

ПЕРВОЕ ВЫСШЕЕ ТЕХНИЧЕСКОЕ УЧЕБНОЕ ЗАВЕДЕНИЕ РОССИИ



**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

УТВЕРЖДАЮ

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Kon', written over a horizontal line.

**Руководитель ОПОП ВО
профессор Н.К. Кондрашева**

**МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО
ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ
МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ**

Уровень высшего образования:	Подготовка кадров высшей квалификации
Направление подготовки:	18.06.01 Химическая технология
Направленность (профиль):	Технология неорганических веществ
Форма обучения:	очная
Нормативный срок обучения:	4 года
Составитель:	д.т.н., профессор О.А. Дубовиков

Санкт-Петербург

ВВЕДЕНИЕ

Настоящие методические рекомендации разработаны на основе рабочей программы дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов» и предназначены для самостоятельного изучения обучающимися.

Грамотный специалист для успешной работы в данной области должен обладать представлениями о методах компьютерного моделирования процессов получения неорганических веществ с использованием баз данных, результатов экспериментальных исследований, технологических параметров промышленных объектов химической технологии.

Для успешного выполнения научно-исследовательской и научно-инновационной деятельности необходимо владеть знаниями существующих и развивающихся математических моделей химико-технологических процессов производства неорганических веществ, а также навыками владения и умениями применения этих знаний.

**СОДЕРЖАНИЕ И МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО
ИЗУЧЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ
«МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ»**

Тема 1. Вводный раздел

Цели и задачи занятия:

Обозначить цели и задачи курса, связь с другими дисциплинами. Организация изучения дисциплины. Химико-технологическая система, ее состав и структура. Основные понятия моделирования химических производств.

Учебные вопросы по самостоятельной работе:

1. Иерархическая структура современного химико-технологического предприятия;
2. Типовые химико-технологические процессы.

Темы докладов, сообщений, эссе:

1. Основные структуры ХТС;
2. Системы автоматизированного проектирования (САПР);
3. Автоматизированные системы управления (АСУ);
4. Простейшие операторы химико-технологических систем (ХТС).

Методические указания:

Основные понятия моделирования химических производств.

Моделирование - один из главных методов, позволяющих ускорить технический прогресс, сократить сроки освоения новых процессов. Современные достижения в области компьютерного моделирования химических процессов дают возможность более строго и с большей точностью решать задачи проектирования и управления химическими производствами. Развитие и широкое распространение информационных технологий (ИТ-технологий), внедрение глобальных и локальных вычислительных сетей дают возможность развивать и совершенствовать современные системы прикладной информатики – автоматизированные системы (АС).

К таким системам относятся:

1. автоматизированные информационные системы (АИС);

2. системы автоматизированного проектирования (САПР);
3. автоматизированные системы управления (АСУ);
4. автоматизированные обучающие системы (АОС);
5. автоматизированные системы научных исследований (АСНИ).

Применение указанных автоматизированных систем позволяет решать задачи химической технологии с использованием компьютерных моделей реальных процессов и производств, в частности, результатов компьютерного моделирования.

Компьютерное моделирование химико-технологических процессов предполагает решение следующих основных задач:

1. построение математической модели процесса и её реализацию на компьютере;
2. идентификация разработанной математической модели с моделируемым процессом с целью обеспечения её адекватности, т.е. качественного и количественного соответствия модели реальному процессу;
3. оптимизация процесса с использованием его математической модели, т.е. определения оптимальных (наилучших) режимных и конструкционных параметров процессов, которые обеспечивают наибольшее или наименьшее значение выбранного критерия оптимальности (целевой функции), характеризующего эффективность реального процесса.

Также существует сложность современного химического производства, которая не позволяет смотреть на него как на сумму разработанных и спроектированных в отдельности технологических операций, и процессов. Работа каждого отдельного аппарата, включенного в процесс производства химического продукта, зависит от работы других аппаратов, способа соединения их между собой и других факторов. Признание факта взаимного влияния агрегатов привело к рассмотрению технологического процесса в целом и выдвинуло новый подход к проектированию и эксплуатации химических производств – системный метод исследования.

Основные принципы системного подхода

Впервые основные принципы системного подхода были сформулированы в 1937 году американским биологом Лео фон Берталанфи. В то время новый исследовательский подход не привлек особого внимания ученых и только после II мировой войны получил широкое распространение в связи с развитием кибернетики и социальных наук. Основные принципы системного подхода можно сформулировать следующим образом:

- любой объект исследования следует рассматривать как систему, отвлекаясь от его конкретной природы;

- эффективность функционирования этой системы зависит от ее состава и структуры;

- нельзя изучать отдельные элементы системы в отрыве от других элементов;

- полное знание одного элемента системы не означает знание всей системы, и неполная информация может привести к неожиданным последствиям;

- для изучения состава и структуры системы используют метод декомпозиции – расчленение целого на части;

- при изучении отдельных элементов системы исследуются лишь те свойства элемента, которые определяют его взаимодействие с другими элементами или влияют на свойства системы в целом;

- системный подход заключается в определении состава и структуры системы, которые обеспечат полную совместимость элементов внутри системы и совместимость последней с внешней средой при достижении высоких результатов функционирования системы.

С этой точки зрения химическое производство – это искусственная техническая система, предназначенная для выпуска химической продукции требуемого качества с минимальными затратами и минимальным воздействием на окружающую среду. Назовем эту систему химико-технологической системой (ХТС) и рассмотрим ее состав и структуру.

Состав химико-технологической системы

Химико-технологическая система (ХТС) – это совокупность взаимосвязанных технологическими потоками и действующих как единое целое аппаратов, в которых осуществляется определенная последовательность технологических операций (подготовка сырья, собственно химическое превращение и выделение целевых продуктов).

Простейшим элементом ХТС (рис.1) является *оператор*, под которым понимают типовой процесс химической технологии и соответствующую ему технику. Оператор преобразует физические параметры входящих в него потоков в соответствующие параметры выходящих потоков.



Рисунок 1. Элемент ХТС

Можно выделить несколько классов операторов (типовых технологических процессов):

1. химические процессы, скорость которых определяется законами химической кинетики;
2. массообменные (диффузионные) процессы, скорость которых определяется скоростью переноса вещества из одной фазы в другую (растворение, кристаллизация, адсорбция, десорбция, экстракция и др.);
3. гидродинамические процессы, скорость которых определяется законами механики и гидромеханики (отстаивание, перемешивание, пенообразование и др.);
4. тепловые процессы, скорость которых определяется законами теплопередачи (нагревание, охлаждение);
5. энергетические процессы, заключающиеся во взаимном преобразовании различных видов энергии: тепловой, механической, электрической в турбинах, генераторах и моторах;
6. механические процессы (дробление, прессование, гранулирование, дозирование и др.);

7. процессы управления – получение и передача информации о состоянии потоков и продуктов и изменении их свойств.

Операторы классов 1–6 часто объединяют под одним названием – технологические операторы. Более крупной структурной единицей ХТС является подсистема. Подсистемой называют совокупность операторов, объединенных одной технологической схемой. Подсистема – это самостоятельно функционирующая часть системы.

Подсистемы могут быть выделены по любому, удобному для изучения системы признаку. Например, химическое производство можно представить, как иерархическую структуру (рис. 2), состоящую из 3 – 4 уровней или ступеней иерархии (соподчинения):

1 (низшая) ступень – ступень иерархии – типовые химико-технологические процессы (механические, тепловые, диффузионные, химические) и локальные системы стабилизации;

2 ступень – совокупность типовых технологических процессов, осуществляющих определенную операцию. Чаще всего, это цехи или их отдельные участки;

3 ступень – химические производства, состоящие из нескольких цехов, где получают целевые продукты;

4 ступень – химическое предприятие в целом.

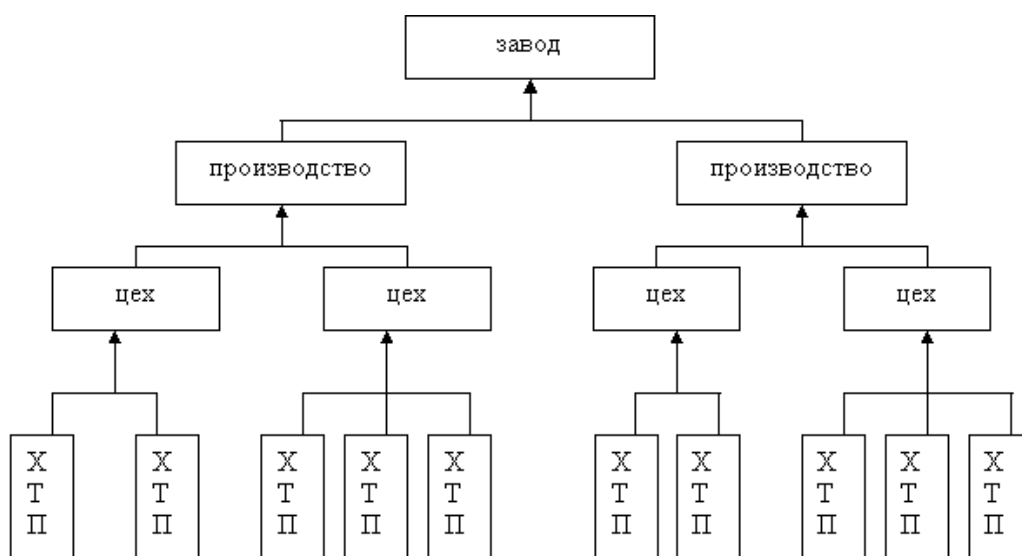


Рисунок 2. Ступени иерархической модели

По функциональному признаку, наиболее часто используемому технологами, выделяют следующие подсистемы ХТС:

- подсистема подготовки сырья;
- подсистема химического превращения;
- подсистема выделения целевого продукта;
- подсистема обработки технического продукта;
- энергетическая подсистема;
- экологическая подсистема.

Подсистема химического превращения является главной подсистемой ХТС, здесь происходит получение целевого продукта.

Подсистему подготовки сырья вводят в том случае, если сырье по своим характеристикам не соответствует требованиям главной подсистемы. Операторами этой подсистемы являются хранение и транспортировка сырья, нагрев и охлаждение, испарение, плавление, растворение, сушка, измельчение и др.

Подсистема выделения целевого продукта предназначена для разделения реакционной смеси на отдельные компоненты. Операторы подсистемы – ректификация, экстракция, фильтрация и др.

Подсистема обработки технического продукта имеет целью доведение целевого продукта до заданного уровня качества и придания ему товарного вида. В эту подсистему могут быть включены операторы расфасовки, укупорки, маркировки, транспорта, хранения и др. Энергетическая подсистема включает в себя подсистемы производства энергии, рекуперации энергии и водоподготовки. Экологическая подсистема предназначена для рекуперации сырья, очистки сточных вод и газовых выбросов.

В состав ХТС кроме элементов включаются еще связи. Связь - это физический канал, по которому происходит обмен веществом, энергией или информацией между элементами (внутренние связи) и между отдельными системами (внешние связи). По физическому смыслу связи бывают материальные, энергетические и информационные. Материальные связи –

потоки сырья, вспомогательных материалов, продуктов и отходов. Энергетические связи – потоки топлива, хладагентов и теплоносителей. Материальные и энергетические связи называют технологическими. Информационные связи – это связи, обеспечивающие управление системой.

Структура ХТС

Структура ХТС – это способ соединения элементов в единую систему. Можно выделить 4 основные структуры:

1. последовательное соединение операторов;
2. параллельное соединение операторов;
3. обводное (байпасное) соединение операторов;
4. обратное соединение операторов (рецикл).

При последовательном соединении аппаратов весь технологический поток, выходящий из предыдущего элемента поступает полностью в последующий элемент; при этом через каждый элемент схемы поток проходит лишь один раз.

При параллельном соединении технологический поток разделяется на несколько более мелких потоков, поступающих в различные элементы системы. Выходящие из этих элементов потоки могут объединяться в один поток или выходить из системы отдельно. Через каждый элемент поток проходит один раз.

Обводное соединение элементов – это ряд последовательно соединенных аппаратов, через которые проходит лишь часть технологического потока. Другая часть потока обходит один или несколько аппаратов и затем соединяется с основной частью потока. При байпасном соединении направление главного и побочного потоков совпадают; каждый проходит через какой-либо элемент только один раз.

Рецикл характеризуется наличием в цепи последовательно соединенных элементов хотя бы одного обратного потока. В отличие от ранее рассмотренных схем это замкнутая система.

Такие системы характеризуются степенью рециркуляции, показывающей, какая для главного потока после его разветвления возвращается в процесс, и коэффициентом рециркуляции, который показывает, во сколько раз главный поток больше прямого.

Все остальные структуры ХТС являются комбинацией этих четырех основных способов соединения элементов. Комбинированные структуры весьма многообразны; их можно разделить на две большие группы: *разветвленные*

Рассмотренные четыре структуры используются в производстве при соединении в технологическую цепочку любых аппаратов, в том числе и химических реакторов. Рассмотрим, какие технологические задачи решаются при использовании различных вариантов соединения реакторов.

Последовательное и параллельное соединение реакторов осуществляют при необходимости увеличения производительности установки. При заданной скорости химической реакции производительность установки, работающей в непрерывном режиме, можно увеличить

1. при достижении более высокой степени превращения реагента за счет увеличения времени пребывания реагентов в реакционной зоне;
2. путем увеличения количества перерабатываемого сырья в единицу времени при сохранении $\alpha = \text{const}$.

В обоих случаях это приводит к увеличению объема реакционной зоны (объема реактора).

В случае повышения производительности за счет повышения времени пребывания реагентов в реакторе (τ) используют последовательное соединение реакторов; для повышения объемной скорости подачи сырья применяют параллельную схему соединения реакторов.

Последовательное включение реакторов используют также при оптимизации условий проведения отдельных стадий технологического процесса; параллельное соединение удобно для оптимальной организации производства (попеременное включение реакторов).

Обвод широко применяется для создания оптимального температурного и концентрационного режима. Рецикл находит применение при использовании избытка одного из реагентов или невозможности достижения высоких степеней превращения реагента; в этом случае непревращенный реагент выделяют и возвращают в реактор.

При изучении ХТС применяют модели двух классов: обобщенные и математические. Обобщенные модели – это качественные модели, используемые для получения общего представления о процессе функционирования об элементах и о химическом составе исходного сырья, промежуточных и конечных продуктов ХТС. Обобщенные модели могут быть двух типов: иконографические и операционно-описательные модели. Иконографические обобщенные модели дают общее представление об исследуемой ХТС в виде некоторого графического изображения или чертежа. Операционно-описательные модели дают общее упрощенное представление о процессе функционирования ХТС в форме последовательного словесного описания различных химико-технологических процессов, происходящих в элементах системы. Примером операционно-описательных моделей могут служить технологические регламенты и различная проектноэксплуатационная документация. Математическая модель ХТС является абстрактным и формальным представлением системы, изучение которого возможно математическими методами. Математические модели (ММ) ХТС подразделяют на символические и иконографические. Символические математические модели реальной ХТС представляют собой совокупность математических соотношений в виде формул, уравнений, операторов, логических условий или неравенств, которые определяют характеристики состояния ХТС в зависимости от конструкционных и технологических параметров ХТС. Иконографические математические модели ХТС – это графическое отображение таких качественных свойств ХТС, которым можно определить количественные характеристики системы, или графическое отображение функциональных соотношений между параметрами и переменными ХТС, являющихся по своей

сущности чисто математическими. Указанные модели подразделяются на две большие группы: топологические и сетевые модели. 9 Совокупность математических соотношений, образующих данную символическую ММ ХТС, в частном случае представляет систему уравнений математического описания ХТС. Используют два метода составления систем МО ХТС. Один метод основан на глубоком изучении физико-химической сущности технологических процессов функционирования ХТС и ее элементов, другой на применении формально-эмпирических математических зависимостей, полученных в результате статистического обследования действующей ХТС. Символические ММ ХТС второго типа обычно называют статистическими моделями. Последние имеют вид регрессионных или корреляционных соотношений между параметрами входных и выходных технологических потоков ХТС.

Рекомендуемая литература:

основная: [1-4];

дополнительная: [5-8].

Тема 2. Математическое моделирование химико-технологических процессов

Цели и задачи занятия:

Рассмотреть общие принципы моделирования. Ознакомиться с понятием модели, классификацией моделей, физическим и математическим моделированием. Изучить вопрос применения ЭВМ для создания автоматизированных систем управления технологическими процессами и применение ЭВМ в системах научного исследования.

Учебные вопросы по самостоятельной работе:

1. Классификация математических моделей;
2. Принципы математического моделирования процессов химической технологии.

Темы докладов, сообщений, эссе:

1. Реальные математические модели;
2. Математическая модель химико-технологического процесса;

3. Автоматизированная система управления;

Методические указания:

Общие принципы моделирования. Широкое применение моделей объясняется тем, что модель дает возможность установить в явлении, объекте или процессе основные закономерности, которые им присущи, и пренебречь второстепенными, вспомогательными признаками. На рисунке 3 приведена общая классификация моделей.

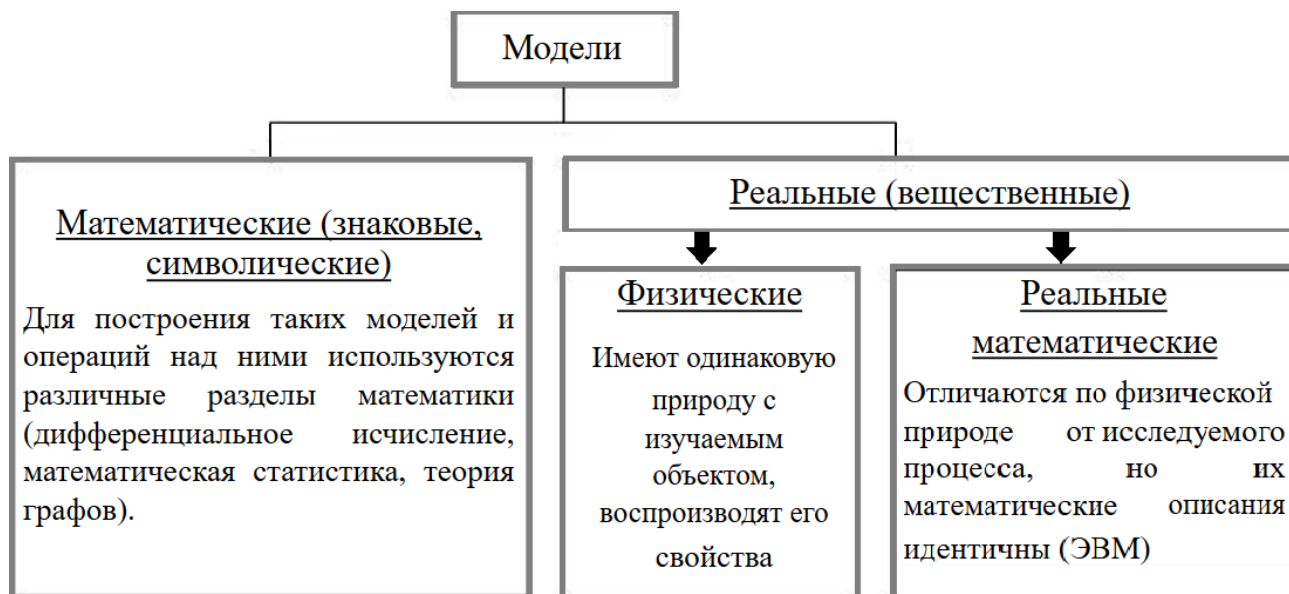


Рисунок 3. Общая классификация моделей

В зависимости от характера и сложности явлений, могут использоваться различные методы моделирования:

1. геометрическое (на основе геометрического подобия величин);
2. физическое (характеризуется одинаковой физической природой модели и исследуемого объекта);
3. математическое (характеризуется различной физической природой и одинаковым математическим описанием модели и исследуемого объекта).

Процессы химической технологии – это сложные физико-химические системы, имеющие двойственную детерминировано стохастическую природу, переменные в пространстве и во времени. Особенности данных процессов состоят в следующем:

1. участие многокомпонентных и многофазных материальных потоков;
2. наличие процессов переноса импульса, энергии, массы на границе раздела фаз;
3. на процесс в значительной степени влияют геометрические характеристики аппарата;
4. наложение стохастических особенностей гидродинамической обстановки в аппарате на процессы массо- и теплопереноса и химического превращения. Это объясняется случайным взаимодействием составляющих компонентов фаз (соударением частиц, коалесценцией) или случайным характером геометрии граничных условий в аппарате.

Подобного рода системы характеризуются чрезвычайно сложным взаимодействием составляющих их фаз и компонентов, вследствие чего изучение их с позиции классических детерминированных законов переноса и сохранения становится невозможным.

Ключ к решению данной задачи дает применение метода математического моделирования, базирующийся на основе стратегического 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.

Математическим моделированием – называют изучение свойств объекта на математической модели, целью которого является определение оптимальных условий протекания процесса, управление им на основе математической модели и перенос результатов на объект.

Математическая модель химико-технологического процесса (ХТП) – совокупность математических структур: формул, уравнений, неравенств и т.д., адекватно описывающая исследуемые свойства объекта. Реализованная на компьютере математическая модель называется компьютерной математической моделью, а проведение целенаправленных расчетов с помощью компьютерной модели называется вычислительным экспериментом.

Математическое моделирование включает в себя три взаимосвязанных этапа:

- составление математического описания изучаемого объекта. Применительно к химической технологии математическая модель – совокупность математических зависимостей, отражающих в явной форме сущность химико-технологического процесса и связывающих его физические, режимные, физико-химические и конструктивные параметры;
- выбор метода решения системы уравнений математического описания и реализация его в форме моделирующей программы;
- установление соответствия (адекватности модели объекту).

В модели должны быть учтены все наиболее существенные факторы, влияющие на процесс, и, вместе с тем, она не должна быть загромождена множеством мелких, второстепенных факторов, учет которых только усложнит математический анализ.

В зависимости от конкретной реализации процесса и его аппаратного оформления, все многообразие химико-технологических процессов можно разделить на четыре класса:

1. процессы, переменные во времени (нестационарные);
2. процессы, не меняющиеся во времени (стационарные);
3. процессы, в ходе которых их параметры не изменяются в пространстве;
4. процессы с учетом пространственного изменения параметров.

Так как математические модели являются отражением соответствующих объектов, то они классифицируются аналогичным образом.

В общем случае для моделирования химико-технологических процессов с использованием ЭВМ необходимо знание физико-химических закономерностей их протекания, а также данных лабораторных и/или полупромышленных (реже промышленных) экспериментов для подтверждения справедливости (адекватности) моделей.

Однако для сложных гетерофазных процессов, сопровождающихся химическими превращениями в различных фазах, эти закономерности не до конца

известны, и их дальнейшее изучение требует существенных инвестиций в научные исследования, что не всегда оправдано. В этих случаях приходится разрабатывать так называемые эмпирические модели ХТП. в которых, в отличие от физико-химических моделей, не учитываются закономерности протекания реальных процессов, и построение которых базируется на формализованном описании данных экспериментальных исследований.

В результате для каждой выходной (зависимой) переменной эмпирической модели получается достаточно простая функциональная (чаще всего, аппроксимационная) её зависимость от входных (условно независимых) переменных процесса. Вид и коэффициенты этих зависимостей, как правило, определяются методами регрессионного и корреляционного анализа по результатам обработки данных пассивных или активных экспериментов.

К недостаткам таких моделей, кроме необходимости проведения большого числа уточняющих опытов, относится также то обстоятельство, что, строго говоря, они справедливы только в том диапазоне изменения параметров технологического процесса, в котором были проведены экспериментальные исследования.

В этом плане физико-химические модели являются более привлекательными, так как они основаны на учёте действительных закономерностей протекающих процессов, и поэтому могут применяться для прогнозирования поведения промышленных производств в достаточно широких диапазонах изменения параметров. При их построении сначала изучается теория процесса, исходя из чего строится система уравнений математического описания (МО), после анализа которой разрабатывается моделирующий алгоритм (МА) её решения. Последний, чаще всего, представляет собой комбинацию известных численных методов решения стандартных задач вычислительной математики. В результате реализации моделирующего алгоритма (МА) на компьютере одновременно вычисляются все выходные переменные технологического процесса при известных значениях входных

переменных, т.е. решается так называемая прямая задача математического моделирования.

Не менее важным является также и решение обратной задачи математического моделирования, когда на основе экспериментальных данных определяются как вид уравнений, описывающих физико-химические закономерности протекающих процессов (гидродинамики, химических и фазовых превращений, массо- и теплопередачи и других), так и значения параметров (коэффициентов массопередачи, теплопередачи, констант фазовых равновесий и др.) этих уравнений. Только при успешном решении обратной задачи удаётся добиться адекватности математической модели (ММ) и использовать её для исследования поведения реальных процессов.

Обратные задачи математического моделирования тесно связаны с задачами идентификации МО ХТП. Идентификация МО объектов заключается в определении вида уравнений системы (структурная идентификация) и её коэффициентов (параметрическая идентификация) на основании ограниченной выборки (статистики) экспериментальных данных. С практической точки зрения однозначного решения задачи идентификации не существует в том смысле, что при различных наблюдениях экспериментальных данных получаются отличающиеся друг от друга результаты. Для эмпирических моделей задача идентификации решается при их построении статистическими методами. В случае физико-химических моделей для решения задачи идентификации приходится реализовывать специальные оптимизационные алгоритмы, которые минимизируют отклонения между расчётными и экспериментальными параметрами ХТП.

Решение задачи оптимизации процесса также отличается при применении эмпирических или физико-химических моделей для описания поведения процессов.

При использовании эмпирических моделей из-за ограниченности диапазона изменения их параметров в процессе описания поведения реальных процессов расчёт оптимальных условий приходится сочетать с дополнительной

постановкой экспериментальных исследований - реализуются так называемые экспери-ментально-статистические методы оптимизации. В этом случае оптимальные условия проведения процессов из-за простого вида функциональных зависимостей моделей могут определяться с использованием необходимых и достаточных условий экстремума функций многих переменных.

Для решения задачи оптимизации с использованием физико-химических моделей применяются численные методы одномерной и многомерной оптимизации. Проведение дополнительных экспериментов при этом не требуется, так как модели справедливы в широком диапазоне изменения параметров процессов и допускается возможность экстраполяции их свойств. Рассчитываемые оптимальные условия проведения процессов при условии адекватности используемой компьютерной модели обычно соответствуют действительности.

Автоматизированные системы управления технологическими процессами.

Автоматизированная система управления технологическими процессами (АСУТП) – человеко-машинная система, обеспечивающая автоматизированный сбор, обработку информации и управление технологическими объектами в соответствии с принятыми критериями. Критериями управления АСУТП являются технико-экономические показатели (например, себестоимость готового продукта, производительность ТОО при стандартном качестве продукта) или технологические показатели (например, параметры технологического процесса, параметры качества готового продукта).

Совокупность совместно функционирующих АСУТП и ТОО называется автоматизированным технологическим комплексом (АТК).

Многочисленные датчики технологических параметров – температуры, давления, расхода, качества и т. д., а также датчики состояния оборудования («включено», «выключено») служат для получения информации о текущем состоянии объекта в реальном масштабе времени.

Одними из главных преимуществ АСУТП является снижение, вплоть до полного исключения, влияния так называемого человеческого фактора на

управляемый процесс, сокращение персонала, минимизация расходов сырья, повышение качества исходного продукта, и в конечном итоге существенное повышение эффективности производства.

Основные функции, выполняемые подобными системами, включают в себя контроль и управление, обмен данными, обработку, накопление и хранение информации, формирование сигналов тревог, построение графиков и отчетов

АСУТП – одно из наиболее специфических применений вычислительной техники. ЭВМ и устройства, входящие в состав АСУТП, управляют ТОУ, функционирующим в реальном времени и реализующим технологический процесс (ТП). При этом на вычислительную технику возложены задачи управления пуском и остановом технологического оборудования, контроля его состояния и защиты от перегрузок, поддержания заданного режима работы оборудования и стабилизации отдельных технологических параметров, оптимизации качественных и количественных показателей работы отдельных агрегатов и технологического объекта в целом и т. п.

Рекомендуемая литература:

основная: [1-4];

дополнительная: [5-8].

Тема 3. Математическое моделирование гидродинамической структуры однофазных потоков

Цели и задачи занятия:

Рассмотреть время пребывания элементов потока как случайной величины. Изучить интегральную и дифференциальную функции распределения времени пребывания элементов потока. Ознакомиться с моделями идеального перемешивания и идеального вытеснения. Изучить однопараметрическую диффузионную модель.

Учебные вопросы по самостоятельной работе:

1. Типовые математические модели структуры потоков в аппаратах;
2. Комбинированные модели;
3. Алгоритм идентификации математического описания структуры потоков.

Темы докладов, сообщений, эссе:

1. Математическое описание химико-технологического процесса с помощью физико-химической модели;
2. Экспериментально-статические методы оптимизации;
3. Численные методы одномерной и многомерной оптимизации;
4. Эмпирические модели ХТП.

Методические указания:

Математическое описание гидродинамической структуры потоков.

Химико-технологические процессы обычно протекают в движущихся потоках фаз (парогазовых, жидкостных и твёрдых), гидродинамические закономерности перемещения которых оказывают влияние на эффективность химических производств. Выбор конструкций аппаратов химической технологии во многом связан с необходимостью обеспечения требуемых гидродинамических условий проведения процессов. Поэтому основу уравнений МО ХТП составляют балансовые уравнения для потоков вещества (массы), теплоты (энтальпии) и импульса (количества движения), записанные с учётом гидродинамических закономерностей их движения.

Характерной особенностью перечисленных балансовых уравнений является то обстоятельство, что они должны включать выражения, описывающие интенсивности источников (стоков) веществ, теплоты и импульсов, характеризующих скорости их образования (выделения) и расходования (поглощения) в потоках за счёт различных «элементарных» физико-химических процессов - химических реакций, массо-передачи, фазовых переходов и т.д.

Принципиально можно построить гидродинамические модели потоков различной сложности, наиболее отвечающие используемым конструкциям технологического оборудования. Для этой цели при построении физико-химических моделей реальных процессов применяются так называемые комбинированные гидродинамические модели движения потоков. Они представляют собой комбинации описаний зон аппаратов с более простыми гидродинамическими моделями движения потоков, в частности, комбинации моделей идеаль-

ного смешения, идеального вытеснения и однопараметрической диффузионной модели. Основная особенность этих моделей состоит в том, что они содержат минимальное число параметров:

1. модель идеального смешения - объём;
2. модель идеального вытеснения - объём и длину;
3. однопараметрическая диффузионная модель - объём, длину и коэффициент продольного перемешивания.

Химико-технологические процессы обычно сопровождаются перемещением некоторых материальных потоков жидкости, газа (пара) или твёрдых частиц. Потоки могут быть однофазными, т.е. целиком состоять из частиц одной фазы (например жидкости), которые перемещаются в некотором объёме аппарата, и многофазными (в частности, двухфазными), когда процесс проходит в условиях взаимодействия нескольких фаз, например, газ-жидкость, жидкость-твёрдое вещество, газ-твёрдое вещество и т.д. В связи с этим основу уравнений математического описания ХТП составляют балансовые уравнения движения потоков.

Уравнения гидродинамики реальных потоков обычно очень сложны (например, уравнения Навье-Стокса) и часто не могут быть записаны в общем виде (например, для многофазных потоков из-за отсутствия возможности задания граничных условий на нестационарной поверхности раздела фаз). Поэтому на практике при составлении математических описаний обычно используют приближённые (модельные) представления о структуре движущихся потоков отдельных фаз - гидродинамические модели идеального смешения, идеального вытеснения и однопараметрические диффузионные модели.

Для зон потоков, описываемых этими приближёнными моделями, составляются балансовые уравнения гидродинамики в соответствии с рис. 2.1.

В общем случае балансовые уравнения гидродинамики записывают отдельно для:

- массы;
- вещества (компонентов) многокомпонентной смеси;
- теплоты;
- импульса.

и распространяются на всю движущуюся систему с учётом её полного объема и длины (для модели идеального вытеснения).

Под потоком массы понимают общую массу многокомпонентной смеси, протекающую в единицу времени в рассматриваемой! системе. Единица измерения потока массы, например, [кг/час] или [кг/сек].

Поток вещества (компонента) является частным случаем потока массы. Термин относится только к массе выбранного /-го компонента. Единица измерения потока вещества (компонента), например, [молей /-го компонента смеси/час] или [молей /i-го компонента смеси/сек]. Из определения закона сохранения массы следует, что внутри системы сумма потоков компонентов равна потоку массы.

Поток теплоты или энтальпии в инженерных расчётах является энергетической характеристикой системы. Под этим термином понимают поступающее (отводимое) в единицу времени в (от) систему (системы) количество теплоты (энтальпии), отнесённое к стандартному состоянию. Единицы измерения потока теплоты или энтальпии, например, [ккал/час] или [ккал/сек].

Поток импульса (количества движения) характеризуется значением подводимого (отводимого) в единицу времени к (от) системе импульса. Единица его измерения, например, [кгм/час] или [кгм/сек].

Следует отметить, что уравнения балансов импульса при МО ХТП используются достаточно редко. Это связано с тем, что они существенно усложняют процедуру решения систем уравнений МО. в то время как дополнительная информация, получаемая при их применении, как правило, не столь важна. На этом основании уравнения балансов импульса в дальнейшем не рассматриваются.

Рекомендуемая литература:

основная: [1-4];

дополнительная: [5-8].

Тема 4. Математическое моделирование теплообменных и массообменных процессов

Цели и задачи занятия:

Изучить основы теплового расчета, проектный и поверочный расчеты теплообменного аппарата. Ознакомиться с математическими моделями теплообменников. Рассмотреть теплообменники типов: «перемешивание-перемешивание», «вытеснение-перемешивание», «вытеснение-вытеснение». Изучить алгоритм расчета критерия оптимизации и блочный принцип построения моделей массопередачи.

Учебные вопросы по самостоятельной работе:

1. Оптимальное проектирование теплообменного аппарата.
2. Постановка задачи оптимального проектирования.
3. Моделирование противоточного теплообменника.
4. Начальные и граничные условия модели массообменного процесса.

Темы докладов, сообщений, эссе:

1. Оптимизация при проектировании сложных инженерных сооружений и систем;
2. Оптимизация в управлении производственными, техническими и экономическими системами;
3. Критерии оптимальности;
4. Блочный принцип построения моделей массопередачи;

Методические указания:

Математические модели теплообменных аппаратов. Химическое производство характеризуется большим разнообразием условий проведения тепловых процессов. Они различаются по виду теплообмена, давлению, температуре и агрессивности теплоносителей. Все это обуславливает создание и

изготовление различных по конструкции и назначению типов теплообменных аппаратов.

Современные теплообменники должны обеспечивать необходимый теплосъем на единицу площади теплообменника, высокую пропускную способность по теплоносителям при допустимых перепадах давлений, высокую коррозионную стойкость в агрессивных средах, надежную работу в течение длительного периода эксплуатации, стабильность тепловых и гидродинамических характеристик за счет механической или химической очистки поверхности теплообмена, удобство эксплуатации.

Наиболее широкое применение в настоящее время находят теплообменники, которые по своим конструктивным признакам делятся на:

1. теплообменные аппараты, изготавливаемые из труб различной формы и диаметров (кожухотрубчатые, «труба в трубе», оросительные витые и др.);
2. теплообменные аппараты, изготавливаемые из листа (пластинчатые, спиральные и панельные);
3. теплообменные аппараты, совмещенные с различными типами химических аппаратов и реакторов.

В зависимости от направления движения теплоносителей вдоль поверхности теплообмена различают теплообменные аппараты с прямотоком, противотоком, перекрестным током, в том числе одноходовые и многоходовые.

Сложность описания и расчета теплообмена с учетом реальных его протекания во многом объясняет факт, что в настоящее время теплообменную аппаратуру рассчитывают по моделям, предполагающим режим полного вытеснения теплоносителя либо его полного смешения.

При построении математических моделей теплообменных аппаратов предварительно проводят структурный анализ по выявлению количества и видов однородных потоков тепловой энергии, имеющих место в аппарате. Для каждого поля записывается математическое описание в виде выражений, характеризующих изменение температуры в потоке теплоносителя во времени, обусловленное движением потока и теплопередачей.

Если структура потока теплоносителя соответствует модели идеального перемешивания (модель основана на предположении о полном смешении хладагента, потому его температура будет постоянна по длине теплообменника), то для математического описания этого потока можно использовать уравнение (1) изменения температуры с учетом теплопередачи.

$$V \cdot \rho \cdot C_p \cdot \frac{dT}{dt} = \nu \cdot \rho \cdot C_p \cdot (T_{\text{вх}} - T) + Vq_T, \quad (1)$$

где V – объем зоны идеального перемешивания, м^3 ; ρ – плотность теплоносителя, $\text{кг}/\text{м}^3$; C_p – удельная теплоемкость теплоносителя, $\text{Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$; ν – объемная скорость потока (расход), $\text{м}^3/\text{с}$; $T_{\text{вх}}$ – температура потока на входе в зону идеального перемешивания; T – температура в любой точке зоны идеального перемешивания; Vq_T – интенсивность теплообмена в реакционном объеме, которая находится по формуле (2):

$$Vq_T = F \cdot K_T \cdot \Delta T, \quad (2)$$

где q_T – удельная объемная интенсивность источника тепла; F – поверхность теплообмена, м^2 ; K_T – коэффициент теплопередачи, $\text{Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$.

Если структура потока соответствует модели идеального вытеснения (в основе модели лежит допущение о постоянстве температуры в поперечном сечении и отсутствии продольного перемешивания), то для математического описания этого потока можно использовать уравнение (3) с учетом теплопередачи.

$$S_B \cdot \rho \cdot C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = -\nu \cdot \rho \cdot C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial l} + S_B \cdot q_T, \quad (3)$$

где S_B – площадь поперечного сечения потока, м^2 ; l – постоянная координата от 0 до L (длина зоны вытеснения).

Площадь поперечного сечения потока можно найти по формуле (4):

$$S_B = \frac{V}{L}, \quad (4)$$

где $T=f(l,t)$ – функция распределения температуры потока теплоносителя по пространственной координате и времени.

Проектный и поверочный расчеты теплообменного аппарата. В моделировании различают проектный и поверочный расчет теплообменного оборудования. Целью проектного расчета является определение необходимой поверхности теплообмена и режима работы теплообменника для обеспечения заданного переноса теплоты от одного теплоносителя другому. Задачей поверочного расчета является определение количества передаваемой теплоты и конечных температур теплоносителей в данном теплообменнике с известной поверхностью теплообмена при заданных условиях его работы. Эти расчеты основываются на использовании уравнения теплопередачи и тепловых балансов.

Исходными данными для проектного расчета чаще всего являются: G – расход одного или обоих (G, D) теплоносителей, кг/с; T_n, T_k – начальная и конечная температуры, К; p – давление сред; c, m, r – теплоемкость, вязкость и плотность теплоносителей (эти величины могут быть не заданы, тогда их следует определять из справочной литературы). Кроме того, часто указывается и тип проектируемого теплообменника. Если он не указан, то необходимо сначала провести технико-экономическое обоснование выбранного типа.

Задачей проектного теплового расчета теплообменника является определение поверхности теплообмена в результате совместного решения интегрального уравнения теплопередачи (5) и уравнений тепловых балансов (6):

$$\left\{ \begin{array}{l} Q = k_m \cdot \Delta t_{cp} \cdot F, \\ Q = G_{m2} \cdot c_{p2} \cdot (t_n - t_k) \cdot \eta' = G_{m1} \cdot c_{p1} \cdot (t_k - t_n) \cdot \eta'' \end{array} \right. \quad (5)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} Q = k_m \cdot \Delta t_{cp} \cdot F, \\ Q = G_{m2} \cdot c_{p2} \cdot (t_n - t_k) \cdot \eta' = G_{m1} \cdot c_{p1} \cdot (t_k - t_n) \cdot \eta'' \end{array} \right. \quad (6)$$

Если теплоносители изменяют агрегатное состояние в процессе теплообмена, расчет тепловой нагрузки (удельного теплового потока) производится через энтальпии по уравнению (7):

$$Q = G_{mг} \cdot (H_H - H_K) \cdot \eta' = -G_{mх} \cdot (H_K - H_H) \cdot \eta'', \quad (7)$$

где $G_{mг}$ и $G_{mх}$ – массовые расходы горячего и холодного теплоносителей, кг/с.

Значения физических констант свойств теплоносителей можно принимать как среднеинтегральные величины, если в рассматриваемом интервале температур их нельзя считать постоянными. С некоторым приближением (что на практике чаще и делают) расчетное значение теплоемкости можно брать как

истинное значение $ср$ при средней температуре теплоносителя либо как среднее арифметическое истинных теплоемкостей при конечных температурах.

Значение коэффициентов h наиболее точно определяют опытным или расчетным путем. Из промышленной практики известно, что для теплообменников потери тепла в окружающую среду обычно невелики и составляют 2–3 % от общего переданного тепла. Поэтому в приближенных расчетах можно принять $h = 0,97–0,98$.

Уравнения тепловых балансов служат для нахождения расходов теплоносителей или их конечных температур. Если ни то, ни другое не задано, то, как правило, задаются начальными и конечными значениями температур теплоносителей с таким расчетом, чтобы минимальная разность температур между теплоносителями была не менее 5–7 К. Поверхность теплообмена определяют из основного уравнения теплопередачи, предварительно задавшись ориентировочным значением коэффициента теплопередачи.

Поверочный расчет теплообменника с известной поверхностью теплопередачи заключается, как правило, в определении количества передаваемой теплоты и конечных температур теплоносителей при их заданных начальных значениях и заданных расходах. Необходимость в таком расчете может возникнуть, например, если в результате проектного расчета был выбран нормализованный аппарат со значительным запасом поверхности, а также при проектировании сложных последовательно-параллельных схем соединения стандартных теплообменников. Поверочные расчеты могут понадобиться также для выявления возможностей имеющегося аппарата при переходе к другим (отличным от проекта) режимам работы.

Критерий оптимизации. Оптимизация – это процесс нахождения наилучшего решения задачи, определяемого по некоторому заранее установленному критерию. Другими словами, это целенаправленная деятельность, заключающаяся в получении наилучших результатов при соответствующих условиях.

Оптимизация в широком смысле слова находит применение любой области человеческой деятельности, например:

- при проектировании сложных инженерных сооружений и систем;
- в управлении производственными, техническими и экономическими системами;
- в процессах разработки автоматизированных информационных систем и т.д.

Так, оптимальная система управления может быть реализована в виде набора правил, стратегии или способа управления, согласно которым следует поступать в той или иной ситуации (военной, производственной и т.д.), или в виде комплекса технических средств управления (космическим или морским объектом, инженерным проектом и т.д.).

Поиски оптимальных решений привели к созданию специальных математических методов, и уже в XVIII в. были заложены математические основы оптимизации (вариационное исчисление, численные методы и др.). Однако до второй половины XX в. методы оптимизации во многих областях науки и техники применялись редко, поскольку практическое использование математических методов оптимизации требовало огромной вычислительной работы, которую без ЭВМ реализовать было крайне трудно, а в ряде случаев – невозможно. Например, большие трудности возникают при решении задач оптимизации процессов в химической технологии из-за большого числа параметров и их сложной взаимосвязи между собой. При наличии ЭВМ задача заметно упрощается.

Постановка задачи оптимизации предполагает существование следующих условий:

1. Наличие объекта оптимизации и цели оптимизации. Формулировка каждой задачи оптимизации должна требовать экстремального значения лишь одной величины, т.е. одновременно системе не должно приписываться два и более критерия оптимизации (практически всегда экстремум одного критерия не соответствует экстремуму другого).

Вот типичный пример неправильной постановки задачи оптимизации: “Получить максимальную производительность при минимальной себестоимости”. Ошибка заключается в том, что ставится задача поиска оптимума двух величин, противоречащих друг другу по своей сути. Правильная постановка задачи могла быть следующая: “Получить максимальную производительность при заданной себестоимости или получить минимальную себестоимость при заданной производительности”.

В первом случае критерий оптимизации – производительность, а во втором – себестоимость.

2. Наличие ресурсов оптимизации, под которыми понимают возможность выбора значений некоторых параметров оптимизируемого объекта. Объект должен обладать определенными степенями свободы – управляющими воздействиями.

3. Возможность количественной оценки оптимизируемой величины, поскольку только в этом случае можно сравнивать эффекты от выбора тех или иных управляющих воздействий.

4. Учет ограничений.

Часто оптимизируемая величина связана с экономичностью работы рассматриваемого объекта. Оптимизируемый вариант работы объекта должен оцениваться критерием оптимальности, под которым понимается количественная оценка оптимизируемого качества объекта.

На основании выбранного критерия оптимальности составляется целевая функция, представляющая собой зависимость критерия оптимальности от параметров, влияющих на ее значение. Вид критерия оптимальности или целевой функции определяется конкретной задачей оптимизации.

Таким образом, задача оптимизации сводится к нахождению экстремума целевой функции.

Наиболее общей постановкой оптимальной задачи является выражение критерия оптимальности в виде экономической оценки (производительность, себестоимость продукции, прибыль, рентабельность). Иногда, в частных задачах

оптимизации, когда объект является частью технологического процесса, не всегда удается или не всегда целесообразно выделять прямой экономический показатель, который бы полностью характеризовал эффективность работы рассматриваемого объекта. В таких случаях критерием оптимальности может служить технологическая характеристика, косвенно оценивающая экономичность работы агрегата (время контакта, выход продукта, степень превращения, температура).

В задачах оптимизации важным моментом является использование системного подхода при постановке задачи. Сущность системного подхода заключается в комплексном, едином рассмотрении всех частей системы и их эффективном сочетании. Так, при космических полетах можно, увеличивая вес корабля, добиться максимальной автономии управления, независимо от Земли. Можно, наоборот, обеспечив хорошую связь с кораблем, больше аппаратуры разместить на Земле, максимально уменьшив вес корабля. Оптимальную границу распределения веса наземной и бортовой аппаратуры должны определить методы оптимизации исходя из критерия оптимальности и состояния техники, доступной проектировщикам.

Процесс проектирования любой системы включает в себя, как правило, следующие этапы:

- создание математической модели процесса, которым требуется управлять (объекта управления), и системы управления с обратными связями (контура управления);
- нахождение формального (математического) закона (описания) управления для полученной модели;
- разработка (приобретение) системного программно-технического комплекса управляющей информационно-вычислительной системы и средств связи;
- разработка информационного и программного обеспечения.

На каждом из этих этапов возникает проблема формулировки критериев оптимальности и оптимизации. Так, на этапе разработки информационного и

программного обеспечения необходимо решать задачи оптимизации программирования, т.е. задачу порождения компилятором выходной программы, которая наилучшим способом использует ресурсы ЭВМ. При этом задача разбивается на ряд подзадач, например:

- глобальная оптимизация программирования – переупорядочивание установленной последовательности выполнения команд с целью исключения избыточных вычислений;

- регистровая оптимизация программирования – привязка регистров ЭВМ к переменным и промежуточным результатам, чтобы минимизировать число случаев “холостого” резервирования регистров;

- локальная оптимизация программирования – адаптация программы к конкретным особенностям архитектуры ЭВМ.

Хотя системный подход подразумевает общую оптимизацию всех этапов, каждый из них в отдельности может и не быть оптимальным.

Для решения задач оптимизации прежде всего необходимо уметь формулировать критерии оптимальности и владеть методами (процедурами) оптимизации.

Блочный принцип построения моделей массопередачи. При математическом моделировании процессов массопередачи широко используется блочный принцип, когда модель формируется по отдельным ее составляющим. Имея информацию о равновесных данных и составив материальный и тепловой балансы процесса, далее изучается гидродинамическая модель процесса как основа математического описания. Затем проводится исследование кинетики процесса массопередачи с учетом гидродинамических условий найденной модели и составляется математическое описание этих процессов с учетом уравнений равновесия материальных и тепловых балансов и граничных условий. На заключительном этапе моделирования математические описания всех сторон процесса объединяются в полную математическую модель.

Представление математической модели процесса в виде совокупности подсистем (блоков) позволяет и свою очередь представить процедуру

построения указанной модели как совокупность операций по составлению математических моделей отдельных подсистем, т. е. реализовать блочный принцип построения математической модели.

Использование блочного принципа построения математических моделей рассматриваемых процессов, который основан на системном подходе, позволяет также принципиально наметить пути решения и такой практически важной проблемы, как масштабирование диффузионных процессов. С позиций математического моделирования масштабный переход есть не что иное, как деформация математической модели при изменении геометрических размеров, характеризующих аппаратное оформление процесса. При применении блочного принципа построения математической модели влияние геометрических размеров на свойства процесса отражается лишь в одной подсистеме, а именно в подсистеме “Гидродинамика”. Поэтому при наличии достаточно корректного в качественном и количественном отношении математического описания этой подсистемы и становится возможным осуществить масштабный переход.

Принципиально каждый блок математической модели может иметь различную степень детализации математического описания. Важно лишь, чтобы входные и выходные переменные всех блоков модели находились во взаимном соответствии, что обеспечит получение замкнутой системы уравнений математической модели процесса в целом. Что касается состава внутренних переменных блоков, то здесь существует достаточно большая свобода выбора. В идеале математическое описание каждого блока должно включать уравнения, параметрами которых являются только физико-химические свойства разделяемых компонентов смеси, а также геометрические характеристики оборудования и факторы, определяющие заданные внешние воздействия.

Рекомендуемая литература:

основная: [1-4];

дополнительная: [5-8].

Тема 5. Математическое моделирование химических реакторов

Цели и задачи занятия:

Рассмотреть математические модели процесса в реакторе. Изучить математические модели реакторов идеального смешения и идеального вытеснения.

Учебные вопросы по самостоятельной работе:

1. Каскад реакторов идеального смешения;
2. Сравнение реакторов идеального смешения и идеального вытеснения;

Темы докладов, сообщений, эссе:

1. Каскад реакторов идеального смешения;
2. Сравнение реакторов идеального смешения и идеального вытеснения, каскада реакторов идеального смешения.

Методические указания:

Классификация химических реакторов и режимов их работы. Химические реакторы для проведения различных процессов отличаются друг от друга по конструктивным особенностям, размеру, внешнему виду. Однако, несмотря на существующие различия, можно выделить общие признаки классификации реакторов, облегчающие систематизацию сведений о них, составление математического описания и выбор метода расчета.

Наиболее употребимы следующие признаки классификации химических реакторов и режимов их работы: 1) режим движения реакционной среды (гидродинамическая обстановка в реакторе); 2) условия теплообмена в реакторе; 3) фазовый состав реакционной смеси; 4) способ организации процесса; 5) характер изменения параметров процесса во времени; 6) конструктивные характеристики.

Классификация реакторов по гидродинамической обстановке. В зависимости от гидродинамической обстановки можно разделить все реакторы на реакторы смешения и вытеснения.

Реакторы смешения — это емкостные аппараты с перемешиванием механической мешалкой или циркуляционным насосом. Реакторы вытеснения — трубчатые аппараты, имеющие вид удлиненного канала. В трубчатых реакторах перемешивание имеет локальный характер и вызывается неравномерностью распределения скорости потока и ее флуктуациями, а также завихрениями.

Классификация по условиям теплообмена. Протекающие в реакторах химические реакции сопровождаются тепловыми эффектами (это тепловые эффекты химических реакций и сопровождающих их физических явлений, таких, например, как процессы растворения, кристаллизации, испарения и т. п.). Вследствие выделения или поглощения теплоты изменяется температура и возникает разность температур между реактором и окружающей средой, а в определенных случаях температурный градиент внутри реактора.

При отсутствии теплообмена с окружающей средой химический реактор является адиабатическим. В нем вся теплота, выделяющаяся или поглощающаяся в результате химических процессов, расходуется на «внутренний» теплообмен — на нагрев или охлаждение реакционной смеси.

Реактор называется изотермическим, если вследствие теплообмена с окружающей средой в нем обеспечивается постоянство температуры. В этом случае в любой точке реактора в результате теплообмена полностью компенсируется выделение или поглощение теплоты.

В реакторах с промежуточным тепловым режимом тепловой эффект химической реакции частично компенсируется теплообменом с окружающей средой, а частично вызывает изменение температуры реакционной смеси.

Классификация по фазовому составу реакционной смеси. Реакторы для проведения гомогенных процессов подразделяют на аппараты для газофазных и жидкофазных реакций. Аппараты для проведения гетерогенных процессов, в свою очередь, подразделяют на газожидкостные реакторы, реакторы для процессов в системах газ - твердое вещество, жидкость - твердое вещество и др. Особо следует выделить реакторы для проведения гетерогенно-каталитических процессов.

Классификация по способу организации процесса. По способу организации процесса (способу подвода реагентов и отвода продуктов) реакторы подразделяют на периодические, непрерывно действующие и полунепрерывные (полупериодические).

В реакторе периодического действия все отдельные стадии протекают последовательно, в разное время. Все реагенты вводят в аппарат до начала реакции, а смесь продуктов отводят по окончании процесса. Продолжительность реакции можно измерить непосредственно, так как время реакции и время пребывания реагентов в реакционном объеме одинаковы. Параметры технологического процесса в периодически действующем реакторе изменяются во времени.

Между отдельными реакционными циклами в периодическом реакторе необходимо выполнить вспомогательные операции – загрузку реагентов и выгрузку продуктов. Поскольку во время этих вспомогательных операций не может быть получено дополнительное количество продукта, их наличие обуславливает снижение производительности периодического реактора.

В реакторе непрерывного действия (проточном) все отдельные стадии процесса химического превращения вещества (подача реагирующих веществ, химическая реакция, вывод готового продукта) осуществляются параллельно, одновременно и, следовательно, непроизводительные затраты времени на операции загрузки и выгрузки отсутствуют. Поэтому на современных крупнотоннажных химических предприятиях, где требуется высокая производительность реакционного оборудования, большинство химических реакций осуществляют в непрерывнодействующих реакторах. В реакторе полунепрерывного (полупериодического) действия один из реагентов поступает в него непрерывно, а другой – периодически. Возможны варианты, когда реагенты поступают в реактор периодически, а продукты реакции выводятся непрерывно, или наоборот.

Классификация по характеру изменения параметров процесса во времени. В зависимости от характера изменения параметров процесса во времени одни и

те же реакторы могут работать в стационарном и нестационарном режимах. Рассмотрим некоторую произвольную точку, находящуюся внутри химического реактора. Режим работы реактора называют стационарным, если протекание химической реакции в произвольно выбранной точке характеризуется одинаковыми значениями концентраций реагентов или продуктов, температуры, скорости и других параметров процесса в любой момент времени. В стационарном режиме параметры потока на выходе из реактора не зависят от времени. Обычно это постоянство выходных параметров обеспечивается постоянством во времени параметров на входе в реактор.

Если в произвольно выбранной точке происходят изменения параметров химического процесса во времени по тому или иному закону, режим работы реактора называют нестационарным. Нестационарный режим является более общим. Стационарный режим возможен для непрерывно-действующих проточных реакторов. Но даже эти реакторы работают в нестационарном режиме в моменты их пуска и остановки. Нестационарными являются все периодические процессы.

Классификация по конструктивным характеристикам. Химические реакторы отличаются друг от друга и по ряду конструктивных характеристик, оказывающих влияние на расчет и изготовление аппаратов. По этому принципу классификации можно выделить такие типы реакторов: емкостные реакторы (автоклавы; реакторы-камеры; вертикальные и горизонтальные цилиндрические конверторы и т. п.); колонные реакторы (реакторы-колонны насадочного и тарельчатого типа; каталитические реакторы с неподвижным, движущимся и псевдооживленным слоем катализатора; полочные реакторы); реакторы-теплообменники; реакторы типа реакционной печи (шахтные, полочные, камерные, вращающиеся печи) и т. д.

Рекомендуемая литература:

основная: [1-4];

дополнительная: [5-8].

ЛИТЕРАТУРА КО ВСЕМ ТЕМАМ

Основная:

1. Клинов, А.В. Математическое моделирование химико-технологических процессов [Элек-тронный ресурс] : учебное пособие / А.В. Клинов, А.Г. Мухаметзянова. — Электрон. дан. — Казань : КНИТУ, 2009. — 144 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/13289>. — Загл. с экрана.

2. Гумеров, А.М. Математическое моделирование химико-технологических процессов [Элек-тронный ресурс] : учебное пособие / А.М. Гумеров. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2014. — 176 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/41014>. — Загл. с экрана.

3. Натареев, С.В. Системный анализ и математическое моделирование процессов химической технологии [Электронный ресурс] : учебное пособие / С.В. Натареев. — Электрон. дан. — Иваново : ИГХТУ, 2007. — 80 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/4496>. — Загл. с экрана.

4. Абуталипова, А.Н. Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов и систем: сборник статей (23-25 мая) [Электронный ресурс] : сборник научных трудов / А.Н. Абуталипова, В.В. Хамматова, Л.А. Сафина. — Электрон. дан. — Казань : КНИТУ, 2016. — 248 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/102070>. — Загл. с экрана.

Дополнительная:

5. Исследование равновесия в системах газ-жидкость: теоретические основы и экспериментальные методики. Моделирование химико-технологических процессов [Электронный ресурс] : учебное пособие / Г.Г. Елиманова [и др.]. — Электрон. дан. — Казань : КНИТУ, 2016. — 88 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/102063>. — Загл. с экрана.

6. Клинов, А.В. Лабораторный практикум по математическому моделированию химико-технологических процессов [Электронный ресурс] : учебное пособие / А.В. Клинов, А.В. Малыгин. — Электрон. дан. — Казань : КНИТУ, 2011. — 99 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/13285>. — Загл. с экрана.

7. Самойлов, Н.А. Примеры и задачи по курсу "Математическое моделирование химико-технологических процессов" [Электронный ресурс] : учебное пособие / Н.А. Самойлов. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2013. — 176 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/37359>. — Загл. с экрана.

8. Натареев, С.В. Моделирование и расчет процессов химической технологии [Электронный ресурс] : учебное пособие / С.В. Натареев. — Электрон. дан. — Иваново : ИГХТУ, 2008. — 144 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/4502>. — Загл. с экрана.