

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОМЫШЛЕННЫХ РЕАКТОРОВ

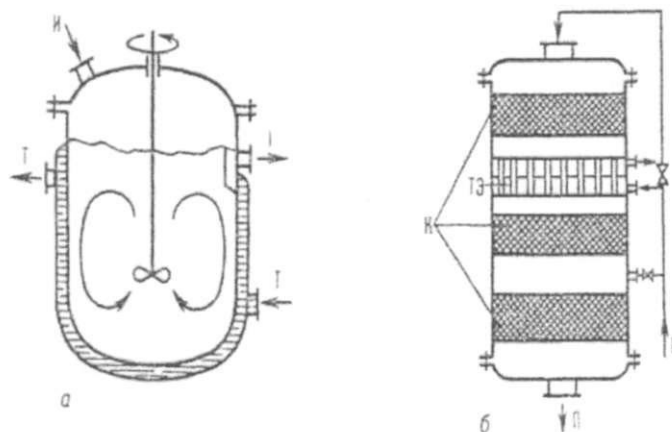
Ф.Е.Алтынбеков, Г.Оспанов
ЮКГУ им.М.Ауезова, г. Шымкент

Задача создания математической модели химических реакторов представляется разрешимой при наличии определенных исходных данных о процессах, происходящих в рассматриваемых реакторах. В первую очередь, это данные о кинетике процесса, то есть информация о реакции, приводящей к целевому продукту. Далее требуются данные о термодинамике процесса, т.е. о теплоте, выделяющейся или поглощаемой в ходе реакции. Следующими, не менее важными, данными являются данные о степени превращения исходных веществ в продукты. Практически во всех реакторах реакцию необходимо хорошо перемешивать. Эффективность смешения зависит от вязкости компонентов, взаимной растворимости исходных веществ и продуктов, скоростей потоков, размеров реактора. Это гидродинамические данные о процессе.

Таким образом, в общем виде задача моделирования химического реактора достаточно сложна. Однако при наличии определенных моделей реакторов возможно построение математической модели на конкретный технологический процесс.

В настоящей статье изложены основные концепции математического моделирования промышленных реакторов с учетом основных влияющих факторов и опыта промышленной эксплуатации.

Рассмотрим реакторы непрерывного действия.



а – проточный емкостный реактор смешения с теплообменной рубашкой;
б – многослойный каталитический реактор с промежуточными
и теплообменными элементами

Рисунок 1 - Основные типы реакторов

В реактор непрерывно вводятся реагенты, а реакционная смесь, содержащая продукты и исходные вещества, интенсивно перемешивается и постоянно выводится из реактора. Среднее время пребывания реакционной смеси в реакторе τ равно:

$$\tau = V/\omega,$$

где V - объем реактора,
 ω - суммарная объемная скорость подачи всех реагентов.

В реакторах смешения существует широкое распределение по времени пребывания, то есть одни молекулы, попав в реактор, находятся в нем длительное время, а другие быстро его покидают [1]. Это структура потоков в аппаратах. Оценка структуры потоков в химических реакторах осуществляется с помощью кривых отклика, характеризующих распределение времени пребывания частиц в потоке. Поскольку время пребывания частиц вещества в зоне реакции является случайной величиной в силу разного рода соударений ее с частицами других веществ, стенками аппарата и т.д., то распределение частиц по времени характеризуется функцией распределения.

Выражения для функций распределения по времени пребывания применительно к аппарату любой конструкции могут быть получены тремя способами.

- Первый способ, теоретический, основан на применении уравнений Навье-Стокса с системой граничных условий, которые являются основными уравнениями гидродинамики для описания движения вязкой жидкости [2]. В силу чрезвычайной сложности гидродинамической обстановки в реальных аппаратах этот способ практически неприемлем.
- Второй способ – чисто экспериментальный. Но этот способ имеет много недостатков, т.к. полученные экспериментально и аппроксимированные определенным выражением функции распределения не дают точной оценки потоков в реальных аппаратах, не связаны с какими-либо конструктивными или режимными параметрами.
- Третий способ, получивший наибольшее распространение, является наиболее эффективным. При этом способе с использованием модели структуры потоков на базе теоретических основ представления реальной структуры потоков в аппарате получают оценки по параметрам моделей из конструктивных соотношений диаметров аппарата и мешалки, высоты и диаметра аппаратов, величины циркуляционных потоков и т.д.

Для оценки структуры потоков в химических реакторах экспериментально определяют кривые отклика, характеризующие распределение времени пребывания частиц в потоке.

Дифференциальная функция распределения или плотность распределения $C(\tau)$ может быть определена экспериментально как кривая отклика при вводе трассера на вход реактора. При этом функция $C(\tau)$ дает долю вещества (трассера), которая находилась в системе время, меньшее, чем τ . Используя функцию распределения времени пребывания, можно определить среднее время пребывания $\bar{\tau}$:

$$\bar{\tau} = \int_0^{\infty} \tau \cdot C(\tau) \cdot d\tau \quad (1)$$

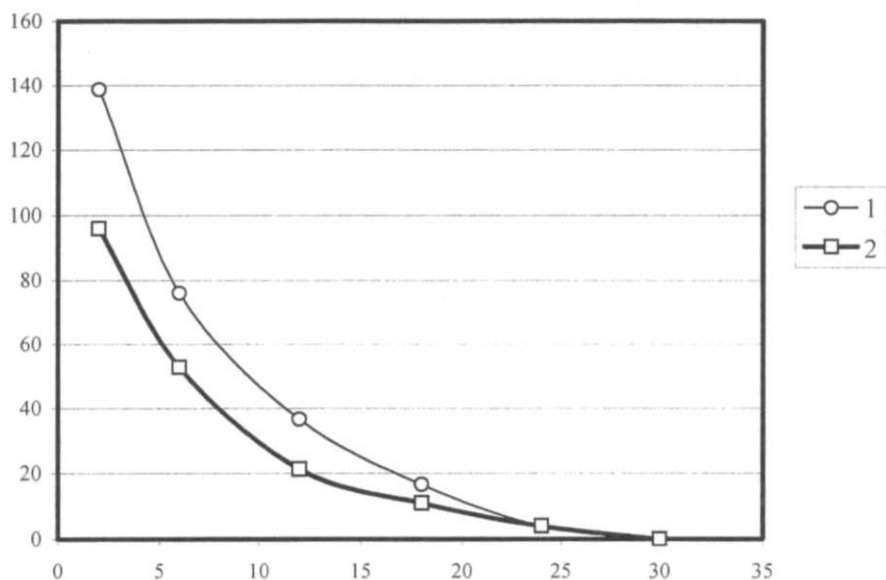
Для реактора идеального перемешивания кривая отклика на импульсное возмущение по концентрации трассера описывается уравнением вида:

$$C(\tau) = \frac{1}{\bar{\tau}} \cdot \exp(-\tau / \bar{\tau}) \quad (2)$$

Для исследования режимов перемешивания в промышленных химических реакторах используется метод радиоактивного трассера [3]. Полученная при этом экспериментальная C -кривая отличается по форме от теоретической кривой распределения (рисунок 2).

На рисунке видно, что теоретическая и экспериментальная кривые отличаются по форме. Это позволяет предположить, что для приближенного описания реальных реакторов необ-

ходимы дополнительные исследования для корректировки математической модели.



Ось абсцисс – время пребывания (час),
ось ординат – кривая распределения (С-кривая) (мкр/час):
1 – теоретическая, 2 – экспериментальная

Рисунок 2 - Кривые распределения времени пребывания

Применение идеальных моделей химических реакторов значительно упрощает задачу, однако требует внимательного и осторожного подхода, поскольку необходимо соблюдение условий идеальности в каждом конкретном случае. Как правило, условия идеальности выдержать при проведении процессов в реальных промышленных реакторах не представляется возможным.

Реальные реакторы отличаются от идеальных моделей. Так, в реакторах смешения существуют застойные зоны, в которых время пребывания, температура и концентрации веществ отличаются от средних.

При этом существенное значение имеют размеры реакторов, так, при проведении полимеризационных процессов в реакторах полимерная цепь, образующаяся при присоединении молекул мономера, в обычной лабораторной колбе с мешалкой будет иметь практически одну и ту же длину (молекулярную массу). Если тот же самый процесс проводить в большом промышленном реакторе, то полимерный продукт будет состоять из набора молекул различной молекулярной массы [4]. Другими словами, структура и свойства полимера зависят от того, в каком реакторе он получен. Все эти факторы влияют на качество получаемого продукта и должны быть учтены при разработке математических моделей.

Важную роль в работе реакторов имеют динамические режимы. Динамические режимы реакторов характеризуются изменением во времени параметров, определяющих состояние процесса (например: концентрация, температура, давление). В динамическом режиме всегда функционирует реактор периодического действия, в котором ход процесса изменяется от момента загрузки сырья до выгрузки готового продукта. Реактор непрерывного действия должен работать в стационарном, неизменном во времени режиме. Хотя и считается, что реакторы непрерывного действия работают в статическом режиме и описываются уравнениями статики, динамические режимы имеют место при пуске и останове реактора, при изменении условий ведения процесса. А также из-за неизбежных внешних возмущений, например, изменения состава сырья, условий отвода или подвода теплоты, возникают отклонения от стационарного режима.

Они могут быть незначительными и существенными, приводящими к заметным изменениям качества продукта, производительности реактора и даже к авариям. Динамические режимы реакторов непрерывного действия исследуют с помощью их математических моделей в виде дифференциальных уравнений в обыкновенных или частных производных.

Динамические режимы непрерывно действующего реактора идеального смешения, в котором протекает экзотермическая реакция первого порядка, описываются безразмерной системой уравнений, составленной на основе материального (3) и теплового (4) балансов:

$$\frac{dx}{dt} = x e^{-1/y} + \lambda(x_0 - x) \quad (3)$$

$$\frac{dy}{dt} = x e^{-1/y} + \lambda(y_0 - y) + \beta(y_t - y) , \quad (4)$$

где x, y – переменные, пропорциональные, соответственно, концентрации реагирующего вещества и температуре в реакторе;

x_0, y_0 – те же переменные для потока на входе реактора;

y_t – переменная, пропорциональная температуре окружающей среды;

λ – константа, пропорциональная расходу потока на входе реактора;

β – константа, пропорциональная коэффициенту теплопередачи и площади поверхности теплообмена с окружающей средой;

t – время.

Стационарные режимы реактора определяются условием:

$$dx/dt = dy/dt = 0.$$

Решение уравнений (3), (4) дает значения x_s и y_s для стационарного состояния. В зависимости от параметров реактора стационарных состояний может быть одно или три; в общем случае их всегда нечетное число.

Таким образом, в работе представлено, что при моделировании реакторов промышленного действия необходимо учитывать реальные условия и использование идеальной модели не всегда приводит к удовлетворительным результатам.

Литература

- 1 Крамерс Х., Вестертеп К. Химические реакторы.- М.: Химия, 1967.- 264 с.
- 2 Кафаров В.В. и др. Системный анализ процессов химической технологии. Процессы полимеризации. - М.: Наука, 1991. - 105с.
- 3 Бесков В.С. Методы математического моделирования и использования ЭВМ в общинженерных курсах по химической технологии //Сб. научных трудов Российского химико-технологического университета. Вып. 178. - М., 2000. - С.150-156.
- 4 Берлин Ал.Ал., Вольфсон С.А. Кинетический метод в синтезе полимеров.- М.: Химия, 1973.- 360 с.

Қорытынды

Бұл жұмыста өндірістік реакторлардың негізгі әсерін көрсетіп, факторлардың есебімен модельдеу тәсілдері ұсынылған. Полимер шығаратын химиялық реакторлардың динамикалық және статикалық тендеулері келтірілген.

Summary

In the given work the ways of modeling industrial reactors are submitted in view of the basic influencing factors. The equations of dynamics and statics chemical reactors of polymerization are given.