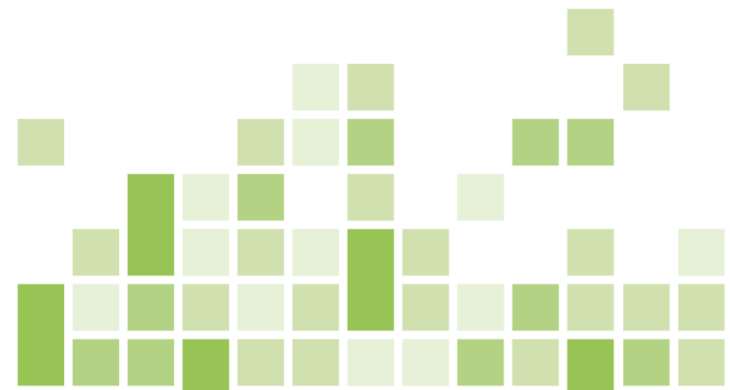
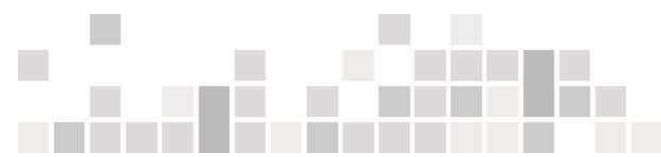




ПРОЦЕССЫ И АППАРАТЫ ХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

Лекция 2. Типовые модели структуры потоков в аппаратах непрерывного действия

**научный сотрудник, к.т.н.
Белинская Наталия Сергеевна**



Типовые модели структуры потоков в аппаратах непрерывного действия

Модель идеального смешения. Вывод дифференциального уравнения модели. Вид функции отклика модели на стандартные возмущения. Частотные характеристики модели. Условия реализуемости принятых допущений в приложении к аппаратам химической технологии. Модель идеального вытеснения. Вывод дифференциального уравнения модели. Передаточная функция. Вид функции отклика и частотные характеристики модели. Сравнительная оценка идеальных моделей. Энтропийная оценка меры упорядоченности движения частиц. Каноническое и микроканоническое распределение Гиббса. Фактор распределения как выражение второго закона термодинамики. Учет рассеяния по времени пребывания. Ячеечная модель. Свойство детектируемости. Частотные характеристики и вид функции отклика. Вывод уравнения предельного перехода к модели идеального вытеснения. Диффузионная модель. Комбинированные (многопараметрические) модели. Байпасирование. Последовательное и параллельное включение ячеек идеального смешения и вытеснения. Модель с застойной зоной.

Математическое описание гидродинамической структуры потоков

Химико-технологические процессы обычно протекают в движущихся потоках, гидродинамические закономерности перемещения которых оказывают существенное влияние на эффективность химических производств, поэтому при составлении математических моделей химико-технологических процессов важное значение приобретает описание движения потоков веществ.

Движущиеся потоки могут быть как одно- так и многофазными и обычно имеют сложную структуру.

В гидродинамике существует целый ряд уравнений, с помощью которых можно описать движение среды (например, уравнение Навье-Стокса, уравнение неразрывности потока и др.).

Математическое описание гидродинамической структуры потоков

Применение классических законов гидродинамики к химико-технологическим процессам оказывается затруднительным из-за сложности уравнений гидродинамики реальных потоков, поэтому на практике при составлении математических моделей гидродинамических потоков обычно используют более простые приближенные представления об их внутренней структуре.

Структура движущейся технологической среды характеризуется степенью перемешивания частиц потока, которая определяет поле концентраций и градиенты температур.

Это и послужило предпосылкой для установления по признаку перемешивания некоторых типовых моделей движущихся потоков.

Математическое описание гидродинамической структуры потоков

Принципиально можно построить гидродинамические модели потоков различной сложности, наиболее отвечающие применяемым конструкциям технологического оборудования. Обычно при составлении математических моделей ХТП используют приближенные (модельные) представления о структуре движущихся потоков отдельных фаз.

Это следующие гидродинамические модели:

- идеального смешения;
- идеального вытеснения;
- диффузионные (одно- и двухпараметрические) модели;
- ячеечные модели;
- комбинированные модели.

Математическое описание гидродинамической структуры потоков

При построении модели структуры потока должны учитываться следующие требования:

- модель должна отражать физическую сущность реального потока и при этом должна иметь достаточно простое математическое описание;
- должна давать возможность определять ее параметры расчетным или экспериментальным способом;
- должна быть удобной для использования при расчетах конкретного химико-технологического процесса.



По данной модели поток представляется в виде непрерывной среды, которая поступает в аппарат и мгновенно распределяется по всему объему аппарата вследствие полного (идеального) перемешивания частиц потока, при этом концентрация и температура остаются постоянными во всех точках объема данного аппарата и на выходе из него.

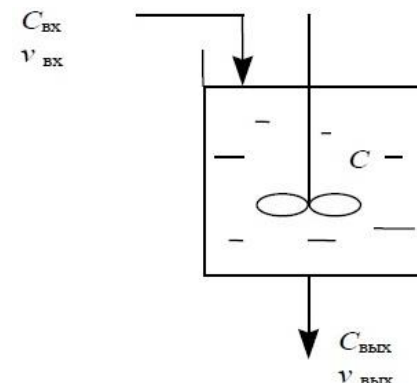
Модель идеального смешения

$C_{\text{вх}} = C_0$, $v_{\text{вх}} = v_0$ при постоянном объеме ($V = \text{const}$).

Уравнение материального баланса потоков на входе и выходе из аппарата:

$$I_{\text{вх}} = vC_{\text{вх}}, I_{\text{вых}} = vC_{\text{вых}},$$

где I – поток вещества [моль/с], v – объемный расход потока, м³/с; $C_{\text{вх}}$, $C_{\text{вых}}$, C – концентрация вещества в потоке на входе в аппарат, выходе из него и в любой точке объема аппарата соответственно, моль/м³; V – объем, м³.



В установившемся режиме $I_{\text{вх}} = I_{\text{вых}}$. Если на входе в аппарат произошло изменение концентрации (возмущение), то $I_{\text{вх}} \neq I_{\text{вых}}$ и в аппарате произойдет накопление вещества. Предположим, что рассматриваемое изменение в аппарате произошло за очень маленький промежуток времени $\Delta t \rightarrow dt$, за который в аппарате произойдет накопление массы: $\Delta M \rightarrow dM$.

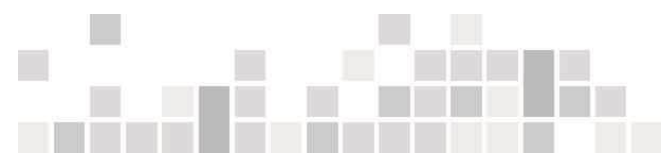
Разделив обе части уравнения на объем аппарата (V), получим

$$\frac{d\left(\frac{M}{V}\right)}{dt} = \frac{v}{V} \cdot (C_0 - C) \quad \frac{M}{V} = C \quad \frac{dC}{dt} = \frac{v}{V} \cdot (C_0 - C) \quad (1) - \text{изменение концентрации в аппарате идеального смешения}$$

Учитывая, что время контакта равно $\tau = V / v$, получим **модель идеального смешения**:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{1}{\tau} \cdot (C_0 - C) \quad (2)$$

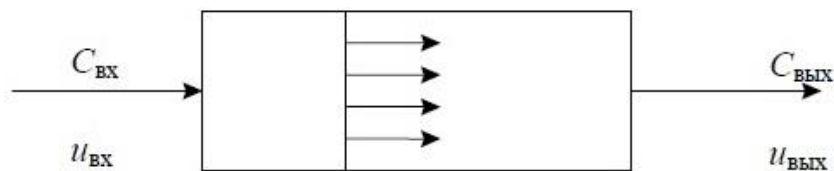
Начальные условия: при $t = 0$ $C(0) = C_0$.



Гидродинамическая модель идеального смешения является моделью с сосредоточенными параметрами, т. к. переменная C изменяется только во времени.

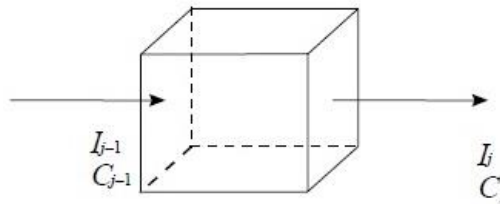
Модель идеального смешения обычно используют при описании аппаратов, в которых обеспечивается интенсивное перемешивание сред. Это аппараты небольших размеров с соизмеримыми высотой и диаметром. На практике – это аппараты с мешалками барботажного типа либо аппараты с очень высокой скоростью циркуляции потока.

Модель идеального вытеснения – это модель с идеализированной структурой потока, в котором принимается поршневое течение без перемешивания вдоль потока при равномерном распределении концентраций вещества в направлении, перпендикулярном движению потока:



Здесь $u_{ВХ}$, $u_{ВЫХ}$ – линейная скорость потока на входе и выходе из аппарата, м/с.

Выделим некоторую элементарную ячейку:



Поток на входе в $j-1$ -е сечение равен $I_{\text{вх}} = u \cdot S \cdot C_{j-1}$,
где S – площадь поперечного сечения аппарата, м^2 .

Поток на выходе из j -го сечения $I_{\text{вых}} = u \cdot S \cdot C_j$.

В установившемся режиме $I_{\text{вх}} = I_{\text{вых}}$.

При изменении концентрации на входе в аппарат $I_{\text{вх}} \neq I_{\text{вых}}$.

Модель идеального вытеснения

В системе за некоторый промежуток времени Δt происходит накопление вещества (dM). Считаем, что при $\Delta t \rightarrow 0$ $\Delta V \rightarrow dV$, $\Delta t \rightarrow dt$.

$$dM = [I_{ex}(t) - I_{vbx}(t)] dt = [I_{j-1}(t) - I_j(t)] \cdot dt$$

$$dM = -[I_j(t) - I_{j-1}(t)] dt$$

$$dM = -[uSC_j(t) - uSC_{j-1}(t)] \cdot dt$$

$$\frac{dM}{dt} = -uSdC \quad (3)$$

Разделив обе части уравнения (3) на dV , получим

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -uS \frac{\partial C}{\partial V}$$

Таким образом, уравнение гидродинамической модели идеального вытеснения будет иметь вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u \cdot \frac{\partial C}{\partial l} \quad (4)$$

где u – линейная скорость потока, м/с; l – длина аппарата, м; t – время, с.

Начальные условия: при $t = 0$ $C(0, l) = C_0$; **граничные условия:** при $l = 0$ $C(t, 0) = C_0$.



Модель идеального вытеснения – это модель с распределенными параметрами, т. к. концентрация вещества в потоке изменяется во времени и по длине аппарата.

На практике встречается достаточно большое многообразие аппаратов, которые можно описать моделью идеального вытеснения: химические реакторы (трубчатого, полочного типа и др.), массообменные и теплообменные аппараты.

Известно, что если отношение длины (высоты) аппарата к его диаметру ≥ 20 , то в таком аппарате возможна реализация режима идеального вытеснения.

Диффузионные модели применяют при описании реальных потоков в аппаратах, в которых происходит продольное и радиальное перемешивание веществ.

Природа возникновения продольного и радиального перемешивания весьма сложна.

Предположим, что перемешивание в потоке идеального вытеснения (конвективный поток) возникает за счет молекулярной диффузии.

Тогда в соответствии с блочным принципом построения математических моделей уравнение

однопараметрической диффузионной гидродинамической модели примет следующий вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u \frac{\partial C}{\partial l} + D_L \frac{\partial^2 C}{\partial l^2} \quad (5)$$

где D_L – коэффициент диффузии в продольном направлении, $\text{м}^2/\text{с}$.

Начальные и граничные условия: при $t = 0$ $C(0, l) = C_0$; при $l = 0$ $dC/dt = 0$.

Однопараметрическая модель учитывает диффузию только в продольном направлении.

Диффузионные модели применяют при описании реальных потоков в аппаратах, в которых происходит продольное и радиальное перемешивание веществ.

Природа возникновения продольного и радиального перемешивания весьма сложна.

Предположим, что перемешивание в потоке идеального вытеснения (конвективный поток) возникает за счет молекулярной диффузии.

Если в потоке одновременно происходит продольное и радиальное перемешивание веществ, то математическое описание гидродинамики потока можно представить **двухпараметрической диффузионной моделью**:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U \frac{\partial C}{\partial l} + D_L \frac{\partial^2 C}{\partial l^2} + D_R \left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right) \quad (6)$$

где R_D – коэффициент диффузии в продольном направлении, $\text{м}^2/\text{с}$; r – текущий радиус, м ; R – радиус аппарата, м .

Для оценки степени влияния диффузии можно использовать **диффузионный критерий Пекле**

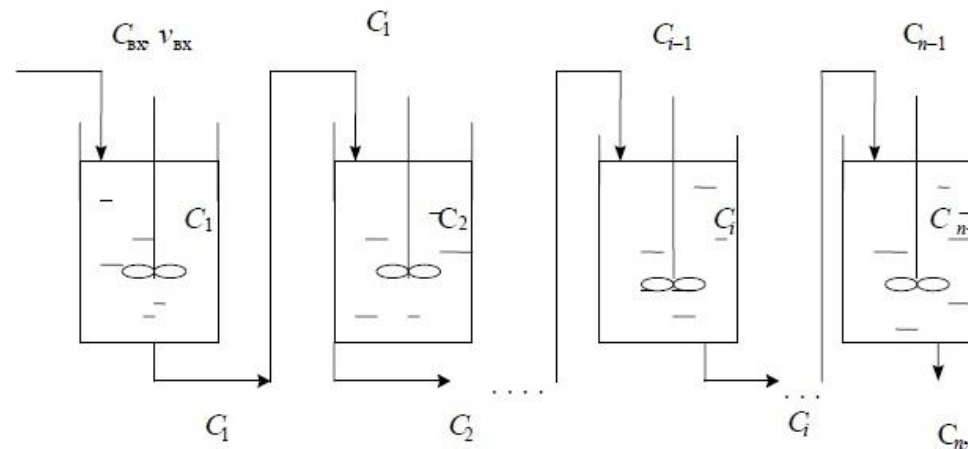
$$Pe_D = \frac{U \cdot l}{D_L}$$

При $Pe_D > 200$ движущийся поток можно считать потоком идеального вытеснения.

Диффузионные модели достаточно точно отражают структуру потоков во многих реальных аппаратах: пленочных, распылительных, барботажных колоннах, экстракторах и др.

Ячеечные гидродинамические модели

Физическая сущность ячейочной модели заключается в том, что материальный поток может быть представлен несколькими последовательно соединенными ячейками, при этом допускается, что в каждой ячейке поток имеет структуру идеального смешения, а между ячейками перемешивание отсутствует.



Пусть V_i – объем i -й ячейки, m^3 . Примем $V_1 = V_2 = V_3 = \dots = V_n$.

Поскольку в каждой ячейке реализуется режим идеального смешения, то для любой ячейки справедливо уравнение модели идеального смешения:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_1}{dt} = \frac{1}{\tau_1} \cdot (C_0 - C_1) \\ \cdot \\ \cdot \\ \frac{dC_i}{dt} = \frac{1}{\tau_i} \cdot (C_{i-1} - C_i) \\ \cdot \\ \cdot \\ \frac{dC_n}{dt} = \frac{1}{\tau_n} \cdot (C_{n-1} - C_n) \end{array} \right. \quad (7)$$

Время пребывания вещества в каждой ячейке $\tau = V_i/v$,
общее время пребывания $\tau = V/v$,
тогда объем всех ячеек $V = nV_i$, где n – число ячеек.

Уравнение ячейочной модели для i -й ячейки примет вид

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{n}{\tau} \cdot (C_{i-1} - C_i) \quad (8)$$

при $t = 0$ $C(0) = C_0$.

При $n = 1$ получим модель идеального смешения,

при $n \rightarrow \infty$ – модель идеального вытеснения.

При использовании ячейечной модели очень важно правильно выбрать число ячеек, которое можно рассчитать по формуле

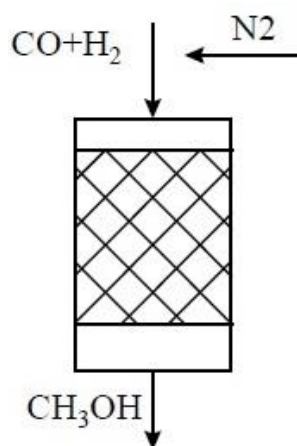
$$n = \frac{Pe_D}{2} = \frac{ul}{2D_L}$$

Ячеечные модели достаточно точно отражают свойства потоков в различных абсорбционных и экстракционных колоннах, в теплообменных аппаратах некоторых конструкций, в каскаде химических реакторов с мешалками, в аппаратах с псевдоожиженным слоем.

Определение условий перемешивания в проточных аппаратах

Для того чтобы установить характер перемешивания потока в аппарате, необходимо на входе в поток ввести какое-либо вещество (индикатор, трассёр) и изучить изменение концентрации этого вещества в выходном потоке, т. е. найти отклик системы на входное возмущение.

Индикатором является вещество (азот, аргон, гелий), которое вводится в небольшом количестве и отличается по свойствам от других компонентов потока.



Для измерения концентрации на выходе из аппарата можно использовать различные физико-химические методы анализа: хроматографические, спектральные и др.

Существует несколько стандартных способов ввода индикатора в поток:

- импульсный;
- ступенчатый.

При импульсном вводе индикатор вводится в основной поток за короткий промежуток времени и в небольшом объёме, затем снимается изменение концентрации индикатора во времени на выходе из аппарата, т. е. получают кривую отклика системы на импульсное возмущение (С – кривая).

Ступенчатый ввод индикатора предполагает замену части основного потока индикатором, при этом на выходе получаем кривую отклика, которая называется F-кривая.

Определение условий перемешивания в проточных аппаратах

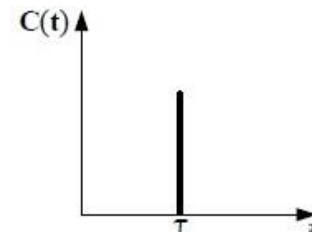
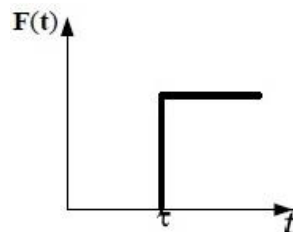
Кривые отклика для различных гидродинамических моделей

Характер отклика при возмущении:

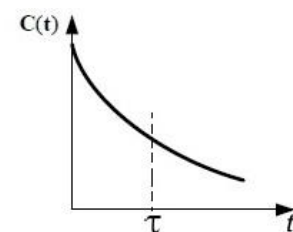
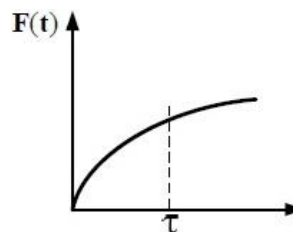
ступенчатом

импульсном

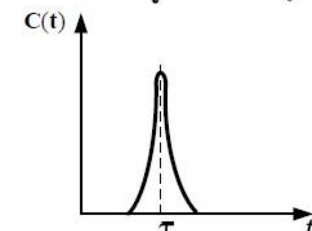
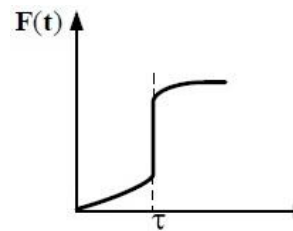
Модель идеального вытеснения



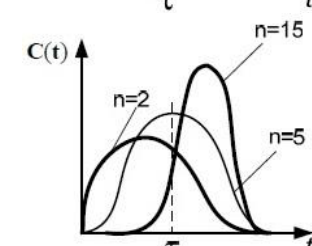
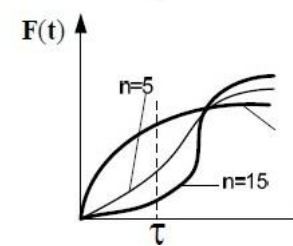
Модель идеального смешения



Диффузионная модель



Ячеечная модель





1. Ушева Н.В., Мойзес О.Е., Митянина О.Е., Кузьменко Е.А. Математическое моделирование химико-технологических процессов: учебное пособие; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. – 135 с.
2. Кафаров В.В., Глебов М.Б. математическое моделирование основных процессов химических производств: Учебное пособие для вузов. – М.: Высш шк., 1991. – 400 с.
3. Гумеров А.Н., Валеев А.Н и др. Математическое моделирование химико-технологических процессов: учеб. пособие. – М.: КолосС, 2008. – 160 с.
4. Касаткин А.Н. Основные процессы и аппараты химической технологии: учебник для вузов. – М.: Альянс, 2004. – 750 с.