to \frac{\Delta T_T}{\Delta x}, \Delta T_T = T_{Ti-1} - T_{Ti}, \Delta x = \frac{L}{3} \qquad (2.54)$$

где T_{Ti} - температура на выходе i-той ячейки;

L – длина трубы в баке.

Для первой ячейки: $T_{Ti-1} = T_{T0}$.

Система уравнений, описывающая ячеечную модель, будет иметь вид:

$$\begin{cases} \frac{\pi D^2}{4} \rho_T C_{PT} \frac{dT_{T1}}{dt} = -G_T C_{PT} \frac{T_{T1} - T_{T0}}{\Delta x} - \alpha_T \pi D (T_{T1} - T_{CT}) \\ \frac{\pi D^2}{4} \rho_T C_{PT} \frac{dT_{T2}}{dt} = -G_T C_{PT} \frac{T_{T2} - T_{T1}}{\Delta x} - \alpha_T \pi D (T_{T2} - T_{CT}) \\ \frac{\pi D^2}{4} \rho_T C_{PT} \frac{dT_{T3}}{dt} = -G_T C_{PT} \frac{T_{T3} - T_{T2}}{\Delta x} - \alpha_T \pi D (T_{T3} - T_{CT}) \end{cases} \qquad (2.55)$$

Изменится уравнение, описывающее стенку (третье уравнение системы 2.53).

$$L\frac{\pi}{4}\left[(D+2\delta)^2-D^2\right]\rho_{CT}C_{PCT}\frac{dT_{CT}}{dt}=\alpha_T\pi D(T_{T1}-T_{CT})\Delta x+$$
$$+\alpha_T\pi D(T_{T2}-T_{CT})\Delta x+\alpha_T\pi D(T_{T3}-T_{CT})\Delta x+\alpha_X\pi(D+2\delta)L(T_{CT}-T_X) \quad (2.56)$$

Общая система уравнений, описывающая теплообменный процесс в баке, будет состоять из уравнений 2.55, 2.56 второго уравнения системы 2.53.

Из каждого дифференциального уравнения математической модели можно получить несколько передаточных функций. Рассмотрим методику получения передаточных функций на примере первого уравнения:

$$\frac{\pi D^2}{4}\rho_T C_{PT}\Delta x\frac{dT_{T1}}{dt}=-G_T C_{PT}(T_{T1}-T_{T0})-\alpha_T\pi D(T_{T1}-T_{CT})\Delta x \quad (2.57)$$

Выходной переменной в этом уравнении является T_{T1}.

Входными параметрами будут: G_T, T_{T0}, T_{CT}, то есть переменные, изменение которых приводит к изменению выходной переменной. Следовательно, из рассматриваемого уравнения можно получить три передаточные функции:

$W_{G_T-T_{T1}}$; $W_{T_{T0}-T_{T1}}$; $W_{T_{CT}-T_{T1}}$.

Для нахождения линейной передаточной функции $W_{G_T-T_{T1}}$ по каналу $G_T\to T_{T1}$, из нелинейного уравнения 2.57 необходимо дать приращения по переменным канала, то есть в уравнение 2.57 вместо G_T и T_{T1} подставить выражения: $G_T+\Delta G_T$ и $T_{T1}+\Delta T_{T1}$ соответственно.

$$\frac{\pi D^2}{4}\rho_T C_{PT}\Delta x\frac{d(T_{T1}+\Delta T_{T1})}{dt}=-(G_T+\Delta G_T)C_{PT}(T_{T1}+\Delta T_{T1}-T_{T0})-\alpha_T\pi D(T_{T1}+\Delta T_{T1}-T_{CT})\Delta x \quad (2.58)$$

$$\frac{\pi D^2}{4}\rho_T C_{PT}\Delta x\frac{dT_{T1}}{dt}+\frac{\pi D^2}{4}\rho_T C_{PT}\Delta x\frac{d\Delta T_{T1}}{dt}=-G_T C_{PT}(T_{T1}-T_{T0})-C_{PT}(T_{T1}-T_{T0})\Delta G_T-$$
$$-G_T C_{PT}\Delta T_{T1}-C_{PT}\Delta T_{T1}\Delta G_T-\alpha_T\pi D(T_{T1}-T_{CT})\Delta x-\alpha_T\pi D\Delta T_{T1}\Delta x \quad (2.59)$$

Для получения уравнения в приращениях необходимо вычесть из уравнения 2.59 уравнение 2.57, получим:

$$\frac{\pi D^2}{4}\rho_T C_{PT}\Delta x\frac{d\Delta T_{T1}}{dt}=-G_T C_{PT}\Delta T_{T1}-\alpha_T\pi D\Delta x\Delta T_{T1}-C_{PT}(T_{T1}-T_{T0})\Delta G_T-C_{PT}\Delta T_{T1}\Delta G_T \quad (2.60)$$

Членом - $\Delta G_T C_{PT}\Delta T_{T1}$ - можно пренебречь, т.к. это величина второй степени малости (произведение двух малых величин - ΔG_T и ΔT_{T1}), тогда:

$$\frac{\pi D^2}{4}\rho_T C_{PT}\Delta x\frac{d\Delta T_{T1}}{dt}+(G_T C_{PT}+\alpha_T\pi D\Delta x)\Delta T_{T1}=-C_{PT}(T_{T1}-T_{T0})\Delta G_T \quad (2.61)$$

После преобразования по Лапласу уравнения 2.61, передаточная функция примет вид:

$$W_{G_T-T_{T1}}=\frac{K}{TS+1},$$

где $K = -\dfrac{C_{PT}(T_{T1} - T_{T0})}{G_T C_{PT} + \alpha_T \pi D \Delta x}$;

$$T = \frac{\pi D^2 \rho_T C_{PT} \Delta x}{4\left(G_T C_{PT} + \alpha_T \pi D \Delta x\right)}.$$

Аналогичным образом необходимо получить все передаточные функции:
из первого уравнения

$$W_{G_T - T_{T1}},\ W_{T_{T0} - T_{T1}},\ W_{T_{CT} - T_{T1}};$$

из второго уравнения

$$W_{G_T - T_{T2}},\ W_{T_{T1} - T_{T2}},\ W_{T_{CT} - T_{T2}};$$

из третьего уравнения

$$W_{G_T - T_{T3}},\ W_{T_{T2} - T_{T3}},\ W_{T_{CT} - T_{T3}};$$

из четвертого уравнения

$$W_{G_X - T_X},\ W_{T_{X0} - T_X},\ W_{T_{CT} - T_X};$$

из пятого уравнения

$$W_{T_{T1} - T_{CT}},\ W_{T_{T2} - T_{CT}},\ W_{T_{T3} - T_{CT}},\ W_{T_X - T_{CT}}.$$

Для анализа сложных химико-технологических систем широко используются топологические модели. Построим граф проточного подогреваемого бака.

Для построения графа на чертеже располагаются точки, которые называются вершинами. Каждая вершина соответствует одной из переменных, входящих в каналы передаточных функций. Пара точек, входящая в канал передаточной функции соединяется направленным отрезком, который называется дугой. Направление отрезка указывается стрелкой от входной к выходной переменной канала. Граф проточного подогреваемого бака приведен на рис. 2.8.

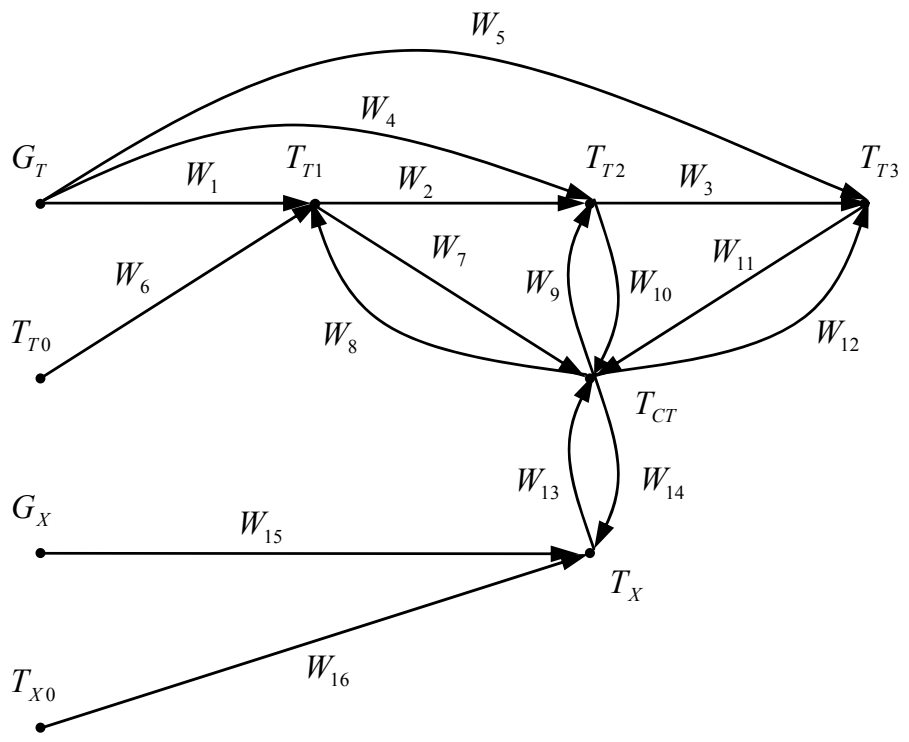

Рис. 2.8 – Граф проточного подогреваемого бака

На основании полученного графа получим структурную схему объекта управления (рис. 2.9). График кривой разгона по каналу управления $G_T - T_{T3}$ представлен на рис. 2.10.

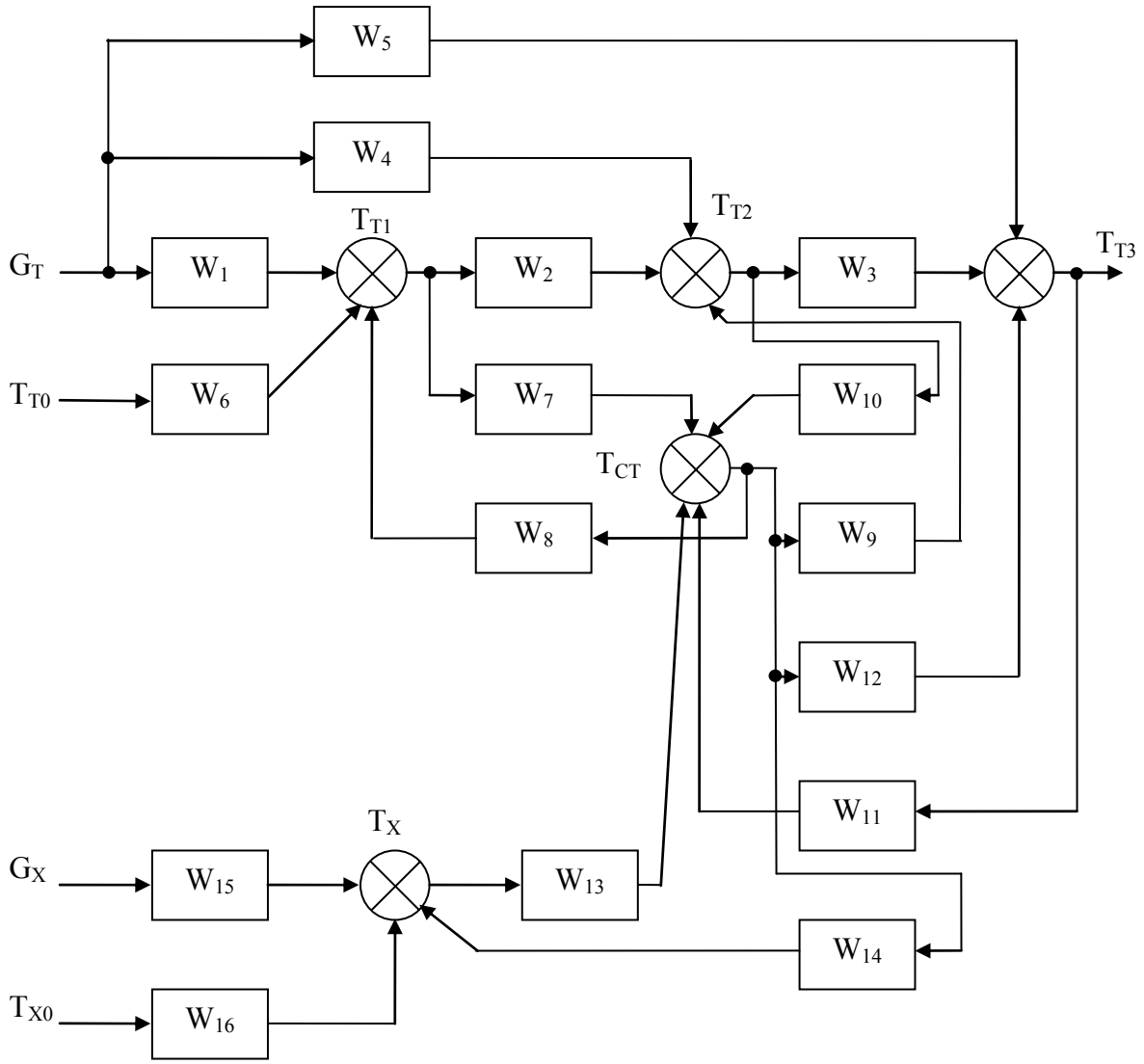

Рис. 2.9 – Структурная схема объекта управления

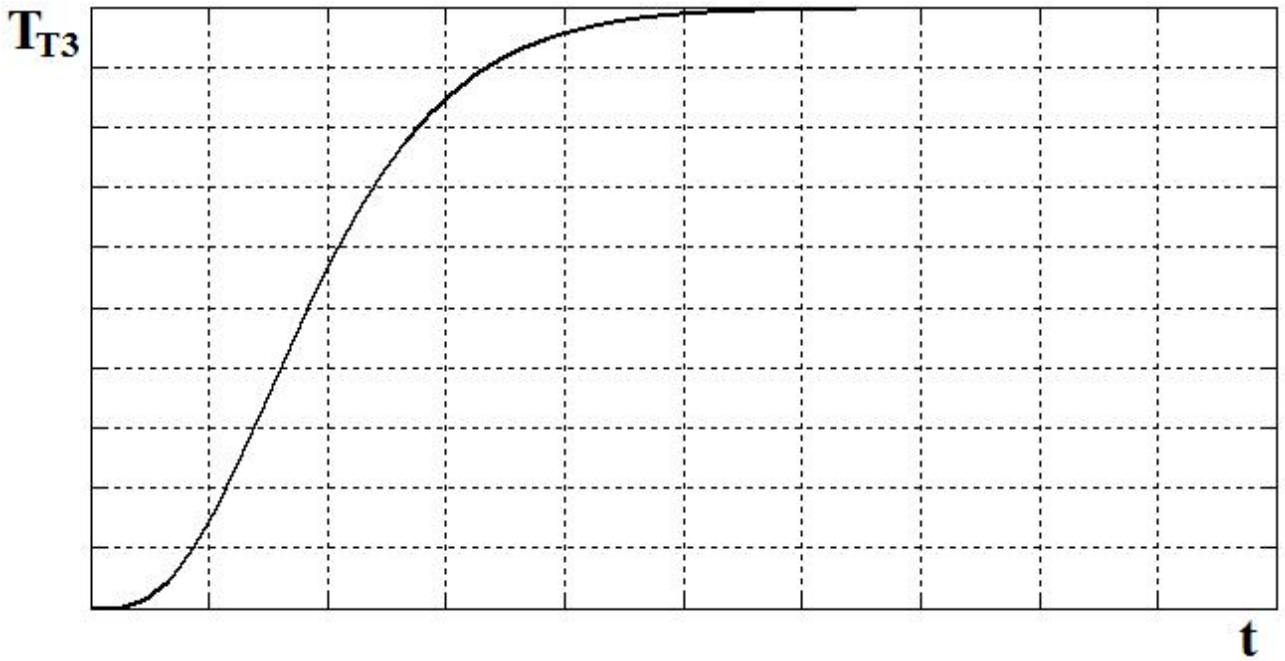

Рис. 2.10 – Кривая разгона по каналу управления $G_T - T_{T3}$

2.2 Контрольные задания по моделированию теплообменных аппаратов

Необходимо получить математическую модель заданного теплообменного аппарата для целей управления им, и передаточные функции по каналу управления.

При решении задач использовать единые, предлагаемые ниже, основные значения.

G_X - расход хладоагента, $\left[\frac{кг}{с}\right]$

G_T - расход теплоносителя, $\left[\frac{кг}{с}\right]$

$\rho_X, c_{PX}, \rho_T, c_{PT}$ - плотность и теплоемкость хладоагента и теплоносителя, $\left[\frac{Дж}{кг \cdot К}\right], \left[\frac{кг}{м^3}\right]$

T_{X0}, T_{T0}, T_X, T_T - температуры начальные (с индексом 0) и текущие (или конечные) для хладоагента и теплоносителя, $[К]$

$V, F, П, L, D$ - объем, $[м^3]$;площадь сечения, $[м^2]$; периметр, $[м]$; длина, $[м]$; диаметр, $[м]$

α_T, α_X - коэффициенты теплоотдачи, $\left[\frac{Вт}{м^2 \cdot К}\right]$

k_T - коэффициент теплопередачи, $\left[\frac{Вт}{м^2 \cdot К}\right]$

T_{CT} - температура стенки, $[К]$

Задача 01.

Задан одноходовой кожухотрубный теплообменник с перегородками в межтрубном пространстве (рис. 2.11). Заданы все конструктивные параметры. Теплоноситель движется в межтрубном пространстве, хладоагент – в трубном.

Принять идеальное вытеснение для трубного пространства и идеальное смешение для одной секции (количество секций определяется количеством перегородок в межтрубном пространстве) межтрубного пространства. Построить две модели без учета тепловой инерционности стенки: 1 – используя закон теплоотдачи Ньютона; 2 – используя уравнение теплопередачи. Потерями тепла в окружающую среду пренебречь.

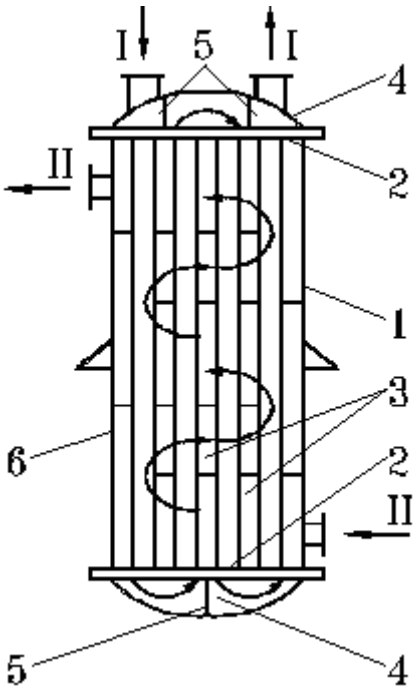

Рис. 2.11 - Кожухотрубчатый одноходовой теплообменник
1 - корпус (обечайка); 2 - трубные решетки; 3 - трубы; 4 - крышки;
5 - перегородки в крышках; 6 - перегородки в межтрубном пространстве.

Задача 02.

Для теплообменника, указанного в задаче 1 принять: движение потока в трубном пространстве характеризуется моделью идеального вытеснения, в межтрубном – однопараметрической диффузионной моделью. Построить модель с учетом тепловой инерционности стенок трубного пространства. Потерями в окружающую среду пренебречь.

Задача 03.

Для теплообменника, приведенного в задаче 1 принять: движение потока в трубном пространстве характеризуется моделью идеального вытеснения в межтрубном – однопараметрической диффузионной моделью. Построить модель с учетом тепловой инерционности стенок трубного пространства и стенок кожуха аппарата. В данном случае пренебречь потерями тепла в окружающую среду нельзя. Принять, что температура окружающей среды $T_0 = const$

Задача 04.

Задан многоходовой кожухотрубный теплообменник с перегородками в межтрубном пространстве (рис. 2.12). Заданы все конструктивные параметры. Теплоноситель движется в трубном пространстве, хладоагент – в межтрубном.

Принять идеальное вытеснение для трубного пространства и однопараметрическую диффузионную модель для межтрубного пространства. Построить модель с учетом тепловой инерционности стенок внутренних трубок. Потерями в окружающую среду пренебречь.

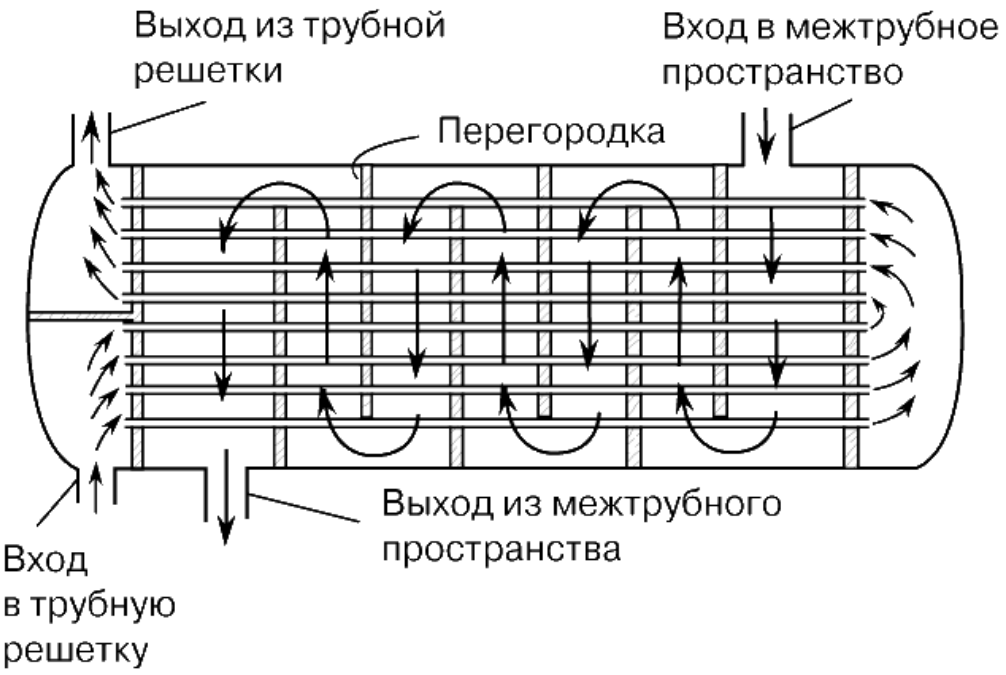

Рис. 2.12 – Многоходовой кожухотрубный теплообменник

Задача 05.

Для теплообменника, приведенного в задаче 4, принять, что движение потока в трубном пространстве характеризуется моделью вытеснения, а движение потока в межтрубном пространстве характеризуется в каждой секции (количество секций определяется по числу перегородок) моделью смешения. Построить модель без учета тепловой инерционности стенок. Потерями тепла в окружающую среду пренебречь.

Задача 06.

Задан кожухотрубный теплообменник с U – образными трубками (рис. 2.13). Все конструктивные параметры заданы. Теплоноситель движется в трубном пространстве, хладоагент – в межтрубном.

Принять идеальное вытеснение для обоих потоков. Среды движутся противопотоком. Построить модель с учетом тепловой инерционности стенок внутренних трубок и кожуха аппарата. Принять, что температура окружающей среды $T_0 = const$.

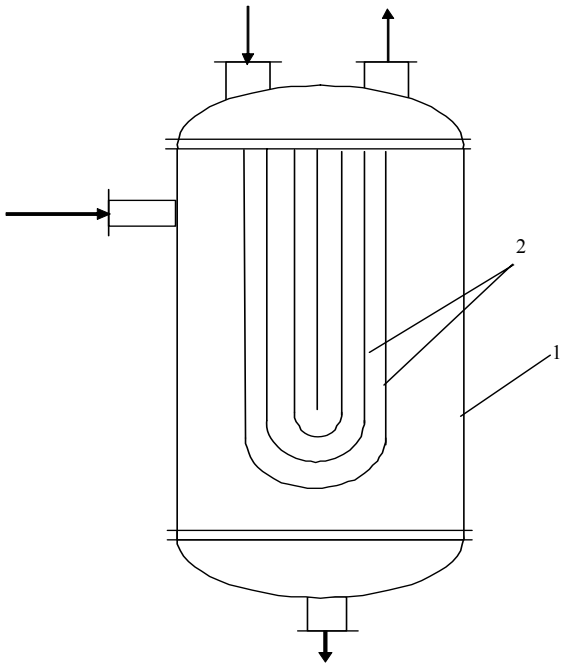

Рис. 2.13 – Кожухотрубный теплообменник с U-образными трубками
1 – кожух; 2 – U-образные трубы

Задача 07.

Решить задачу 6 при условии, что среды движутся прямотоком.

Задача 08.

Задан кожухотрубный теплообменник с двойными трубками (рис. 2.14). Все конструктивные параметры заданы. Хладоагент движется по межтрубному пространству, теплоноситель внутри трубок.

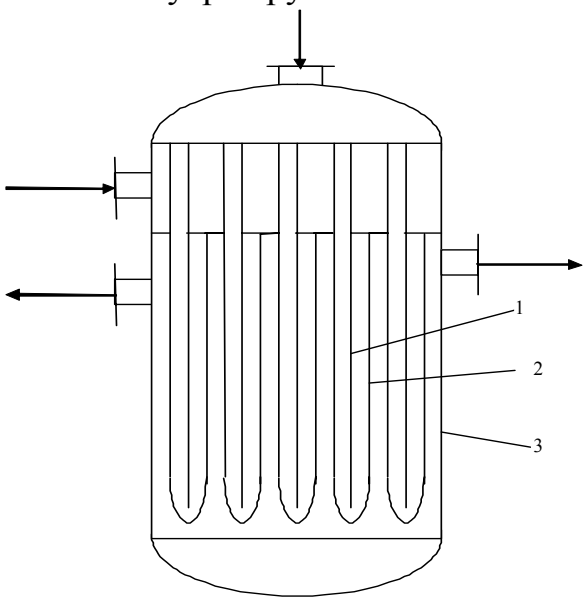

Рис. 2.14 – Кожухотрубный теплообменник с двойными трубками
1 – внутренняя труба с открытыми концами;
2 – наружная труба с закрытым нижним концом; 3 –кожух

Задача 09.

При условиях задачи 8 построить модель без учета тепловой инерционности стенок.

Задача 10.

Два параллельно работающих теплообменника типа “труба в трубе” обеспечивает нагрев раствора, непрерывно поступающего в бак. Схема условно представлена на рис. 2.15.

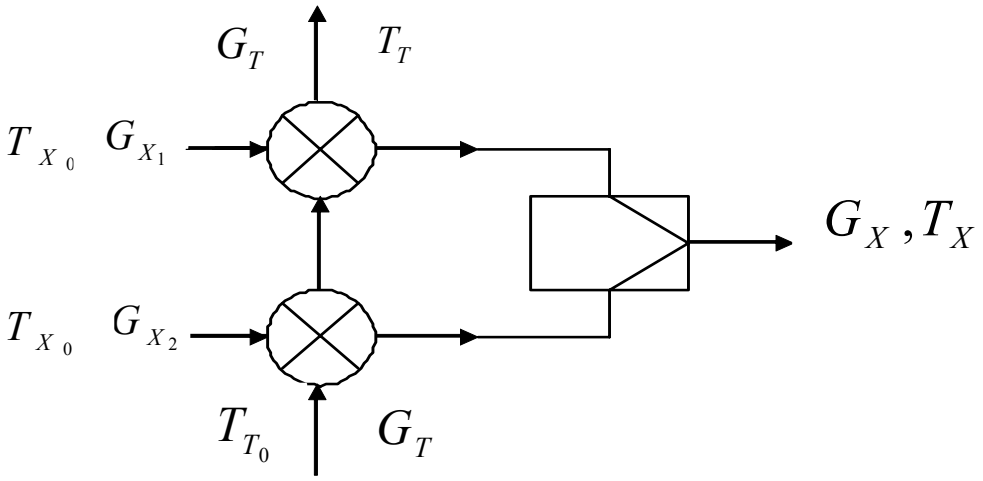

Рис.2.15 – Структурная схема процесса нагрева

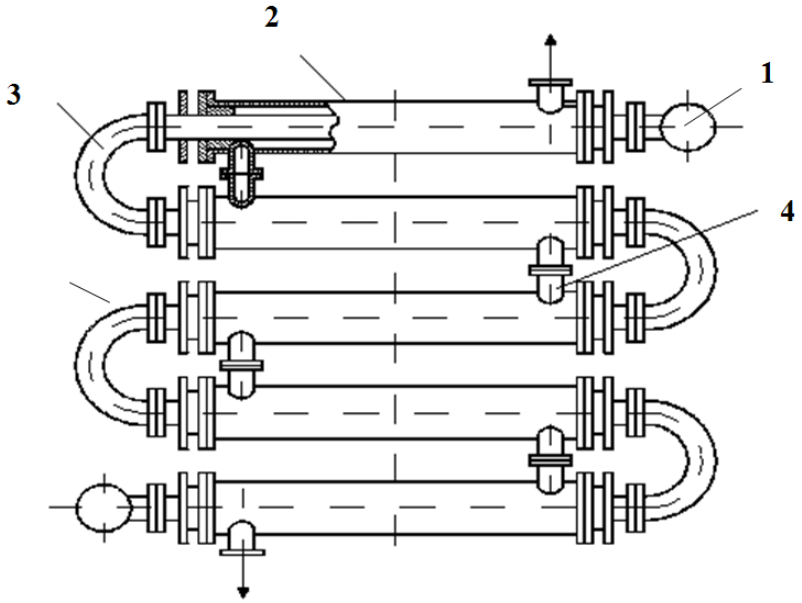

Рис. 2.16 – Теплообменник типа “труба в трубе”
1 – внутренняя труба; 2 – наружная труба;
3 – изогнутая соединительная труба; 4 – соединительные патрубки.

Все конструктивные параметры заданы.

Построить математическую модель, необходимую для определения температуры раствора на выходе из бака. Тепловой инерционностью и потерями тепла в окружающую среду пренебречь.

Задача 11.

Построить модель для процесса, заданного в задаче 10, учитывая тепловую инерционность внешней и внутренней трубы в обоих теплообменниках.

Задача 12.

Изолированная комната обогревается с помощью отопительной батареи. Батарея представляет собой трубу диаметром D и длиной L. Объем воздуха в комнате равен V. Отношение $L/D > 20$.

Потерями тепла в окружающую среду пренебречь. Построить модель с учетом тепловой инерционности стенок трубы.

Задача 13.

Для процесса, приведенного в задаче 12, построить модель без учета тепловой инерционности стенок трубы.

Задача 14.

Для процесса, приведенного в задаче 12, построить две модели без учета тепловой инерционности стенок 1 – используя закон теплоотдачи; 2 – используя уравнение теплопередачи.

Задача 15.

Для нагрева вязкой жидкости используется шнековый теплообменник (рис.2.17).

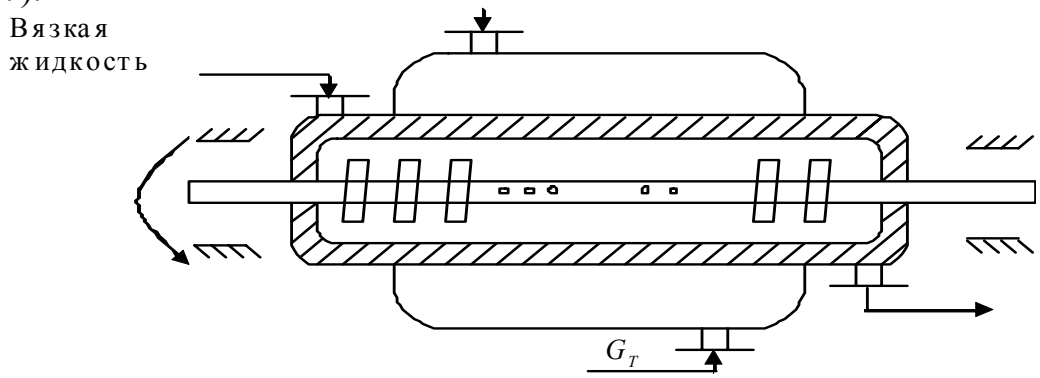

Рис. 2.17 – Шнековый теплообменник

Принять идеальное вытеснение для теплоносителя однопараметрическую диффузионную модель для вязкой жидкости. Потерями тепла в окружающую среду пренебречь. Построить модель с учетом тепловой инерционности внутренней трубы.

Задача 16.

Для условий задачи 15 построить модель без учета тепловой инерционности внутренней трубы.

Задача 17.

Два параллельно работающих теплообменника змеевикового типа обеспечивают нагрев раствора, непрерывно поступающего в бак. Отработавший теплоноситель также поступает в бак. Условно процесс представлен на рис.2.18.

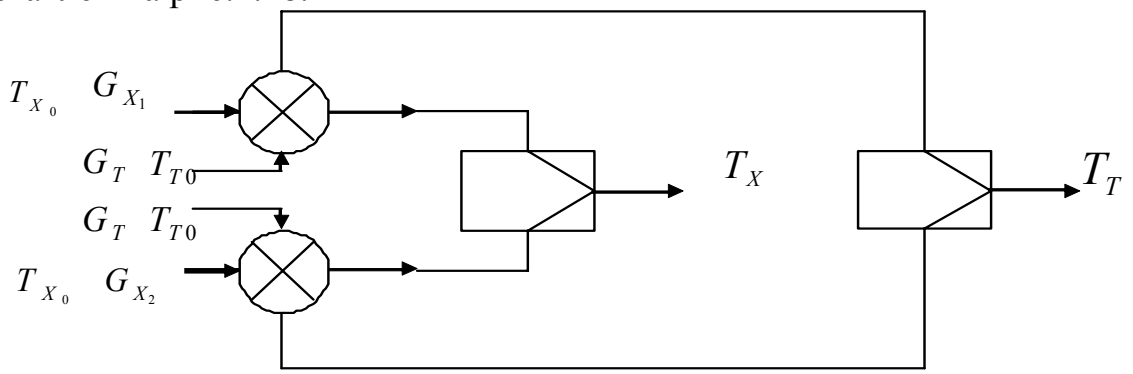

Рис.2.18 – Структурная схема процесса нагрева

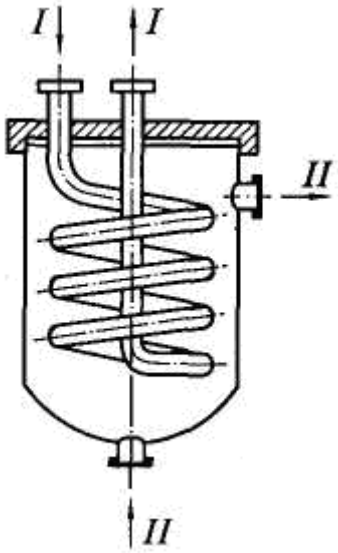

Рис.2.19 – Теплообменник змеевикового типа
I – теплоноситель, II - раствор

Считать, что хладоагент (раствор) поступает в теплообменники с равной температурой, теплоноситель имеет одинаковую температуру. Вес расходы различны. Потерями тепла в окружающую среду пренебречь. Для змеевиков выполняется соотношение $L/D > 20$.

Построить математическую модель для определения температур T_X и T_T на выходе из баков с учетом тепловой инерционности стенок змеевика.

Задача 18.

Для условий задачи 17 построить модель без учета тепловой инерционности стенок змеевиков.

Задача 19.

В оросительном теплообменнике водой охлаждается газовая смесь (рис. 2.20). Все конструктивные параметры заданы.

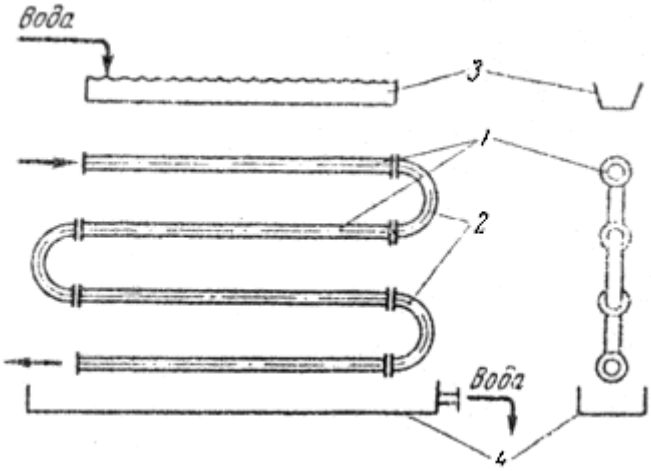

Рис.2.20 – Оросительный теплообменник
1 – секция прямых труб; 2 – калачи; 3 – распределительный желоб; 4 – поддон.

Задача 20.

Для теплообменника, приведенного в задаче 19 построить модель без учета тепловой инерционности стенок.

3 Математическое описание массообменных аппаратов

В качестве примеров построения математических моделей массообменных процессов рассмотрим математическое описание насадочного абсорбера и процесса ректификации бинарной смеси.

3.1 Математическое описание процесса абсорбции в насадочном аппарате

Процесс абсорбции – процесс массопереноса вещества из газовой фазы в жидкую. При математическом моделировании в соответствии с блочным принципом необходимо сформулировать допущения относительно гидродинамики и относительно массопередачи.

В общем случае при математическом описании насадочного абсорбера используют самые разнообразные гидродинамические модели за исключением модели идеального смешения, которая описывает процесс неадекватно.

Математическое описание процесса массопереноса вещества из газовой фазы в жидкую строят, используя основное уравнение массопередачи

$$M = K_V \cdot \Delta V \cdot \Delta C \qquad (3.1)$$

где M – массовый поток вещества, $\left[\frac{кг}{с}\right]$; K_V – объемный коэффициент массопередачи, $\left[\frac{кг}{м^3 \cdot с \cdot \frac{кг}{кг}}\right]$; ΔV – элементарный объем массообменного пространства, $[м^3]$; ΔC – движущая сила процесса, $\left[\frac{кг}{кг}\right]$.

Для характеристики скорости накопления вещества насадкой вводятся величины: h_L , h_G – удерживающие способности насадки в жидкой и газовой фазах, $\left[\frac{кг}{м^3}\right]$.

Рассмотрим ряд математических моделей насадочного абсорбера.

3.1.1 Построение ячеечной модели для насадочного абсорбера

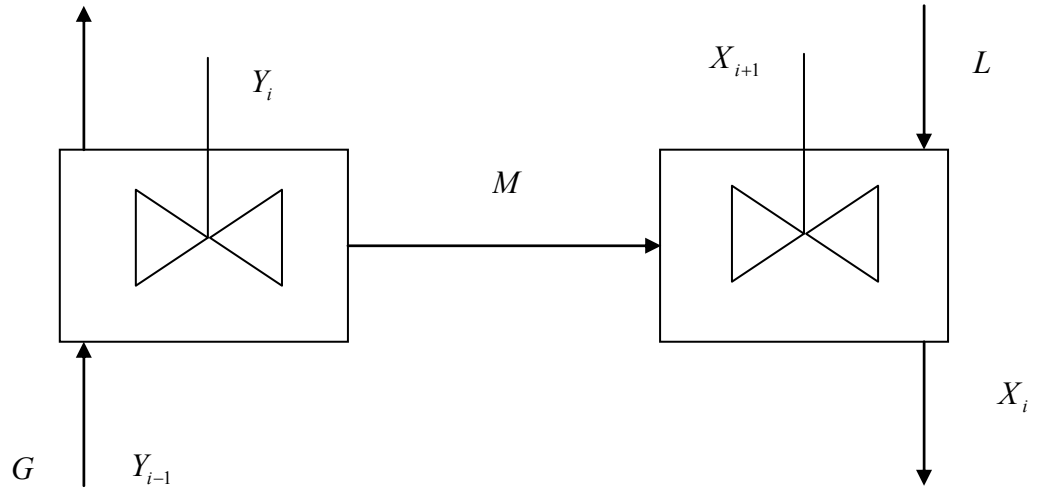

Рис.3.1 - Схематическое изображение ячейки

Здесь X_i , Y_i - концентрация вещества в жидкой и газовой фазе соответственно, $\left[\frac{кг}{кг}\right]$; i – номер ячейки; G, L – массовые расходы газовой и жидкой фаз, $\left[\frac{кг}{с}\right]$; M – массовый поток вещества, характеризующий массоперенос.

Примем, что процесс поглощения газовой жидкой фазой протекает изотермически.

Для получения математического описания в данном случае необходимо составить два материальных баланса по газовой и жидкой фазам (процесс изотермический, поэтому тепловой баланс не составляем).

В соответствии с принятой моделью предполагается, что распределение массы в потоках описывается уравнением (1.29). Это уравнение не учитывает процесс массопередачи, который описывается соотношением (3.1).

В соотношении (3.1) примем, что коэффициент массопередачи в пределах каждой ячейки не изменяется, $\Delta V = V_i$ – объем i – ой ячейки, чтобы записать движущую силу процесса, рассмотрим два случая абсорбции:

1. Легкорастворимые газы.

Для легко растворимых газов принимается, что в процессе массообмена сопротивление берется со стороны газовой фазы (в жидкости газы растворяются легко – сопротивление массообмену со стороны жидкой фазы, следовательно, мало). Движущая сила процесса записывается через газовую фазу.

Массовый поток (M, рис. 3.1) из газовой фазы в жидкую можно определить в данном случае из соотношения

$$M = K_{Yi} V_i (Y_i - Y_i^*) \qquad (3.2)$$

где K_{Yi} – коэффициент массопередачи для i – ой ячейки; Y_i^* - равновесное содержание компонента в газовой фазе.

2. Труднорастворимые газы

В отличие от предыдущего случая, движущая сила записывается через жидкую фазу

$$\Delta X = X_i^* - X_i \qquad (3.3)$$

Уравнение массопередачи запишется в следующем виде

$$M = K_{Xi} V_i (X_i^* - X_i) \qquad (3.4)$$

где K_{Xi} - объемный коэффициент массопередачи, рассчитанный для жидкой фазы; X_i^* - равновесное содержание компонента в жидкой фазе.

Математическое описание процесса абсорбции при сделанных допущениях построим, используя уравнение закона сохранения массы (1.2), записывая его отдельно для каждой фазы в соответствии с рис. 3.1.

$$\frac{dM_г}{dt} = M_{Кг}^{вх} - M_{Кг}^{вых} - M \qquad (3.5)$$

$$\frac{dM_ж}{dt} = M_{Кж}^{вх} - M_{Кж}^{вых} + M \qquad (3.6)$$

где $\frac{dM_г}{dt}, \frac{dM_ж}{dt}$ - скорости накопления массы вещества в объеме i – ой ячейки соответственно для газовой и жидкой фаз, $\left[\frac{кг}{с}\right]$; $M_{Кг}$, $M_{Кж}$ – конвективные массовые потоки по газовой и жидкой фазам.

Учитывая величины h_L, h_G, последние уравнения запишутся в виде:

$$\frac{d}{dt}(V_i h_G Y_i) = GY_{i-1} - GY_i - M \qquad (3.7)$$

$$\frac{d}{dt}(V_i h_L X_i) = LX_{i+1} - LX_i + M \qquad (3.8)$$

$$i = 1,2,....,m.$$

где M определяется в соответствии с уравнениями (3.2) или (3.3). Например, для труднорастворимых газов математическая модель будет иметь вид:

$$V_i h_G \frac{dY_i}{dt} = G(Y_{i-1} - Y_i) - K_{Xi} V_i (X_i^* - X_i) \qquad (3.9)$$

$$V_i h_L \frac{dX_i}{dt} = L(X_{i+1} - X_i) + K_{Ki} V_i (X_i^* - X_i) \qquad (3.10)$$

$$i = 1,2,....,m.$$

В модели принимается, что расходы G и L не изменяются от ячейки к ячейки, а изменяется только концентрация.

3.1.2 Построение модели идеального вытеснения для процесса абсорбции

Математическая модель в данном случае строится на основе соотношения (1.1). Выделим элементарный объем и запишем уравнение закона сохранения массы для каждой фазы.

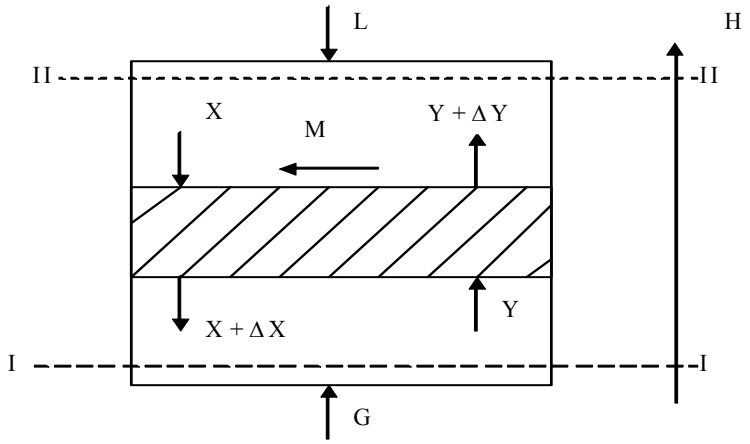

Рис. 3.2 – Схематическое изображение процесса массопереноса

Здесь X, У – концентрация вещества в жидкой и газовой фазах соответственно, кг/кг.

Для газовой фазы отдельные слагаемые уравнения (1.1) будут иметь вид:

$$\begin{aligned} &\Delta M = h_G F\varphi\Delta h\Delta Y \\ &M_{вх} = G\cdot Y \\ &M_{вых} = G(Y+\Delta Y)+M \\ &M = K_Y F\varphi\Delta h(Y-Y^*) \end{aligned} \qquad (3.11)$$

где φ - коэффициент, характеризующий свободное сечение насадки; Fφ - свободное сечение насадки, $F\varphi\Delta h = \Delta V$ - элементарный объем массообменного пространства.

Данные соотношения позволяют записать уравнение материального баланса для газовой фазы:

$$h_G F\varphi\Delta h\Delta Y = GY\Delta t - G(Y+\Delta Y)\Delta t - K_Y F\varphi\Delta h(Y-Y^*)\Delta t \qquad (3.12)$$

В дифференциальной форме уравнение 3.12 имеет вид (после выполнения деления на $F\varphi\Delta t\Delta h$ и переходя к пределу):

$$h_G\frac{\partial Y}{\partial t} = -G\frac{\partial Y}{\partial h} - K_Y(Y-Y^*) \qquad (3.13)$$

В этом уравнении G имеет размерность $\left[\frac{кг}{м^3\cdot с}\right]$.

Аналогично материальный баланс по жидкой фазе запишется

$$h_L F\varphi\Delta h\Delta X = L(X+\Delta X)\Delta t - LX\Delta t + K_X F\varphi\Delta h(X^*-X)\Delta t \qquad (3.14)$$

При выводе этого уравнения на основе уравнения (1.1) учитывалось направление оси координат H, т.е. входы – это сечение I-I, а выходы сечение II-II. Поэтому

$$M_{вх} = K(X + \Delta X)$$
$$M_{вых} = LX \qquad (3.15)$$

Таким образом, математическое описание процесса абсорбции в данном случае получено в виде

$$h_G \frac{\partial Y}{\partial t} = -G\frac{\partial Y}{\partial h} - K_Y(Y - Y^*)$$
$$h_L \frac{\partial X}{\partial t} = L\frac{\partial X}{\partial h} + K_X(X^* - X) \qquad (3.16)$$

При получении этих уравнений предполагалось, что не задано условие труднорастворимый или легкорастворимый газ.

3.1.3 Построение диффузионной однопараметрической модели процесса абсорбции

Однопараметрическая диффузионная модель процесса абсорбции строится по аналогии с предыдущим случаем. Отличие заключается в том, что в уравнениях материального баланса учитывается составляющая массовых потоков на входе в элементарный объем и выходе из него, связанная с продольным перемешиванием. Таким образом, в приращениях уравнения материального баланса запишутся:

$$h_G F\varphi\Delta h \cdot \Delta Y = GY\Delta t - G(Y + \Delta Y)\Delta t - D_G\rho_G F\varphi\frac{dY}{dh}\Delta t + D_G\rho_G F\varphi\frac{d(Y + \Delta Y)}{dh}\Delta t -$$
$$- K_Y F\varphi\Delta h(Y - Y^*)\Delta t \qquad (3.17)$$

$$h_L F\varphi\Delta h\Delta X = L(X + \Delta X)\Delta t - LX\Delta t - D_L\rho_L F\varphi\frac{d(X + \Delta X)}{dh}\Delta t + D_L\rho_L F\varphi\frac{dX}{dh}\Delta t +$$
$$+ K_X F\varphi\Delta h(X^* - X)\Delta t \qquad (3.18)$$

где ρ_G, ρ_L – плотность газовой и жидкой фаз, $\left[\frac{кг}{м^3}\right]$; D_G, D_L – коэффициенты продольного перемешивания по газовой и жидкой фазе, $\left[\frac{м^2}{с}\right]$.

От уравнений в приращениях можно перейти к дифференциальным уравнениям, если выполнить деление на $F\varphi\Delta h\Delta t$ и перейти к пределу при $\Delta t \to 0$ и $\Delta h \to 0$. Окончательно получим:

$$h_G \frac{\partial Y}{\partial t} = -G\frac{\partial Y}{\partial h} + D_G\rho_G\frac{\partial^2 Y}{\partial h^2} - K_Y(Y - Y^*) \qquad (3.19)$$

$$h_L \frac{\partial X}{\partial t} = L\frac{\partial X}{\partial h} - D_L\rho_L\frac{\partial^2 X}{\partial h^2} + K_X(X^* - X) \qquad (3.20)$$

При выводе уравнений принималось, что коэффициенты продольного перемешивания и плотности фаз не изменяются по высоте аппарата.

3.1.4 Построение математического описания процесса абсорбции на основе диффузионной модели с застойными зонами

При применении указанных гидродинамических моделей необходимо выявить цепь обменных процессов между газовой и жидкой фазами в застойной и проточной части аппарата.

Примем, что застойные части образуют зоны по жидкой фазе (образование застойных зон по газовой фазе маловероятно). Примем следующую замкнутую цепь обменных процессов в аппарате: газовая фаза проточная зона потока жидкости, застойная зона потока жидкости, газовая фаза (рис. 3.3), где K_V, K_1, K_2 – объемные коэффициенты массопередачи.

Запишем диффузионную модель с застойными зонами. С этой целью выделим элементарный объем и примем закон сохранения массы.

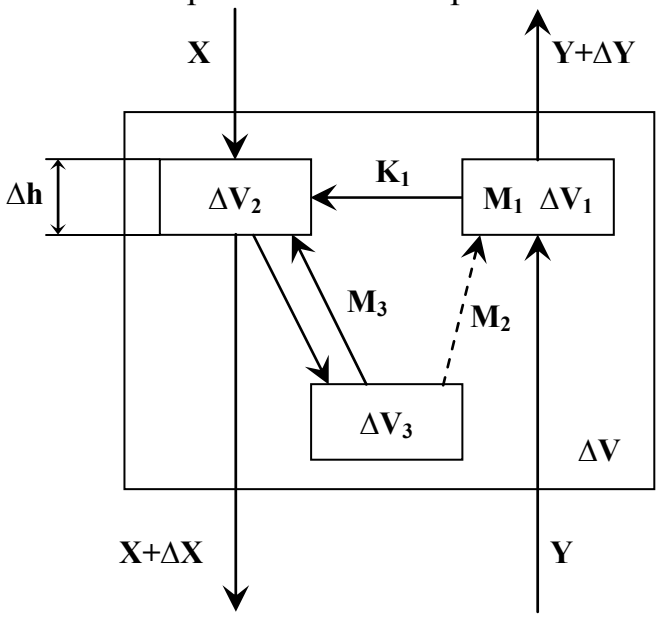

Рис. 3.3. Схематическое изображение массопереноса

ΔV_1 – объем, занимаемый газовой фазой, ΔV_2 – объем, занимаемый жидкой фазой, ΔV_3 – объем застойных зон, $\Delta V_1+\Delta V_2$ – проточная часть аппарата, $\Delta V_1+\Delta V_2+\Delta V_3=F\varphi\Delta h=\Delta V$ – выделенный элементарный объем, $F\varphi$ - свободное сечение насадки.

Для определения объемов ΔV_1, ΔV_2, ΔV_3 введем величины: $H_г$ – относительный объем, занимаемый газовой фазой; $\varepsilon_{зз}$ – относительный объем , занимаемый застойными зонами. Используя эти величины ΔV_1, ΔV_2, ΔV_3 определим из соотношений:

$$\Delta V_1 = H_г \Delta V = H_г F\varphi\Delta h \qquad (3.21)$$

$$\Delta V_3 = \varepsilon\Delta V = \varepsilon F\varphi\Delta h \qquad (3.22)$$

$$\Delta V_2 = \Delta V - \Delta V_1 - \Delta V_3 = (1 - H_г - \varepsilon)F\varphi\Delta h \qquad (3.23)$$

Для определения массовых потоков M_1 и M_2 (рис.3.3) воспользуемся основным уравнением массопередачи (3.1). Для определения массового потока M_3 используем уравнение Щукарева

$$M_3 = K_1\Delta V(X - X_{зз}) \qquad (3.24)$$

где X – концентрация вещества в жидкой фазе для проточной части аппарата, $X_{зз}$ – концентрация вещества в застойной зоне, ΔV – элементарный объем массообменного пространства.

Для получения материального баланса по газовой фазе примем к объему ΔV_1 (рис. 3.3) закон сохранения массы.

$$\Delta M = \Delta V_1 \rho_G \Delta Y = M_K^{вх} \Delta t + M_d^{вх} \Delta t - M_K^{вых} \Delta t - M_d^{вых} \Delta t - M_1 \Delta t + M_2 \Delta t \qquad (3.25)$$

или:

$$H_г F \varphi \rho_G \Delta h \Delta Y = GY\Delta t - D_G \rho_G F \varphi \frac{dY}{dh} \Delta t - G(Y - \Delta Y)\Delta t + D_G \rho_G F \varphi \frac{d(Y + \Delta Y)}{dh} \Delta t - \\ - K_V F \varphi \Delta h (Y - Y^*)\Delta t + K_2 (Y_{зз}^* - Y)\Delta t F \varphi \Delta h \qquad (3.26)$$

Аналогично для жидкой фазы в проточной части аппарата получим уравнение:

$$\Delta M = \Delta V_2 \rho_L \Delta X = M_K^{вх} \Delta t + M_d^{вх} \Delta t - M_K^{вых} \Delta t - M_d^{вых} \Delta t + M_1 - M_3 \qquad (3.27)$$

или

$$(1 - \varepsilon - H_г) F \varphi \rho_L \Delta h \Delta X = L(X + \Delta X)\Delta t \cdot D_L \rho_L F \varphi \frac{d(X + \Delta X)}{dh} \Delta t - \\ - L_X \Delta t + D_L \rho_L F \varphi \frac{dX}{dh} \Delta t + K_Y F \varphi \Delta h (Y - Y^*)\Delta t - \\ - K_1 F \varphi \Delta h (X - X_{33})\Delta t \qquad (3.28)$$

Для застойной зоны принимается идеальное перемешивание, поэтому

$$\frac{dM}{dt} = M_3 - M_2 \qquad (3.29)$$

или

$$\frac{d}{dt}(\Delta V_3 X_{33} \rho_{33}) = -K_2 (Y_{33}^* - Y)\Delta V + K_1 (X - X_{33})\Delta V \qquad (3.30)$$

Окончательно математическое описание будет иметь вид

$$H_2 \rho_G \frac{\partial Y}{\partial t} = -G \frac{\partial Y}{\partial h} + D_G \rho_G \frac{\partial^2 Y}{\partial h^2} - K_V (Y - Y^*) + K_2 (Y_{33}^* - Y) \qquad (3.31)$$

$$(1 - \varepsilon - H_2) \rho_L \frac{\partial X}{\partial t} = L \frac{\partial X}{\partial h} - D_L \rho_L \frac{\partial^2 X}{\partial h^2} + K_V (Y - Y^*) - K_1 (X - X_{33}) \qquad (3.32)$$

$$(1 - \varepsilon) \frac{dX_{33}}{dt} = -K_2 (Y_{33}^* - Y) + K_1 (X - X_{33}) \qquad (3.33)$$

3.1.5 Построение модели в случае неизотермической абсорбции

При построении предыдущих моделей предполагалось, что теплотой растворения газовой фазы в жидкой можно пренебречь. Построим модель при условии, что теплотой растворения пренебречь нельзя. Рассмотрим один случай, когда распределение масс и энергии в потоках описывается моделью идеального вытеснения. Примем, что при растворении 1 кг газа выделяется q [Дж] тепла.

Если теплотой растворения пренебречь нельзя, то уравнения материального баланса дополняются одним уравнением теплового баланса, которое записывается для жидкой фазы. Обычно принимают, что вследствии большой теплоемкости жидкой фазы (по сравнению с газовой при достаточно большом объемном расходе газовой фазы) все тепло от растворения идет на нагревание жидкой фазы (газовая фаза не успевает нагреться). Поэтому записывают тепловой баланс для жидкой фазы.

В соответствии с рис. 3.2 в сечении I-I температура равна T+ΔT, а в сечении II-II - T, поэтому уравнение теплового баланса будет иметь вид:

$$\Delta Q = h_L F\varphi\Delta h C_P \Delta T = LC_P(T+\Delta T)\Delta t - LC_P T\Delta t + qK_X F\varphi\Delta h(X^* - X) \qquad (3.34)$$

Это уравнение можно переписать в дифференциальном виде:

$$h_L C_P \frac{\partial T}{\partial t} = LC_P \frac{\partial T}{\partial h} + qK_X(X^* - X) \qquad (3.35)$$

где, L имеет размерность [кг\(м^{2}с)].

3.1.6 Математическое описание тарельчатой ректификации бинарной смеси

При математическом описании процесса массопереноса между паровой и жидкой фазами для характеристики движения потоков фаз используют самые разнообразные модели: от простейших идеального вытеснения и смешения до комбинированных. Рассмотрим одну из математических моделей.

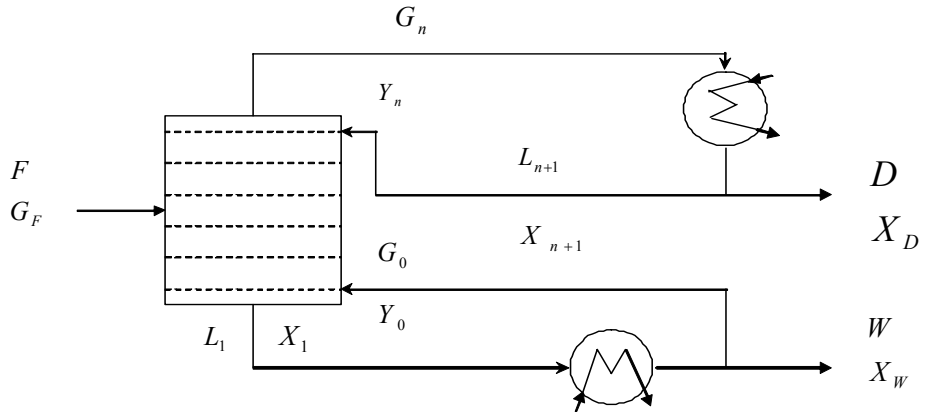

Рис. 3.4 – Схематическое изображение процесса ректификации

Колонна содержит n тарелок, куб и конденсатор. В кубе происходит испарение части жидкости за счет подвода тепла, пары поднимаются вверх по колонне, обогащаются легколетучим компонентом, конденсируются. Продукты отбираются в виде дистиллята D $\left[\frac{кг}{с}\right]$ составом X_D $\left[\frac{кг}{кг}\right]$ и кубового остатка W $\left[\frac{кг}{с}\right]$ составом X_W $\left[\frac{кг}{кг}\right]$. Концентрация измеряется по легколетучему компоненту.

Приняты следующие условные обозначения на рис. 3.4: G – расход паровой фазы, $\left[\frac{кг}{с}\right]$; L – расход жидкой фазы, $\left[\frac{кг}{с}\right]$; F – расход исходной смеси, $\left[\frac{кг}{с}\right]$; G_X, G_T – массовые расходы хладоагента в конденсаторе и теплоносителя в кубе, Y – состав паровой фазы, $\left[\frac{кг}{кг}\right]$, X – состав жидкой фазы, $\left[\frac{кг}{кг}\right]$; индексы 0, 1, n, n+1 – характеризуют нумерацию тарелок - снизу вверх.

При построении модели примем следующие допущения:

1. Жидкость на тарелках колонны, в кубе и конденсаторе идеально смешивается.
2. Движение потока пара при его контакте с жидкостью может быть описано гидродинамической моделью идеального вытеснения.
3. Жидкость на тарелках колонны находится при температуре кипения, пар – при температуре конденсации. Питание в колонну подается в жидкой фазе, при температуре кипения. Орошение (L_{n+1}) поступает в колонну также при температуре кипения.
4. Количество пара и жидкости в потоках по высоте колонны не изменяется в пределах каждой секции. Это соответствует допущению, что количество тепла, затрагиваемое на испарение 1 моля жидкости равно количества тепла, выделяющемуся при конденсации 1 моля пара.
5. Унос жидкости паром с тарелок отсутствует.
6. Пар равномерно распределяется по всему массообменному пространству тарелки.
7. Куб колонны работает как парциальный испаритель, т.е. в кубе поддерживается постоянное давление.
8. В конденсаторе колонны происходит полная конденсация. Дистиллят отбирают в жидкой фазе.
9. Интенсивность массообмена между жидкостью и паром на тарелке характеризуется объемным коэффициентом массопередачи V_{iV}, значение которого постоянно для всех точек массообменного пространства i – ой тарелки. Так как жидкость идеально смешивается, следовательно, сопротивление массопереносу сосредоточено в паровой фазе и движущая сила записывается в виде:

$$\Delta Y_i = Y_i^* - Y_i$$

где $Y_i^* = f(P, X_i)$ - зависимость равновесного состава жидкости при заданном давлении в колонне.

10. Количество питания *F*, его состав *X*, величины отбора дистиллята *D* и кубового остатка *W* считаются заданными.

Задачей моделирования является определение составов жидкости и пара на всех тарелках колонны, а также составов получаемых продуктов.

Основу модели процесса ректификации составляет математическое описание массопередачи на отдельной тарелке.

3.2.1 Математическое описание тарелок ректификации

Пусть конструктивно задана колпочковая тарелка с переливом

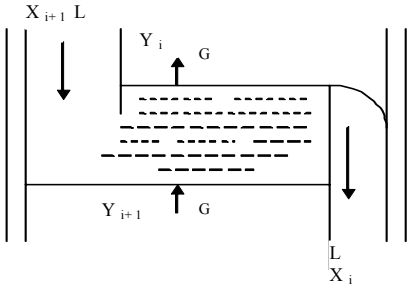

Рис. 3.5 – Схематическое изображение тарелки

Для характеристики массообменного пространства тарелки введем величину ε_n – удерживающую способность тарелки по паровой фазе $\left[\frac{м^3}{м^3}\right]$ – относительный объем массообменного пространства тарелки, который занимает паровая фаза.

В соответствии с принятыми допущениями массовый расход жидкости и паровой фаз не меняется по высоте колонны, изменяется только концентрация легколетучего компонента. Температуры потоков на каждой тарелки рассчитываются, исходя из соотношений:

$$T_{жi} = f_1(P, X_i) \qquad (3.36)$$

$$T_{Пi} = f_2(P, Y_i) \qquad (3.37)$$

где $T_{жi}$, $T_{Пi}$ – температура жидкой и паровой фаз на i – ой тарелке.

Для определения неизвестных величин Y_i, X_i запишем два уравнения материального баланса. Выделим в массообменном пространстве тарелки элементарный объем и, учитывая, что концентрация потоков изменяется в результате вынужденной конвекции и массопередачи, составим материальные балансы по жидкой и паровой фазам для i – ой тарелки (легколетучий компонент)

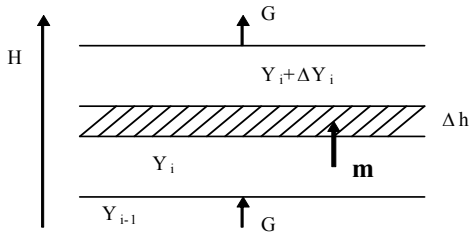

Рис. 3.6 – Элементарный объем

$$\Delta M = M^{к}_{вх}\Delta t - M^{к}_{вых}\Delta t + m\Delta t \qquad (3.38)$$

где m – элементарное количество легколетучего компонента, которое переходит из жидкой фазы в паровую.

$$\Delta(\varepsilon_n S\Delta h\rho_n Y_i) = \left[GY_i - G(Y_i - \Delta Y_i) + K_{Yi}S\Delta h(Y_i^* - Y_i)\right]\Delta t \qquad (3.39)$$

где S – сечение тарелки, ρ_n – плотность паровой фазы. Окончательно получим следующее дифференциальное уравнение материального баланса для паровой фазы:

$$\varepsilon_n S\rho_n \frac{\partial Y_i}{\partial t} = -G\frac{\partial Y_i}{\partial h} + K_{Yi}S(Y_i^* - Y_i) \qquad (3.40)$$

Здесь принимается, что плотность ρ_n изменяется незначительно в процессе.

Для жидкой фазы принято идеальное смешение, поэтому материальный баланс составляем для всего массообменного пространства тарелки. В этом случае необходимо определить полное количество легколетучего компонента $M_л$, которое теряет жидкая фаза на i – ой тарелке очевидно

$$M_{лi} = \int_0^{V_{Ti}} K_{Yi}(Y_i^* - Y_i)dV = GY_i - GY_{i-1} \qquad (3.41)$$

где V_{Ti} – объем массообменного пространства.

Учитывая это уравнение, концентрацию X_i можно определить из уравнения 3.42:

$$\frac{dM}{dt} = M_{вх}^{к} - M_{вых}^{к} - M_л \qquad (3.42)$$

Для i – ой тарелки

$$(1-\varepsilon_{ni})V_T\rho_{жi}\frac{dX_i}{dt} = L(X_{i+1} - X_i) - G(Y_{i-1} - Y_i) \qquad (3.43)$$

где $\rho_{жi}$ – плотность жидкой фазы. Принимается, что $\rho_{жi}$ – изменяется незначительно в процессе.

Полученные уравнения 3.40, 3.43 справедливы для укрепляющей секции колонны. Для исчерпывающей секции при справедливости сделанных допущений уравнение 3.43 необходимо переписать для тарелки, на которую поступает питание, а именно:

$$(1-\varepsilon_{ni})V_T\rho_{жi}\frac{dX_i}{dt} = L(X_{i+1} - X_i) - G(Y_{i-1} - Y_i) + FX_F \qquad (3.44)$$

Для тарелок, которые расположены ниже тарелки питания, концентрация рассчитывается, исходя из уравнения 3.44, а расход, исходя из соотношения:

$$L_{f+1} = L_{f-1} + F \qquad (3.45)$$

где f номер тарелки питания.

Для колонны ректификации кроме математического описания тарелок необходимо составить математическое описание куба колонны и конденсатора.

3.2.2 Математическое описание куба колонны

В данном случае величины L_1, X_1, T_1 (рис 3.7) определяются, исходя из расчета тарелок; V_T, T_{T0} – массовой расход и начальная температура теплоносителя заданы; известной величиной считается и W. Требуется определить шесть неизвестных величин.

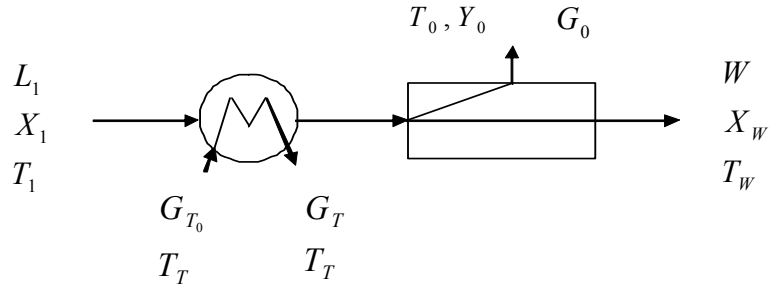

Рис.3.7 – Схематическое изображение кубы колонны

Примем, что пар и жидкость в кубе находятся в состоянии равновесия. Поэтому $T_0 = T_W, Y_0 = Y_0^* = f(P, X_W)$

Принимая, что плотность жидкой и паровой фаз в кубе изменяются незначительно, можно записать уравнение:

$$\frac{dM_W}{dt} = L_1 - G_0 - W \qquad (3.46)$$

где M_W – масса жидкой фазы в кубовой емкости. Для определения X_W запишем материальный баланс по легколетучему компоненту.

$$\frac{d}{dt}(V_W \rho_W C_{PW} T_W) = L_1 X_1 - G_0 Y_0 - W X_W \qquad (3.47)$$

где V_W – объем жидкой фазы в кубе.

Кроме материальных балансов необходимо составить тепловые балансы:

1. Для кубовой жидкости

$$\frac{d}{dt}(V_W \rho_W C_{PW} T_W) = L_1 C_{P1} T_1 - G_0 (C_{P0} T_0 + r) - W C_{PW} T_W + \alpha_W F_W (T_{CT} - T_W) \qquad (3.48)$$

где α_W, F_W – коэффициенты теплоотдачи и поверхность теплоотдачи, r – теплота парообразования, C_P – теплоемкость, T_{CT} – температура стенки змеевика (теплообменник змеевикового типа).

2. Для теплоносителя (идеальное вытеснение)

$$S_T \rho_T C_{PT} \frac{\partial T_T}{\partial t} = -G_T C_{PT} \frac{\partial T_T}{\partial l} - \alpha \Pi_T (T_T - T_{CT}) \qquad (3.49)$$

где l – длина змеевика.

3. Для стенки змеевика

$$S_{CT} \rho_{CT} C_{PCT} \frac{dT_{CT}}{dt} = \alpha_T \Pi_T (T_T - T_{CT}) - \alpha_W \Pi_W (T_{CT} - T_W) \qquad (3.50)$$

3.2.3 Математическое описание конденсатора

Учитывая, что в конденсаторе (рис. 3.8) имеет место полная конденсация, получим: $T_D = T_{n+1}, X_{n+1} = X_D$

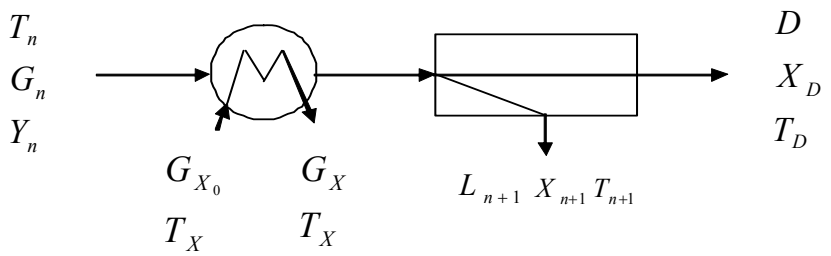

Рис.3.8 – Схематическое изображение конденсатора

Запишем материальные и тепловые балансы по аналогии с уравнениями 3.46 – 3.50.

$$\frac{dM_D}{dt} = G_n - D - L_{n+1} \qquad (3.51)$$

$$\frac{d}{dt}(V_D \rho_D X_D) = G_n Y_n - D X_D - L_{n+1} X_{n+1} \qquad (3.52)$$

$$\frac{d}{dt}(V_D \rho_D C_{PD} T_D) = G_n C_{Pn} T_n - D C_{PD} T_D - L_{n+1} C_{Pn+1} T_{n+1} \quad (3.53)$$

$$S_X \rho_X C_{PX} \frac{\partial T_X}{\partial t} = -G_X C_{PX} \frac{\partial T_X}{\partial l} - \alpha_X \Pi_X (T_{CT} - T_X) \quad (3.54)$$

$$S_{CT} \rho_{CT} C_{PCT} \frac{dT_{CT}}{dt} = \alpha_D \Pi_D (T_D - T_{CT}) - \alpha_X \Pi_X (T_{CT} - T_X) \quad (3.55)$$

Уравнения с 3.40 по 3.55 и представляют собой математическое описание тарельчатой ректификации бинарной системы.

3.3 Пример составления математической модели насадочного абсорбера

Извлечение двуокиси азота из газовой фазы проводится водой в насадочном абсорбере. Процесс протекает изотермически. Принять, что движение газовой фазы (G) описывается моделью вытеснение, движение жидкой фазы (L) – комбинированной моделью. Построить математическую модель процесса.

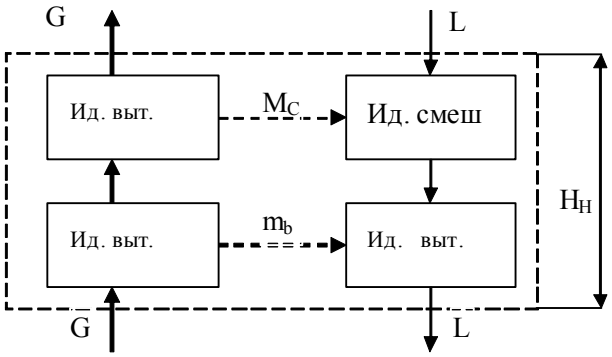

Рис. 3.9 – Схематическое изображение движения потоков в насадочном абсорбере

На рис. 3.9 условно представлено, что объем, занимаемый газовой фазой, состоит из двух последовательно соединенных ячеек вытеснения. M_c – полное количество двуокиси азота, которое переходит из газовой фазы в ячейку идеального смешения; $m_в$ – элементарное количество двуокиси азота, которое переходит из газовой фазы в жидкую; $H_Н$ – высота насадки.

Пусть εV – объем, который занимает газовая фаза; γV – объем, занимаемый зоной смешения; тогда (1-ε-γ)V – объем, который занимает ячейка идеального вытеснения в жидкой фазе.

Примем, что L и G измеряется в [кг/с], а X и Y – в [кг/кг]. Обозначим: X_c, $X_в$ – соответственно концентрация двуокиси азота в ячейки смешения и вытеснения, расположенных в жидкой фазе.

В процессе абсорбции газовая фаза обменивается массой как с ячейкой смешения, так и с ячейкой вытеснения. Математическое описание составляем отдельно для каждой ячейки и для каждой фазы. Перенос массы из газовой фазы в жидкую фазу определяем в соответствии с основным уравнением массопередачи (3.1)

Если в условии задачи не оговорено, легкорастворимые газы или труднорастворимые, то при определении движущей силы процесса возможны два случая. Если модель симметричная, то движущая сила записывается через

концентрацию той фазы, для которой составляется материальный баланс. Симметричной моделью является, например, когда обе фазы описываются моделью вытеснения.

Составим материальный баланс по двуокиси углерода для газовой фазы. С этой целью выделим элементарный объем в слое насадки и сориентируем этот объем относительно оси ординат Н.

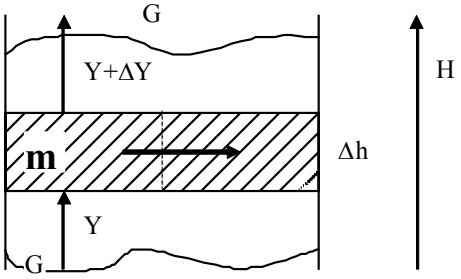

Рис. 3.10 – Схематическое изображение элементарного объема

Выделенный элементарный объем в газовой фазе ($\Delta V_г$) определяется из соотношения $\Delta V_г = \varepsilon \Delta V = \varepsilon S \Delta h = \varepsilon S_k \varphi \Delta h$, где $S = S_K \varphi$ - свободное сечение насадки, [м^2]; S_k – сечение колонны, φ – коэффициент свободного сечения насадки.

Используя закон сохранения массы, запишем материальный баланс

$$\Delta M = M_{BX}^{K} \Delta \mathrm{t} - \left(M_{BЫX}^{K} + \mathrm{m}\right)\Delta t \qquad (3.56)$$

Примем, что расходы фаз по высоте колонны не изменяются, изменяется только концентрация. Поэтому

$$\begin{aligned} &\Delta M = \Delta(\varepsilon F \Delta h \rho_G Y) = \varepsilon F \Delta h \rho_G \Delta Y \\ &M_{BX}^{K} = LY \\ &M_{BЫX}^{K} = L(Y + \Delta Y) \end{aligned} \qquad (3.57)$$

Для определения m используем соотношение (3.1)

$$\begin{aligned} &m = K_Y F \Delta h \left(Y - Y^*\right) \\ &Y^* = f\left(P, T, X\right) \end{aligned} \qquad (3.58)$$

где через X обозначена концентрация ячейки смешения X_C или ячейки вытеснения X_B; Y^* - равновесная концентрация.

Подставим соотношения (3.57 - 3.58) в уравнение (3.56). Получим:

$$\varepsilon F \Delta h \rho_C \Delta Y = LY\Delta t - L\left(Y + \Delta Y\right)\Delta t - K_y F \Delta h \left(Y - Y^*\right)\Delta t \qquad (3.59)$$

Разделим правую и левую часть этого уравнения не $\Delta h \cdot \Delta t$ и перейдем к пределу $\Delta h \to 0, \Delta t \to 0$.

$$\varepsilon F \rho_G \frac{\partial Y}{\partial t} = -L \frac{\partial Y}{\partial h} - K_Y F \left(Y - Y^*\right) \qquad (3.60)$$

Так как газовая фаза обменивается с разными зонами (рис. 3.9), примем, что коэффициент массопередачи в пределах каждой зоны различен ($К_Y$=$К_{YC}$ или $К_Y$=$К_{YB}$). Это замечание будет учтено ниже.

Составим материальный баланс по двуокиси азота для жидкой фазы в пределах ячейки смешения. Материальный баланс составляем для всего объема ячейки смешения.

Элементарное количество двуокиси азота, которое в единицу времени переходит из газовой в жидкую фазу определяется на основе выражения (3.58).

Полное количество массы двуокиси азота, которое получит ячейка смешения в единицу времени, очевидно, равно

$$M_C = \int_0^{\gamma V} K_{YC}\left(Y - Y^*\right)dV$$
$$Y^* = f\left(P, T, X_C\right) \tag{3.61}$$

где $K_{ус}$ – коэффициент массопередачи, характеризующий массоперенос из газовой фазы в зону смешения. Составляем материальный баланс для ячейки смешения используя уравнение сохранения массы 3.11

$$\frac{\partial M}{\partial t} = M_{BX}^{K} - M_{BЫX}^{K} + M_C \tag{3.62}$$

Отдельные слагаемые имеют вид:

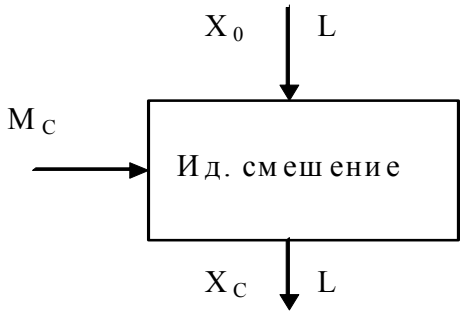

Рис. 3.11 – Схематическое изображение модели идеального смешения

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(\gamma V \rho_{LC} X_C) \tag{3.63}$$

$$M_{вых}^{л} = L \cdot X_0 \tag{3.64}$$

$$M_{вых}^{к} = L \cdot X_C \tag{3.65}$$

где ρ_{LC} - плотность жидкой фазы в пределах ячейки смешения, V – объем насадки; X_C – концентрация двуокиси азота в жидкой фазе на входе в колонну.

Принимая, что ρ_{LC} в пределах ячейки смешения изменяются незначительно, получим следующее уравнение материального баланса:

$$\gamma V \rho_{LC} \frac{dX_C}{dt} = L(X_0 - X_C) + \int_0^{\gamma V} K_{YC}\left(Y - Y^*\right)dV \tag{3.66}$$

Аналогично составляем материальный баланс для ячейки вытеснения в жидкой фазе.

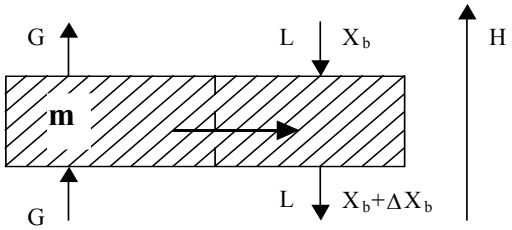

Рис. 3.12 – Схематическое изображение ячейки вытеснения

$$\Delta M = M_{BX}^{K} \cdot \Delta t - M_{BЫX}^{K} \Delta t + m\Delta t \tag{3.67}$$

$$M_{BX}^{K} = L(X_B + \Delta X_B) \tag{3.68}$$

$$M_{BЫX}^{K} = LX_B \tag{3.69}$$

$$m = K_{XB} F \Delta h \left(X_B^* - X_B \right) \quad (3.70)$$

$$X_B^* = \varphi(P, T, Y) \quad (3.71)$$

$$\Delta M = \Delta\left[(1-\varepsilon-\gamma) F \Delta h \rho_{LB} X_B\right] = (1-\varepsilon-\gamma) F \Delta h \rho_{LB} \Delta X_B \quad (3.72)$$

где ρ_{LB} - плотность жидкой фазы в пределах ячейки вытеснения, K_{XB} – коэффициент массопередачи, характеризующий массоперенос в пределах ячейки вытеснения.

Подставив уравнения 3.68 – 3.72 в уравнение 3.67 и переходя $\Delta t \to 0, \Delta h \to 0$, получим:

$$(1-\varepsilon-\gamma) F \rho_{LB} \frac{\partial X_B}{\partial t} = L \frac{\partial X_B}{\partial h} + K_{Xв} F \left(X_B^* - X_B \right) \quad (3.73)$$

Таким образом, математическое описание процесса, представленного на рис. 3.9, имеет вид:

если $0 \le h \le (1-\varepsilon-\gamma) H_n$

$$\begin{aligned} &\varepsilon F \rho_G \frac{\partial Y}{\partial t} = -L \frac{\partial Y}{\partial h} - K_{YB} F (Y - Y^*) \\ &Y^* = f\left(P, T, X_B\right) \\ &(1-\varepsilon-\gamma) \rho_{LB} \frac{\partial X_B}{\partial t} + K_{XB} \cdot F \left(X_B^* - X_B \right) \end{aligned} \quad (3.74)$$

если $(1-\varepsilon-\gamma) H_n < h \le H_n$

$$\begin{aligned} &\varepsilon F \rho_G \frac{\partial Y}{\partial t} = L \frac{\partial Y}{\partial h} - K_{YC} F \left(Y - Y^* \right) \\ &Y^* = f(P, T, X_C) \\ &\gamma V \rho_{LC} \frac{\partial X_C}{\partial t} = L\left(X_0 - X_C \right) + \int_0^{\gamma V} K_{YC} \left(Y - Y^* \right) dV \end{aligned} \quad (3.75)$$

Первые три уравнения представляют собой математическое описание процесса абсорбции в пределах ячейки идеального вытеснения, оставшиеся три уравнения соответственно описывают процесс абсорбции в пределах ячейки смешения (рис. 3.9).

3.4 Контрольные задания по моделированнию массобменных аппаратов

Необходимо получить математическую модель заданного массобменного аппарата для целей управления им, и передаточные функции по каналу управления.

При решении задач использовать единые, предлагаемые ниже, основные обозначения.

L - расход жидкой фазы, $\left[\frac{кг}{с}\right]$

G - расход паровой или газовой фазы, $\left[\frac{кг}{с}\right]$

x - состав жидкой фазы, $\left[\frac{кг}{кг}\right], \left[\frac{кг}{м^3}\right]$

y - состав паровой фазы, $\left[\frac{кг}{кг}\right]$.

$\rho_L, c_{PL}, \rho_G, c_{PG}$ - плотность и теплоёмкость соответственно жидкой и паровой фаз, $\left[\frac{кг}{м^3}\right]$

T_L, T_C - температуры в фазах *[K]*

P - давление *[Па]*

k_Y, k_X, k_V - коэффициенты массопередачи, $\left[\frac{кг}{м^3 \cdot с \cdot \frac{кг}{кг}}\right]$

$V, F, П, L, Д, H$ - объём, $[м^3]$; площадь сечения, $[м^2]$; периметр, $[м]$; длина, $[м]$; диаметр, $[м]$; высота $[м]$

ε - относительный объём, который занимает газовая фаза.

α, β, γ - относительные объёмы, занимаемые соответственно зоной вытеснения, застойной зоной, зоной смешивания.

r - относительная величина расхода смеси в рециркуляционном потоке.

y - относительная величина расхода смеси в байпасном потоке.

h_L - удерживающие способности насадки в жидкой фазе $\left[\frac{кг}{м^3}\right]$

h_G - удерживающие способности насадки в газовой фазе $\left[\frac{кг}{м^3}\right]$

Задача 01. Из смеси газов извлекаются водой пары метилового спирта в насадочном абсорбере (рис. 3.13). Составить математическое описание процесса, принимая однопараметрическую диффузионную модель, если теплотой растворения пренебречь нельзя.

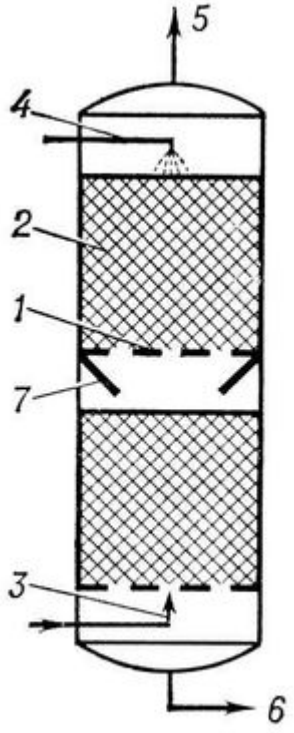

Рис. 3.13 – Насадочный абсорбер
1 – горизонтальные решетки; 2 – насадки; 3 – подача газа; 4 – подача жидкости; 5 – выход газовой фазы; 6 – слив жидкости из колонны; 7 - конусы

Задача 02. Процесс извлечения сернистого газа из смеси газов проводится в тарельчатом абсорбере барботажного типа (рис. 3.14). Построить математическую модель процесса, протекающего изотермически. Принять идеальное вытеснение для газа и ячеечную модель с обратным потоком для жидкости в пределах каждой тарелки.

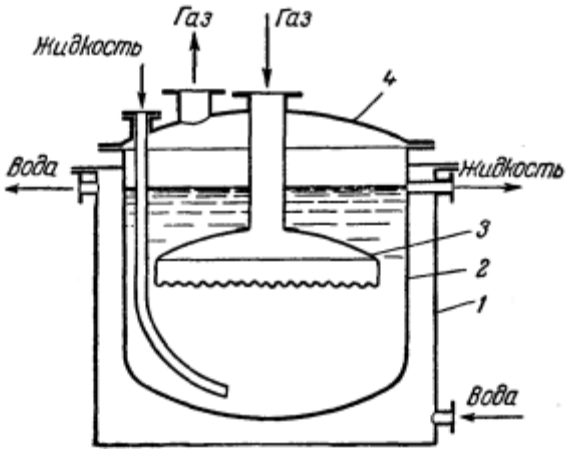

Рис.3.14 - Тарельчатый абсорбер барботажного типа

1 – резервуар; 2 – корпус абсорбера; 3 – колокол; 4 – крышка.

Задача 03. Углекислый газ извлекается из смеси газов водой в насадочном абсорбере (рис. 3.13). Построить математическую модель процесса, протекающего изотермически. Принять идеальное вытеснение для газовой фазы и ячеечную модель с застойными зонами для жидкости.

Задача 04. Из коксового газа маслом в насадочном абсорбере извлекаются пары бензола (рис. 3.13). Процесс протекает изотермически. Принять ячеечную модель с застойными зонами для жидкой фазы, простую ячеечную модель для газовой фазы. Составить математическое описание процесса.

Задача 05. Пары четыреххлористого углерода из смеси газов извлекаются водой в тарельчатом абсорбере барботажного типа (рис. 3.14). Процесс протекает изотермически. Принять ячеечную модель с обратным потоком для жидкости и простую ячеечную модель для газовой фазы в пределах каждой тарелки. Построить математическую модель.

Задача 06. В насадочном абсорбере проводится процесс осушки некоторой газовой смеси (извлечение паров воды) с помощью серной кислоты (рис. 3.13). Процесс протекает изотермически. Принять идеальное вытеснение для газовой фазы и однопараметрическую диффузионную модель с застойными зонами для жидкой фазы. Составить математическое описание.

Задача 07. Из смеси с водородом извлекается углекислый газ щелочью в насадочном абсорбере (рис. 3.13). Принять диффузионную модель для газовой фазы и ячеечную с застойными зонами для жидкой фазы. Составить математическое описание в случае изотермического протекания процесса.

Задача 08. В тарельчатой колонне (рис. 3.15) проводится процесс извлечения компонента B из смеси двух компонентов B + C с помощью растворителя A. Компонент C совершенно не растворим в растворителе. Жидкость A стекает сверху вниз, пар B + C движется противотоком. Раствор, отбираемый снизу колонны обогащается компонентом B, пар, отбираемый сверху колонны, состоит из компонента C, некоторого количества компонента B и испарившегося компонента A. Построить модель, принимая эквимолярный перенос вещества из фазы в фазу. Процесс протекает изотермически. Принять идеальное смешение для жидкости идеальное вытеснение для пара.

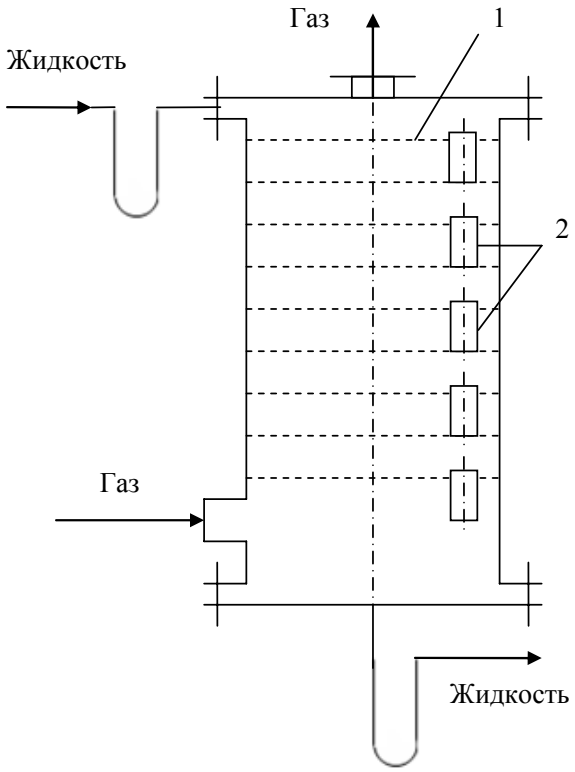

Рис. 3.16 - Тарельчатая колонна
1 – тарелка; 2 – переливное устройство

Задача 09. В башне путем разбрызгивания однокомпонентной жидкости, текущей противотоком, увлажняется газ. Газ состоит из трех компонентов: A,B,C. Растворимость газов различна.

Построить модель процесса, предполагая, что жидкая и газовая фаза находятся в равновесии. Брызгоуносом пренебречь. Процесс протекает неизотермически.

Задача 10. Ректификация бинарной смеси проводится в тарельчатой колонне с кубом и дефлегматором (рис. 3.16). Принять, что движение жидкости описывается комбинированной моделью с рециклом, движение пара – моделью вытеснения (рис. 3.17).

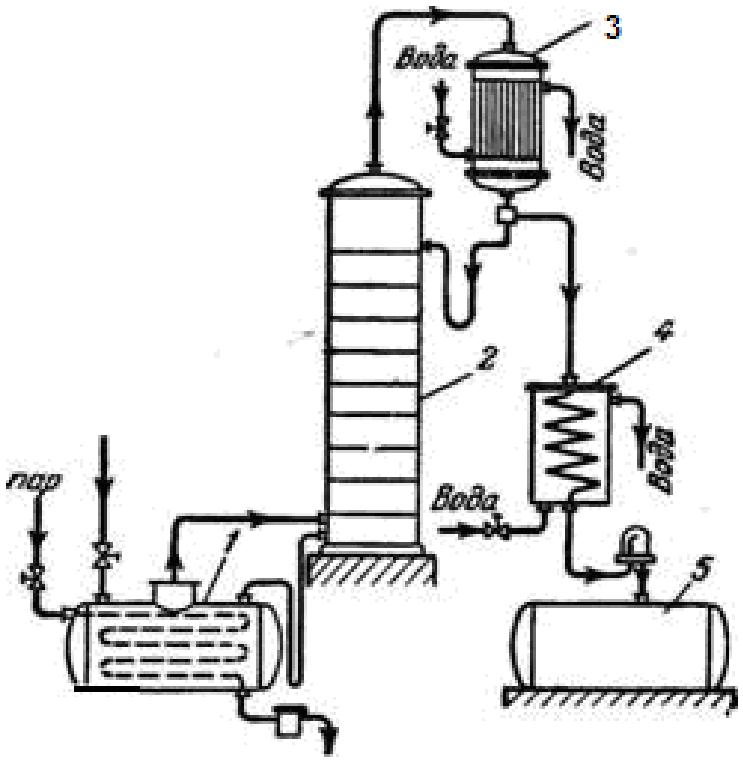

Рис. 3.16 Тарельчатая колонна с кубом и дефлегматором
1 – куб; 2 – Колонна; 3 – дефлегматор; 4 – холодильник конденсатор; 5 – сборник дистиллята.

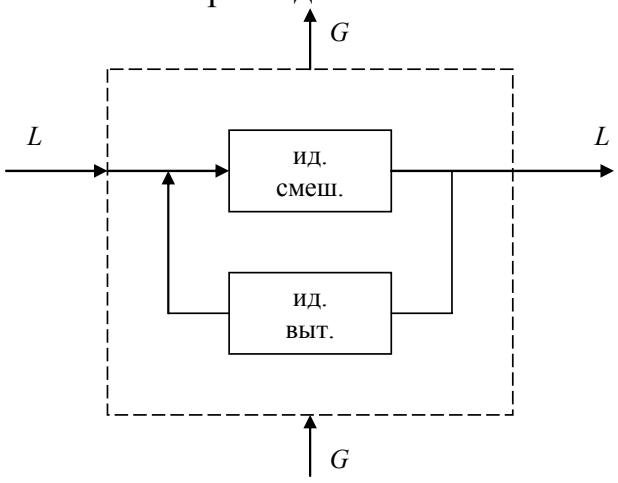

Рис. 3.17 – Схематическое изображение гидродинамического режима

Построить математическое описание процесса.

Задача 11. В условиях задачи 10 принять, что движение жидкости описывается комбинированной моделью с байпасом (рис.3.18).

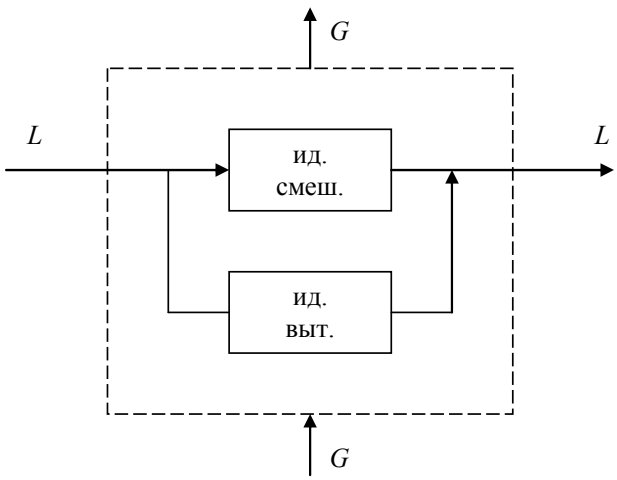

Рис. 3.18 – Схематическое изображение гидродинамического режима

Построить математическую модель.

Задача 12. В условиях задачи 10 построить математическое описание, принимая, что движение жидкости описывается следующей моделью (рис.3.19).

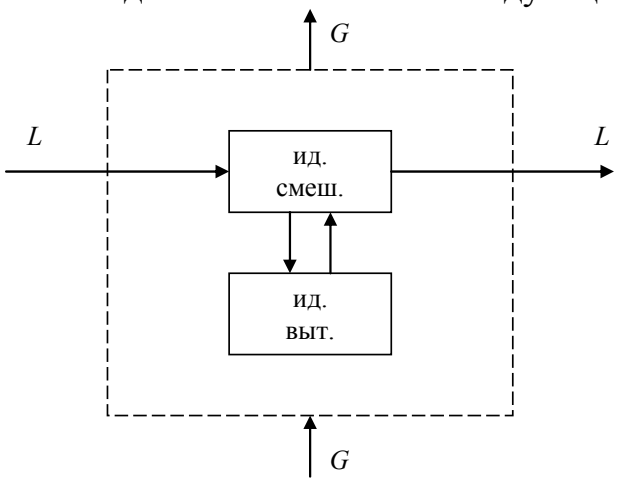

Рис. 3.19 – Схематическое изображение гидродинамического режима

Задача 13. Ректификация смеси метиловый спирт – вода проводится в насадочной колонне с дефлегматором и кубом. Построить математическое описание процесса, принимая, что движение жидкости и пара характеризуется однопараметрической диффузионной моделью (рис. 3.20).

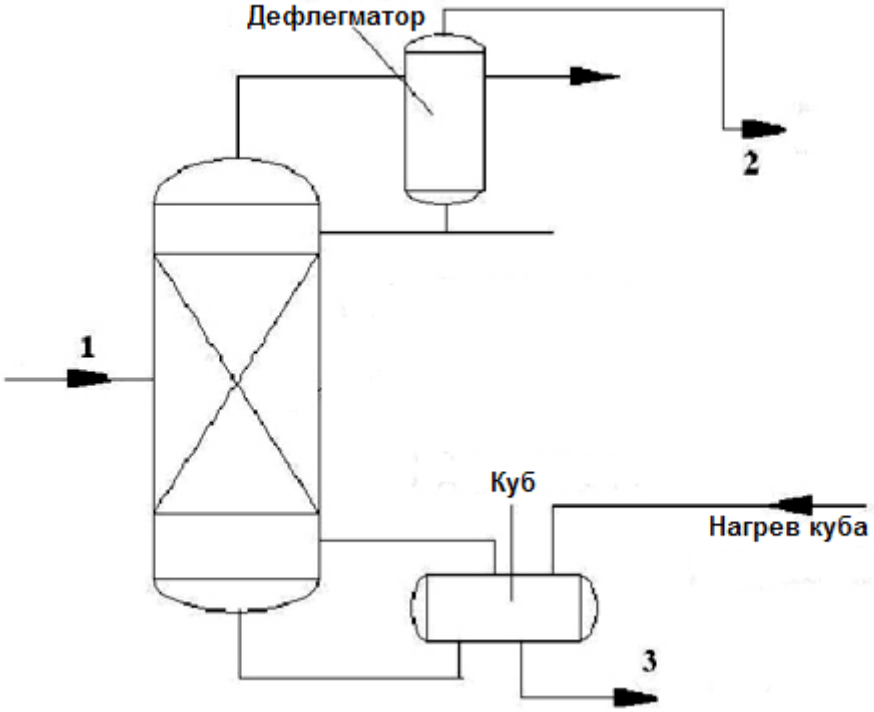

Рис. 3.20 - Насадочная колонна с кубом и дефлегматором
1 – исходная смесь; 2 – дистиллят; 3 – кубовый остаток

Задача 14. В условиях задачи 13 построить математическое описание процесса, принимая, что движение газа описывается однопараметрической диффузионной моделью, движение жидкости – ячеечной моделью с застойными зонами.

Задача 15. В условиях задачи 13 построить математическое описание процесса, принимая, что движение жидкости описывается ячеечной моделью, движение пара – комбинированной моделью с байпасом (рис. 3.21).

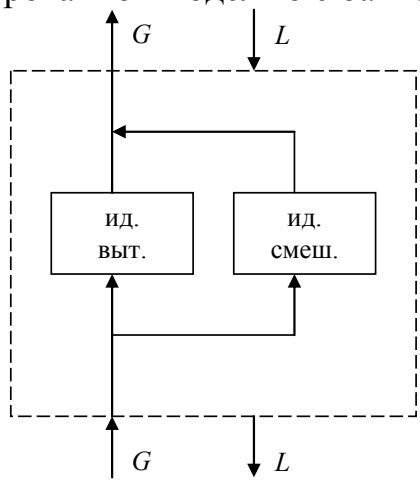

Рис. 3.21 – Схематическое изображение гидродинамического режима

Задача 16. Процесс извлечения двуокиси углерода из конвертированного газа проводится в насадочном абсорбере (рис.3.13) моноэтаноламином. Процесс протекает изотермически. Построить математическую модель.

Принять, что движение газа описывается моделью вытеснения, движение жидкости ячеечной моделью с обратным потоком.

Задача 17. В условиях задачи 16 построить модель процесса, если движение жидкости описывается комбинированной моделью (рис.3.22).

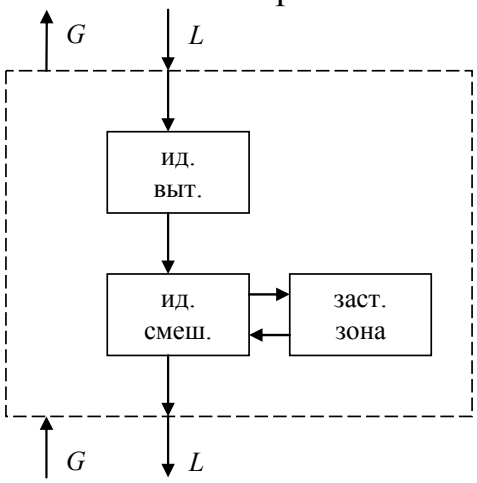

Рис. 3.22 – Схематическое изображение гидродинамического режима

Задача 18. В условиях задачи 16 принять, что движение жидкости описывается комбинированной моделью (рис.3.23), движение газа – однопараметрической диффузионной моделью.

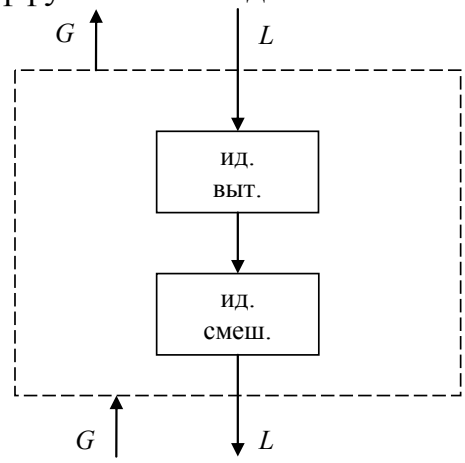

Рис. 3.23 – Схематическое изображение гидродинамического режима

Построить математическую модель.

Задача 19. В условиях задачи 16 построить математическую модель процесса, принимая, что движение жидкости описывается комбинированной моделью (рис. 3.24) с байпасом.

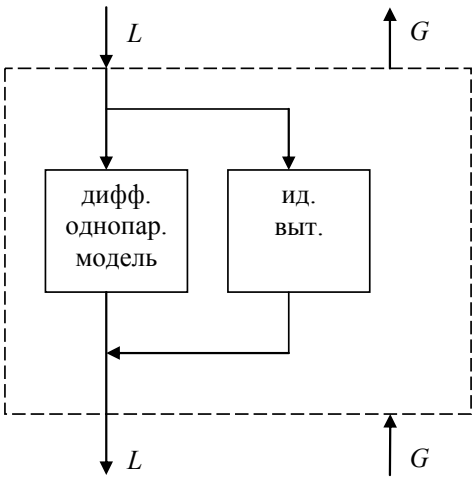

Рис. 3.23 – Схематическое изображение гидродинамического режима

Задача 20. В условиях задачи 16 построить математическое описание процесса, принимая, что движение газа описывается комбинированной моделью с байпасом (рис. 3.24), движение жидкости – однопараметрической диффузионной моделью.

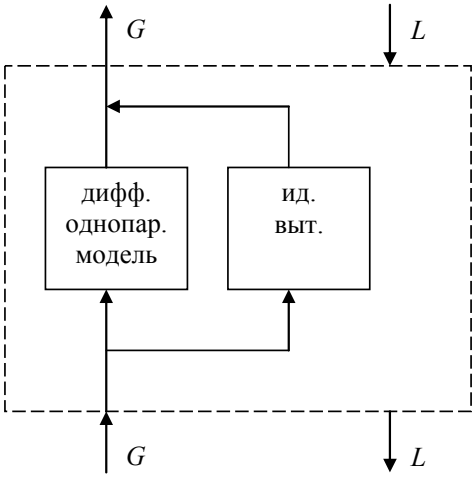

Рис. 3.24 – Схематическое изображение гидродинамического режима

4 Моделирование химических реакторов

При построении математического описания химических реакторов используют самые разнообразные гидродинамические модели. Основная трудность построения математической модели заключается в отсутствии достаточно надежной кинетики. Известно, что скорость химического превращения описывается законом действующих масс, труднее установить действительный механизм реакции.

При математическом моделировании химических реакторов примем, что скорость химической реакции ω_i измеряется в $\left[\frac{моль}{м^3 с}\right]_i$ – гомогенные реакции – и определяется в соответствии с законом действующих масс. Построить математическую модель – это значит – написать соотношения для определения концентраций всех компонентов и температуры реакционной смеси на выходе реактора.

Математическая модель химического реактора представляет собой уравнения материального баланса по компонентам выражающих закон сохранения массы (1.3) и уравнение теплового баланса, составляемого в соответствии с законом сохранения энергии (1.6).

4.1 Механизм химической реакции. Простые и сложные реакции

В химической реакции не всегда происходит непосредственное превращение исходных молекул в молекулы продуктов реакции. В большинстве случаев реакция протекает в несколько стадий. Совокупность стадий, из которых состоит химическая реакция, называется механизмом химической реакции. При изучении химических превращений в первую очередь следует устанавливать механизм химической реакции, поскольку именно он обуславливает конкретный вид кинетического уравнения, которое отражает изменение концентрации какого-либо вещества во времени в ходе химического превращения.

Наиболее простым является механизм реакции, которая протекает в одну стадию. Химические реакции, протекающие в одну стадию, т.е. осуществляющиеся путем прямого перехода реагирующих частиц в продукты реакции, называются элементарными реакциями. Каждая элементарная реакция складывается из большого числа одинаковых повторяющихся превращений исходных частиц – элементарных актов химического превращения. Реакции, в элементарном акте которых участвуют одна, две или три частицы, называется соответственно мономолекулярными, бимолекулярными и тримолекулярными. Реакции более высокой молекулярности практически не встречаются.

Для элементарных реакций стехиометрические уравнения всегда выражают истинный механизм химического превращения и, следовательно, определяют кинетические уравнения.

По количеству стехиометрических уравнений, необходимых для описания химического превращения, различают простые и сложные реакции. Если одного стехиометрического уравнения достаточно, чтобы описать протекание данной реакции, то её относят к простым реакциям. Если же для описания наблюдаемого течения реакции необходимо несколько стехиометрических и кинетических уравнений, то её относят к сложным реакциям. Сложные реакции разделяются на последовательные, параллельные и смешанные.

Приведем примеры простых элементарных реакций и соответствующие им кинетические уравнения:

$$A \xrightarrow{k} S, \quad \frac{dC_A}{d\tau} = -kC_A \tag{4.1}$$

$$A + B \xrightarrow{k} S, \quad \frac{dC_A}{d\tau} = -kC_A C_B \tag{4.2}$$

$$2A \xrightarrow{k} S, \quad \frac{dC_A}{d\tau} = -kC_A^2 \tag{4.3}$$

$$A + B + D \xrightarrow{k} S, \quad \frac{dC_A}{d\tau} = -kC_A C_B C_D \tag{4.4}$$

$$2A + B \xrightarrow{k} S, \quad \frac{dC_A}{d\tau} = -kC_A^2 C_B \tag{4.5}$$

$$nA \xrightarrow{k} S, \quad \frac{dC_A}{d\tau} = -kC_A^n \tag{4.6}$$

где k - константа скорости реакция, которая соответсвует компоненту А.

Если в простой элементарной реакции участвует одинаковое число молекул различных компонентов, то константы скорости реакции, соответствующие любому компоненту, будут иметь равные численные значения, т.е. $k_A = k_B = ... = k_S$. Если же в реакции участвует неодинаковое число молекул различных компонентов, то кинетические уравнения нельзя считать достаточно определенными и нужно указывать компонент, которому отвечает константа скорости реакции.

Для иллюстрации сказанного рассмотрим реакцию:

$$A + 2B \xrightarrow{k} 3S \tag{4.7}$$

Запишем уравнения для скорость реакции:

по компоненту *A*

$$\frac{dC_A}{d\tau} = -k_A C_A C_B^2 \tag{4.8}$$

по компоненту *B*

$$\frac{dC_B}{d\tau} = -k_B C_A C_B^2 \tag{4.9}$$

по продукту *S*

$$\frac{dC_S}{d\tau} = k_S C_A C_B^2 \tag{4.10}$$

Большинство химических реакций являются сложными, т.е. такими, которые протекают в несколько стадий и при этом могут иметь прямое и обратное направления. Составление кинетических уравнений сложных процессов основано на независимом протекании элементарных реакций. Согласно этому, величина константы скорости химической реакции не зависит от того, протекают ли в данной системе одновременно и другие элементарные реакции.

В сложном химическом процессе одно и то же вещество может принимать участие в качестве исходного или конечного компонента на различных стадиях. Поэтому при составлении кинетических уравнений сложной реакции её представляют состоящей из нескольких независимо протекающих элементарных реакций и для описания каждой из них используют кинетические закономерности элементарного акта химического превращения.

Полное изменение концентрации *i*-го компонента сложной реакции будет алгебраической суммой скоростей его образования или расходования на всех элементарных стадиях, где участвует в реакции этот компонент. Сложные реакции математически описываются системами дифференциальных кинетических уравнений, количество которых определяется числом реагирующих веществ. Приведем примеры сложных химических реакций и соответствующие им кинетические уравнения:

последовательная реакция

$$A \xrightarrow{k_1} S \xrightarrow{k_2} R$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_A}{d\tau} &= -k_1 C_A; \\ \frac{dC_S}{d\tau} &= k_1 C_A - k_2 C_S; \\ \frac{dC_R}{d\tau} &= k_2 C_S; \end{aligned} \qquad (4.11)$$

параллельная реакция

$$\begin{tikzcd} & S \\ A \arrow[ur, "k_1"] \arrow[dr, "k_2"'] & \\ & R \end{tikzcd}$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_A}{d\tau} &= -(k_1 + k_2) C_A; \\ \frac{dC_S}{d\tau} &= k_1 C_A; \\ \frac{dC_R}{d\tau} &= k_2 C_A; \end{aligned} \qquad (4.12)$$

смешанная реакция

$$\begin{tikzcd} & & R \\ A \arrow[r, "k_3"] & S \arrow[ur, "k_2"] \arrow[dr, "k_3"'] & \\ & & Q \end{tikzcd}$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_A}{d\tau} &= -k_1 C_A; \\ \frac{dC_S}{d\tau} &= k_1 C_A - k_2 C_S - k_3 C_S; \\ \frac{dC_R}{d\tau} &= k_2 C_S; \\ \frac{dC_Q}{d\tau} &= k_3 C_S; \end{aligned} \qquad (4.13)$$

обратимые реакции

$$\alpha A + \beta B \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} \gamma R + \delta S$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_A}{d\tau} &= -k_1 C_A^{\alpha} C_B^{\beta} + k_2 C_R^{\gamma} C_S^{\delta}; \\ \frac{dC_B}{d\tau} &= -k_1 C_A^{\alpha} C_B^{\beta} + k_2 C_R^{\gamma} C_S^{\delta}; \\ \frac{dC_S}{d\tau} &= k_1 C_A^{\alpha} C_B^{\beta} - k_2 C_R^{\gamma} C_S^{\delta}; \\ \frac{dC_R}{d\tau} &= k_1 C_A^{\alpha} C_B^{\beta} - k_2 C_R^{\gamma} C_S^{\delta}; \end{aligned} \qquad (4.14)$$

Здесь k_1, k_2, k_3 – константы скорости реакции соответствующих стадий.

Рассмотрим ряд математических моделей на примере следующей химической реакции

$$A + B \xrightarrow{K} C + Д \qquad (4.15)$$

Скорости химического превращения по каждому компоненту имеют вид:

$$w_A = -KC_A C_B \qquad (4.16)$$

$$w_B = w_A \qquad (4.17)$$

$$w_C = w_Д = -w_A = KC_A C_B \qquad (4.18)$$

где К – константа скорости химической реакции, которая зависит от типа молекул и температуры в соответствии с уравнением Аррениуса

$$K = K_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

где K_0 – частотный фактор, E – энергия активации.

4.2 Математическое описание изотермического реактора идеального смешения

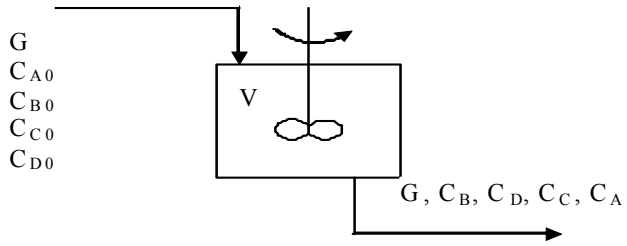

Рис. 4.1 – Схематическое изображение изотермического реактора

G – массовый расход, $\left[\frac{кг}{с}\right]$; C_i – концентрация i – го компонента на входе и выходе реактора, моль/моль. По условию температура в зоне реакции поддерживается постоянной, поэтому записываем только материальные балансы в соответствии с уравнением 1.3, знак плюс или минус учитывается при определении скорости химической реакции, например, для компонента А (реакция 4.15).

$$-M_{XP} = -KC_A C_B V m_A = w_A V m_B \qquad (4.19)$$

где m_A –молекулярный вес компонента А (M_{XP} имеет размерность $\left[\frac{кг}{с}\right]$).

В соответствии с уравнением 1.3 математическое описание данного реактора имеет вид:

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dt}\left(V\rho\frac{m_A}{m}C_A\right) = G\frac{m_A}{m}\left(C_{A0} - C_A\right) + \omega_A V m_A \\
&\frac{d}{dt}\left(V\rho\frac{m_B}{m}C_B\right) = G\frac{m_B}{m}\left(C_{B0} - C_B\right) + \omega_B V m_B \\
&\frac{d}{dt}\left(V\rho\frac{m_C}{m}C_C\right) = G\frac{m_C}{m}\left(C_{C0} - C_C\right) + \omega_C V m_C \\
&C_A + C_B + C_C + C_Д = 1
\end{aligned} \qquad (4.20)$$

4.3 Математическое описание адиабатического реактора идеального вытеснения

В адиабатическом реакторе весь тепловой эффект химической реакции идет на изменение энтальпии реакционной смеси.

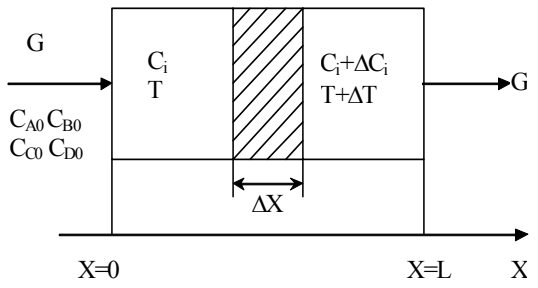

Рис. 4.2 – Схематическое изображение адиабатического реактора

В соответствии с рис. 4.2 материальный и тепловой балансы записываются, исходя из уравнений 1.3 и 1.6

Исходя из уравнений 1.3 и 1.6, получим

$$
\begin{aligned}
&S\rho\frac{\partial C_A}{\partial t} = -G\frac{\partial C_A}{\partial X} + \omega_A Sm \\
&S\rho\frac{\partial C_B}{\partial t} = -G\frac{\partial C_B}{\partial X} + \omega_B Sm \\
&S\rho\frac{\partial C_C}{\partial t} = -G\frac{\partial C_C}{\partial X} + \omega_C Sm \\
&C_A + C_B + C_C + C_Д = 1 \\
&S\rho C_P\frac{\partial T}{\partial t} = -GC_P\frac{\partial T}{\partial X} + q_C\omega_C S
\end{aligned}
\qquad (4.21)
$$

где S – сечение реактора, q_C – тепловой эффект химической реакции (в уравнении принять, что реакция протекает экзотермически) – показывает, сколько Дж тепла выделяется при образовании 1 моля продукта С (принято, что компонент С – целевой продукт).

4.4 Построение однопараметрической диффузионной модели для политропического реактора

Политропическим называется реактор, имеющий внешний отвод или подвод тепла такой, что температура в зоне реакции не поддерживается постоянной.

Пусть, как и в предыдущем случае реакция протекает экзотермически. Избыток тепла отводится с помощью охлаждающей рубашки. Хладоагент движется противотоком.

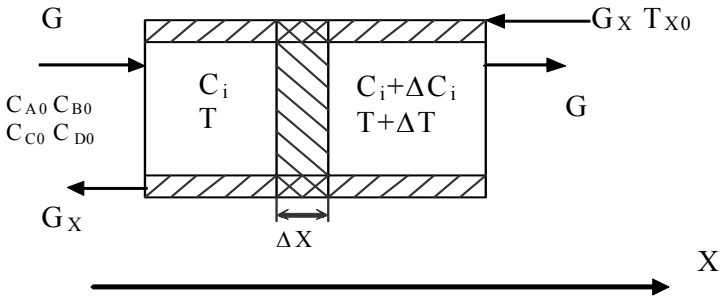

Рис. 4.3 – Схематическое изображение политропического реактора

В данном случае необходимо учесть, что концентрация изменяется в результате вынужденной конвекции, продольного перемешивания, химической реакции, а температура изменяется еще и в результате теплообмена с хладоагентом. Примем, что потерями тепла в окружающую среду модно пренебречь, тепловой емкостью стенки пренебречь нельзя, движение хладоагента описывается моделью вытеснения, плотность, теплоемкость и молекулярный вес потоков изменяется незначительно.

Для составления математической модели в данном случае используем уравнение (4.21), а также уравнения (1.27) и (2.25, 2.26 и 2.28)

$$
\begin{aligned}
&S\rho\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_X S\rho\frac{\partial^2 C_A}{\partial X^2} - G\frac{\partial C_A}{\partial X} + \omega_A Sm \\
&S\rho\frac{\partial C_B}{\partial t} = D_X S\rho\frac{\partial^2 C_B}{\partial X^2} - G\frac{\partial C_B}{\partial X} + \omega_B Sm \\
&S\rho\frac{\partial C_C}{\partial t} = D_X S\rho\frac{\partial^2 C_C}{\partial X^2} - G\frac{\partial C_C}{\partial X} + \omega_C Sm \\
&C_A + C_B + C_C + C_Д = 1 \qquad (4.22) \\
&S\rho C_P\frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_T S\frac{\partial^2 T}{\partial X^2} - GC_P\frac{\partial T}{\partial X} + q_C\omega_C S - \alpha\Pi(T - T_{CT}) \\
&S_X\rho_X C_{PX}\frac{\partial T_X}{\partial t} = -G_X C_{PX}\frac{\partial T_X}{\partial X} + \alpha_X\Pi_X(T_{CT} - T_X) \\
&S_{CT}\rho_{CT}C_{PCT}\frac{\partial T_{CT}}{\partial t} = \alpha\Pi(T - T_{CT}) - \alpha_X\Pi_X(T_{CT} - T_X)
\end{aligned}
$$

где λ_T –коэффициент продольного перемешивания по температуре, Π_P, Π_X – периметры поверхности теплоотдачи со стороны ректификационной смеси и хладоагента, F_X – сечение, в котором движется хладоагент.

4.5 Пример составления математической модели химической реакции

Химическая реакция

$$2A + B \underset{k2}{\overset{k1}{\rightleftarrows}} C \qquad (4.23)$$

проводится в трубочном аппарате. Процесс протекает с поглощением тепла, поэтому аппарат снабжен тепловой рубашкой («труба в трубе»). Гидродинамический режим представляется моделью вытеснения с байпасом, (рис. 4.4) теплоноситель движется противотоком.

Составить математическое описание процессов.

В данном случае движение теплоносителя характеризуется моделью вытеснения, как и движение реакционной смеси. Примем, что можно пренебречь изменением плотности, теплоемкости и молекулярного веса потоков в процессе. Пусть G – массовый расход реакционной смеси, $\left[\frac{кг}{с}\right]$; C_i –

концентрация компонентов, $\left[\frac{кг}{кг}\right]$; F_T – объемный расход теплоносителя, $\left[\frac{м^3}{с}\right]$; q_ρ – тепловой эффект химической реакции, $\left[\frac{Дж}{моль}\right]$. Причем, что тепловой инерционностью стенки можно пренебречь.

Математическая модель в данном случае представляется тремя уравнениями материального баланса, составленными для каждого компонента и двумя уравнениями теплового баланса для реакционной смеси и теплоносителя.

Составим уравнение материального баланса в соответствии с законом сохранения массы (1.3).

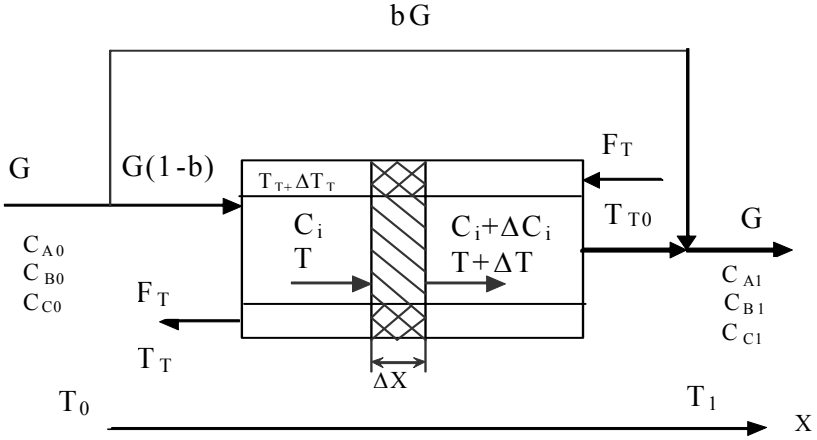

Рис. 4.4 – Схематическое изображение реактора

Для определения M_{XP} в уравнение 1.3 по каждому компоненту составим уравнения кинетики процесса, принимая, что скорость химической реакции ω измеряется в $\left[\frac{моль}{м^3 с}\right]$.

$$-M_{KP} = -KC_A C_B V m_A = w_A V m_B \tag{4.24}$$

$$\omega_A = -2K_1 C_A^2 C_B + 2K_2 C_C \tag{4.25}$$

$$\omega_B = -K_1 C_A^2 C_B + K_2 C_C \tag{4.26}$$

Отдельные слагаемые уравнения (1.3) имеют вид (рис. 4.4);

$$\Delta M = \Delta(S\Delta X \rho C_i) = S\Delta X \rho C_i \tag{4.27}$$

$$M_{вх}^{к} = GC_i(1-b) \tag{4.28}$$

$$M_{вых}^{к} = G(C_i + \Delta C_i)(1-b) \tag{4.29}$$

$$\pm M_{XP} = \omega_i S\Delta X \mu_i \tag{4.30}$$

где i – номер компонента A, B, C; S – сечение аппарата. Комбинируя соотношения, записанные выше, и переходя к пределу $\Delta X \to 0, \Delta t \to 0,$ получим следующие уравнения материального баланса:

$$S\rho \frac{\partial C_A}{\partial t} = -G(1-b)\frac{\partial C_A}{\partial X} + \left(-2K_1 C_A^2 C_B + 2K_2 C_C\right)\cdot S \cdot \mu_A \tag{4.31}$$

$$S\rho\frac{\partial C_A}{\partial t} = -G(1-b)\frac{\partial C_B}{\partial X} + \left(-K_1C_A^2C_B + K_2C_C\right)S\mu \quad (4.32)$$

$$S\rho\frac{\partial C_C}{\partial t} = -G(1-b)\frac{\partial C_C}{\partial X} + \left(K_1C_A^2C_B - K_2C_C\right)S\mu_C \quad (4.33)$$

Уравнение теплового баланса для реакционной смеси получим на основе закона сохранения тепла.

$$\Delta Q = Q_{вх}^K\Delta t - Q_{вых}^K\Delta t - Q_{XP}\Delta t + Q_T\Delta t \quad (4.34)$$

где

$$\Delta Q = \Delta(S\Delta X\rho C_P T) = S\Delta X\rho C_P\Delta T \quad (4.35)$$

$$Q_{вх}^к = GC_PT(1-b) \quad (4.36)$$

$$Q_{вых}^к = GC_P(T+\Delta T)(1-b) \quad (4.37)$$

$$Q_{XP} = q_P\left(K_1C_A^2C_B - K_2C_C\right)S\Delta X \quad (4.38)$$

$$Q_T = K_T\Pi_T\Delta X(T_T - T) \quad (4.39)$$

Π_T – периметр поверхности теплопередачи.

При определении Q_{XP} принималось, что q_P представляет собой количество тепла, которое выделяется, если образуется один моль компонента С. Поэтому $Q_{XP} = q_p \cdot \omega_C \cdot S \cdot \Delta X$

Подставляя уравнения 4.35-4.39 в уравнение 4.34 позволяет записать следующее уравнение теплового баланса.

$$S\rho C_P\frac{\partial T}{\partial t} = -G(1-b)C_P\frac{\partial T}{\partial X} - q_P\left(K_1C_A^2C_B - K_2C_C\right)S + K_T\Pi_T(T_T - T) \quad (4.40)$$

Для определения температуры теплоносителя составим тепловой баланс для потока в тепловой рубашке (рис. 4.4).

$$\Delta Q = Q_{вх}^K\Delta t - Q_{вых}^K\Delta t - Q_T\Delta t \quad (4.41)$$

где

$$\Delta Q = \Delta(S_T\Delta X\rho_T C_{PT}T_T) = S_T\Delta X\rho_T C_{PT}\Delta T_T \quad (4.42)$$

$$Q_{вх}^к = F_T\rho_T C_{PT}(T_T - \Delta T_T) \quad (4.43)$$

$$Q_{вых}^к = F_T\rho_T C_{PT}T_T \quad (4.44)$$

$$Q_T = K_T\Pi_T\Delta X(T_T - T) \quad (4.45)$$

S_T – площадь сечения, в котором движется теплоноситель.

После подстановки уравнения 4.42 - 4.45 в уравнение 4.31 получим

$$S_T\rho_T C_{PT}\frac{\partial T_T}{\partial t} = V_T\rho_T C_{PT}\frac{\partial T_T}{\partial X} - K_T\Pi_T(T_T - T) \quad (4.46)$$

При составлении окончательной системы уравнения математического описания процесса необходимо учесть байпасный поток, который изменяет температуру и концентрацию реакционной смеси на выходе реактора. Это изменение температуры и концентрации можно определить, если составить уравнение материального и теплового баланса для точки смешения.

$$(1-b)GC_A + bGC_{A0} = GC_{A1} \quad (4.47)$$

$$(1-b)GC_B + bGC_{B0} = GC_{B1} \quad (4.48)$$

$$(1-b)GC_C + bGC_{C0} = GC_{C1} \quad (4.49)$$

$$(1-b)GC_PT + bGC_PT_0 = GC_PT_1 \quad (4.50)$$

Таким образом, математическая модель заданного химического процесса имеет вид:

$$
\begin{aligned}
S\rho\frac{\partial C_A}{\partial t} &= -G(1-b)\frac{\partial C_A}{\partial X} + (-2K_1C_A^2C_B + 2K_2C_C)\cdot S\cdot\mu_A \\
S\rho\frac{\partial C_A}{\partial t} &= -G(1-b)\frac{\partial C_B}{\partial X} + (-K_1C_A^2C_B + K_2C_C)S\mu_B \\
S\rho\frac{\partial C_C}{\partial t} &= -G(1-b)\frac{\partial C_C}{\partial X} + (K_1C_A^2C_B - K_2C_C)S\mu_C \\
S\rho C_P\frac{\partial T}{\partial t} &= -G(1-b)C_P\frac{\partial T}{\partial X} - q_P(K_1C_A^2C_B - K_2C_2)S + K_T\Pi_T(T_T - T) \\
S_T\rho_TC_{PT}\frac{\partial T_T}{\partial t} &= F_T\rho_TC_{PT}\frac{\partial T_T}{\partial X} - K_T\Pi_T(T_T - T) \\
C_{A1} &= (1-b)C_A + bC_{A0} \\
C_{B1} &= (1-b)C_B + bC_{B0} \\
C_{C1} &= (1-b)C_C + bC_{C0} \\
T_1 &= (1-b)T + bT_0
\end{aligned}
\qquad (4.51)
$$

4.6 Контрольные задания по моделированию химических реакторов

Необходимо получить математическую модель заданного химического реактора для целей управления им, и передаточные функции по каналу управления.

При решении задач использовать единые, предлагаемые ниже, основные обозначения.

ω - скорость химической реакции, $\left[\frac{моль}{м^3 с}\right]$

K - константа скорости химической реакции, [-]

C - концентрация компонентов, $\left[\frac{моль}{моль}\right]$

μ - молекулярный вес

C - массовый расход, $\left[\frac{м}{с}\right]$

F - объемный расход, $\left[\frac{м^3}{с}\right]$

Задача 01.

В некоторой системе протекают одновременно две параллельные реакции, одна из которых $A + B \xrightarrow{K_1} P + D$ приводит к образованию целевого продукта, а другая $A + B \xrightarrow{K_2} S + U$ является побочной и нежелательной.

Процесс проводится в жидкой фазе так, что побочная реакция подавляется. Для этого процесс проводят адиабатически при недостатке компонента В в каскаде реакторов идеального смешения (рис.4.5). Реакция протекает экзотермически.

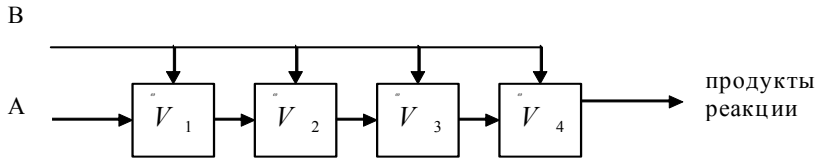

Рис.4.5 – Каскад реакторов идеального смешения

Задача 02.

Для подавления побочной реакции химический процесс, указанный в задаче 1, приводится в адиабатическом реакторе с мешалкой при большом избытке продукта А. Составить математическое описание процесса, принимая, что поведение жидкости описывается комбинированной моделью (рис.4.6).

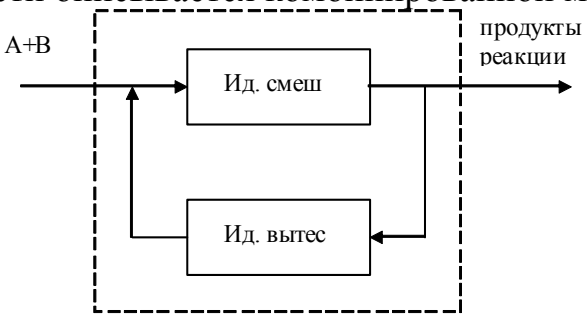

Рис. 4.6 – Схематическое изображение химической реакции

Задача 03.

В жидкой фазе одновременно протекают две параллельные экзотермические реакции

$$A + B \xrightarrow{K_1} R$$
$$A + B \xrightarrow{K_2} S$$

приводящие к получению целевого продукта *R* и побочного продукта *S*. Процесс проводится с большим избытком компонента А для подавления побочной реакции при наличии рецикла по веществу А (рис. 4.7).

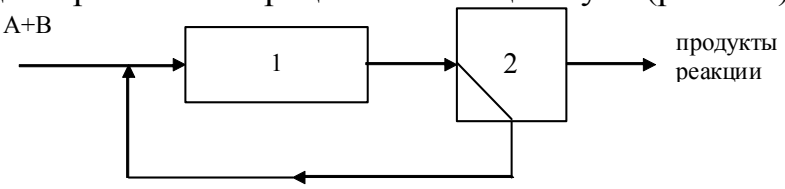

Рис. 4.7 – Схематическое изображение химической реакции

Реактор 1 описывается однопараметрической диффузионной моделью. В аппарате 2 вещество А извлекается полностью. Построить математическую модель.

Задача 04. Химическая реакция

$$2A + B \underset{K_2}{\overset{K_1}{\rightleftarrows}} 2C$$

протекает в реакторе идеального вытеснения. Реакция протекает экзотермически. Для использования тепла, выделившегося в процессе,

исходная смесь подогревается продуктами реакции в противоточном теплообменнике «труба в трубе» (рис.19).

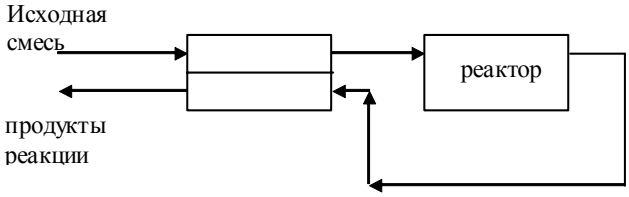

Рис.19

Построить математическую модель.

Задача 05.

Химическая реакция

$$2A \xrightarrow{K_1} R \underset{K_3}{\overset{K_2}{\rightleftarrows}} S$$

проводится в адиабатическом аппарате. Реакция протекает в жидкой фазе с выделением тепла. Гидродинамический режим течения жидкости описывается следующей моделью

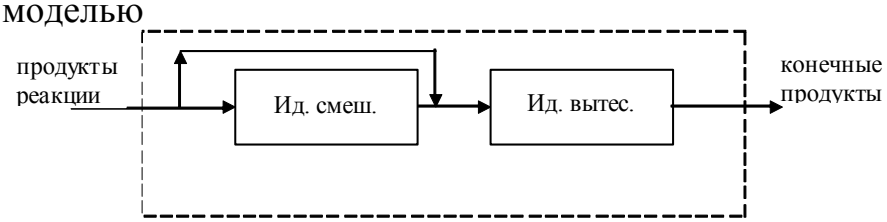

Рис. 4.6 – Схематическое изображение гидродинамического режима

Построить математическую модель процесса.

Задача 06.

Целевой продукт R получается в результате следующих химических реакций

$$A + B \underset{K_2}{\overset{K_1}{\rightleftarrows}} 2C$$

$$A + C \xrightarrow[K_3]{} R$$

Процесс проводится в трубчатом реакторе в жидкой фазе. Реакции протекают экзотермически, поэтому аппарат имеет тепловую рубашку («труба в трубе»). Составить математическое описание процесса, принимая, что движение реакционной смеси описывается однопараметрической диффузионной моделью, движение теплоносителя – моделью вытеснения.

Задача 07.

Решить задачу 06 при условии, что из отбираемого на выходе реактора раствора извлекается целевой продукт R, а оставшиеся компоненты возвращаются в рециркуляционном потоке на вход реактора. Продукт R отделяется полностью. Степень извлечения продукта R равна φ .

Задача 08.

Химическая реакция

$$2A \underset{K_2}{\overset{K_1}{\rightleftarrows}} B + C$$

проводится в проточном трубчатом аппарате с насадкой. Реакция является экзотермической. Для поддержания приемлемой скорости процесса в поток А вводится некоторое количество водяного пара, обладающего каталитическим действием для заданной реакции. Составить математическое описание процесса, принимая, что на входе аппарата происходит полное перемешивание пара и вещества А, процесс в реакторе описывается диффузионной однопараметрической моделью.

Задача 09.

Экзотермическая реакция $2A + B \xrightarrow{K_1} 3C$ проводится в проточном реакторе путем продувки газообразного компонента В через жидкость. Компоненты А и В подаются снизу аппарата. Продукты реакции отводятся сверху аппарата. Кроме жидких веществ А и С в выходном потоке присутствует избыточный газ В, который затем удаляется из раствора в сепараторе. Составить математическое описание протекающего процесса в реакторе, если движение жидкости в аппарате описывается ячеечной моделью с обратным потоком.

Задача 10.

В каскаде из трех реакторов идеального вытеснения протекает экзотермическая реакция

$$A + 2B \underset{K_2}{\overset{K_1}{\rightleftarrows}} C$$

Компонент А подается только в первый реактор, компонент В подается в каждый реактор. Для отвода избытка тепла в каждом реакторе установлен змеевик, по которому циркулирует охлаждающая вода. Построить математическую модель процесса.

Задача 11.

Химическая реакция $2A + B \xrightarrow{K_1} C$ протекает в противоточном аппарате. Снизу аппарата подается газообразный компонент В, жидкость А стекает сверху. Снизу из аппарата отбираются продукты реакции. Избыточное количество компонента В удаляется сверху аппарата. Принять, что в потоке на выходе аппарата компонент В отсутствует, процесс движения жидкости описывается ячеечной моделью с обратным потоком. Построить математическую модель процесса.

Задача 12.

Процесс получения целевого продукта R

$$A + 2B \rightleftarrows C$$

$$2C \rightleftarrows R$$

проводится в адиабатическом реакторе. Реакция протекает экзотермически. Движение потока в аппарате можно представить следующей моделью (рис. 4.11).

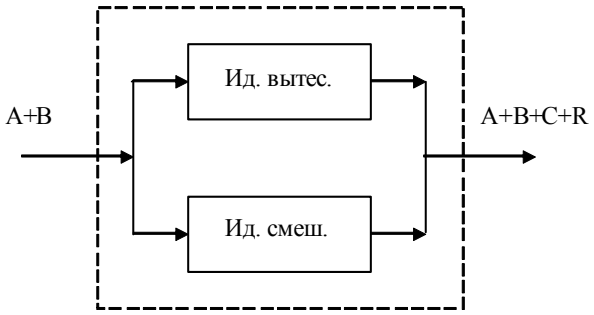

Рис. 4.11 – Схематическое изображение химической реакции

Составить математическое описание процесса.

Задача 13.

Процесс протекания экзотермической химической реакции

$$2A + B \rightleftarrows 2C$$

проводится в аппарате, гидродинамический режим в котором описывается моделью, представленной на рис. 4.12.

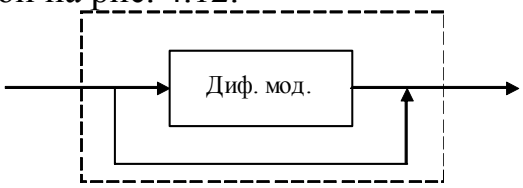

Рис. 4.12 – Схематическое изображение гидродинамического режима

Составить математическое описание процесса.

Задача 14.

Химическая реакция

$$A \rightleftarrows 2B \rightleftarrows 2C$$

проводится в реакторе, гидродинамический режим в котором описывается следующей моделью (рис. 4.13).

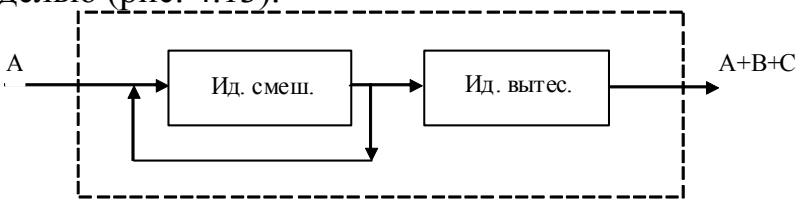

Рис. 4.13 – Схематическое изображение гидродинамического режима

Процесс протекает экзотермически. Поэтому для поддержания приемлемой скорости химического превращения производится подогрев реакционной смеси с помощью встроенного в аппарате змеевика. Построить математическую модель.

Задача 15.

В трубчатом аппарате протекают следующие экзотермические реакции

$$A + 2B \rightleftarrows R$$

$$R + B \rightarrow S$$

Аппарат снабжен тепловой рубашкой («труба в трубе»). Принимая, что движение реакционной смеси в аппарате описывается следующей моделью (рис. 4.14).

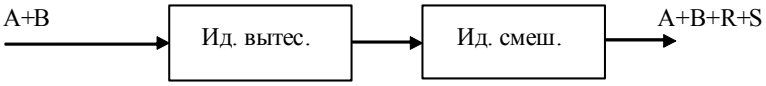

Рис. 4.14 – Схематическое изображение гидродинамического режима

Составить математическое описание заданного процесса.

Задача 16.

В адиабатическом реакторе протекает экзотермическая реакция

$$2B + A \rightleftarrows D \rightleftarrows 2C$$

Составить математическое описание процесса, принимая, что движение реакционной смеси описывается комбинированной моделью (рис. 4.15).

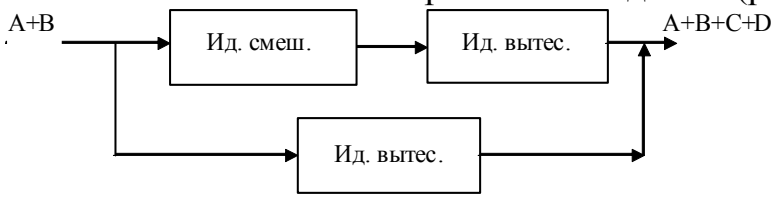

Рис. 4.15 – Схематическое изображение химической реакции

Задача 17.

Химическая реакция

$$2A + 2B \rightleftarrows 3C$$

протекает в адиабатическом реакторе. Составить математическое описание процесса, принимая, что движение потока описывается комбинированной моделью (рис. 4.16).

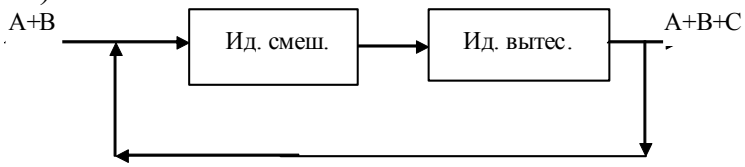

Рис. 4.16 – Схематическое изображение гидродинамического режима

Задача 18.

В цилиндрическом проточном аппарате с мешалкой проводится экзотермическая химическая реакция

$$A + 2B \rightleftarrows 2C$$

Аппарат снабжен тепловой рубашкой. Составить математическое описание процесса, если гидродинамический режим в аппарате описывается моделью смешения с байпасом (рис. 4.17)

Рис. 4.17 – Схематическое изображение гидродинамического режима

Задача 19.

Химическая реакция между двумя вязкими жидкостями А и В проводится в прямоточном колонном аппарате. Для осуществления перемешивания этих жидкостей аппарат снабжен ротором с дисками (рис. 4.18)

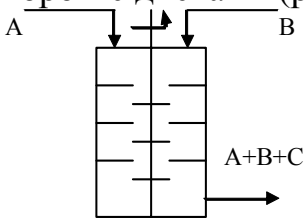

Рис. 4.18 – Схематическое изображение химической реакции

Реакция протекает по схеме $A + B \xrightarrow{K_1} 2C$

Составить математическое описание процесса, принимая, что в данном случае справедлива ячеечная модель с обратным потоком. Число ячеек равно m.

Задача 20. Решить задачу 19 при условии, что с целью увеличения степени превращения веществ А и В, полученный в реакторе продукт С извлекается, а оставшиеся компоненты А и В возвращаются на вход аппарата. Степень извлечения продукта С составляет φ.

Библиографический список

1. Кафаров В. В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. М.: Химия, 1985.–448 с.

2. Кафаров В. В., Глебов М. Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств. М.: Высшая школа, 1991,–400 с.

3. Процессы и аппараты химической технологии. Ю.А. Комисаров, Л.С. Гордеев, Д.П. Вент. М.: Химия, 2011,–1230 с.

4. Комиссаров Ю.А., Гордеев Л.С., Вент Д.П. Основы конструирования и проектирования промышленных аппаратов. М., Химия, 1997, 367 с.

5. Гордеев Л.С., Комиссаров Ю.А , Глебов М.Б., Вент Д.П. Химико-технологические процессы. Теория и эксперимент. Москва: Химия, 1999, 360 с

6. Гартман Т.Н., Клушин Д.В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов Учеб. пособие для вузов. - М. : ИКЦ «Академкнига», 2006. - 416 с.

Приложение А

Выбор варианта курсовой работы

Вариант курсовой работы выбирается студентом в соответствии с двумя последними цифрами шифра на пересечении строки и столбца таблицы 1. Номером строки является предпоследняя цифра шифра, номером столбца – последняя цифра шифра. Курсовая работа включает три задачи по темам теплообмен, массообмен, химический реактор. Номера задач представлены в клетках таблицы в порядке, соответствующем перечисленным выше темам.

Во всех задачах задан нестационарный режим.

Таблица 1 – Варианты курсовой работы

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0	1,19,8	7,11,12	15,9,20	10,7,9	12,8,18	7,19,17	15,4,6	2,15,5	20,9,7	17,11,8
1	10,13,4	16,10,5	13,6,15	14,3,10	2,12,16	11,17,19	6,16,1	13,12,1	8,5,10	1,13,9
2	14,15,3	8,2,11	18,9,18	14,6,4	10,16,3	13,7,19	3,12,20	16,14,7	19,8,18	7,11,8
3	19,14,2	6,18,3	3,17,2	3,20,20	19,3,5	17,15,6	4,12,20	13,18,6	4,1315	12,21,1
4	9,1,13	11,5,18	15,4,17	9,14,11	7,15,2	12,3,14	5,11,16	14,5,17	10,14,6	5,20,12
5	11,16,2	19,20,7	3,10,4	10,18,5	8,13,3	5,18,19	18,4,13	16,2,14	4,16,14	18,1,11
6	12,19,3	6,17,4	8,20,8	13,17,4	5,19,1	3,8,2	6,7,17	16,1,18	15,6,13	2,10,12
7	20,10,20	11,9,12	3,18,16	4,17,1	14,16,9	6,15,17	1,14,16	12,13,15	20,12,9	8,11,10
8	11,20,5	9,1,19	11,2,7	15,3,11	2,4,16	9,513	16,6,15	7,7,14	1,8,12	17,9,10
9	20,10,6	19,9,8	18,8,7	2,7,9	5,6,1	18,5,14	17,4,15	17,3,10	4,2,13	7,1,11