

УДК 669.112

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОПРЕДЕЛЕНИЯ УСТОЙЧИВОЙ РАБОТЫ ХИМИЧЕСКОГО РЕАКТОРА

В.Ф. Раков*, О.В. Тубольцева**

* Научно-технологический центр «Реактивэлектрон» НАН Украины,

** Институт прикладной математики и механики НАН Украины

e-mail: donmashinery@meta.ua

Главной задачей расчета устойчивости работы химических реакторов полунепрерывного действия (в которые непрерывно подаются исходные вещества, а продукты реакции удаляются периодически) является обеспечение условий безопасной эксплуатации и предупреждение аварийных ситуаций. Кроме этого, эксплуатация промышленной установки должна быть не только безопасной, но и обеспечивать требуемое качество продукции.

В качестве математической модели реактора принимается система [1], состоящая из уравнений материального и теплового баланса:

$$\begin{cases} \frac{dC_x}{dt} = -AC_x^n e^{-\frac{E}{RT}} + \frac{q}{V} C_{x_0} \\ \frac{dT}{dt} = \frac{AH}{c_1 \rho_1} C_x^n e^{-\frac{E}{RT}} - \frac{hS}{c_1 \rho_1 V} (T - T_c) - \frac{c_2 \rho_2 q}{c_1 \rho_1 V} (T - T_b) \end{cases}, \quad (1)$$

где время t является независимой переменной, зависимые переменные: C_x – текущая концентрация реагента и T – температура реакционной системы, а остальные величины считаем параметрами: A – предэкспоненциальный множитель уравнения Аррениуса, n – порядок реакции, E – энергия активации, R – универсальная газовая постоянная, C_{x_0} – концентрация раствора подаваемого реагента, q – объемная скорость подачи реагента, V – объем реакционной системы, S – поверхность теплопередачи, h – коэффициент теплопередачи, H – энтальпия реакции, c_1 – теплоемкость системы, c_2 – теплоемкость раствора подаваемого реагента, ρ_1 – плотность реакционной системы, ρ_2 – плотность раствора подаваемого реагента, T_c – температура внутренней стенки реактора, T_b – температура раствора подаваемого реагента.

Стационарные состояния системы (1) находятся когда $\frac{dC_x}{dt} = 0$ и $\frac{dT}{dt} = 0$. Решая эти уравнения, определяем, что система (1) имеет единственное положение равновесия, т.е. является моностационарной [2]. Координаты этого положения равновесия

$$(C_{xS}, T_S) = \left(\sqrt[n]{\frac{q \cdot C_{x_0}}{AV}} \cdot e^{\frac{E(hS + c_2 \rho_2 q)}{nR(qHC_{x_0} + T_c hS + T_b c_2 \rho_2)}}, \frac{qHC_{x_0} + T_c hS + T_b c_2 \rho_2}{hS + c_2 \rho_2 q} \right) \quad (2)$$

Для определения устойчивости положения равновесия (2) вводятся новые переменные

$$\xi = Cx - Cx_S \text{ и } \eta = T - T_S,$$

имеющие смысл отклонений от координат исследуемого положения равновесия. Тогда в новых координатах ξ, η система (1) примет вид

$$\begin{cases} \frac{d\xi}{dt} = -A(\xi + C_{xS})^n \cdot e^{\frac{-E}{R(\eta+T_S)}} + \frac{q}{V} C_{x_0} \\ \frac{d\eta}{dt} = \frac{AH}{c_1\rho_1} (\xi + C_{xS})^n \cdot e^{\frac{-E}{R(\eta+T_S)}} - \frac{hS}{c_1\rho_1 V} (\eta + T_S - T_C) - \frac{c_2\rho_2 q}{c_1\rho_1 V} (\eta + T_S - T_B) \end{cases}.$$

Якобиан системи:

$$J = \begin{pmatrix} -nA(\xi + C_{xS})^{n-1} \cdot e^{\frac{-E}{R(\eta+T_S)}} & -\frac{EA(\xi + C_{xS})^n}{R(\eta + T_S)^2} \cdot e^{\frac{-E}{R(\eta+T_S)}} \\ \frac{nAH}{c_1\rho_1} (\xi + C_{xS})^{n-1} \cdot e^{\frac{-E}{R(\eta+T_S)}} & \frac{EAH(\xi + C_{xS})^n}{c_1\rho_1 R(\eta + T_S)^2} \cdot e^{\frac{-E}{R(\eta+T_S)}} - \frac{hS}{c_1\rho_1 V} - \frac{c_2\rho_2 q}{c_1\rho_1 V} \end{pmatrix}.$$

$$J|_{(0,0)} = \begin{pmatrix} -nAC_{xS}^{n-1} \cdot e^{\frac{-E}{RT_S}} & -\frac{EAC_{xS}^n}{RT_S^2} \cdot e^{\frac{-E}{RT_S}} \\ \frac{nAH}{c_1\rho_1} C_{xS}^{n-1} \cdot e^{\frac{-E}{RT_S}} & \frac{EAHC_{xS}^n}{c_1\rho_1 RT_S^2} \cdot e^{\frac{-E}{RT_S}} - \frac{hS}{c_1\rho_1 V} - \frac{c_2\rho_2 q}{c_1\rho_1 V} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_{11} & j_{12} \\ j_{21} & j_{22} \end{pmatrix}.$$

Система линейного приближения в окрестности стационарного состояния $(\xi, \eta) = (0, 0)$:

$$\begin{cases} \frac{d\xi}{dt} = j_{11}\xi + j_{12}\eta \\ \frac{d\eta}{dt} = j_{21}\xi + j_{22}\eta \end{cases}. \quad (3)$$

Характеристическое уравнение для линейной системы (3):

$$k^2 + \sigma \cdot k + \Delta = 0,$$

где

$$\sigma = -(j_{11} + j_{22}), \quad \Delta = j_{11}j_{22} - j_{12}j_{21}.$$

Из условий Рауса–Гурвица положение равновесия устойчиво, если выполняются неравенства

$$\sigma > 0 \text{ и } \Delta > 0.$$

Поскольку

$$\Delta = \frac{nA}{c_1\rho_1 V} \cdot C_{xS}^{n-1} \cdot e^{\frac{-E}{RT_S}} \cdot (hS + c_2\rho_2 q), \quad (4)$$

то из (4) видно, что $\Delta > 0$ при любых физически возможных параметрах.

Тогда устойчивость системы зависит от знака σ :

$$\sigma = \left(nAC_{xS}^{n-1} - \frac{EAHC_{xS}^n}{c_1\rho_1 RT_S^2} \right) \cdot e^{\frac{-E}{RT_S}} + \frac{hS + c_2\rho_2 q}{c_1\rho_1 V}. \quad (5)$$

Подставив C_{xS} и T_S из (2) в (5), получим:

$$\sigma = \frac{q \cdot C_{x_0} E H}{V c_1 \rho_1 R} \cdot \left(\frac{n c_1 \rho_1 R}{E H} \cdot \sqrt[n]{\frac{A V}{q \cdot C_{x_0}}} \cdot e^{\frac{-E(hS + c_2 \rho_2 q)}{n R (q H C_{x_0} + T_C h S + T_B c_2 \rho_2 q)}} - \left[\frac{h S + c_2 \rho_2 q}{q H C_{x_0} + T_C h S + T_B c_2 \rho_2 q} \right]^2 \right) + \frac{h S + c_2 \rho_2 q}{c_1 \rho_1 V}$$

Применение математической модели рассмотрим на примере процесса растворения железа в азотной кислоте. Значения параметров представлены в таблице 1.

Таблица 1. Физические параметры реактора и вещества

Физические параметры	Значения параметров
Предэкспоненциальный множитель уравнения Аррениуса, A	$1000 \text{ м}^3/(\text{кг} \cdot \text{с})$
Порядок реакции, n	1,5
Энергия активации, E	15000 Дж/моль
Универсальная газовая постоянная, R	$8,31 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{К)}$
Объемная скорость подачи реагента, q	$0,001 \text{ м}^3/\text{с}$
Объем реакционной системы, V	$0,229074 \text{ м}^3$
Концентрация раствора подаваемого реагента, C_{x_0}	30 кг/м^3
Теплоемкость системы, c_1	$4100 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}$
Теплоемкость раствора подаваемого реагента, c_2	$4100 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}$
Плотность реакционной системы, ρ_1	1200 кг/м^3
Плотность раствора подаваемого реагента, ρ_2	1020 кг/м^3
Энтальпия системы, H	300000 Дж/моль
Коэффициент теплопередачи, h	$18 \text{ Дж/(м}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{К)}$
Поверхность теплопередачи, S	$1,178097 \text{ м}^2$
Температура внутренней стенки реактора, T_C	300 К
Температура раствора подаваемого реагента, T_B	330 К

Для данного примера $\sigma = 1.992222805 > 0$, что соответствует устойчивому состоянию, которое обеспечивается поддержанием концентрации реагента $C_{xs} = 0.0968 \text{ кг/м}^3$ и температуры реакционной системы $T_s = 331,693 \text{ К}$.

На рис.1-6 приведены зависимости влияния различных параметров на координаты положения равновесия (C_{xs} , T_s).

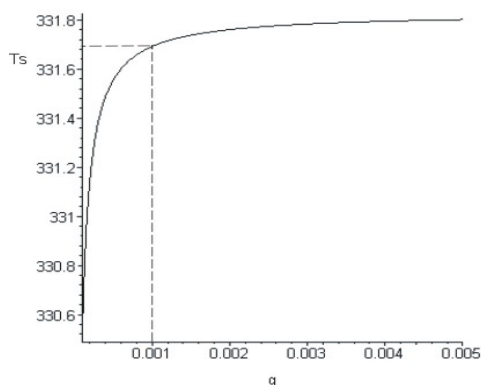


Рис.1. Зависимость $T_s(q)$

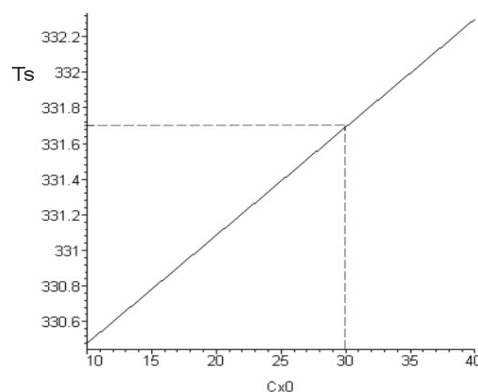
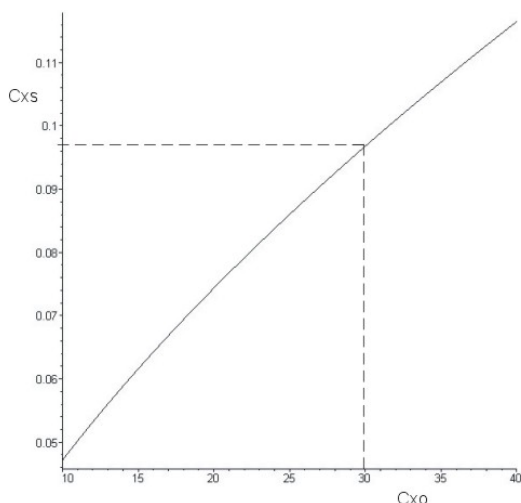
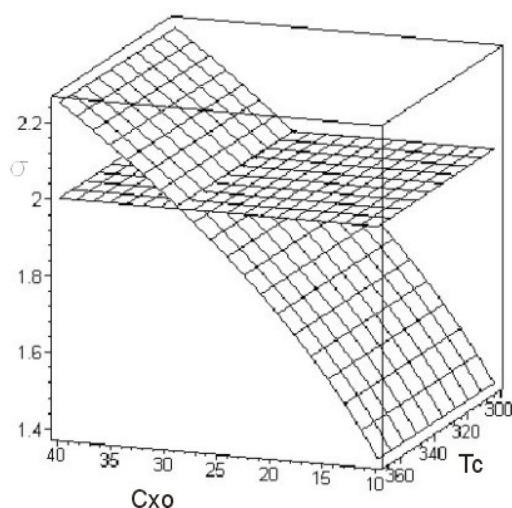


Рис.2. Зависимость $T_s(C_{x_0})$

Рис.3. Зависимость $C_{xs}(C_{x0})$ Рис.4. Зависимость $C_{x0}(T_c)$ в устойчивом состоянии при $\sigma = 1.992222805 > 0$

Выводы

1. Представленная математическая модель позволяет определить основные параметры, при которых работа химического реактора полунепрерывного действия является стабильно устойчивой. Такими параметрами, контролируемыми и поддерживаемые автоматизированной системой управления реактора, являются текущая концентрация реагента и температура реакционной системы.

2. При работе реактора в зоне стабильной устойчивости система в малой степени подвержена влиянию температуры стенки реактора в допустимом диапазоне.

3. При использовании представленной математической модели возможно значительно сократить объем экспериментальных исследований для получения необходимой информации при разработке химико-технологического процесса. Обеспечивается поддержка принятия решений как на стадии проектирования системы, так и в выработке основных требований по системе автоматического управления и рекомендаций оператору.

Литература

1. Вольтер Б.В., Сальников И.Е. Устойчивость режимов работы химических реакторов. – М.: Химия, 1981. – 198с.

2. Тубольцева О.В., Раков В.Ф. Анализ математической модели химического реактора полунепрерывного действия для исследования устойчивости. Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: “Обчислювальна техніка та автоматизація”, 2011, 20(182), с.66-73