

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ. ГИДРОДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

### 1 Математическое моделирование. Основные понятия и определения

Процессы химической технологии – это сложные физико-химические системы. Участвующие в них потоки вещества, как правило, многофазные и многокомпонентные. В ходе протекания процесса в каждой точке фазы и на границах раздела происходит перенос импульса, энергии, массы. Весь процесс в целом протекает в аппарате с конкретными геометрическими характеристиками, оказывающими, в свою очередь, влияние на характер этого процесса.

Как же изучать химико-технологические процессы? Ключ к решению этой проблемы дает метод математического моделирования, базирующийся на стратегии системного анализа, сущность которой заключается в представлении процесса как сложной взаимодействующей иерархической системы с последующим качественным анализом ее структуры, разработкой математического описания и оценкой неизвестных параметров. Такой подход позволяет наиболее полно установить совокупность явлений всего процесса и связей между ними.

Под **математическим моделированием** понимают изучение свойств объекта на математической модели. Его целью является определение оптимальных условий протекания процесса, управление им на основе математической модели и перенос результатов на объект.

Основным понятием метода математического моделирования является понятие математической модели. **Математической моделью** называется приближенное описание какого-либо явления или процесса внешнего мира, выраженное с помощью математической символики.

Математическое моделирование включает три взаимосвязанных этапа:

1) составление математического описания изучаемого объекта. Данная задача состоит:

– во-первых, в установлении связей между параметрами процесса, а также дополнительных условий, которые обычно называются граничными и начальными условиями;

– во-вторых, в формализации процесса в виде системы математических соотношений, характеризующих изучаемый объект.

Математическое описание составляется на основе материальных и энергетических балансов, а также физических законов, определяющих переходные процессы в объектах либо характеризующих специфические особенности процесса. В систему математического описания в общем случае могут входить алгебраические уравнения, обыкновенные дифференциальные уравнения и в частных производных, эмпирические формулы, логические условия и др.

2) выбор метода решения системы уравнений математического описания и реализация его в форме моделирующей программы;

Параметры (коэффициенты) составленных уравнений функционально зависят от определяющих размеров химико-технологического аппарата (диаметров, длин и т. д.),

свойств обрабатываемых веществ (плотностей, вязкостей и т. п.) и величин, характеризующих протекание физико-химических процессов (констант скорости реакции, коэффициентов диффузии и др.). Эти параметры либо задают предварительно, либо рассчитывают, либо находят по формулам, вытекающим из известных критериальных зависимостей. Нередко для получения численных значений коэффициентов требуется постановка специальных лабораторных опытов по изучению каждого из происходящих в объекте процессов.

В отдельных наиболее простых случаях возможны точные аналитические решения уравнений модели. Но, как правило, объекты химической технологии отличаются сложностью и для реализации их математических моделей применяется вычислительная техника.

3) установление соответствия (адекватности) модели объекту. Данный этап необходимо проводить по той причине, что любая модель является лишь приближенным отражением реального процесса вследствие допущений, всегда принимаемых при составлении математической модели. Решением этой задачи устанавливается, насколько принятые допущения правомерны, и тем самым определяется, применима ли полученная модель для исследуемого процесса. При необходимости проводится коррекция математической модели. С этой целью используются результаты измерений на самом объекте или на его физической модели, воспроизводящей в сравнительно небольших масштабах основные физические закономерности объекта моделирования.

Все многообразие математических моделей разделяют на несколько классов по нескольким признакам в зависимости от конкретной реализации моделируемого процесса и его аппаратного оформления:

**1) по пространственным признакам:**

– **модели с сосредоточенными параметрами.** Для данного класса моделей характерно постоянство переменных в пространстве. Математическое описание включает алгебраические уравнения либо дифференциальные уравнения первого порядка для нестационарных процессов. Примером объекта, описываемого данным классом моделей, может служить реактор идеального смешения (РИС);

– **модели с распределенными параметрами.** Если основные переменные процесса изменяются как во времени, так и в пространстве, или если указанные изменения происходят только в пространстве, то модели, описывающие такие процессы, называются моделями с распределенными параметрами. Их математическое описание включает обычно дифференциальные уравнения в частных производных, либо обыкновенные дифференциальные уравнения в случае стационарных процессов с одной пространственной переменной. Примером процесса, описываемого такими моделями, служит реактор идеального вытеснения;

**2) по характеру режимов:**

– **статические модели.** Статические модели отражают работу объекта в стационарных условиях, т.е. когда параметры процесса не меняются во времени. Соответственно математическое описание в статических моделях не включает время как переменную и состоит из алгебраических уравнений либо дифференциальных уравнений в случае объектов с распределенными параметрами;

– **динамические модели.** Динамическая модель отражает изменение объекта во времени. Математическое описание таких моделей обязательно включает производную по времени. Часто динамическую модель объекта строят в виде передаточных функций, связывающих входные и выходные переменные;

**3) по природе процессов, протекающих в моделируемых объектах:**

– **детерминированные модели** - модели, в которых значение выходной характеризующей величины однозначно определяется значением входной величины. При составлении таких моделей используют фундаментальные законы физики (перенос вещества, энергии, импульса, законы хим. кинетики);

– **вероятностные модели** – модели описывающие стохастический (случайный) процесс, в котором изменение определяющих величин происходит беспорядочно и часто дискретно. При этом значение входной величины не находится в однозначном соответствии с входной. При составлении этих моделей используют аппарат теории вероятностей, при помощи которого параметры состояния оцениваются в терминах мат. ожидания, а возмущающие параметры характеризуются вероятностными законами распределения.

Схему построения математической модели химико-технологического процесса в первом приближении можно представить таким образом:

1) этап составления кинетических уравнений, описывающих «элементарный» процесс химического превращения;

2) этап выбора типа основного аппарата (реактора). В ходе построения модели необходимо произвести выбор типа реактора путем сравнения возможных вариантов с учетом влияния на процесс особенностей конструктивного оформления аппарата. С этой целью могут быть использованы последовательные расчеты нескольких вариантов и выбор лучшего из них, анализ лабораторных кинетических экспериментов, информация о работе реакторов при осуществлении аналогичных процессов и др;

3) этап составления математического описания «элементарного» процесса перемещения веществ или построение гидродинамической модели. Для получения уравнений гидродинамической модели необходимо провести всесторонний анализ физической сущности процесса, изучить особенности структуры реагирующей среды (чаще всего движущихся потоков) и принять некоторые допущения, позволяющие упростить зависимости между параметрами и сохранить физическую картину процесса. Если принятые допущения не вносят существенных отклонений от реального процесса, то рекомендуется применять типовые гидродинамические модели или их комбинации, которые позволяют описывать гидродинамические режимы сравнительно простыми уравнениями, полученными для идеальных структур или реальных потоков с известными упрощениями.

4) этап изучения процессов тепло- и массообмена и составление их математические описания в соответствии с гидродинамическим режимом (структурой) движения реакционной среды.

5) в ряде случаев исследуемые процессы могут отличаться какими-либо особенностями, которые учитываются при моделировании введением в математическое описание теоретических, полуэмпирических и эмпирических соотношений между параметрами процесса.

6) заключительным этапом построения математической модели является объединение описаний всех исследованных «элементарных» процессов в единую систему уравнений.

## **2 Математическое описание процессов перемещения веществ (гидродинамические модели)**

Любой химико-технологический процесс, как правило, сопровождается перемещением материальных потоков жидкости, газа или твердых частиц. Поэтому при

составлении математической модели особое значение приобретает описание движения потоков веществ.

Поведение потоков в реальных аппаратах настолько сложно, что в настоящее время дать строгое математическое описание их в большинстве случаев не представляется возможным. В то же время известно, что структура потоков оказывает существенное влияние на эффективность химико-технологических процессов, поэтому ее необходимо учитывать при моделировании процессов. При этом математические модели структуры потоков являются основой, на которой строится математическое описание химико-технологического процесса. Точное описание реальных потоков приводит к чрезвычайно трудным для решения задачам. Поэтому разработанные к настоящему времени модели структуры потоков в аппаратах являются достаточно простыми и носят полуэмпирический характер. Тем не менее, уже они позволяют получать модели, достаточно точно отражающие реальный физический процесс (модели, адекватные объекту).

Давайте рассмотрим экспериментальные методы исследования структуры потоков в реальных аппаратах и наиболее распространенные математические модели структуры потоков.

## 2.1 Методы исследования структуры потоков

Сущность указанных методов заключается в том, что в поток на входе его в аппарат каким-либо способом вводят индикатор, а на выходе потока из аппарата измеряют концентрацию индикатора как функцию времени. Эта выходная кривая называется **функцией отклика системы на типовое возмущение** по составу потока.

В качестве индикаторов используют красители, растворы солей и кислот, изотопы и другие вещества. Требования, предъявляемые к индикатору:

- поведение частиц индикатора в аппарате должно быть подобно поведению частиц потока;
- индикатор не должен вступать во взаимодействие с основным потоком;
- индикатор должен легко измеряться.

Индикатор на входе потока в аппарат вводят в виде стандартных сигналов: импульсного, ступенчатого и циклического. В зависимости от вида возмущающего сигнала различают методы исследования структуры потоков: **импульсный, ступенчатый и циклический**.

**Импульсный метод.** В соответствии с этим методом в поток на входе его в аппарат практически мгновенно, вводят определенное количество индикатора, т.е. в начальный момент времени  $t = 0$ , концентрация индикатора в потоке будет бесконечно велика и входной сигнал будет иметь вид, показанный на рисунке 1.

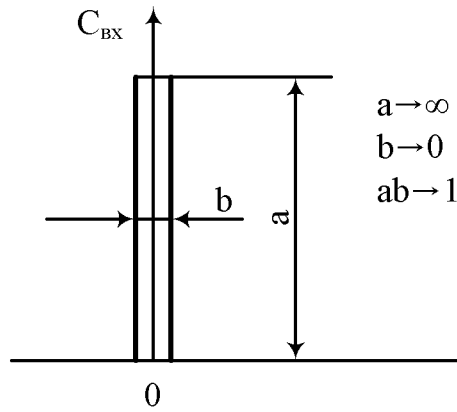


Рисунок 1 – Входной сигнал при импульсной подаче индикатора

При импульсной подаче индикатора на входе на выходе получается **С-кривая**, или импульсная характеристика (обозначим ее  $C_{кр}$ ). Графическое изображение С-кривой удобно представлять в безразмерных координатах. Для этого концентрацию индикатора в потоке на выходе  $C$  относят к его начальной концентрации  $C_0$  и откладывают по оси

ординат значения  $C_{кр} = \frac{C}{C_0}$ , а также используют понятие безразмерного времени  $\theta = \frac{t}{\tau}$ ,

где  $t$  – натуральное время;  $\tau = \frac{V}{v}$  – среднее время пребывания частиц потока в аппарате. Типичная форма отклика представленная на стандартный импульсный сигнал изображена на рисунке 2. При этих условиях площадь, ограниченная С-кривой, всегда равна единице. Вид С-кривой определяется структурой потока в аппарате.

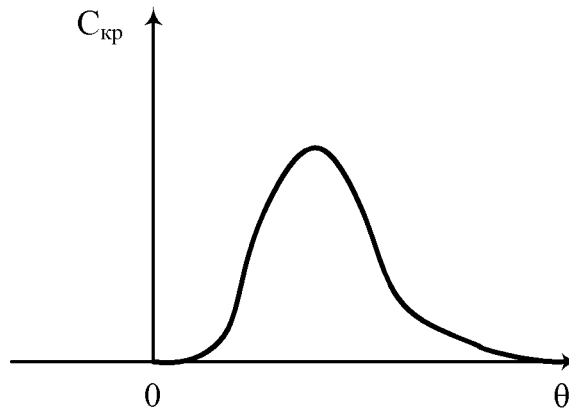


Рисунок 2 – Вид выходного сигнала при импульсном вводе трассера (С-кривая)

**Метод ступенчатого возмущения.** При использовании этого метода в поток жидкости, поступающей в аппарат и не содержащей индикатора, вносят некоторое количество индикатора таким образом, что его концентрация во входящем потоке изменяется скачком от нуля до некоторого значения и в дальнейшем поддерживается на этом уровне. Входной сигнал при этом имеет вид, изображенный на рисунке 3.

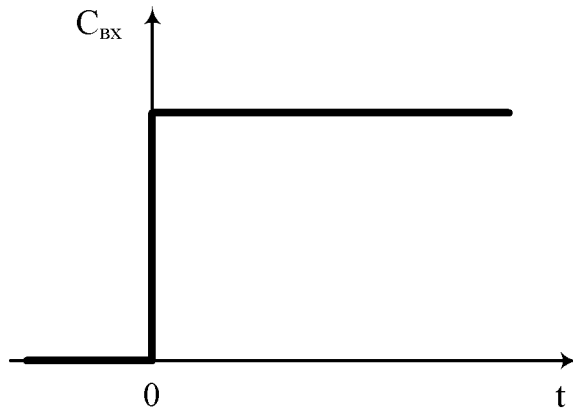


Рисунок 3 – Входной сигнал при ступенчатом вводе индикатора

При стандартном ступенчатом сигнале на входе функция отклика на выходе из аппарата представляет собой зависимость, которую называют **F-кривой** (обозначим ее  $F_{кр}$ ). По координатным осям, в которых обычно строят F-кривую, аналогично предыдущему случаю, откладывают безразмерные единицы. Типичная форма отклика на стандартный ступенчатый сигнал изображена на рисунке 4, из которого следует, что

показатель  $F_{кр}$  в потоке на выходе, равный  $\frac{C}{C_0}$ , изменяется от 0 до 1. F-кривая по существу является временной характеристикой объекта, ее вид тоже определяется лишь свойствами или структурой потока (среды) в аппарате.

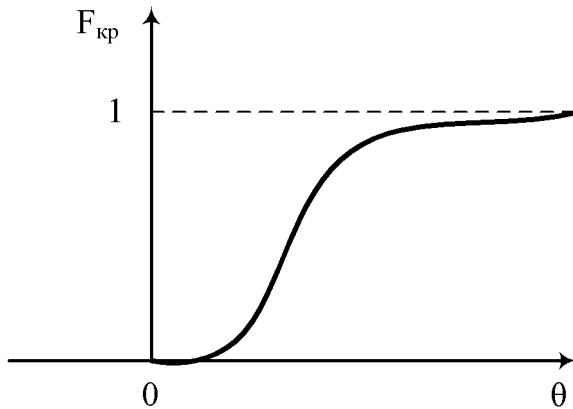


Рисунок 4 – Вид выходного сигнала при ступенчатой подаче трассера (F-кривая)

Поскольку математическая связь между F-кривой и C-кривой выражается соотношениями:

$$\frac{dF_{кр}(t)}{dt} = C_{кр}(t),$$

или

$$F_{кр}(t) = \int_0^t C_{кр}(t) dt,$$

то F-кривую называют интегральной, а C-кривую – дифференциальной кривой.

**Метод синусоидального (импульсного) возмущения.** При наложении синусоидального возмущения на входящий поток получают на выходе функцию отклика,

также представляющую собой синусоиду, но имеющую другую амплитуду и сдвинутую по фазе. Типичная форма отклика на стандартный импульсный сигнал изображена на рисунке 5.

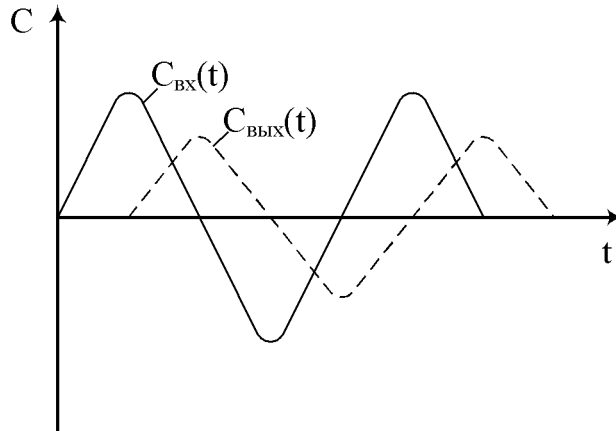


Рисунок 5 – Вид входного и выходного сигналов при синусоидальной подаче трассера

Метод установления модели потока на основе информации о его структуре в виде отклика на стандартное входное возмущение удобен и прост. Практическая реализация этого метода состоит в том, что фиксируют реакцию объекта на выходе (отбором проб, самопишущим прибором либо другим способом) и затем полученные выходные кривые сравнивают с аналогичными кривыми известных типовых моделей. По результатам совпадений или отклонений дают оценку структуры исследуемого процесса и строят модель, отражающую гидродинамику данного потока.

## 2.2 Типовые гидродинамические модели

К типовым прежде всего относятся модель идеального перемешивания и модель идеального вытеснения. Хотя указанные модели – теоретические и соответствуют идеальным потокам, однако в ряде случаев их можно использовать для характеристики реальных потоков. Кроме перечисленных, к типовым моделям гидродинамических потоков относятся диффузионная, ячеечная и комбинированные модели (потоки с застойной зоной, байпасированием и др.). Диффузионная и ячеечная модели характеризуют реальные потоки. Эти модели при предельных идеализированных условиях переходят в одну из теоретических моделей – идеального вытеснения или идеального перемешивания. Комбинированные модели также представляют реальные потоки в сложных объектах и строятся сочетанием более простых моделей, соответствующих отдельным участкам сложного реального потока.

### 2.2.1 Модель идеального перемешивания

Модель идеального перемешивания представляет идеализированный поток и является теоретической моделью. Согласно этой модели принимается, что поступающий в аппарат поток мгновенно распределяется по всему объему вследствие полного (идеального) перемешивания частиц среды. При этом **концентрация распределенного вещества во всех точках аппарата и в потоке на выходе из него одинакова**. Схематическое изображение модели идеального перемешивания приведено на рисунке 6.

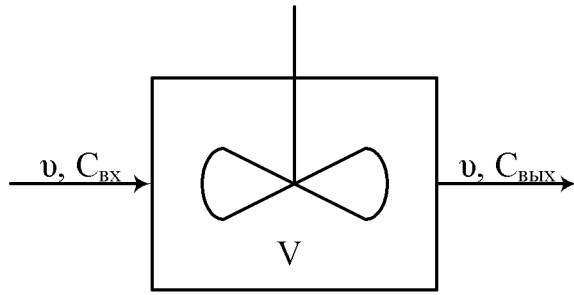


Рисунок 6 – Схематическое изображение модели идеального перемешивания

Математическое описание модели идеального перемешивания в дифференциальном виде:

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

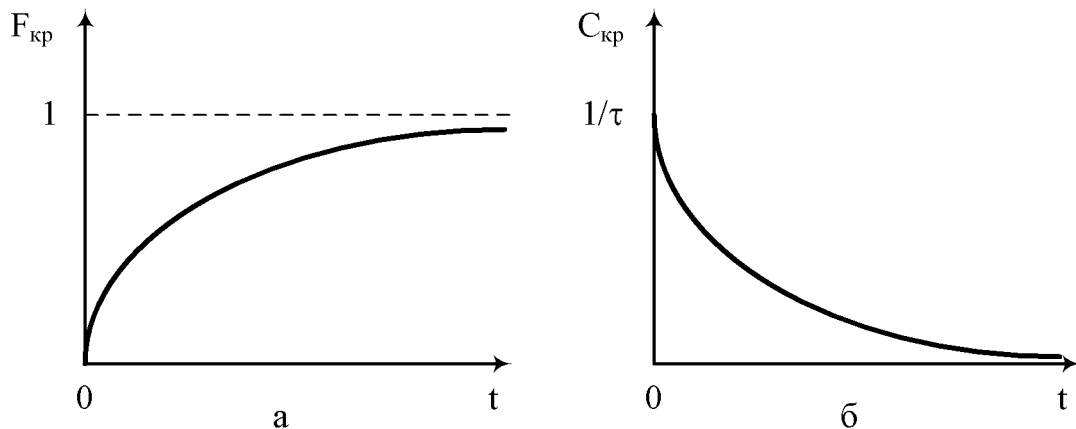
где  $C_{\text{вх}}$  – концентрация вещества на входе;  
 $C$  – концентрация вещества в аппарате и на выходе из него;  
 $V$  – объем аппарата;  
 $v$  – объемный расход потока через аппарат.

$$\frac{V}{v}$$

Отношение  $\frac{V}{v}$  характеризует среднее время нахождения частиц в зоне идеального перемешивания; его принято называть временем пребывания частиц в аппарате и обозначать  $\tau$ . Время пребывания  $\tau$  является параметром модели идеального перемешивания, который обычно определяется экспериментально либо расчетом. Дифференциальное уравнение модели идеального перемешивания обычно записывают с учетом параметра  $\tau$ :

$$\frac{dC}{dt} = \frac{1}{\tau}(C_{\text{вх}} - C).$$

Данные уравнения показывают, что это модель с сосредоточенными параметрами, т.к. основная переменная изменяется только во времени. На рисунке 7 представлен вид F-кривой и C-кривой для данной модели.



а – при ступенчатом возмущении (F-кривая); б – при импульсном возмущении (C-кривая)

Рисунок 7 – Вид функции отклика модели идеального смешения



Наилучшим образом эта модель отвечает реальным потокам в проточных аппаратах с мешалкой, у которых высота  $\ell$  мало отличается от диаметра  $d$ , мешалка создает высокую степень перемешивания и объемная скорость потоков  $v$  невелика. Именно в подобных случаях можно достичь такого состояния, когда концентрация вещества во всех точках объема аппарата становится практически одинаковой, т.е. структура потока близка к модели идеального перемешивания.

### 2.2.2 Модель идеального вытеснения

В соответствии с моделью идеального вытеснения принимается поршневое течение без перемешивания вдоль потока при равномерном распределении концентрации вещества в направлении, перпендикулярном движению. При этом время пребывания всех частиц в зоне идеального вытеснения одинаково и равно отношению объема зоны

вытеснения к объемному расходу жидкости (или газа)  $\tau = \frac{V}{v}$ . Схематическое изображение модели идеального вытеснения показано на рисунке 8.

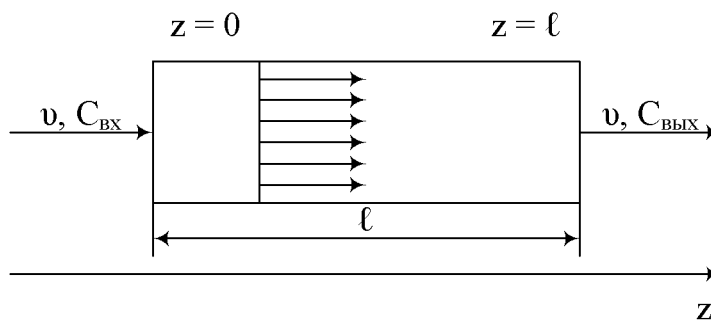


Рисунок 8 – Схематичное изображение модели идеального вытеснения

Дифференциальное уравнение модели идеального вытеснения имеет вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u \frac{\partial C}{\partial z},$$

где  $u$  – средняя линейная скорость потока, м/с, которая находится по формуле  $u = \frac{v}{s_B}$ ;

$s_B$  – сечение зоны идеального вытеснения, м<sup>2</sup>;

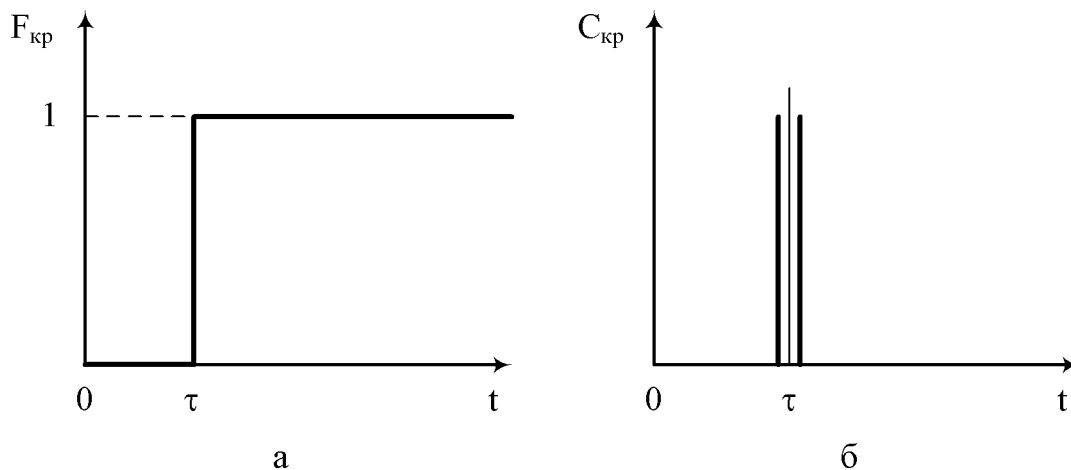
$z$  – пространственная координата.

Такая модель называется моделью с распределенными параметрами.

Если вместо средней скорости  $s_B$  подставить в уравнение ее значение, то уравнение примет следующий вид:

$$s_B \frac{\partial C}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial z}.$$

На рисунке 9 представлен вид F-кривой и C-кривой для данной модели.



а – при ступенчатом возмущении (F-кривая); б – при импульсном возмущении (С-кривая)

Рисунок 9 – Вид функции отклика модели идеального вытеснения

Модель идеального вытеснения широко используется в химической технологии при описании трубчатых реакторов и теплообменников. Трубчатые аппараты с большим отношением длины трубок к их диаметру ( $l/d > 20$ ) при турбулентном движении жидкости или газа могут описываться как модели идеального вытеснения. Это объясняется тем, что при  $l/d > 20$  продольное перемешивание незначительно и мало искажает поток вытеснения, а турбулентное движение при этом обеспечивает равномерное распределение концентрации по сечению аппарата.

### 2.2.3 Диффузионная модель

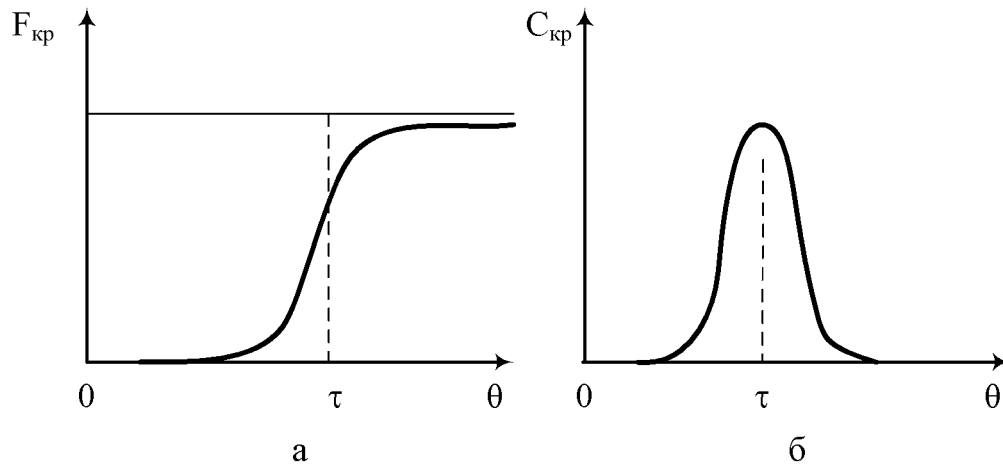
Диффузионная модель получила широкое распространение при оценке реальных потоков в аппаратах, в которых происходит продольное или продольное и радиальное перемешивание (например, поток в слоях насадки колонных аппаратов). Природа возникновения продольного и радиального перемешивания весьма сложна. Более подробно об этой модели можно почитать, например, в книге «Математическое моделирование в химической технологии» Бондаря А.Г.

Различают однопараметрическую и двухпараметрическую диффузионные модели. Если при построении модели учитывают только продольное перемешивание, а в радиальном направлении концентрацию принимают постоянной, то такая модель называется однопараметрической. Эта модель характеризуется одним параметром, учитывающим продольное перемешивание, который обозначается  $D_L$ . Основой однопараметрической диффузионной модели является модель вытеснения, осложненная обратным перемешиванием. Если математическое описание учитывает и радиальное перемешивание, то модель становится двухпараметрической. При составлении модели необходимо ввести дополнительно второй параметр – коэффициент радиального перемешивания –  $D_R$ . Она более точно отражает процесс, но ее описание и решение значительно усложняются. Кроме того, решение обычно имеет настолько сложный вид, что применять его на практике крайне неудобно, поэтому двухпараметрическая модель используется сравнительно редко и нами рассматриваться не будет.

Уравнение однопараметрической диффузионной модели имеет вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - u \frac{\partial C}{\partial z}.$$

На рисунке 10 представлен вид F-кривой и C-кривой для данной модели.



а – при ступенчатом возмущении (F-кривая); б – при импульсном возмущении (C-кривая)

Рисунок 10 – Вид функции отклика диффузионной модели

В практике технологических расчетов однопараметрическая диффузионная модель дает возможность достаточно точно воспроизводить свойства реального потока при исследовании многих аппаратов, в частности, пленочных, распылительных, барботажных, пульсационных, насадочных колонн, роторно-дисковых экстракторов, а также трубчатых аппаратов (полых и заполненных насадкой).

#### 2.2.4 Ячеечная модель

Типовые модели идеального перемешивания, идеального вытеснения, диффузионная модель с определенной степенью точности могут применяться для воспроизведения структуры и гидродинамических свойств потоков в различных аппаратах химической технологии. Однако идеальные модели в ряде случаев неадекватны реальному процессу, а диффузионная модель отличается сложностью. По этой причине для трубчатых и колонных аппаратов, а также для каскадов последовательно расположенных реакторов удобнее представлять реальные потоки в виде так называемой ячейчной модели.

Физическая сущность ячейчной модели заключается в том, что движущийся материальный поток рассматривается состоящим из ряда последовательно соединенных ячеек. При этом принимается, что в каждой из таких ячеек поток имеет структуру полного перемешивания, а между ячейками перемешивание отсутствует. Количество предполагаемых ячеек идеального перемешивания  $n$  является параметром, характеризующим ячейчную модель реального потока. Если  $n = 1$  ячейчная модель переходит в модель идеального перемешивания, а если  $n \rightarrow \infty$  – в модель идеального вытеснения.

Схематическое изображение ячейчной модели дано на рисунке 11.

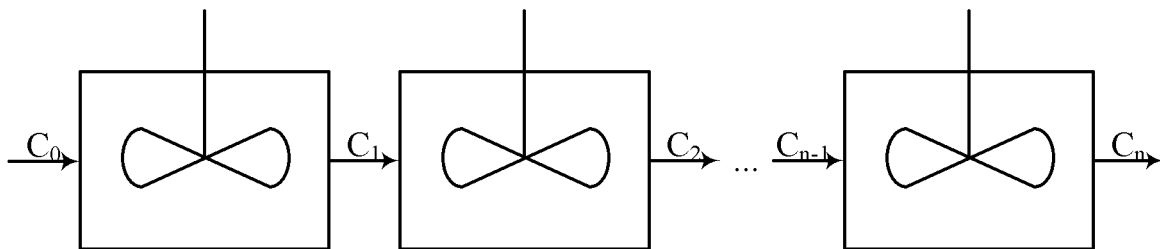
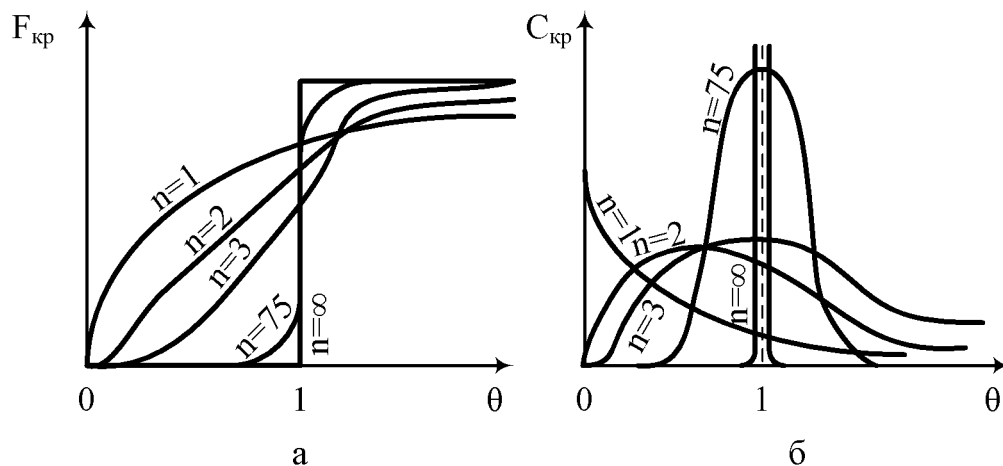


Рисунок 11 – Схематическое изображение ячеечной модели

Математическое описание ячеечной модели имеет вид:

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

Вид функции отклика представлен на рисунке 12.



а – при ступенчатом возмущении (F-кривая); б – при импульсном возмущении (C-кривая)

Рисунок 12 - Вид функции отклика ячеечной модели

Ячеечная модель достаточно точно воспроизводит свойства потоков в последовательно соединенных аппаратах с мешалками, создающими интенсивное перемешивание (каскады реакторов), в абсорбционных и экстракционных колоннах при некоторых гидродинамических режимах, и удовлетворительно в аппаратах с псевдоожиженным слоем.

### 2.2.5 Комбинированные модели

Принцип построения комбинированных моделей состоит в том, что исследуемый процесс рассматривается расчлененным на отдельные участки (зоны), соединенные последовательно, параллельно или по схеме с обратной связью, которые отличаются неодинаковой структурой потоков. При этом комбинированная модель представляет собой сочетание математических описаний всех зон, составляющих процесс.

В ходе построения комбинированных моделей следует оценить возможность применения для различных участков аппарата математических описаний типовых моделей, а также учесть застойные зоны.

Кроме перечисленных выше структур, при построении комбинированных моделей необходимо учитывать и другие виды течения жидкости (газа), которые могут возникать в реальных аппаратах:

– байпасный поток – часть жидкости (газа), движущаяся параллельно сосуду или некоторой его зоне, в результате чего часть потока попадает на выход аппарата, не претерпевая никаких изменений (проскок части потока).

– циркуляционные потоки (рециклы или обратные потоки) – это всякого рода возвраты потока. Они возникают потому, что часть жидкости (газа), которая выводится за пределы сосуда или определенной его части, возвращается в него снова и затем смешивается со свежими порциями вещества на входе в сосуд или в некоторую его зону.

– струйный поток (проскальзывание) – местный поток, мгновенно переносящий вещество непосредственно из одной зоны сосуда в другую.