



ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ



МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ
ЛЕКЦИЯ №15

«Аналитический метод построения моделей физических
процессов. Типовые модели.»

Отделение ядерно-топливного цикла

Лектор:
Зав. каф. - руководитель ОЯТЦ ИЯТШ
Горюнов А.Г.

2020

План лекции

15.1. Аналитический метод построения моделей физических процессов.

15.2. Типовые модели гидродинамики, тепло- и массопереноса.

Литература к лекции:

Гумеров А. М. Математическое моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие / А. М. Гумеров. — 2-е изд., перераб. — Санкт-Петербург : Лань, 2014. — 176 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/41014> (дата обращения: 03.03.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

Информация по курсу:

<https://portal.tpu.ru/SHARED/a/ALEX1479/study/Matmod/Tab>

15.1 Аналитический метод построения моделей физических процессов

15.1.1 Общие принципы построения

В общем случае при моделировании физико-химических процессов необходимо определить потоки количества движения, энергии и массы между отдельными частями объекта моделирования и окружающей средой.

Уравнения переноса **количества движения, энергии и массы** записываются следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega_x}{\partial t} &= - \left(\omega_x \frac{\partial \omega_x}{\partial x} + \omega_y \frac{\partial \omega_x}{\partial y} + \omega_z \frac{\partial \omega_x}{\partial z} \right) + \nu \nabla^2 \omega_x + \left(X - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= - \left(\omega_x \frac{\partial T}{\partial x} + \omega_y \frac{\partial T}{\partial y} + \omega_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) + a \nabla^2 T + \frac{q_r}{\rho \cdot C_p} \\ \frac{\partial C_i}{\partial t} &= - \left(\omega_x \frac{\partial C_i}{\partial x} + \omega_y \frac{\partial C_i}{\partial y} + \omega_z \frac{\partial C_i}{\partial z} \right) + D_i \nabla^2 C_i + r_{iv} \end{aligned} \quad (15.1)$$

где ω_x — количество движения вдоль оси x ; ν — проекция массовой силы, отнесенной к единице массы жидкости, на ось x ; ∇^2 — оператор Лапласа; T — температура; a — коэффициент теплопроводности; ρ — плотность; C_p — теплоемкость; C_i — концентрация; D_i — коэффициент продольного перемешивания; r_{iv} — скорость химической реакции, X — внешний источник количества движения, q_r — внешний источник тепла.

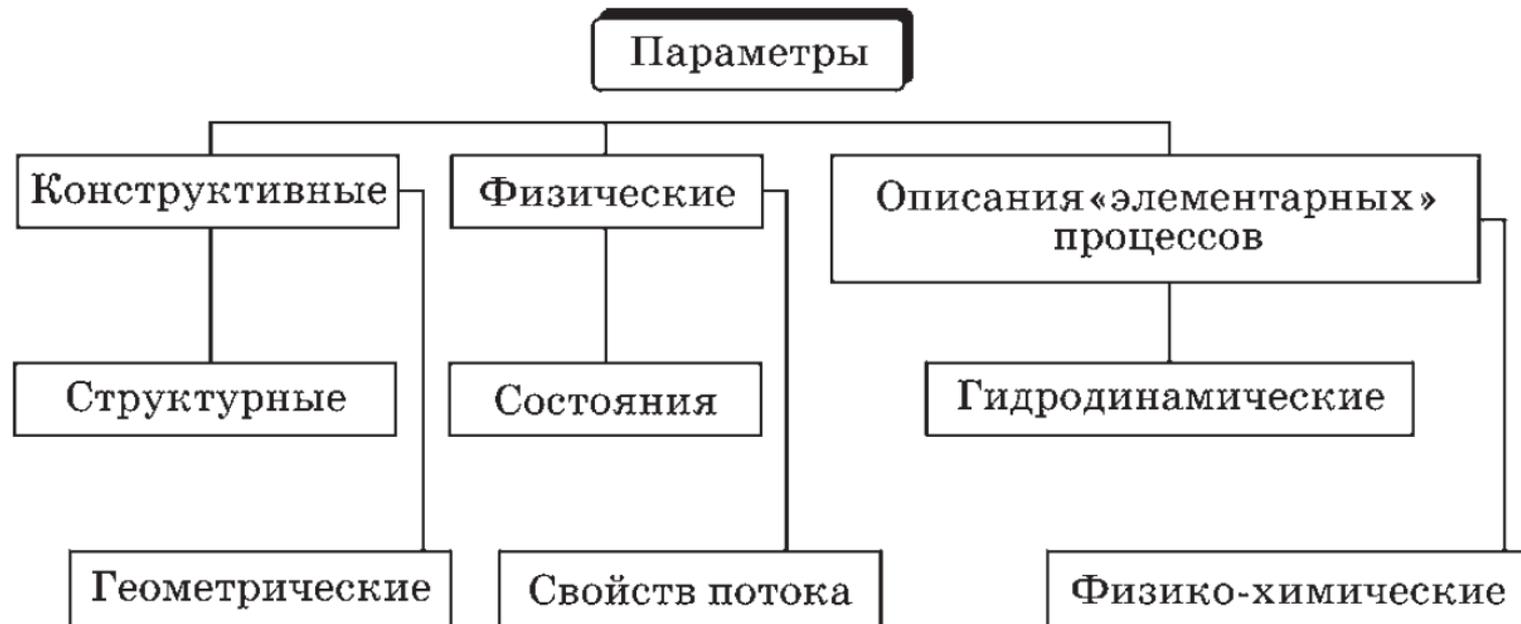
15.1.1 Общие принципы построения

Уравнения (15.1) описывают, соответственно:

- ламинарное движение вязкой жидкости (уравнение Навье — Стокса),
- распространение теплоты в движущейся среде (уравнение Фурье — Кирхгофа),
- перенос произвольного компонента в движущейся среде.

15.1.2 Классификация параметров

Моделирование сложных физико-химических процессов требует принятия системы допущений. Для решения этой задачи требуется выполнить классификацию параметров модели.



15.1.2 Классификация параметров

Конструктивные параметры. К этому классу относятся структурные и геометрические параметры, отражающие конструктивное оформление моделируемого объекта.

Структурные параметры — численные характеристики аппаратного оформления моделируемого объекта. Например, объем реактора, свободное сечение аппарата с насадкой, удельная поверхность катализатора, число тарелок в ректификационной колонне и т. п.

Физические параметры. К этому классу относятся параметры, описывающие физические характеристики потоков веществ моделируемого объекта. Данный класс параметров включает следующие группы:

Параметры состояния потоков — значения потоков веществ и характеристики параметров этих потоков, от которых зависит движущая сила «элементарных» процессов. Например, состав и температура.

Параметры свойств потоков — количественные характеристики параметров потоков, от которых непосредственно не зависит движущая сила «элементарных» процессов. Например, теплоемкость, вязкость, плотность и другие параметры этой группы могут зависеть от параметров состояния потока.

Параметры «элементарных» процессов — гидродинамические и физико-химические параметры, используемые для описания «элементарных» процессов, например, движения потоков фаз, тепло- и массопередачи, химических реакций.

15.1.2 Классификация параметров

Гидродинамические параметры — характеристики движения потоков веществ в модели, обусловленные видом движения потока. Например, коэффициент продольного смешения вещества в потоке, число ячеек смешения в ячейечной модели и т. п.

Физико-химические параметры — характеристики процессов тепло- и массопередачи и химических реакций. Например, коэффициенты тепло- и массопередачи, константы скорости химических реакций и т. п.

15.1.3 Блочный принцип построения математической модели физико-химического процесса

В состав математической модели физико-химического процесса могут входить следующие группы уравнений:

1. Уравнения баланса масс и энергии, записанные с учетом гидродинамических структур движения потоков (данная группа уравнений характеризует распределение в потоках температуры, составов и связанных с ними свойств, например, плотности, вязкости, теплоемкости и т. д.).
2. Уравнения элементарных процессов химических реакций: тепло- и массообмена, фазовых превращений и т. п.
3. Теоретические, полуэмпирические соотношения между различными параметрами процесса, например, зависимость коэффициента массопередачи от скоростей потоков фаз, зависимость теплоемкости раствора от состава, равновесные соотношения и т. д.
4. Ограничения на параметры процесса, например, при моделировании процессов с участием многокомпонентных смесей должно выполняться следующее условие: сумма относительных концентраций всех компонентов равна единице, а концентрация любого компонента может быть только положительной и заключена между 0 и 1.

15.1.4 Классификация уравнений модели

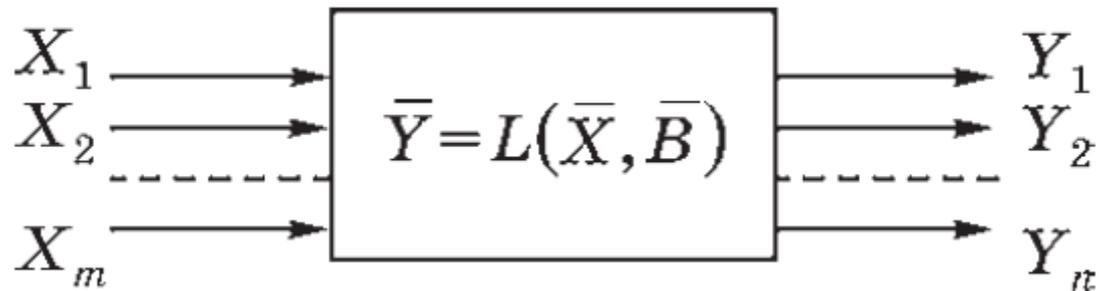
Перечисленные уравнения в 15.1.3 делятся на следующие типы:

- конечные алгебраические или трансцендентные уравнения,
- обыкновенные дифференциальные уравнения,
- дифференциальные уравнения в частных производных,
- ...

15.1.5 Этапы построения модели



15.1.5 Этапы построения модели



$X = (X_1, X_2, \dots, X_m)$ — вектор входных переменных,

$Y = (Y_1, Y_2, \dots, Y_n)$ — вектор выходных переменных,

B — вектор параметров,

L — некоторый оператор, который определяет структуру математической модели.

15.1.5 Этапы построения модели

1. Выяснение структуры потоков и представление ее некой схемой, близкой к установленной реальной картине переноса вещества и тепла.
2. Выделение в этой схеме объема, в котором можно принять параметры, характеризующие состояние фазы (температура, концентрация, теплосодержание), постоянными.
3. Определение процессов в этом объеме и всех входящих потоков.
4. Составление уравнений материального и теплового балансов.

15.2 Типовые модели гидродинамики, тепло- и массопереноса.

15.2.1 Типовая модель гидродинамики

Модели гидродинамики записываются в виде дифференциальных уравнений, выражающих связь между наиболее характерными переменными процесса. Универсальным видом математической модели гидродинамики является уравнение, характеризующее изменение концентрации вещества в потоке, обусловленное только движением этого потока (скорость химической принимается равной нулю):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U_x \frac{\partial C}{\partial x} - U_y \frac{\partial C}{\partial y} - U_z \frac{\partial C}{\partial z} + D \cdot \nabla^2 C \quad (15.2)$$

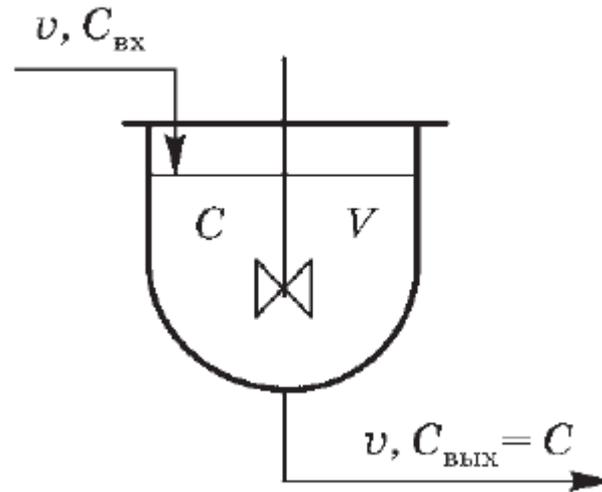
15.2.1 Типовая модель гидродинамики

При построении модели гидродинамики следует учитывать, что модель должна:

- 1) отражать физическую сущность реального потока и в то же время иметь достаточно простое математическое описание;
- 2) позволять определять параметры модели расчетным или экспериментальным способом;
- 3) быть удобной для использования при расчетах конкретных процессов.

15.2.2 Модель идеального перемешивания

Согласно этой модели принимается, что поступающий в аппарат поток мгновенно распределяется по всему объему вследствие полного перемешивания частиц потока.



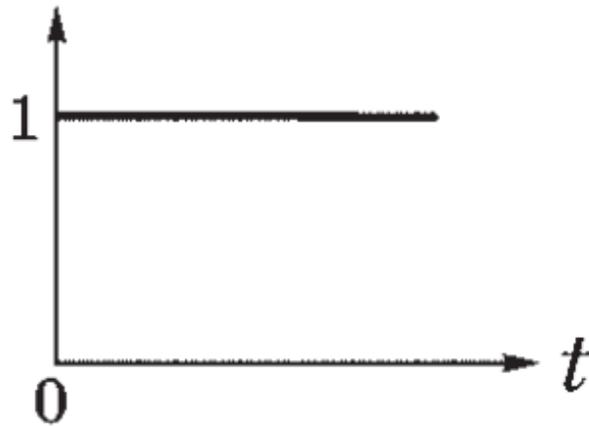
Концентрация распределенного вещества во всех точках зоны идеального перемешивания и в потоке на выходе одинакова.

$$\frac{dC}{dt} = \frac{v}{V}(C_{\text{вх}} - C) \quad (15.3)$$

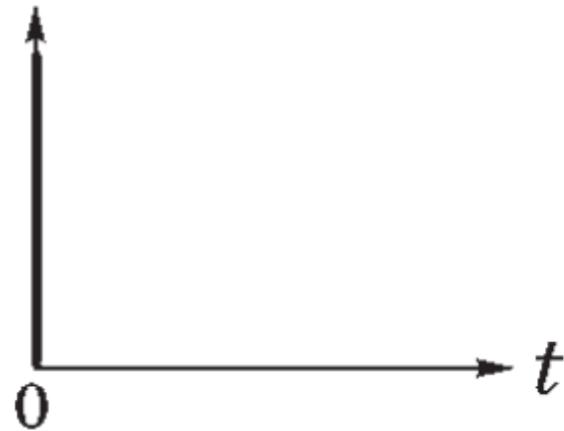
$C_{\text{вх}}$, $C_{\text{вых}}$, C — концентрация вещества в потоке соответственно на входе, выходе и в любой точке объеме аппарата, моль/м³; V — объем зоны идеального перемешивания, м³; v — объемная скорость потока, поступающего в зону идеального перемешивания и выходящего из него, м³/с; t — время, с.

15.2.2 Модель идеального перемешивания

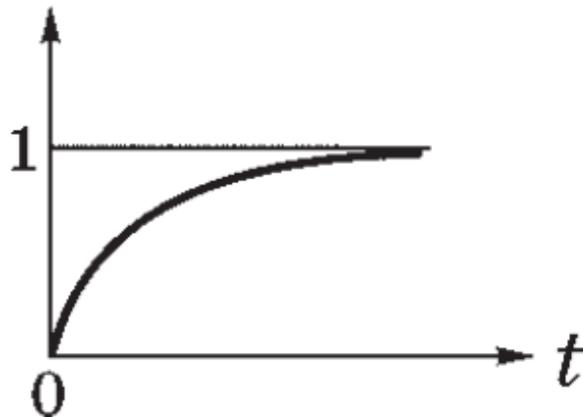
$$C_{\text{ВХ}}(t) = 1(t)$$



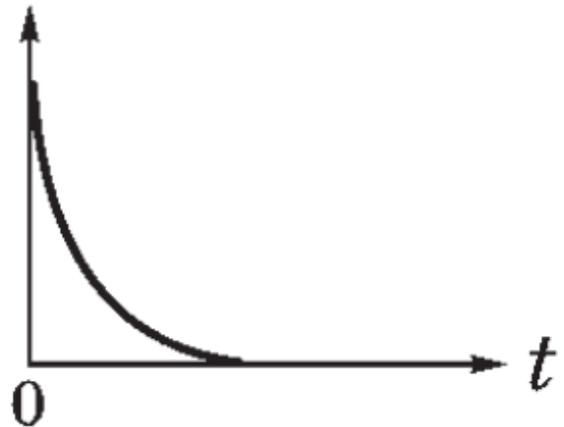
$$C_{\text{ВХ}}(t) = \delta(t)$$



$$F(t) = C_{\text{ВЫХ}}(t)$$



$$\varphi(t) = C_{\text{ВЫХ}}(t)$$



15.2.2 Модель идеального перемешивания (пример)



В стационарном режиме – закон сохранения массы:

$$v_1 \cdot C_1 + v_2 \cdot C_2 - v_3 \cdot C_3 = 0 \quad (15.4)$$

В динамическом режиме – закон сохранения массы (m):

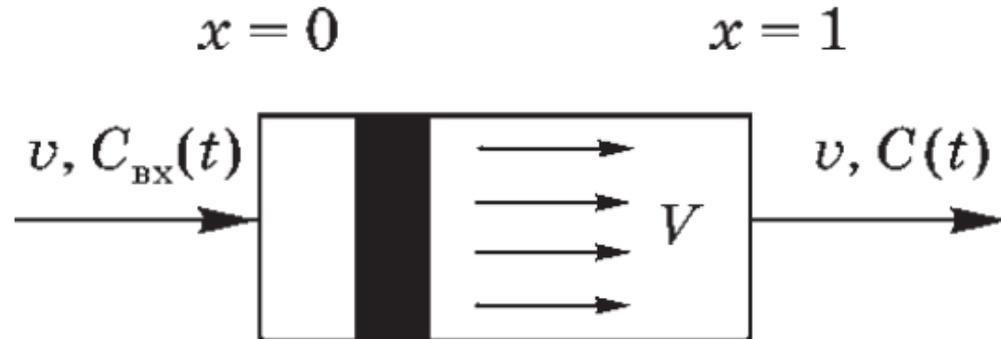
$$\frac{dm}{dt} = v_1 \cdot C_1 + v_2 \cdot C_2 - v_3 \cdot C_3 \quad (15.5)$$

Если $v_3 = \text{const}$:

$$v_3 \frac{dC_3}{dt} = v_1 \cdot C_1 + v_2 \cdot C_2 - v_3 \cdot C_3 \quad (15.6)$$

15.2.3 Модель идеального вытеснения

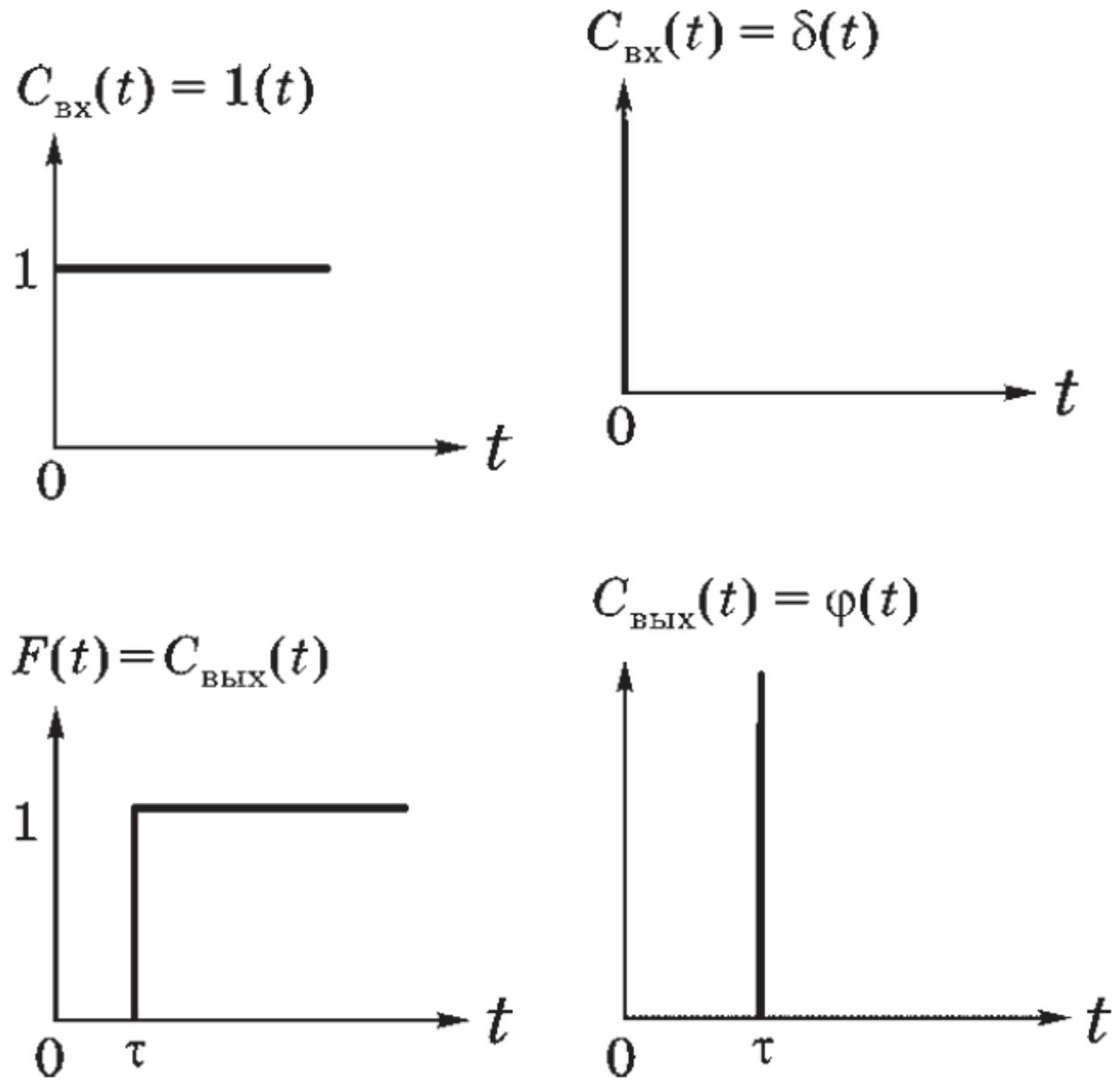
В соответствии с моделью идеального вытеснения принимается поршневое движение потока без перемешивания вдоль потока, при равномерном распределении концентрации вещества в направлении, перпендикулярном движению. При этом время пребывания всех элементов потока в зоне идеального вытеснения одинаково и равно отношению объема зоны вытеснения к объемному расходу жидкости $\tau = V / v$.



$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U \frac{\partial C}{\partial x} \quad (15.7)$$

где $U = v / S$ — средняя линейная скорость потока, м/с; S — площадь сечения зоны идеального вытеснения, м².

15.2.3 Модель идеального вытеснения



15.2.4 Однопараметрическая диффузионная модель

Диффузионная модель получила широкое распространение при оценке структуры реальных потоков в аппаратах, в которых происходит продольное и продольно-радиальное перемешивание (например, поток в слоях насадки колонных аппаратов).

При разработке однопараметрической диффузионной модели (ОДМ) принимают следующие допущения:

- изменение концентрации вещества является непрерывной функцией координат (расстояние по длине аппарата);
- концентрация вещества в каждом сечении постоянна;
- объемная скорость потока v и коэффициент продольного перемешивания D_L не изменяются по длине и сечению потока.

Уравнение ОДМ записывается в следующем виде:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - U \frac{\partial C}{\partial x}, \quad (15.8)$$

где D_L — коэффициент продольного перемешивания, м/с;
 U — линейная скорость потока, м/с.

15.2.5 Неустановившейся во времени конвективная диффузия с переходом вещества из одной фазы в другую

Уравнения неустановившейся во времени конвективной диффузии с переходом вещества из одной фазы в другую имеют вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial X}{\partial t} = D_1 \cdot \frac{\partial^2 X}{\partial h^2} - U_1 \cdot \frac{\partial X}{\partial h} - W \\ \frac{\partial Y}{\partial t} = D_2 \cdot \frac{\partial^2 Y}{\partial h^2} + U_2 \cdot \frac{\partial Y}{\partial h} + W \end{cases} \quad (15.9)$$

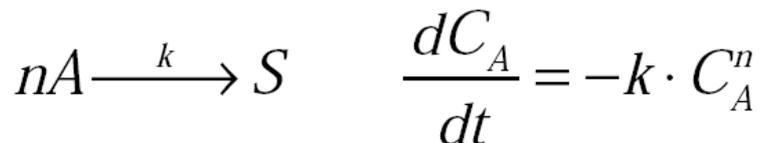
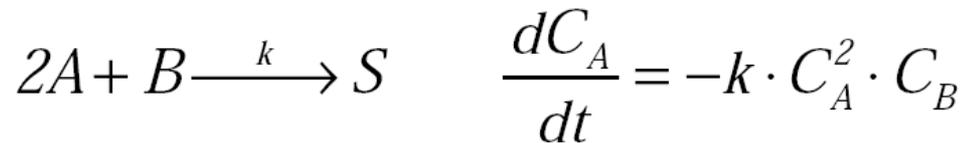
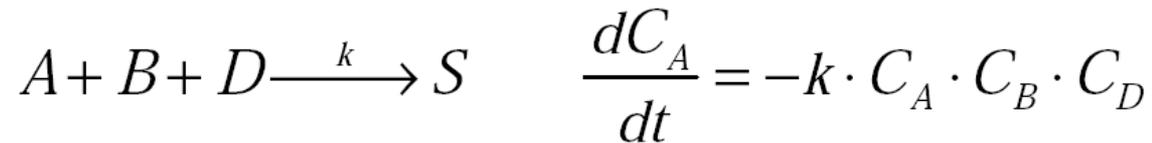
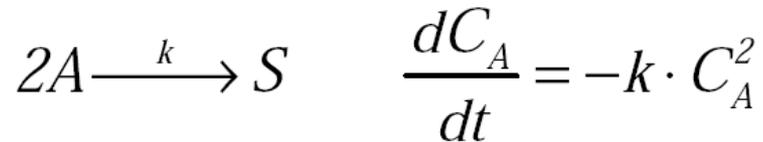
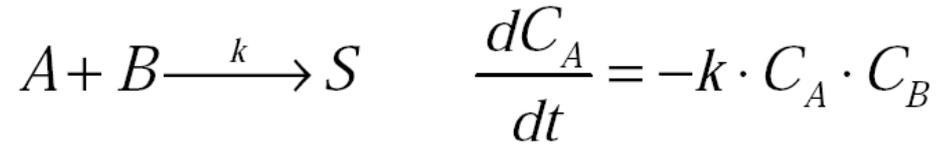
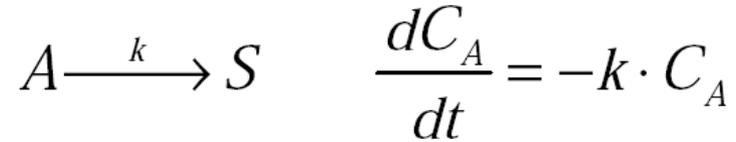
где U_1, U_2 – скорость течения 1-ой и 2-ой фаз, X, Y – концентрации компонент в 1-ой и 2-ой фазах, D_1, D_2 – коэффициенты диффузии в соответствующих фазах,

$$W = \beta_1 \cdot \alpha \cdot (X - X^*) = \beta_2 \cdot \alpha \cdot (Y^* - Y), \quad (15.10)$$

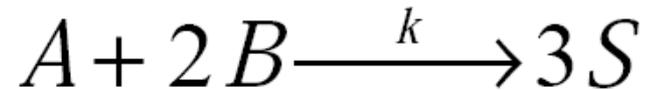
β_1, β_2 – коэффициенты массопередачи от одной фазы к другой (от 1-ой ко 2-ой),
 α – поверхность соприкосновения двух фаз на единицу объема,
 X^*, Y^* – равновесные значения концентрации в 1-ой и 2-ой фазах.

Уравнения диффузии (15.10) – уравнения в частных производных в первом приближении описывают процессы в противоточных аппаратах (колонны, колонные экстракторы и т.д.).

15.2.6 Кинетика химических реакций



15.2.6 Кинетика химических реакций



для компонента A

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_A \cdot C_A \cdot C_B^2;$$

для компонента B

$$\frac{dC_B}{dt} = -k_B \cdot C_A \cdot C_B^2;$$

для компонента S

$$\frac{dC_S}{dt} = +k_S \cdot C_A \cdot C_B^2.$$

15.2.6 Кинетика химических реакций

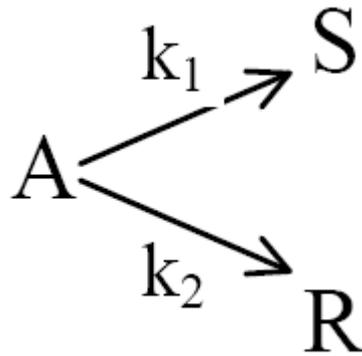


$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 \cdot C_A$$

$$\frac{dC_S}{dt} = k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_S$$

$$\frac{dC_R}{dt} = k_2 \cdot C_S;$$

15.2.6 Кинетика химических реакций

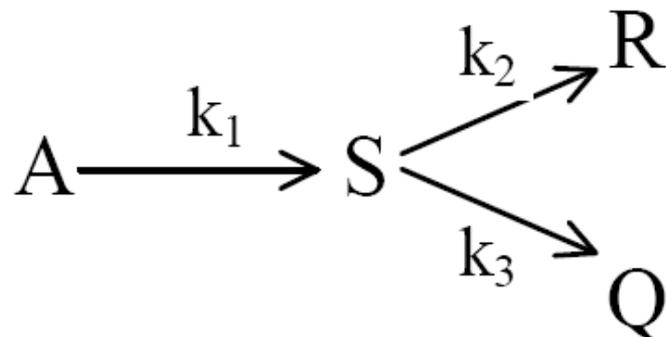


$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_A = -(k_1 + k_2) \cdot C_A$$

$$\frac{dC_S}{dt} = k_1 \cdot C_A$$

$$\frac{dC_R}{dt} = k_2 \cdot C_A;$$

15.2.6 Кинетика химических реакций



$$\frac{d C_A}{d t} = - k_1 \cdot C_A$$

$$\frac{d C_S}{d t} = k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_S - k_3 \cdot C_S$$

$$\frac{d C_R}{d t} = k_2 \cdot C_S$$

$$\frac{d C_Q}{d t} = k_3 \cdot C_S$$

15.2.7 Уравнение теплопроводности

Уравнение теплопроводности часто записывают в краткой форме (лекция №10):

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a^2 \nabla^2 T + \frac{Q_9}{c \cdot \rho}, \quad (15.11)$$

где $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ — оператор Лапласа.

Начальные условия:

$$T(x, y, z, 0) = T|_{t=0} = \varphi_0(x, y, z), \quad (15.12)$$

где $\varphi_0(x, y, z)$ — начальное распределение температуры во всех точках тела при $t = 0$.

Граничные условия:

$$T(x, y, z, t)_{\text{на } S} = f(x, y, z, t), \quad (15.13)$$

где $f(x, y, z, t)$ — функция, определяющая закон распределения температуры во всех точках на поверхности S , ограничивающей тело, в любой момент времени t .