

# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Методические указания по дисциплине "Математическое моделирование и оптимизация технологических процессов и оборудования" для студентов очной и заочной форм обучения по направлениям:  
655400 – Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии, 655800 – Пищевая инженерия и магистров направления 551800 – Технологические машины и оборудование

Тамбов • Издательство ТГТУ • 2001

УДК 658.512.011.56  
ББК з966.8-01с116  
Д 243

Утверждено Редакционно-издательским советом университета

Рецензент  
Доктор технических наук  
**Ю. В. Литовка**

Составители:  
**С. И. Дворецкий, А. В. Майстренко**

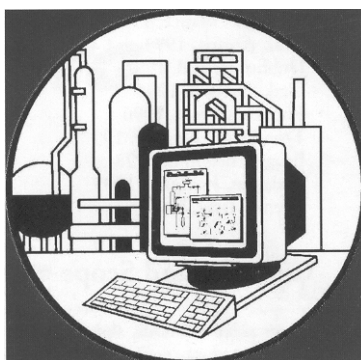
Д 243 **Компьютерное** моделирование технологических процессов: Метод. указ. / Сост. С. И. Дворецкий, А. В. Майстренко. Тамбов: Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2001. 36 с.

Методические указания предназначены для студентов дневной и заочной форм обучения специальностей 170500 – Машины и аппараты химических производств, 170600 – Машины и аппараты пищевых производств и магистров направления 551800 – Технологические машины и оборудование. Здесь же приведены задания к курсовой работе (для студентов дневного отделения) и к контрольной работе (для студентов заочного отделения), при выполнении которых закрепляются навыки полученные на лекциях и практических занятиях по математическому моделированию технологических процессов и оборудования.

УДК 658.512.011.56  
ББК з966.8-01с116

© Тамбовский государственный  
технический университет, (ТГТУ), 2001 г.

# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ



•Издательство ТГТУ•

## ВВЕДЕНИЕ

Метод математического моделирования широко применяется при исследовании, оптимизации и проектировании технологических процессов и оборудования. Математические модели строят на основе законов и закономерностей, выявленных фундаментальными науками: физикой, химией, биологией, экономикой и т.д. После того как математическая модель построена, необходимо исследовать ее поведение. Для воспроизведения поведения изучаемой модели широко применяют компьютерное моделирование.

Изучая сложные технологические процессы, аппараты и физические явления исследователь не может учесть все факторы: какие-то оказываются наиболее важными, а какими-то можно пренебречь. Для учета этих факторов создается модель объекта, которая затем преобразуется в триаду "модель – алгоритм – программа", дополняющуюся при решении многих задач этапами первичной обработки результатов эксперимента, проверки адекватности и коррекции модели, тестирования программы и анализа результатов вычислительного эксперимента. Значение вычислительного эксперимента трудно переоценить, особенно, если натуральный эксперимент опасен, дорог или просто невозможен. При этом он не только не отвергает традиционных методов математического анализа, но и, напротив, предполагает их самое активное использование. Только разумное сочетание аналитических и численных методов является необходимым условием успеха при решении практических задач.

## ЦЕЛЬ ЗАДАНИЯ

При выполнении курсовой (контрольной) работы студент развивает свои представления о компьютерном моделировании как о методе познания физико-химических процессов, протекающих в технологических установках и экологических системах, проектирования технологических процессов и оборудования с высоким уровнем энерго- и ресурсосбережения и экологической чистоты. При этом он овладевает методами построения математических моделей, методикой планирования и проведения вычислительного эксперимента, современными численными методами расчета и оптимизации технологических процессов и оборудования.

В процессе выполнения задания студент приобретает опыт составления математического описания технологических процессов и оборудования, разработки алгоритмов компьютерного моделирования технологических процессов, тестирования программ и расчета на ЭВМ основных процессов и аппаратов биохимической, химической и пищевой технологий.

## СОДЕРЖАНИЕ ЗАДАНИЯ

Каждому студенту выдается индивидуальное задание включающее:

- ◆ конкретный технологический процесс, осуществляемый в установке (машине, аппарате) заданного типа;
- ◆ кинетические константы технологического процесса и физико-химические свойства перерабатываемых веществ;
- ◆ конструктивные размеры технологических машин и аппаратов, входящих в состав установки;
- ◆ режимные переменные технологического процесса.

Студент должен:

- ◆ составить структурную схему исследуемого технологического процесса (установки) и выявить выходные переменные;
- ◆ изучить заданный процесс и уяснить механизм его протекания в установке (машине, аппарате) заданного типа;
- ◆ составить математическое описание исследуемого процесса (установки) аналитическим методом;
- ◆ разработать алгоритм математического моделирования на ЭВМ технологического процесса (установки);
- ◆ составить программу по разработанному алгоритму и провести ее тестирование;
- ◆ спланировать и провести вычислительный эксперимент в соответствии с заданной целью (цель эксперимента указывается в индивидуальном задании);
- ◆ сформулировать задачу оптимизации режимных и конструктивных параметров технологического процесса и установки.

## ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В качестве задания для исследования студенту предлагается конкретный технологический процесс осуществляемый в установке (машине, аппарате) заданного типа. Рассмотрим на конкретных примерах постановки некоторых задач.

*Задача 1*

В трехмодульной реакторной установке проточного типа (рис. 1) осуществляется совмещенный химико-технологический процесс включающий растворение твердой фазы вещества  $A$  (исходного сырья) в кислотной среде  $CK$  и сложное химическое взаимодействие компонентов по схеме:

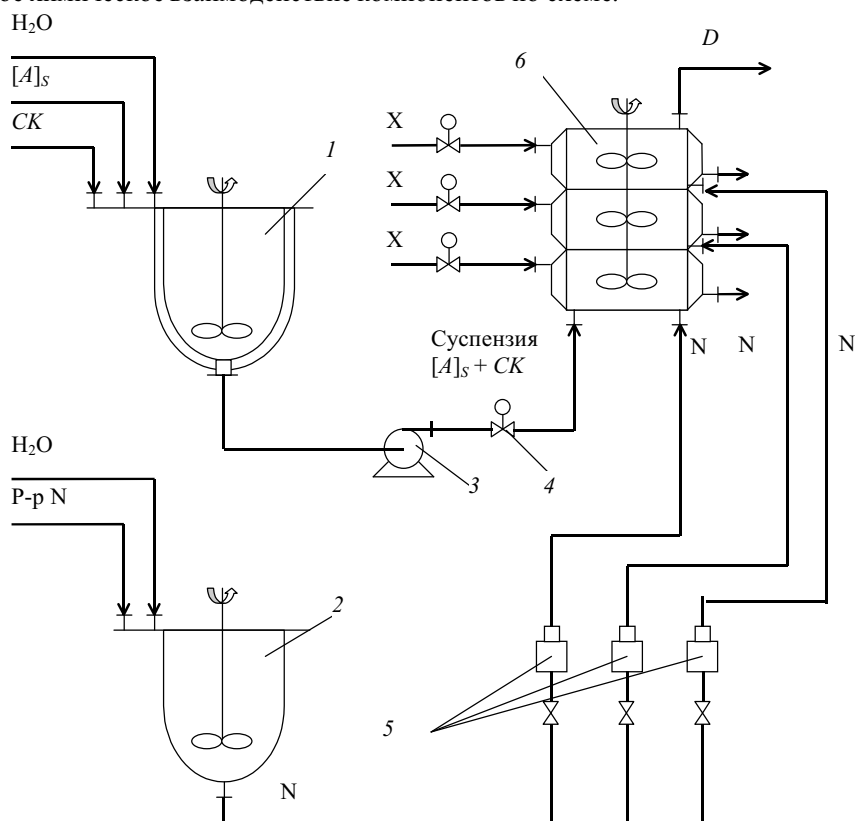
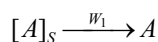
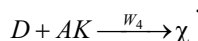


Рис. 1 Реакторная установка непрерывного действия:  
 1 – реактор приготовления солянокислой суспензии вещества  $A$ ;  
 2 – реактор приготовления раствора диазотирующего агента; 3 – насос подачи солянокислой суспензии вещества  $A$ ; 4 – регулирующий клапан;  
 5 – дозирующие насосы; 6 – реактор диазотирования

а) растворение твердой фазы вещества  $A$



б) химические реакции образования:



Исходные данные:

кинетика растворения отдельной частицы описывается уравнением вида

$$\frac{dr}{dt} = W_1 = -B r^{-\nu} \exp\left(\frac{-E_1}{RT}\right) (C_A^* - C_A) / \rho_A,$$

где  $B, \nu$  – кинетические константы процесса растворения;  $B = 4,406 \cdot 10^{12}$ ;  $\nu = 0,398$ ;  $r$  – радиус частицы, мкм;  $E_1$  – энергия активации, Дж/моль;  $E_1 = 47010$  Дж/моль;  $R$  – универсальная газовая постоянная;  $C_A^*, C_A$  – равновесная и текущая концентрация вещества  $A$  в реакционной массе, моль/м<sup>3</sup>;  $C_A^* = f(C_{CK}, T)$ ;  $\rho_A$  – плотность вещества  $A$ , кг/м<sup>3</sup>;  $\rho_A = 1450$  кг/м<sup>3</sup>;  $t$  – время, с.

Уравнения кинетики химических реакций имеют вид

$$W_2 = k_{02} \exp\left(\frac{-E_2}{RT}\right) C_A C_{AK} C_{CK}^{0,87}; \quad k_{02} = 3,75 \cdot 10^5; \quad E_2 = 46820 \text{ Дж/моль};$$

$$W_3 = k_{03} \exp\left(\frac{-E_3}{RT}\right) \frac{C_{AK}^4}{P_\sigma}; \quad k_{03} = 7,17 \cdot 10^{21}; \quad E_3 = 119650 \text{ Дж/моль};$$

$$P_o = 9,81 \cdot 10^4 \text{ Па};$$

$$W_4 = k_{04} \exp\left(\frac{-E_4}{RT}\right) C_D C_{AK}; \quad k_{04} = 0,32 \cdot 10^5; \quad E_4 = 63690 \text{ Дж/моль}.$$

Плотность  $\rho_A$  и молекулярная масса  $M_A$  вещества  $A$

$$\rho_A = 1450 \text{ кг/м}^3; \quad M_A = 0,152 \text{ кг/моль}.$$

Концентрации и расходы веществ в питании реакторной системы:

$$[C_A]_S = 420 \text{ моль/м}^3; \quad C_N = 1460 \text{ моль/м}^3; \\ G_A = 3,36813e - 004 \text{ м}^3/\text{с}; \quad G_N = 9,78603e - 005 \text{ м}^3/\text{с}.$$

Гранулометрический состав суспензии  $A$  в питании реакторной системы описывается выражением

$$\psi^o(r_0) = \sqrt{\frac{\sigma}{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\sigma(\ln r_0 - \bar{r}_0) - \bar{r}_0 - \frac{1}{2\sigma}\right\},$$

где  $\bar{r}_0$ ,  $\sigma$  – параметры логарифмического нормального закона распределения,  $\bar{r}_0 = 1,24$ ;  $\sigma = 3,38$ .

Температура реакционной массы в модулях реакторной системы

$$T(i) = 295 \text{ }^\circ\text{К}; \quad i = \overline{1,3}.$$

Объем модуля

$$V^{(i)} = 0,21 \text{ м}^3; \quad i = \overline{1,3}.$$

Сформулируем допущения:

1 Отдельный модуль установки является реактором идеального смешения. Это означает, что плотность распределения времени пребывания реакционной массы в модуле описывается выражением вида:

$$P_i(\tau) = \frac{1}{\Theta_i} \exp\left(\frac{-\tau}{\Theta_i}\right),$$

где  $\Theta_i$  – среднее время пребывания реакционной массы в  $i$ -том модуле,  $\Theta_i = V^{(i)} / G_i^i$ ,  $G_i^i = G_A^{(i-1)} + G_N^{(i-1)}$ .

2 Химическое взаимодействие веществ происходит в растворе, образование полупродукта  $AK$  происходит со скоростью  $W = \infty$ .

3 Потери тепла в окружающую среду пренебрежимо малы.

4 Суспензия вещества  $A$  представляет собой совокупность сферических частиц с радиусом  $r$ , гранулометрический состав суспензии удовлетворительно описывается логарифмическим нормальным законом распределения.

Требуется:

1 Составить структурную схему химико-технологического процесса как объекта моделирования.

2 Построить физическую модель химико-технологического процесса и установки (реактора), обосновать заданные допущения.

3 Составить математическое описание химико-технологического процесса, осуществляемого в реакторной установке (рис. 1).

4 Разработать алгоритм решения уравнений математической модели, составить блок-схему алгоритма.

5 Составить программу реализации алгоритма на ЭВМ (с использованием языков программирования СИ++, Паскаль и др.) и осуществить ее тестирование.

6 Провести исследование технологического процесса (построить зависимости):

7 а) выхода  $K$  целевого продукта  $D$  от температуры реакции  $T(i)$  ( $290 - 300 \text{ К}$ ),  $i = \overline{1,3}$ ;

б) выхода  $K$  от среднего размера  $\bar{r}$  частиц твердой фазы в питании реактора;

в) содержания побочных продуктов  $\sigma$  и  $\chi$  в продуктах реакции от температуры в реакторе  $T(i)$  ( $290 - 300 \text{ }^\circ\text{К}$ ),  $i = \overline{1,3}$ ;

8 Вывести на печать в виде графиков зависимости

$$K = f(T(i)); \quad K = f(\bar{r}); \quad P_\sigma = f(T(i)); \quad P_\chi = f(T(i)).$$

*Задача 2*

В сушильной установке с движущимся плотным поперечно-продуваемым кольцевым слоем осуществляется сушка дисперсных материалов (зерновых культур) с высоким внутридиффузионным сопротивлением. Эскизная схема сушильной установки приведена на рис. 2.

*Исходные данные:*

Расход материала

$$G_M = 1,11 \text{ кг/с.}$$

Начальное влагосодержание и температура материала на входе в сушильную камеру установки

$$u_n = 0,177 \text{ кг/кг}, \quad T_n = 20 \text{ }^\circ\text{C.}$$

Скорость движения материала в сушильной камере

$$v_M = 0,002 \text{ м/с.}$$

Влагосодержание и температура сушильного агента на входе в сушильную камеру установки

$$x_n = 0,01 \text{ кг/кг}; \quad t_n = 45 \text{ }^\circ\text{C.}$$

Размеры сушильной камеры: толщина кольцевого слоя  $S = 171 \text{ мм}$ ;

высота сушильной камеры  $h = 4000 \text{ мм}$ .

Сформулируем допущения.

- 1 Слой движущегося дисперсного материала, взаимодействуя с фильтрующимся потоком сушильного агента, аналогичен слою неподвижного материала при его сушке в периодическом режиме;
- 2 Частицы высушиваемого материала имеют сферическую форму.
- 3 Неподвижный слой представляется как совокупность монослоев с толщиной, равной эквивалентному диаметру частицы дисперсного материала.
- 4 Фильтрация сушильного агента через монослой соответствует режиму идеального вытеснения.
- 5 В монослой соблюдается равенство температур сушильного агента и материала.

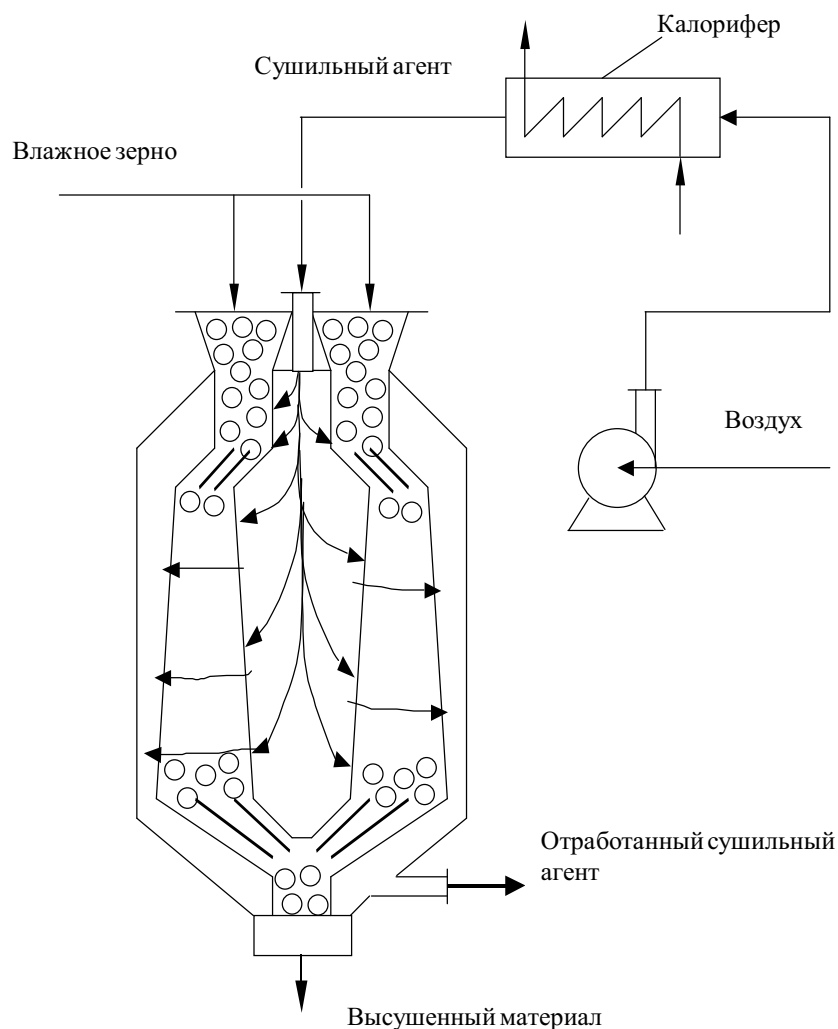


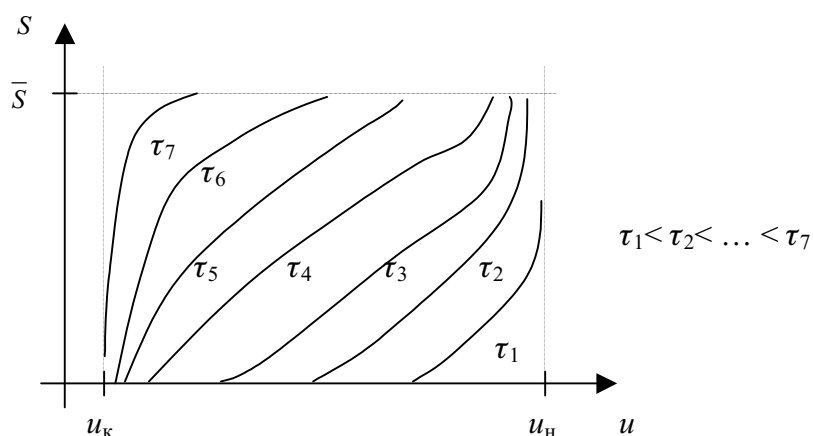
Рис. 2 Сушильная установка

Требуется:

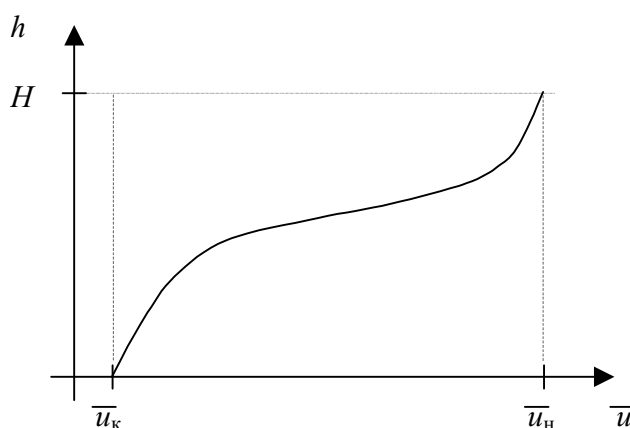
- 1 Составить структурную схему процесса сушки как объекта моделирования.
- 2 Построить физическую модель процесса сушки, обосновать заданные допущения.
- 3 Составить математическое описание процесса сушки, осуществляемого в плотном, поперечно-продуваемом, кольцевом движущемся слое.
- 4 Разработать алгоритм решения уравнений математической модели, составить блок-схему алгоритма.
- 5 Составить программу реализации алгоритма на ЭВМ и осуществить ее тестирование.

6 Провести тестирование процесса сушки (определить зависимости):

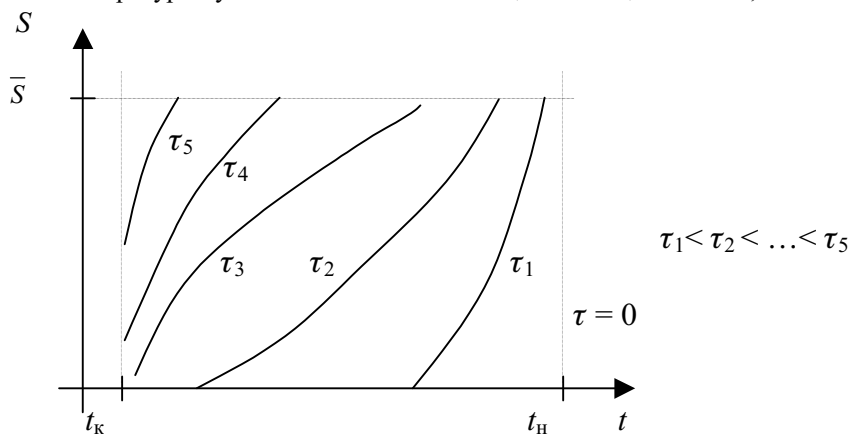
а) распределение влагосодержания материала по толщине кольцевого слоя для различных моментов времени;



б) распределение среднего значения влагосодержания по высоте сушильной камеры;



в) распределение температуры сушильного агента по толщине кольцевого слоя;



г) рассчитать требуемый расход сушильного агента для сушки зерновой культуры (пшеницы, ржи) от начального значения влагосодержания  $u_n$  до заданного конечного значения  $u_k$ .

д.) изменить начальную температуру сушильного агента  $t_n$  и повторить эксперименты а) – г).

7 Вывести на печать в виде графиков зависимости:

$$u = f(S); \bar{u} = f(h); t = f(S).$$

## СОДЕРЖАНИЕ ПОЯСНИТЕЛЬНОЙ ЗАПИСКИ КУРСОВОЙ (КОНТРОЛЬНОЙ) РАБОТЫ

- 1 Постановка задачи (конкретный вариант).
- 2 Структурная схема объекта моделирования и ее описание.
- 3 Физическая модель технологического процесса и установки, обоснование заданных допущений.

- 4 Составление математического описания технологического процесса и установки (расчетные формулы и уравнения пронумеровать).
- 5 Блок-схема (с нумерованными блоками) алгоритма решения уравнений математической модели ее описание по блокам (со ссылками на расчетные формулы и уравнения).
- 6 Запись алгоритма решения задачи на одном из современных языков программирования: СИ++, Паскаль и др.
- 7 Тесты для проверки программы и результаты отладок.
- 8 Результаты решения конкретного варианта задачи на ЭВМ, графики полученных решений.
- 9 Анализ полученных результатов.
- 10 Используемая литература.

## МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ К ВЫПОЛНЕНИЮ КУРСОВОЙ (КОНТРОЛЬНОЙ) РАБОТЫ

Традиционная схема компьютерного моделирования может быть представлена в следующем виде (рис. 3).



Рис. 3 Схема организации вычислительного (имитационного) эксперимента

Как следует из рис. 3 процесс построения компьютерной модели состоит из ряда самостоятельных этапов, среди которых выделим три: построение математической модели исследуемого объекта, разработку моделирующего алгоритма и формирование компьютерной модели (программы) на базе моделирующего алгоритма.

Первый этап является предметом фундаментальных дисциплин. Второй этап связан с разработкой метода расчета сформулированной математической задачи или, как говорят, вычислительного или моделирующего алгоритма. Фактически он представляет собой совокупность алгебраических формул по которым ведутся вычисления и логических условий, позволяющих установить нужную последовательность применения этих формул. Как правило для одной и той же математической задачи можно предложить множество алгоритмов. Однако требуется построение эффективных вычислительных методов, которые позволяют получить решение поставленной задачи с заданной точностью за минимальное количество действий (арифметических, логических), т.е. с минимальными затратами машинного времени. Эти вопросы и составляют предмет теории численных методов.

Третий этап – создание программы для реализации разработанного моделирующего алгоритма на ЭВМ (создание компьютерной модели). Применение современных языков программирования СИ++, Паскаль и других порождает ряд проблем, из которых главными являются трудоемкость и недостаточная гибкость. В процессе исследования реальных систем часто приходится уточнять модели, что влечет за собой перепрограммирование моделирующего алгоритма. Ясно, что процесс моделирования в этом случае не будет эффективным, если не обеспечить его гибкость. Для этой цели можно использовать формальные схемы, описывающие классы математических моделей из определенной предметной области, поскольку программировать тогда нужно функционирование данной схемы, а не частные модели. Если добиться полной параметризации системы, то формирование конкретной модели будет состоять лишь в задании ее параметров, причем на языке естественном для рассматриваемой предметной области.

Обратимся теперь к блоку 7 (рис. 3), вычислительный эксперимент – это собственно проведение расчетов на ЭВМ и получение информации представляющей интерес для исследователя. Действительно решение любой прикладной задачи зависит от многочисленных входных переменных и внутренних параметров объекта исследования. Например, если рассчитывается технологическая установка, то имеется множество режимных переменных, коэффициентов уравнений математической модели, конструктивных параметров среди которых нужно определить их оптимальный набор, обеспечивающий эффективное функционирование этой установки. Конечно точность расчетов определяется достоверно, прежде всего, математической моделью, моделирующим алгоритмом и программой. Именно по этой причине в серьезных прикладных исследованиях никогда не начинают вести полномасштабные расчеты по только что написанной программе. Им всегда предшествует период проведения тестовых расчетов. Они необходимы не только для того, чтобы "отладить" программу, т.е.



отыскать и исправить все ошибки и опечатки, допущенные как при создании алгоритма, так и при его программной реализации. В этих предварительных расчетах тестируется также сама математическая модель, выясняется ее адекватность исследуемому объекту. Для этого проводится расчет некоторых контрольных экспериментов по которым имеются достаточно надежные измерения. Сопоставление этих данных с результатами расчетов позволяет уточнить математическую модель, обрести уверенность в правильности предсказаний, которые будут получены с ее помощью.

Только после проведения кропотливой длительной работы в вычислительном эксперименте наступает фаза имитации – с помощью компьютерной модели предсказывается поведение исследуемого объекта в условиях, где натурные эксперименты пока не проводились или где они вообще невозможны.

Важное место в вычислительном эксперименте занимает обработка результатов расчетов, их всесторонний анализ и, наконец, выводы. При оптимизации, проектировании технологического процесса и установки из-за сложности и высокой размерности математической модели проведение расчетов по описанной выше схеме может оказаться чересчур дорогим. И здесь идут на упрощение модели, на построение инженерных методик (формул), но опирающихся на сложные модели и расчеты и дающих возможность получить необходимую информацию более дешевым способом. При этом проводится огромная предварительная работа по анализу сложных моделей, квинтэссенцией которой и являются простые на первый взгляд формулы.

Таким образом технология компьютерного моделирования является основой целенаправленной деятельности, смысл которой состоит в обеспечении возможности эффективного фактического проведения на ЭВМ исследования функционирования сложных систем. С ее помощью организуются действия исследователя на всех этапах его работы с моделями, начиная от изучения объекта и кончая построением и реализацией планов компьютерных экспериментов для анализа поведения исследуемого объекта. Говоря о технологии моделирования, следует отметить два важных аспекта:

1) методологическую составляющую технологии как науки, занимающейся выявлением закономерностей, применение которых на практике позволяет находить наиболее эффективные и экономичные приемы моделирования систем на ЭВМ;

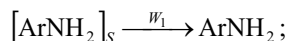
2) прикладные цели и задачи технологии как искусства, мастерства, умения достигать в ходе машинного моделирования сложных систем практически полезных результатов.

## ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ СФОРМУЛИРОВАННЫХ ВЫШЕ ЗАДАЧ

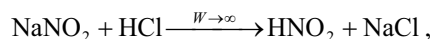
**Пример 1** *Исследование процесса тонкого органического синтеза методом математического (компьютерного) моделирования*

Объектом моделирования является установка диазотирования труднорастворимых аминов. Процесс диазотирования ароматических аминов применяется в качестве основного метода производства наиболее обширного класса синтетических красителей – азокрасителей, имеющих большое значение в технике. Процесс диазотирования включает стадии растворения твердой фазы ароматического амина  $ArNH_2$  в водном растворе  $HCl$  и обработки суспензии солянокислого  $ArNH_2$  нитритом натрия  $NaNO_2$ . При этом протекают основные реакции синтеза целевого продукта (диазосоединения) и образуются побочные продукты (нитрозные газы, диазосмолы):

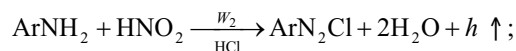
*растворение твердой фазы амина  $[ArNH_2]_s$*



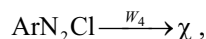
*образование диазотирующего агента  $HNO_2$*



*собственно реакция диазотирования  $ArNH_2$*



*побочные реакции образования диазосмол  $\chi$  и нитрозных газов  $\sigma$  ( $NO_2$ )*



Здесь  $W_i$ ,  $i = \overline{1,5}$  – скорости реакций;  $h$  – тепловой эффект реакции диазотирования ( $h = 1,1 \cdot 10^5$  Дж/моль); индекс  $s$  обозначает твердую фазу.

Структурная схема процесса (установки) диазотирования как объекта моделирования имеет вид (рис. 4).

Схема потоков в показана на рис. 5.

Сформулируем допущения, которые вместе с описанием конструкции реактора, схемой потоков в  $i$ -ой царге реакторной установки (рис. 5) и структурной схемой (рис. 4) будут представлять собой физическую модель объекта.

Реактор диазотирования б (см. рис. 1) представляет собой набор модулей в виде тарелок-царг, причем высота царги равна ее диаметру. Царги разделены тарелками, создающими пленочный режим перелива (течения) реакционной массы из нижней царги в верхнюю. По центру аппарата установлен общий для всех царг вал, на котором насажены трехлопастные мешалки. Солянокислая суспензия амина подается в нижнюю царгу, раствор  $\text{NaNO}_2$  – распределенно по царгам реактора. Каждый модуль реактора снабжен теплообменной рубашкой для поддержания заданной температуры реакционной смеси внутри каждой секции.

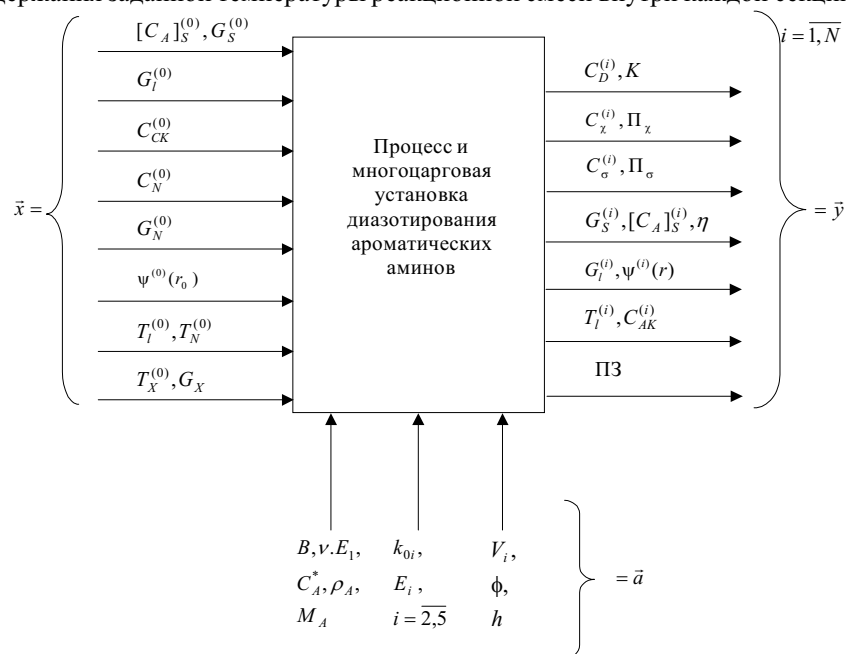


Рис. 4 Структурная схема объекта моделирования:

$[C_A]_S^{(0)}, C_{CK}^{(0)}, C_N^{(0)}$  – концентрации твердой фазы амина, соляной кислоты и нитрита натрия в питании реакторной установки;  $G_l^{(0)}, G_N^{(0)}, G_X$  – расходы солянокислой суспензии амина, нитрита натрия и хладагента на входе в реактор;  $T_l^{(0)}, T_N^{(0)}, T_X^{(0)}$  – температура солянокислой суспензии амина, нитрита натрия и хладагента на входе в реактор;  $\vec{a}$  – вектор кинетических параметров и размеров реакторной установки;  $C_D^{(i)}, C_{AK}^{(i)}, C_X^{(i)}, C_\sigma^{(i)}, [C_A]_S^{(i)}$  – концентрации диазосоединения, азотистой кислоты, диазосмол, нитрозных газов и твердой фазы амина на выходе  $i$ -ой царги реакторной установки,  $i = \overline{1, N}$ ;  $T^{(i)}, \psi^{(i)}(r)$  – температура и гранулометрический состав диазораствора на выходе  $i$ -ой царги;  $G_l^{(i)}, G_S^{(i)}$  – расходы жидкой и твердой фазы на выходе  $i$ -ой царги;  $K, \eta$  – выход целевого продукта (диазосоединения) и просок твердой фазы амина;  $\Pi_X, \Pi_\sigma$  – количество образующихся диазосмол и нитрозных газов; ПЗ – приведенные затраты на создание реакторной установки

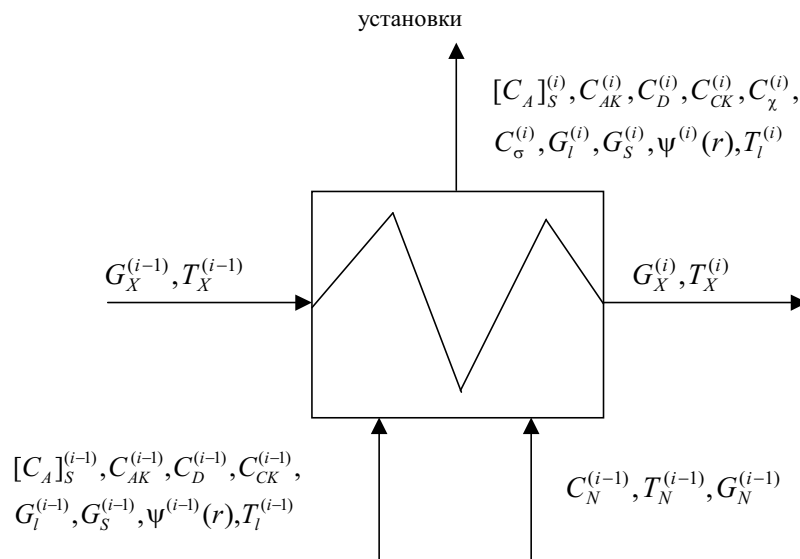


Рис. 5 Схема потоков в  $i$ -ой царге реакторной установки

При математическом моделировании процесса диазотирования, осуществляемого в многоцарговом реакторе различных конструкций, приняты следующие допущения:

- 1) целевая реакция диазотирования протекает в растворе;
- 2) суспензия амина представляет собой полидисперсную фракцию частиц описываемую гранулометрическим составом  $\varphi^{BX}(r_{BX})$ ;
- 3) реакция образования диазотирующего агента  $\text{HNO}_2$  протекает со скоростью превышающей скорость диазотирования на несколько порядков. Поэтому принимаем  $W = \infty$ ;
- 4) физические и теплофизические характеристики перерабатываемых веществ и конструкционных материалов оборудования в рабочем интервале температур постоянны;
- 5) потерями тепла в окружающую среду пренебрегаем;
- 6) гидродинамический режим в модуле "царга-тарелка" соответствует идеальному перемешиванию.

С учетом принятых допущений составим уравнение материального баланса по твердой фазе амина для реакционного пространства  $i$ -ой царги ( $i = \overline{1, n}$ , где  $n$  – число модулей в реакторе) за промежуток времени от  $t$  до  $t + \Delta t$  (накопление = приход – расход):

$$\begin{aligned} & V_{\Pi} [C_{A,S}]^{(i)}(t + \Delta t) - V_{\Pi} [C_{A,S}]^{(i)}(t) = \\ & = G_c^{(i-1)}(t) [C_{A,S}]^{(i-1)}(t) \Delta t - G_c^{(i)}(t) [C_{A,S}]^{(i)}(t) \Delta t - W_1 \left( [C_{A,S}]^{(i)}, C_A^{(i)}, C_A^{*(i)}, T_c^{(i)} \right) V_{\Pi} \Delta t, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $G$  – расход,  $\frac{\text{м}^3}{\text{с}}$ ;  $V$  – объем,  $\text{м}^3$ ;

Индексы:  $\Pi$  – реакционное пространство царги,  $c$  – реакционная смесь.

Аналогично составляются уравнения материального баланса по всем остальным компонентам реакционной смеси.

Составим уравнения теплового баланса для  $i$ -го модуля за промежуток времени от  $t$  до  $t + \Delta t$  (накопление = приход – расход):

– по реакционной смеси

$$\begin{aligned} & c_{pc} \rho_c V_{\Pi} T_c^{(i)}(t + \Delta t) - c_{pc} \rho_c V_{\Pi} T_c^{(i)}(t) = c_{pc} \rho_c G_c^{(i-1)}(t) T_c^{(i-1)}(t) \Delta t + \\ & + c_{pN} \rho_N \gamma_N^{(i)} G_N^{BX}(t) T_N^{BX}(t) \Delta t + W_2 \left( C_A^{(i)}, C_{AK}^{(i)}, C_{CK}^{(i)}, T_c^{(i)} \right) \eta_2 V_{\Pi} \Delta t - \\ & - c_{pc} \rho_c G_c^{(i)}(t) T_c^{(i)}(t) \Delta t - k_{\text{тн}} F \left( T_c^{(i)}(t) - T_x^{(i)}(t) \right) \Delta t; \end{aligned} \quad (2)$$

– по хладагенту

$$\begin{aligned} & c_{px} \rho_x V_p T_x^{(i)}(t + \Delta t) - c_{px} \rho_x V_p T_x^{(i)}(t) = c_{px} \rho_x G_x^{(i)}(t) T_x^{BX}(t) \Delta t + \\ & + k_{\text{тн}} F \left( T_c^{(i)}(t) - T_x^{(i)}(t) \right) \Delta t - c_{px} \rho_x G_x^{(i)}(t) T_x^{(i)}(t) \Delta t, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $T$  – температура, К;  $F$  – площадь поверхности теплопередачи от реакционной смеси к хладагенту,  $\text{м}^2$ ;  $c_p$  – удельная теплоемкость,  $\frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}$ ;  $\rho$  – плотность,  $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ ;  $k_{\text{тн}}$  – коэффициент теплопередачи от реакционной смеси к хладагенту,  $\frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}}$ .

Индексы:  $x$  – хладагент,  $vx$  – входной параметр,  $p$  – охлаждающая рубашка.

Поделив обе части уравнений материального и теплового балансов на  $\Delta t$  и осуществляя предельный переход при  $\Delta t \rightarrow 0$ , получим систему дифференциальных уравнений математической модели динамики процесса диазотирования в реакторе типа "царга-тарелка". Запишем ее с начальными условиями:

$$\frac{d[C_{A,S}]^{(i)}(t)}{dt} = \frac{G_c^{(i-1)}(t) [C_{A,S}]^{(i-1)}(t)}{V_{\Pi}} - \frac{G_c^{(i)}(t) [C_{A,S}]^{(i)}(t)}{V_{\Pi}} - W_1 \left( [C_{A,S}]^{(i)}, C_A^{(i)}, C_A^{*(i)}, T_c^{(i)} \right); \quad (4)$$

$$[C_{A,S}]^{(i)}(t_0) = [C_{A,S}]_S^{0(i)}; \quad (5)$$

$$\frac{dC_A^{(i)}(t)}{dt} = \frac{G_c^{(i-1)}(t)C_A^{(i-1)}(t)}{V_u} - \frac{G_c^{(i)}(t)C_A^{(i)}(t)}{V_u} + W_1([C_A]_S^{(i)}, C_A^{(i)}, C_A^{*(i)}, T_c^{(i)}) - W_2(C_A^{(i)}, C_{AK}^{(i)}, C_{CK}^{(i)}, T_c^{(i)}); \quad (6)$$

$$C_A^{(i)}(t_0) = C_A^{0(i)}; \quad (7)$$

$$\frac{dC_{CK}^{(i)}(t)}{dt} = \frac{G_c^{(i-1)}(t)C_{CK}^{(i-1)}(t)}{V_u} - \frac{G_c^{(i)}(t)C_{CK}^{(i)}(t)}{V_u} - \frac{\gamma_N^{(i)}G_N^{BX}(t)C_N^{BX}(t)}{V_u} - W_2(C_A^{(i)}, C_{CK}^{(i)}, C_{CK}^{(i)}, T_c^{(i)}); \quad (8)$$

$$C_{CK}^{(i)}(t_0) = C_{CK}^{0(i)}; \quad (9)$$

$$\frac{dC_{AK}^{(i)}(t)}{dt} = \frac{G_c^{(i-1)}(t)C_{AK}^{(i-1)}(t)}{V_u} - \frac{G_c^{(i)}(t)C_{AK}^{(i)}(t)}{V_u} + \frac{\gamma_N^{(i)}G_N^{BX}(t)C_N^{BX}(t)}{V_u} - W_2(C_A^{(i)}, C_{AK}^{(i)}, C_{CK}^{(i)}, T_c^{(i)}) - W_4(C_{AK}^{(i)}, T_c^{(i)}) - W_5(C_{AK}^{(i)}, C_D^{(i)}, T_c^{(i)}); \quad (10)$$

$$C_{AK}^{(i)}(t_0) = C_{AK}^{0(i)}; \quad (11)$$

$$\frac{dC_D^{(i)}(t)}{dt} = \frac{G_c^{(i-1)}(t)C_D^{(i-1)}(t)}{V_u} - \frac{G_c^{(i)}(t)C_D^{(i)}(t)}{V_u} + W_2(C_A^{(i)}, C_{AK}^{(i)}, C_{CK}^{(i)}, T_c^{(i)}) - W_3(C_D^{(i)}, T_c^{(i)}) - W_5(C_{AK}^{(i)}, C_D^{(i)}, T_c^{(i)}); \quad (12)$$

$$C_D^{(i)}(t_0) = C_D^{0(i)}; \quad (13)$$

$$\frac{dC_{\chi_1}^{(i)}(t)}{dt} = \frac{G_c^{(i-1)}(t)C_{\chi_1}^{(i-1)}(t)}{V_u} - \frac{G_c^{(i)}(t)C_{\chi_1}^{(i)}(t)}{V_u} + W_3(C_D^{(i)}, T_c^{(i)}); \quad (14)$$

$$C_{\chi_1}^{(i)}(t_0) = C_{\chi_1}^{0(i)}; \quad (15)$$

$$\frac{dC_{\chi_2}^{(i)}(t)}{dt} = \frac{G_c^{(i-1)}(t)C_{\chi_2}^{(i-1)}(t)}{V_u} - \frac{G_c^{(i)}(t)C_{\chi_2}^{(i)}(t)}{V_u} + W_5(C_{AK}^{(i)}, C_D^{(i)}, T_c^{(i)}); \quad (16)$$

$$C_{\chi_2}^{(i)}(t_0) = C_{\chi_2}^{0(i)}; \quad (17)$$

$$\frac{dC_{\sigma}^{(i)}(t)}{dt} = \frac{G_c^{(i-1)}(t)C_{\sigma}^{(i-1)}(t)}{V_u} - \frac{G_c^{(i)}(t)C_{\sigma}^{(i)}(t)}{V_u} + W_4(C_{AK}^{(i)}, T_c^{(i)}); \quad (18)$$

$$C_{\sigma}^{(i)}(t_0) = C_{\sigma}^{0(i)}; \quad (19)$$

$$\frac{dT_c^{(i)}(t)}{dt} = \frac{G_c^{(i-1)}(t)T_c^{(i-1)}(t)}{V_u} - \frac{G_c^{(i)}(t)T_c^{(i)}(t)}{V_u} + \frac{c_{pN}\rho_N\gamma_N^{(i)}G_N^{BX}(t)T_N^{BX}(t)}{c_{pc}\rho_cV_u} + \frac{h_2}{c_{pc}\rho_c}W_2(C_A^{(i)}, C_{AK}^{(i)}, C_{CK}^{(i)}, T_c^{(i)}) - \frac{k_{TH}F}{c_{pc}\rho_cV_u}(T_c^{(i)}(t) - T_c^{(i)}(t)); \quad (20)$$

$$T_c^{(i)}(t_0) = T_c^{0(i)}; \quad (21)$$

$$\frac{dT_x^{(i)}(t)}{dt} = \frac{G_x^{(i)}(t)T_x^{BX}(t)}{V_p} - \frac{G_x^{(i)}(t)T_x^{(i)}(t)}{V_p} + \frac{k_{TH}F}{c_{px}\rho_xV_p}(T_c^{(i)}(t) - T_x^{(i)}(t)), \quad (22)$$

$$T_x^{(i)}(t_0) = T_x^{0(i)}. \quad (23)$$

где  $\gamma_N^{(i)}$  – доля от общего входного расхода раствора нитрита натрия, поступающая в  $i$ -ую царгу.

Индексы:  $N$  – нитрит натрия,  $\chi_1, \chi_2$  – диазосмолы,  $\sigma$  – нитрозные газы.

Для получения замкнутой математической модели дополним систему (4) – (23) уравнениями:

– расхода реакционной смеси

$$G_c^{(i)}(t) = G_c^{(i-1)}(t) + \gamma_N^{(i)}(t)G_N^{\text{BX}}(t); \quad (24)$$

– площади поверхности теплопередачи (с учетом того, что высота царги равна ее диаметру)

$$F = \pi \left( \frac{4V_{\text{ц}}}{\pi} \right)^{2/3}; \quad (25)$$

– равновесной концентрации амина жидкофазного

$$C_A^* = 2,8 + 0,0106 C_{\text{CK}} + \frac{(4,9 - 2,8 + (0,0112 - 0,0106) \cdot C_{\text{CK}}) \cdot (T_c - 292,0)}{28,0}; \quad (26)$$

– скоростей реакций.

Входные параметры процесса диазотирования в аппарате типа "царга-тарелка":

$G_c^{(0)}(t) = G_A^{\text{BX}}(t)$ ,  $G_N^{\text{BX}}(t)$  – расходы солянокислой суспензии амина, нитрита натрия на входе в реактор, соответственно, м<sup>3</sup>/с;

$\gamma_N^{(i)}(t)$  – доля распределения общего расхода нитрита натрия в  $i$ -ый модуль реактора, доли единицы;

$G_x^{(i)}(t)$  – расход хладагента в охлаждающую рубашку  $i$ -го модуля реактора, м<sup>3</sup>/с;

$$[C_A]_S^{(0)}(t) = [C_A]_S^{\text{BX}}(t) - C_A^{*(0)}(C_{\text{CK}}^{(0)}, T_c^{(0)}), \quad C_A^{(0)}(t) = C_A^{*(0)}(C_{\text{CK}}^{(0)}, T_c^{(0)}),$$

$C_{\text{CK}}^{(0)}(t) = C_{\text{CK}}^{\text{BX}}(t)$  – концентрации твердой фазы амина, растворенного амина, соляной кислоты в солянокислой суспензии амина, соответственно, моль/м<sup>3</sup>;

$C_N^{\text{BX}}(t)$  – концентрация нитрита натрия в растворе, моль/м<sup>3</sup>;

$C_{\text{AK}}^{(0)}(t) = C_D^{(0)}(t) = C_{\chi_1}^{(0)}(t) = C_{\chi_2}^{(0)}(t) = C_{\sigma}^{(0)}(t) = 0$  – концентрации азотистой кислоты, диазосоединения, диазосмол и нитрозных газов в солянокислой суспензии амина, соответственно, моль/м<sup>3</sup>;

$T_c^{(0)}(t) = T_A^{\text{BX}}(t)$ ,  $T_x^{\text{BX}}(t)$  – температуры солянокислой суспензии амина и хладагента подаваемых в реактор, К.

Таким образом математическая модель динамики процесса диазотирования осуществляемого в реакторе типа "царга-тарелка" представляет собой систему обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений. Вследствие особенности процесса диазотирования, а именно того факта, что в начальной фазе процесса скорости растворения частиц твердой фазы амина и реакции диазотирования амина различаются на несколько порядков, система уравнений математической модели является жесткой. Для ее решения использовали метод Дормана-Принса 5-го порядка точности с автоматическим выбором шага интегрирования.

Модель статики процесса диазотирования в реакторе проточного типа будет иметь (без учета уравнений теплового баланса):

$$\frac{dr}{dt} = W_1 = -B_1 r^{-\nu} \exp(-E_1/(RT))(C_A^*(T, C_{\text{CK}}) - C_A) \rho;$$

$$G_L = G_L^{\text{BX}} + \mu G_S^{\text{BX}} / \rho + G_N^{\text{BX}}; \quad G_S = (1 - \mu) G_S^{\text{BX}};$$

$$C_A G_L = C_A^{\text{BX}} G_L^{\text{BX}} + \mu G_L^{\text{BX}} / M_A - W_2 (C_A, C_{\text{AK}}, C_{\text{CK}}, T) V;$$

$$C_{\gamma} G_L = C_{\gamma}^{\text{BX}} G_L^{\text{BX}} + \sum_{i=2}^5 W_i \delta_{\gamma i}, \quad \gamma = \overline{2, 7};$$

$$\mu = 1 - \frac{\int_0^{\infty} \int_0^{t_i} \varphi^{\text{BX}}(r_{\text{BX}}) \int_0^{t_i} P(t) dt dr_{\text{BX}} \int_0^{\infty} \varphi^{\text{BX}}(r_{\text{BX}}) \int_0^{\infty} r^3 P(t) dt dr_{\text{BX}}}{\int_0^{\infty} r_{\text{BX}}^3 \varphi^{\text{BX}}(r_{\text{BX}}) dr_{\text{BX}}};$$

$$\hat{\varphi}(r) = -\int_r^{\infty} \varphi_{\text{вх}}(r_{\text{вх}}) P(f(r_{\text{вх}}, r)) f'_r(r_{\text{вх}}, r) dr_{\text{вх}}; \quad \varphi(r) = \hat{\varphi}(r) / \left( \int_0^{\infty} \hat{\varphi}(r) dr \right);$$

$$W_2 = k_{02} \exp(-E_2 / RT) C_A C_{\text{АК}} C_{\text{СК}}^{0,87}; \quad W_3 = k_{03} \exp(-E_3 / RT) C_{\text{АК}}^4 / P_r;$$

$$W_4 = k_{04} \exp(-E_4 / RT) C_{\text{АК}} C_D; \quad W_5 = k_{05} \exp(-E_5 / RT) C_D,$$

где  $r$  – текущий радиус частицы амина  $[\text{ArNH}_2]_s$ , мкм;  $B_1, \nu$  – кинетические константы растворения твердой фазы  $\text{ArNH}_2$ ;  $C^*, C$  – соответственно равновесная и текущая концентрации, моль/м<sup>3</sup>;  $T$  – температура реакционной смеси, К;  $\rho$  – плотность твердой фазы  $\text{ArNH}_2$ , кг/м<sup>3</sup>;  $G$  – объемный расход, м<sup>3</sup>/с;  $\mu$  – доля растворившегося амина, отн. ед.;  $M_A$  – молекулярная масса амина, кг/моль;  $V$  – объем модуля, м<sup>3</sup>;  $\varphi(r), \hat{\varphi}(r)$  – соответственно нормированная и ненормированная плотность распределения частиц амина по размеру;  $P(t)$  – плотность распределения вероятности времени пребывания частиц в модуле;  $t$  – текущее время, с;  $\delta_{\gamma i}$  – символ, принимающий значение 0 или  $\pm 1$  в соответствии со схемой

реакции диазотирования;  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $\frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$ ;  $P_r$  – давление газа, Па;  $t_{\text{п}}$  – время полного растворения твердой фазы  $\text{ArNH}_2$  от начального размера  $r_{\text{вх}}$  до  $r$ , с;  $f'_r(r_{\text{вх}}, r)$  – производная функции  $f(r_{\text{вх}}, r)$  по  $r$ ;  $W_1$  – скорость растворения частицы  $\text{ArNH}_2$ , мкм/с;  $W_i, i = \overline{2,5}$  – скорость  $i$ -ой химической реакции,  $\frac{\text{моль}}{\text{м}^3 \cdot \text{с}}$ ;  $k_{0i}, (i = \overline{2,5})$  – предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса для константы скорости  $i$ -ой реакции;  $E_i, (i = \overline{2,5})$  – энергия активации  $i$ -ой реакции,  $\frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$ .

Индексы: вх – на входе в реактор (модуль); А – амин ( $\text{ArNH}_2$ );  $N$  – нитрит натрия ( $\text{NaNO}_2$ ); АК – азотистая кислота ( $\text{HNO}_2$ ); СК – соляная кислота ( $\text{HCl}$ );  $D$  – диазосоединение ( $\text{ArN}_2\text{Cl}$ );  $L$  – жидкая фаза;  $S$  – твердая фаза;  $\gamma$  – номер компонента реакционной смеси;  $i$  – номер реакции.

Математическая модель статички многоцарговой установки диазотирования представляет собой систему нелинейных алгебраических уравнений, для решения которой используется модифицированный метод Ньютона. Причем основные затраты машинного времени приходится на многократное интегрирование нелинейных функций, заданных алгоритмом своего вычисления. Для повышения эффективности алгоритма необходимо использовать аппроксимационные кубические сплайны, построенные с применением явных формул для вычисления локальных базисных сплайнов.

Результаты исследования статических режимов процесса диазотирования в трехмодульном проточном реакторе приведены на рис. 6 – 9.

Анализ приведенных зависимостей на рис. 6 – 9 показывает, что температура в зоне реакции диазотирования является важным технологическим параметром, влияющим на качественные показатели процесса диазотирования. Так из рис. 6 видно, что наиболее высокий выход диазосоединения происходит при температуре реакционной смеси 290 – 300 °К. При этом содержание нитрозных газов в продуктах реакции в этом диапазоне практически равно нулю (см. рис. 8). В то же время температура 295 – 297 °К является своего рода критической, так как начиная с этой температуры, с одной стороны, проскок амина входит в допустимый диапазон, а, с другой стороны, начинает резко расти количество диазосмол (рис. 7). Таким образом при дальнейшей постановке и решении задачи оптимизации технологических режимов и оптимальном проектировании в первую очередь необходимо учитывать влияние температуры на гладкость протекания процесса диазотирования, выбрав ее в качестве одного из важнейших оптимизирующих параметров.

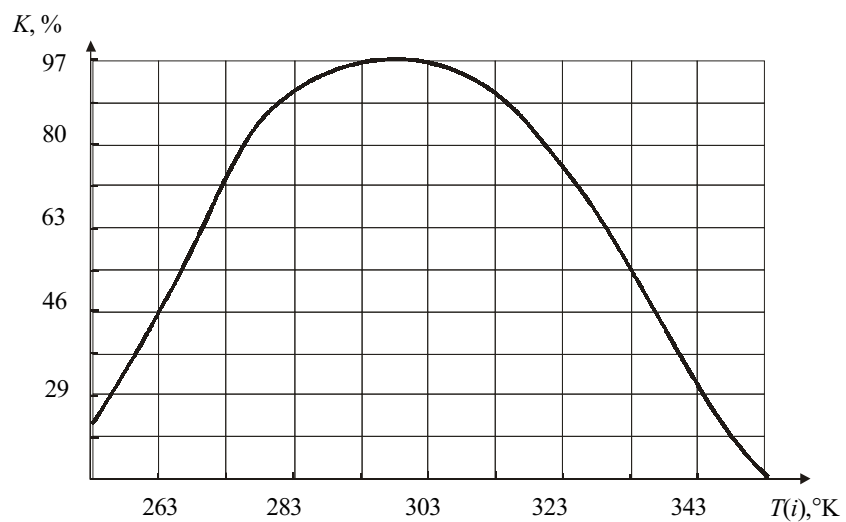


Рис. 6 Зависимость выхода диазосоединения  $K$  от температуры в реакторе  $T(i)$

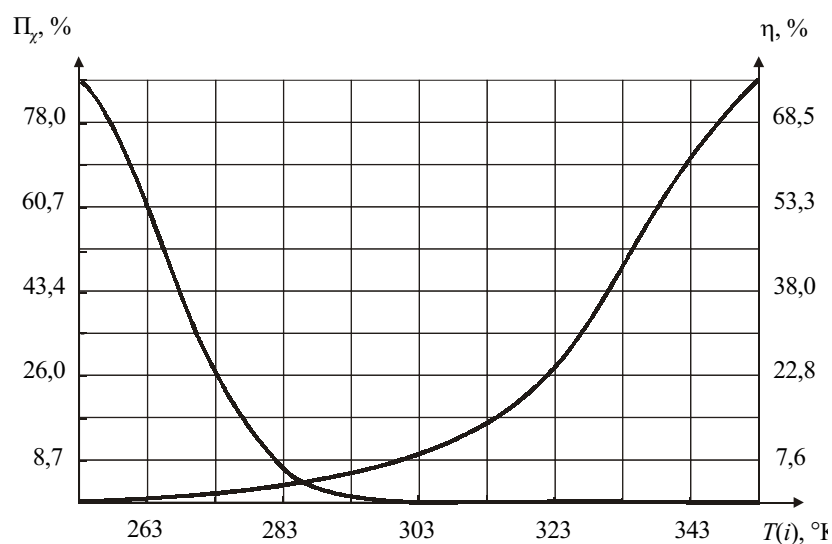


Рис. 7 Зависимость проскока амина  $\eta$  и количества диазомол  $\Pi_x$  от температуры в реакторе  $T(i)$

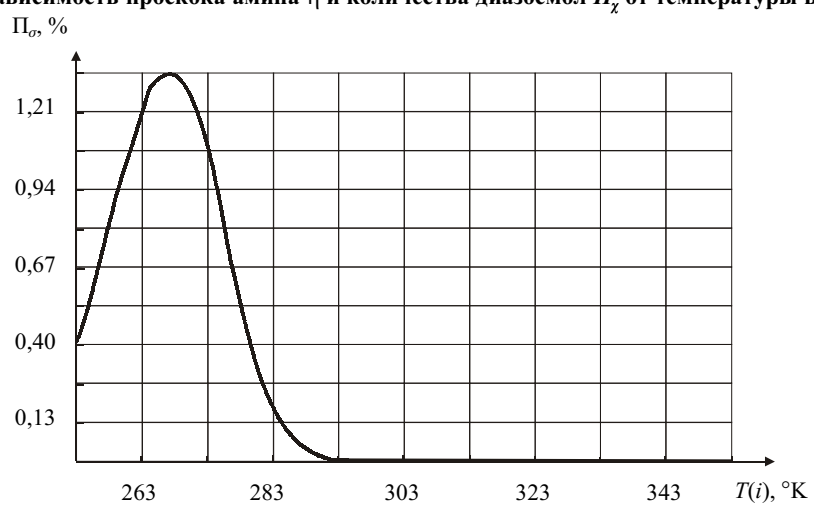


Рис. 8 Зависимость содержания нитрозных газов  $\Pi_\sigma$  от температуры в реакторе  $T(i)$

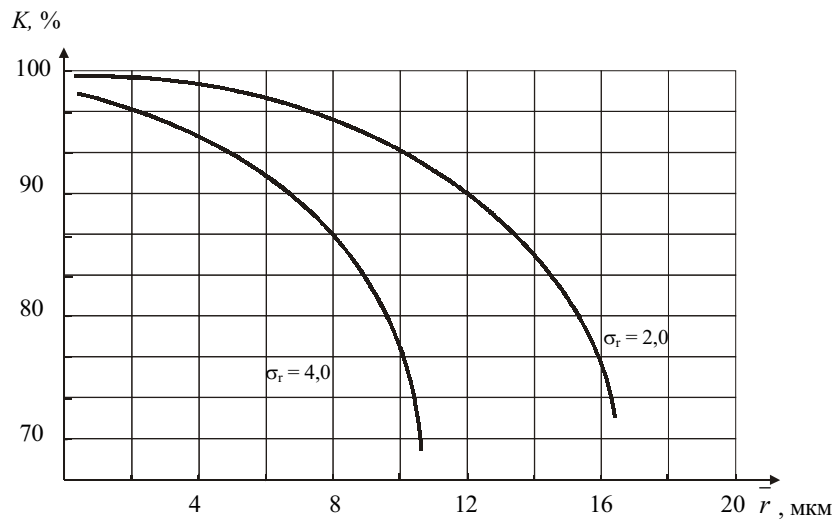
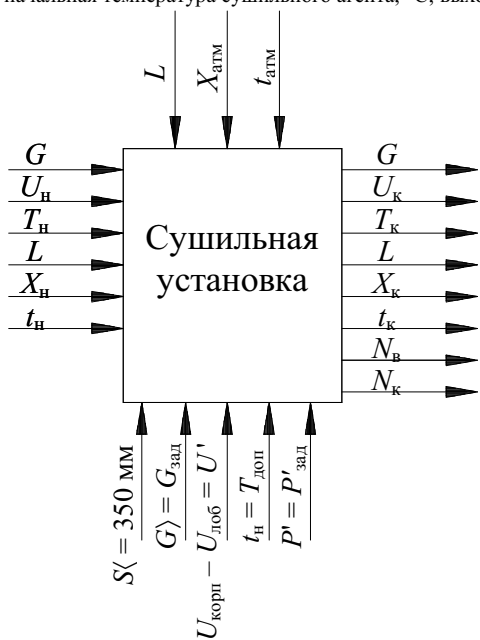


Рис. 9 Зависимость выхода диазосоединения  $K$  от среднего размера  $\bar{r}$  частиц твердой фазы в питании реактора ( $\sigma_r$  – среднее квадратичное отклонение гранулометрического состава амина)

**Пример 2** Исследование процесса сушки

В качестве объекта моделирования рассматривается сушильная установка, содержащая сушильный аппарат с движущимся плотным поперечно-продуваемым кольцевым слоем, электрокалорифер и вентилятор. Структурная схема объекта моделирования представлена на рис. 10. Входные параметры:  $G$  – расход материала, кг/с;  $u_n$  – начальное влагосодержание материала, кг/кг;  $T_n$  – начальная температура материала, °C;  $L$  – расход сушильного агента, кг/с;  $x_n$  – начальное влагосодержание сушильного агента, кг/кг;  $t_n$  – начальная температура сушильного агента, °C; выходные параметры:  $G$  – расход материала, кг/с;  $u_k$  – конечное влагосодержание материала, кг/кг;  $T_k$  – конечная температура материала, °C;  $L$  – расход сушильного агента, кг/с;  $x_k$  – конечное влагосодержание сушильного агента, кг/кг;  $t_k$  – конечная температура сушильного агента, °C;  $N_n$  – мощность вентилятора, кВт;  $N_k$  – мощность калорифера, кВт; возмущения:  $L$  – расход атмосферного воздуха, кг/с;  $x_{атм}$  – влагосодержание атмосферного воздуха, кг/кг;  $t_{атм}$  – температура атмосферного воздуха, °C;

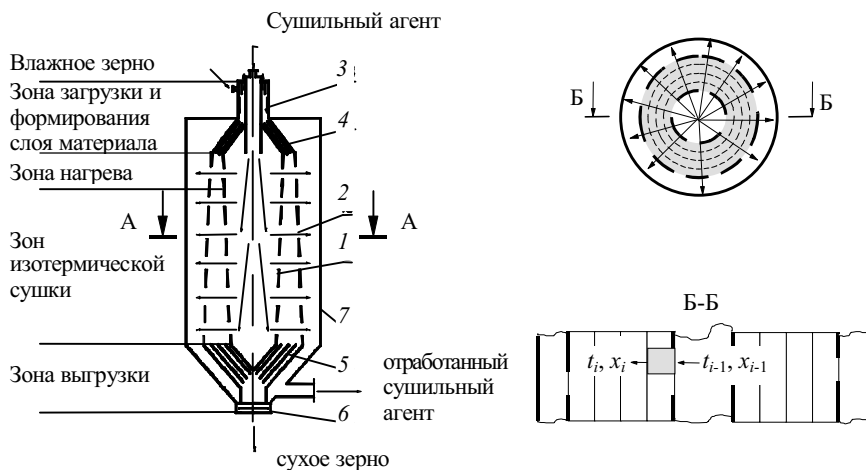


ограничения:  $S$  – толщина слоя, мм;  $G_{зад}$  – производительность по сухому материалу, кг/с;  $\Delta u$  – предельно допустимое отклонение по влагосодержанию, кг/кг;  $T_{доп}$  – допустимая температура нагрева материала, °C;  $P_{зад}$  – заданное гидравлическое сопротивление аппарата, Па.

Физическая модель и схема движения фаз в кольцевой камере сушильного аппарата может быть представлена следующим образом (рис. 11). Сушильная камера с кольцевым слоем разделена на две зоны: предварительного нагрева материала и сушки. Влажный материал подается в кольцевую камеру сушилки, заполняя все пространство зон предварительного нагрева и сушки. Сушильный агент по центральной распределительной трубе поступает в зону сушки, где поперечно продувается через кольцевой слой движущегося материала. После чего отработанный сушильный агент подается в зону предварительного нагрева и затем дважды отработанный сушильный агент выбрасывается в атмосферу. Высушенный материал непрерывно выгружается из аппарата.

Рис. 10 Структурная схема сушильной установки





**Рис. 11** Схема движения фаз в сушильном аппарате с движущимся плотным поперечно-продуваемым кольцевым слоем:

1 – внутренняя перфорированная стенка; 2 – наружная перфорированная стенка; 3 – верхняя конусная часть; 4, 5 – распределительные конуса; 6 – выгрузное устройство; 7 – корпус

При составлении математического описания процесса тепло- и массообмена в зоне сушки принимались следующие допущения:

1) аналогом процесса сушки дисперсного материала в движущемся слое служит периодический процесс сушки в неподвижном слое. При этом время сушки в неподвижном слое соответствует времени пребывания движущегося слоя в аппарате;

2) частицы высушиваемого материала имеют каноническую форму (пластина, шар, цилиндр);

3) неподвижный слой представляется как совокупность элементарных слоев толщиной, пропорциональной эквивалентному диаметру частицы;

4) фильтрация сушильного агента через неподвижный элементарный слой осуществляется в режиме идеального вытеснения;

5) в элементарном слое соблюдается равенство температур материала и сушильного агента.

В соответствии с принятыми допущениями математическое описание процесса сушки материала с высоким внутридиффузионным сопротивлением в элементарном слое включает:

– уравнения материального и теплового балансов

$$G(\bar{u}'_н - \bar{u}'_к) = L(x_н - x_к)\tau_i, \quad (27)$$

$$Lc_{c.a.}(t_н - t_к)\tau_i = G(\bar{u}'_н - \bar{u}'_к)r_u; \quad (28)$$

– нелинейное уравнение диффузии влаги в частице материала

$$\frac{\partial u(r_{\text{экв}}, \tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r D_e(u, T) \frac{\partial u(r, \tau)}{\partial r} \right], \quad 0 \leq r \leq R_{\text{экв}}, \tau > 0; \quad (29)$$

с начальным

$$u(r, 0) = u_н = \text{const}; \quad (30)$$

и граничными условиями

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(0, \tau)}{\partial r} &= 0, \quad \tau > 0 \\ u(R_{\text{экв}}, \tau) &= u_p, \quad \tau > 0 \end{aligned} \quad (31)$$

Габариты сушильного аппарата с движущимся плотным поперечно-продуваемым кольцевым слоем (рис. 11) рассчитываются по уравнениям:

– внутренний диаметр зоны сушки  $D_{\text{вн}}$

$$D_{\text{вн}} = \sqrt{(4L) / \pi \nu_{\text{ф}}^{\text{суп}} \rho_{c.a.}}; \quad (32)$$

– наружный диаметр аппарата

$$D_a = D_{\text{вн}} + 2S, \quad (33)$$

где  $S$  определяется из решения задачи оптимизации процесса и аппарата сушки;

– высота зоны сушки

$$H_{\text{суш}} = v_m \tau_{\text{суш}} \quad (34)$$

Процесс предварительного нагрева материала описывается с помощью уравнений Шумана. Для определения рабочего объема зоны предварительного нагрева материала используется выражение

$$V_{\text{нагр}} = (G \tau_{\text{нагр}}) / (1 - \varepsilon) \rho_m \quad (35)$$

из которого по времени прогрева движущегося слоя вычисляется высота зоны предварительного нагрева  $H_{\text{нагр}}$ .

Общая высота сушильного аппарата складывается из высот зон предварительного нагрева и сушки материала.

Математическое описание сушильной установки включает в себя выражения (27) – (35) для сушильного аппарата и известные эмпирические зависимости для определения общего гидравлического сопротивления сушильного аппарата  $\Delta P_a$ :

$$\Delta P_a = \Delta P_{\text{нагр}} + \Delta P_{\text{суш}} \quad (36)$$

где  $\Delta P_{\text{нагр}}$ ,  $\Delta P_{\text{суш}}$  – гидравлические сопротивления зоны нагрева и зоны сушки соответственно.

Гидравлическое сопротивление зоны сушки  $\Delta P_{\text{суш}}$  определяется выражениями:

– сопротивление перфорированных стенок, Па:

$$\Delta P_{\text{ст}}^D = \frac{0,503 v_0^2 \rho_{c.a} (1 - \phi^2)}{C_c^2} \quad (37)$$

– сопротивление слоя дисперсного материала (например, зерновых культур), Па:

$$\Delta P_{\text{сл}}^D = 9,81 A S v_{\text{тм}}^n \quad (38)$$

$$\Delta P_{\text{суш}} = \sum \Delta P_{\text{ст}}^D + \Delta P_{\text{сл}}^D \quad (39)$$

Мощность, затрачиваемая на продувку слоя зоны сушки, кВт

$$N_B^D = \frac{V_L \Delta P_{\text{суш}}}{1000} \quad (40)$$

Для электрокалорифера определяются:

– расход тепла на нагрев сушильного агента, кДж

$$Q_H = L c_{c.a.} (t_H - t_K); \quad (41)$$

– гидравлическое сопротивление калорифера, Па

$$\Delta P_H = f(v_{c.a.}) \quad (42)$$

Ввиду незначительности сопротивления калорифера данной величиной можно пренебречь.

– мощность электрокалорифера, кВт

$$N_H = \frac{Q_H}{\eta} \quad (43)$$

где  $\eta$  – КПД электрокалорифера.

Гидравлическое сопротивление зоны предварительного нагрева материала  $\Delta P_{\text{нагр}}$  и мощность  $N_B^H$ , затрачиваемая на продувку слоя в этой зоне определяются выражениями, аналогичными (37) – (40).

В выражениях (37) – (40):  $\phi$  – доля живого сечения (степень перфорации) стенки;  $v_0 = v_m / \phi$  – скорость потока в отверстиях стенки, м/с;  $C_c$  – коэффициент сопротивления стенки зависящий от соотношения диаметра отверстий перфорации к толщине стенки;  $A$  и  $n$  – эмпирические коэффициенты;  $V_L$  – объемный расход сушильного агента, м<sup>3</sup>/с.

Отметим, что скорость фильтрации сушильного агента через слой материала в зоне предварительного нагрева материала также ограничивается 0,2 – 0,3 м/с, так как большие скорости в слое приводят к повышению гидравлического сопротивления в сушилке.

Общая высота сушильного аппарата складывается из высот зон предварительного нагрева и сушки материала.

Мощность привода вентилятора, кВт

$$N_B = N_B^H + N_B^D \quad (44)$$

Математическое описание сушильной установки включает в себя выражения (27) – (44) и представляет собой систему из алгебраических, обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных. Решение такой системы целесообразно производить с привлечением средств вычислительной техники.

Опишем алгоритм расчета процесса сушки дисперсного материала с высоким внутридиффузионным сопротивлением в неподвижном слое. Исходными данными для первого (лобового) элементарного слоя

являются: температура сушильного агента  $t_{н1}$  и его влагосодержание  $x_{н1}$  на входе в слой, начальные значения температуры материала  $T_n$  и его влагосодержания  $u_n(r) = \text{const}$ ;

**Шаг 1.** По значениям  $t_n$  и  $x_n$  рассчитывается значение равновесного влагосодержания на поверхности частицы  $u_p$  (по экспериментальным кривым сорбции для полимерных материалов и литературным данным для зерновых культур), рассчитывается коэффициент диффузии влаги в частице  $D_e = f(u)_i$ ; задается шаг  $\tau_1$  по времени сушки (подбирается в процессе проведения численного эксперимента, исходя из заданной точности вычислений) и решается на отрезке  $[0, \tau_1]$  дифференциальное уравнение в частных производных (29) с краевыми условиями (30), (31) конечно-разностным методом. Краевая задача аппроксимируется на равномерной сетке четырехточечной однородной разностной схемой неявного типа. Разностные соотношения получали интегро-интерполяционным методом. Система конечно-разностных нелинейных алгебраических уравнений решалась итерационно методом прогонки.

**Шаг 2.** Вычисляется среднеобъемное влагосодержание высушиваемого материала в элементарном слое  $\bar{u}$  в момент времени  $\tau_1$ :

$$\bar{u}(\tau_1) = \frac{2}{R_{\text{экв}}^3} \int_0^{R_{\text{экв}}} ru(r, \tau_1) dr. \quad (45)$$

**Шаг 3.** Из уравнений материального и теплового балансов для элементарного слоя (27), (28) рассчитывается температура сушильного агента на выходе из первого элементарного слоя  $t_{к1}$ . Рассчитывается средняя температура слоя как  $t_{\text{ср1}} = (t_{н1} + t_{к1})/2$  и среднее влагосодержание сушильного агента  $x_{\text{ср1}} = (x_{н1} + x_{к1})/2$ . По полученным параметрам сушильного агента уточняется значение равновесной влажности на поверхности частицы и осуществляется переход к шагу 1. После очередного расчета и определения значения  $t$  и  $x$  в элементарном слое проверяется выполнение условия

$$\left| (x^{i+1} - x^i) / x^i \right| \leq \delta_1, \%, \quad (46)$$

$$\left| (t^{i+1} - t^i) / t^i \right| \leq \delta_2, \%, \quad (47)$$

где  $i$  – номер итерации;  $\delta_1, \delta_2$  – погрешность расчета.

Если условия (46), (47) выполняются, то осуществляется переход к следующему шагу 4, в противном случае итерации продолжаются.

**Шаг 4.** Выполняется расчет распределения влагосодержания материала, температуры и влагосодержания сушильного агента в следующем по порядку элементарном слое. Расчет проводится аналогично (см. шаги 1, 2) до последнего (кормового) элементарного слоя. После расчета выходных переменных кормового слоя ( $\bar{u}_N, t_N, x_N$ ) проверяется выполнение условия

$$\left| \bar{u}_N - \bar{u}_{\text{зад}} \right| \leq \Delta u_{\text{доп}}, \quad (48)$$

где  $N$  – число элементарных слоев;  $\Delta u_{\text{доп}}$  – предельно допустимое отклонение по влагосодержанию. Если это условие не выполняется, то задается новый отрезок времени  $[\tau_1, \tau_2]$ , начальные данные принимаются при  $\tau_1$ , интегрируется уравнение диффузии (29) на отрезке  $[\tau_1, \tau_2]$  и вновь последовательно производится расчет согласно шагам 1 – 4, в противном случае осуществляется переход к шагу 5.

**Шаг 5.** Производится расчет времени процесса сушки  $\tau_{\text{суш}}$  распределений среднего влагосодержания материала, температуры и влагосодержания сушильного агента по толщине слоя, габаритов сушильного аппарата с движущимся плотным поперечно-продуваемым кольцевым слоем (рис. 11) по уравнениям (32) – (35), общего гидравлического сопротивления сушильного аппарата, мощности, затрачиваемой на продувку слоя материала в сушильной камере и мощности электрокалорифера и осуществляется вывод результатов расчета  $\bar{u}_j, x_j, T_j, j=1, N, t_N, \Delta P_a, N_k, N_k, \tau_{\text{суш}}, D_a, H_a$ .

По известным литературным данным произведено тестирование разработанного алгоритма, показавшее сходимость результатов расчетов.

На рис. 12 – 14 представлены результаты расчета процесса сушки зерновых культур: пшеницы "Безенчукская 139" в сушильном аппарате с движущимся плотным поперечно-продуваемым кольцевым слоем.

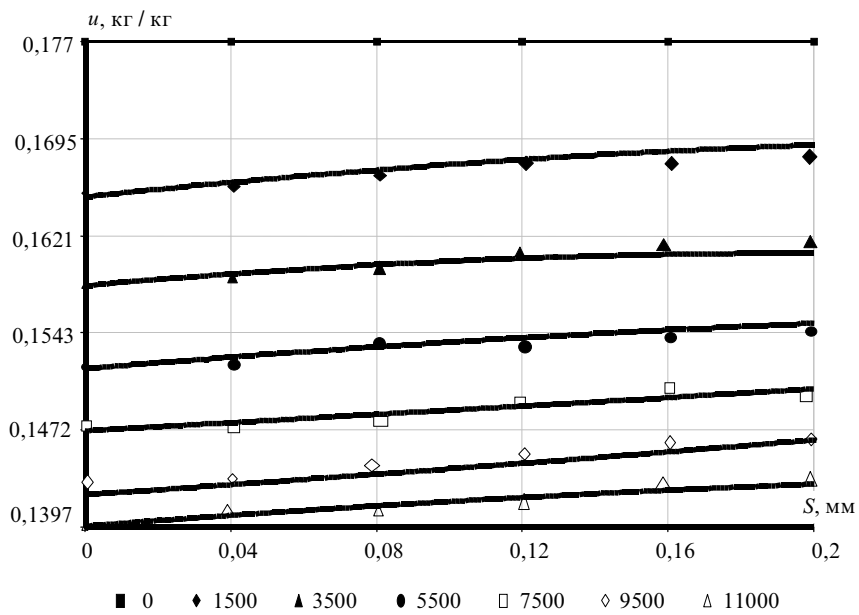


Рис. 12 Распределение влагосодержания материала по толщине кольцевого слоя для различных моментов времени

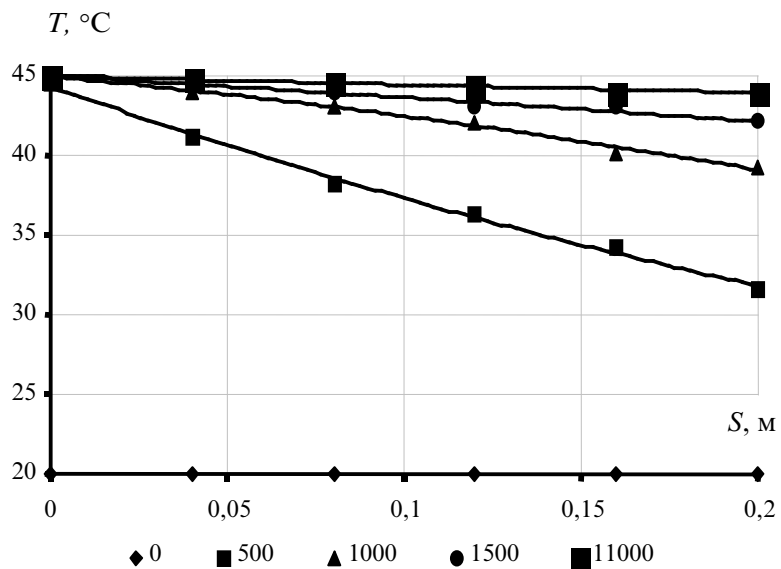
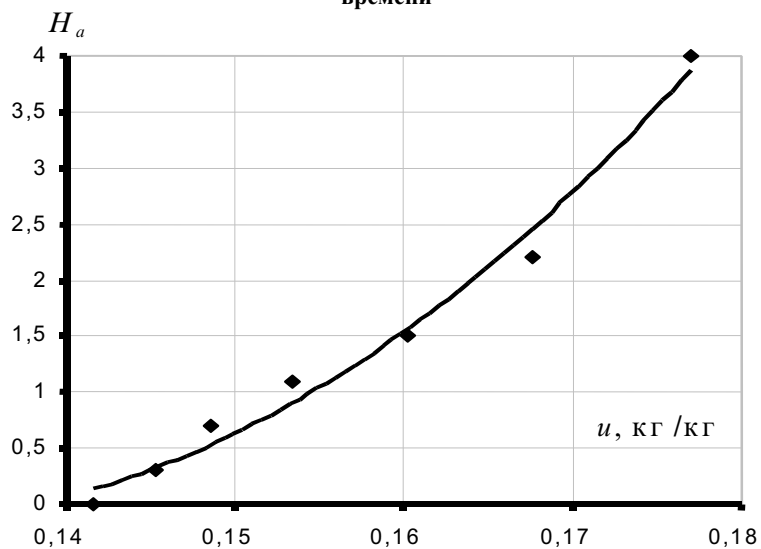


Рис. 13 Распределение температуры сушильного агента по толщине кольцевого слоя для различных моментов времени



**Рис. 14 Распределение среднего значения влагосодержания  
по высоте сушильной камеры**

Распределение влагосодержания высушиваемого материала, а также распределения влагосодержания и температуры сушильного агента по толщине слоя имеет линейный характер, что свидетельствует о незначительном количестве удаляемой влаги в течение процесса сушки. В связи с этим при сушке указанных материалов в неподвижном плотном поперечно-продуваемом слое влагосодержание сушильного агента увеличивается не более чем на 20 %, а его температура снижается не более чем на 15 °С. Характерные изменения влагосодержания и температуры сушильного агента свидетельствуют о постепенном насыщении сушильного агента испаряемой влагой и понижении при этом его температуры. Перегиб графиков показывает наличие испарительного охлаждения на входе в элементарный слой.

**КОНТРОЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ**

В качестве объекта компьютерного моделирования студенту определяется конкретный технологический процесс и оборудование (выдается из базы заданий технологических процессов и оборудования кафедры ТО и ПТ в соответствии с номером в журнале преподавателя).

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1972. 736 с.
2. Кафаров В. В. Основы массопередачи. М.: Высшая школа, 1979. 439 с.
3. Кафаров В. В. Методы кибернетики в химии и химической технологии М.: Химия, 1976. 464 с.
4. Балакирев В. С. Математическое описание объектов управления в химической промышленности М.: МИХМ, 1970. 312 с.
5. Дудников Е. Г., Балакирев В. С. Построение математических моделей химико-технологических объектов. М.: Химия, 1970. 312 с.
6. Кафаров В. В., Глебов М. Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств. М.: Высшая школа, 1991. 400 с.
7. Кафаров В. В., Винаров А. Ю., Гордеев Л. С. Моделирование химических реакторов М.: Лесная промышленность, 1979. 344 с.
8. Кэмпбелл Д. П. Динамика процессов химической технологии М.: Госхимиздат, 1962. 350 с.
9. Кафаров В. В., Мешалкин В. П., Гуреев Л. В. Оптимизация теплообменных процессов и систем. М.: Энергоатомиздат, 1988. 192 с.
10. Кафаров В. В., Мешалкин В. П. Проектирование и расчет оптимальных систем технологических трубопроводов. М.: Химия, 1991. 368 с.
11. Демиденко Н. Д. Моделирование и оптимизация тепломассообменных процессов в химической технологии. М.: Наука, 1991. 240 с.
12. Вигдорчик Е., Шейнин В. А. Математическое моделирование непрерывных процессов растворения в химической технологии. М.: Химия, 1971. 248 с.
13. Фролов В. Ф. Моделирование сушки дисперсных материалов. М.: Химия, 1987. 298 с.

14. Анисимов И. В., Бодров В. И., Покровский В. Б. Математическое моделирование и оптимизация ректификационных установок. М.: Химия, 1975. 216 с.
15. Федоткин И. М. Математическое моделирование технологических процессов. Киев: Высшая школа, 1988. 415 с.
16. Остапчук Н. П. Основы математического моделирования процессов пищевых производств. Киев: Высшая школа, 1991. 367 с.
17. Грачев Ю. П., Тубольцев А. К., Тубольцев В. К. Моделирование и оптимизация тепло- и массообменных процессов пищевых производств. М.: Легкая и пищевая промышленность, 1984. 215 с.
18. Левич В. Г. Физико-химическая гидродинамика. М.: ГИФМЛ, 1959. 699 с.
19. Цирлин А. М., Миронова В. А., Крылов Ю. М. Сегрегированные процессы в химической промышленности. М.: Химия, 1986. 232 с.
20. Кафаров В. В., Дорохов И. Н., Кольцова Э. М. Системный анализ процессов химической технологии. Процессы массовой кристаллизации из растворов и газовой. М.: Наука, 1983. 368 с.
21. Дьяконов С. Г., Елизаров В. И., Лаптев А. Г. Теоретические основы и моделирование процессов разделения веществ. Казань: КУ, 1993. 437 с.
22. Хеммельблау Д. Нелинейное программирование. М.: МИР, 1975. 534 с.
23. Реклейтис Г., Рейвиндран А., Рэгсдел К. Оптимизация в технике: В 2-х кн.: Пер. с англ. М.: Мир, 1986. 670 с.
24. Бояринов А. И., Кафаров В. В. Методы оптимизации в химической технологии. М.: Химия, 1975. 576 с.

Учебное издание

## **КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

Методические указания

Составители:

**Дворецкий** Станислав Иванович,  
**Майстренко** Александр Владимирович

Редактор Т. М. Федченко

Компьютерное макетирование И. В. Евсеевой

ЛР № 020851 от 13.01.99 г. Плр № 020079 от 28.04.97 г.

Подписано к печати 15.08.2001.

Гарнитура Times New Roman. Формат 60 × 84/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Объем: 2,09 усл. печ. л.; 1,93 уч.-изд. л.

Тираж 100 экз. С 547.

Издательско-полиграфический центр ТГТУ  
392000, Тамбов, Советская, 106, к. 14