**Химические реакторы. Математические моделихимико-технологических процессов**

**Математическое описаниегидродинамической структуры потоков**

Химико-технологические процессы обычно протекают в движущихся потоках, гидродинамические закономерности перемещения которых оказывают существенное влияние на эффективность химическихпроизводств, поэтому при составлении математических моделей ХТПважное значение приобретает описание движения потоков веществ.

Движущиеся потоки могут быть как одно- так и многофазными и обычно имеют сложную структуру. В гидродинамике существует целый рядуравнений, с помощью которых можно описать движение среды (например,уравнение Навье-Стокса, уравнение неразрывности потока и др.) [7].

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 обих внутренней структуре. Структура движущейся технологической среды характеризуется степенью перемешивания частиц потока, котораяопределяет поле концентраций и градиенты температур. Это и послужило предпосылкой для установления по признаку перемешивания некоторых типовых моделей движущихся потоков.

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

-идеального смешения;

-идеального вытеснения;

-диффузионные (одно- и двухпараметрические) модели;

-ячеечные модели;

- комбинированные модели.

При построении модели структуры потока должны учитыватьсяследующие требования:

-модель должна отражать физическую сущность реального потока ипри этом должна иметь достаточно простое математическое описание;

-должна давать возможность определять ее параметры расчетнымили экспериментальным способом;

-должна быть удобной для использования при расчетах конкретногоХТП.

***1. Модель идеального смешения***

*По данной модели* поток представляется в виде непрерывной среды,которая поступает в аппарат и мгновенно распределяется по всему объему аппарата вследствие полного (идеального) перемешивания частицпотока, при этом концентрация и температура остаются постояннымиво всех точках объема данного аппарата и на выходе из него [4].



**при постоянном объеме (*V*  const ).

Уравнение материального баланса потоков на входе и выходе изаппарата:



где *I –* поток вещества [моль/с], *v* – объемный расход потока, м3/с;*С*вх, *С*вых, *С –* 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* вх=*I* вых. Если на входе в аппарат произошло изменение концентрации (возмущение), то *I* вх≠*I* вых и в аппаратепроизойдет накопление вещества. Предположим, что рассматриваемоеизменение в аппарате произошло за очень маленький промежуток времени**, за который в аппарате произойдет накопление массы: Δ*М →dM.*

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



Уравнение (2.1) описывает изменение концентрации в аппарате*идеального смешения*.

Учитывая, что время контакта равно



получим *модель идеального смешения* в следующем виде:



Начальные условия: при *t* =0 ,*C(*0) =*C0*.

Гидродинамическая модель идеального смешения является моделью с *сосредоточенными* параметрами, т. к. переменная *С* изменяетсятолько во времени.

***2. Модель идеального вытеснения***

*Модель идеального вытеснения* – это модель с идеализированнойструктурой потока, в котором принимается поршневое течение без перемешивания вдоль потока при равномерном распределении концентрацийвещества в направлении, перпендикулярном движению потока [4]:



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

**

где *S –* площадь поперечного сечения аппарата, м2.

Поток на выходе из *j*-го сечения



В установившемся режиме

*I*вх=*I*вых .

При изменении концентрации на входе в аппарат *I*вх≠*I*вых .

В системе за некоторый промежуток времени Δ*t* происходит накопление вещества (*dM*). Считаем, что при **

Тогда



Разделив обе части уравнения (2.3) на *dV*, получим

.

**

Таким образом, уравнение гидродинамической модели *идеальноговытеснения* (МИВ*)* будет иметь вид



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

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

Это модель с распределенными параметрами, т. к. концентрациявещества 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.), массообменныеи теплообменные аппараты.

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

***3. Диффузионные гидродинамические модели***

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 впотоке идеального вытеснения (конвективный поток) возникает за счетмолекулярной диффузии.

Тогда в соответствии с блочным принципом построения математических моделей уравнение *однопараметрической диффузионной* гидродинамической модели примет следующий вид [4, 5]:



где *DL* – коэффициент диффузии в продольном направлении, м2/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.

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



где *R D* – коэффициент диффузии в продольном направлении, м2/с; *r* –текущий радиус, м; *R* – радиус аппарата, м.

Для оценки степени влияния диффузии можно использовать диффузионный критерий Пекле [7]



При *PeD*>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.

***4. Ячеечные гидродинамические модели***

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



Пусть *Vi –* объем *i*-й ячейки, м3. Примем *V*1 = *V*2 = *V*3 = … = *Vn*.

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



Время пребывания вещества в каждой ячейке *τ* = *Vi*/*v*, общее времяпребывания *τ* = *V*/*v*, тогда объем всех ячеек *V = nVi*, где *n* – число ячеек.

Уравнение *ячеечной* модели для *i*-й ячейки примет вид



при *t* = 0 *C*(0) = *C*0.

При *n* = 1 получим модель идеального смешения, при *n* →∞ – модель идеального вытеснения.

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



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

**Вопросы для самоконтроля**

1. Назовите типовые математические модели структуры потоковв аппаратах.

2. Что такое кривая отклика?

3. Перечислите методы определения гидродинамической структурыпотоков.

4. Перечислите модели идеального вытеснения.

5. Перечислите модели идеального смешения?

6. Дать характеристику диффузионной модели?

7. Дать характеристику ячеечной модели?

Таблица 2.1



