

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ТА БІОХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ І СИСТЕМ

УДК 661.321

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ РЕАКТОРА-СМЕСИТЕЛЯ ОТДЕЛЕНИЯ ДИСТИЛЛЯЦИИ ПРОИЗВОДСТВА СОДЫ И ЕГО КОМПЬЮТЕРНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

Филоненко Д.В., Шестопапов А.В.

МАТЕМАТИЧНИЙ ОПИС РЕАКТОРА-ЗМІШУВАЧА ВІДДІЛЕННЯ ДИСТИЛЯЦІЇ ВИРОБНИЦТВА СОДИ І ЙОГО КОМП'ЮТЕРНА РЕАЛІЗАЦІЯ

Філоненко Д.В., Шестопапов О.В.

MATHEMATICAL DESCRIPTION OF REACTOR-MIXER OF SODA PRODUCTION DISTILLATION DEPARTMENT AND ITS COMPUTATIONAL SIMULATION

Filonenko D.V., Shestopalov O. V.

Национальный технический университет
«Харьковский политехнический институт», г. Харьков, Украина
pheonix_alex@mail.ru

Получено математическое описание реактора-смесителя отделения дистилляции производства соды. Приводятся результаты численных исследований разложения хлористого аммония гидроксидом кальция. Их анализ позволил определять эффективность работы реакционной зоны реактора.

Ключевые слова: реактора-смесителя, математическое описание, числовые методы

Одержано математичний опис реактора-змішувача відділення дистиляції виробництва соди. Наводяться результати числових досліджень розкладання хлористого амонія гідроксидом кальцію. Їх аналіз дозволив визначати ефективність роботи реакційної зони реактора.

Ключові слова: реактора-змішувача, математичний опис, числові методи

Mathematical description of reactor-mixer of of soda production distillation department been obtained. Results over of computational simulation researches of decomposition of ammonium chloride by the hydroxide of calcium are represented. The fnflysis allowed determining efficiency of work of reactionary zone in reactor.

Keywords: reactor-mixer, mathematical description, computational simulation

1. Введение

Разработка реактора-смесителя отделения дистилляции с целью снижения объема реакционной зоны является весьма актуальной задачей, так как позволит в несколько раз уменьшить циркуляционный поток кристаллов ангидрита в реакторе-смесителе и более полно использовать малоактивную часть суспензии гидрата кальция.

Известные сегодня математические модели реактора-смесителя основаны на заданных значениях характеристик и потому не могут быть непосредственно использованы для расчетов конструкций в схеме содового производства, поскольку не позволяют точно рассчитывать материальные и тепловые балансы и степень отгонки NH_3 из-за существенных изменений технологических параметров входных материальных потоков. В связи с этим существует необходимость разработки математической модели реактора-смесителя, которая включает систему уравнений покомпонентного материального и теплового балансов [1].

Модель структуры взаимодействующих материальных потоков является основой при составлении математического описания процесса, так как вид этой модели и значения ее параметров являются определяющими при дальнейшем ее решении.

Математическое описание реактора-смесителя необходимо при проектировании дистилляционной аппаратуры повышенной мощности с оптимальными параметрами процесса и конструкции, поскольку качество работы дистилляционной колонны во многом определяется работой смесителя.

Необходимость использования для оценки процесса смешения физического аналога структуры потоков привела к созданию целого ряда моделей, таких как: модель идеального вытеснения, модель идеального смешения, ячеечная модель, рециркуляционная модель, диффузионная модель (поршневой поток, осложненный турбулентной диффузией), комбинированная модель. Согласно [2] считается, что выбор типа модели смешивания должен быть основан на сопоставлении моментов экспериментальной и теоретической C - кривых, при этом необходимо учитывать различные дополнительные сведения о процессе (наличие байпаса, застойных зон, струйных потоков).

2. Математическое моделирование реактора-смесителя

Основой математической модели реактора-смесителя принята однопараметрическая диффузионная модель, согласно которой процесс разделения хлористого аммония гидроокисью кальция описывается системой дифференциальных уравнений второго порядка материального и теплового балансов элементарного объема жидкостного потока в смесителе и дифференциальным уравнением зависимости константы скорости реакции от температуры:

$$D_L \frac{d^2 f_A}{dh^2} - U_L \frac{df_A}{dh} - k_t C_{A_0} C_{B_0} f_A^2 f_B = 0; \quad (1)$$

$$D_L \frac{d^2 f_B}{dh^2} - U_L \frac{df_B}{dh} - k C_{A_0}^2 f_A^2 f_B = 0; \quad (2)$$

$$D_L \rho_L C_{PL} \frac{d^2 t}{dh^2} - U_L \frac{dt}{dh} \rho_L C_{PL} - q k_t C_{A_0}^2 C_{B_0} f_A^2 f_B = 0; \quad (3)$$

$$\frac{dk_t}{dh} = \mu_0 \frac{dt}{dh}. \quad (4)$$

В этих уравнениях:

f_A – доля неразложившегося хлорида аммония;

f_B – доля неразложившейся гидроокиси кальция;

C_A и C_{A_0} – соответственно текущее и начальное значение концентрации хлорида аммония, кг/м^3 ;

C_B и C_{B_0} – соответственно текущее и начальное значение концентрации гидроокиси кальция, кг/м³;

U_L – средняя скорость жидкостного потока в реакторе, м/с;

D_L – коэффициент продольного перемешивания, м/с;

h – высота реакционной зоны;

k_t – константа скорости реакции разложенного хлористого аммония гидроокисью кальция, м⁶/кг³сек;

ρ_L – плотность жидкостного потока в реакторе, кг/м³;

C_{PL} – средняя теплоемкость жидкости в реакторе, ккал/(кг·°C);

q – тепловой эффект реакции разложения хлористого аммония гидроокисью кальция, ккал/(кг·NH₄Cl);

t – температура жидкостного потока, °C.

2. Результаты экспериментального исследования

Коэффициент продольного перемешивания D_L был определен экспериментально на промышленном реакторе-смесителе. Использовалась методика, основанная на получении функции распределения концентрации трассирующего вещества во времени в жидкости на выходы из реактора (С-кривой) при импульсной подаче трассирующего вещества на вход аппарата. Индикатором служил 0,5% раствор флуорисцента, анализ проб жидкости, поступающей из смесителя, проводился фотоэлектронным калориметром ФЭК-2м, предварительно отградуированном на жидкости смесителя.

На рис. 1 представлена усредненная С-кривая реактора-смесителя диаметром 3,2 м и высотой 7,75 м (эффективный реакционный объем 63,5 м³), оборудованного рамной мешалкой, скорость вращения которой составляла 17 об/мин.

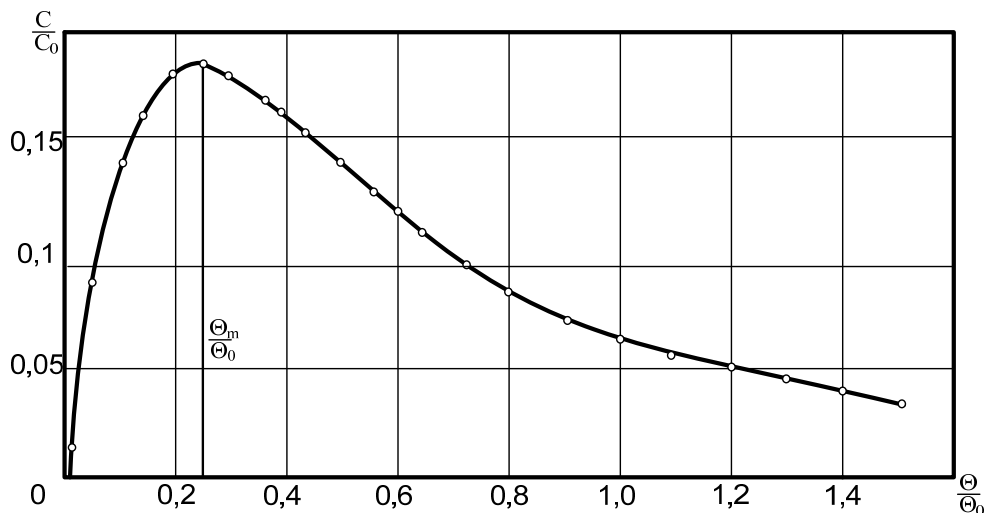


Рис. 1 Усредненная С-кривая реактора-смесителя диаметром 3,2 м и высотой 7,75 м

Во время эксперимента нагрузка дистилляционной колонны по жидкости составляла 140 м³/час, расход известкового молока 52 м³/час. Полученная С-кривая была обработана по известной методике [3]; в результате было найдено значение

аналога диффузионного критерия Пекле, характеризующего степень продольного перемешивания жидкости в реакторе

$$Pe'_L = \frac{2}{\sigma^2}, \quad (5)$$

где Pe'_L – аналог диффузионного критерия Пекле;
 σ^2 – дисперсия, определенная по уравнению

$$\sigma^2 = \frac{\sigma_\tau^2}{(\bar{\tau})^2}, \quad (6)$$

где $\bar{\tau}$ – среднее время пребывания трассера в аппарате, определенное по уравнению

$$\bar{\tau} = \frac{\sum \tau_i C_{\phi i}}{\sum C_{\phi i}}, \quad (7)$$

в котором

$C_{\phi i}$ – концентрация трассера в произвольной i -ой пробе;

τ_i – время от начала впрыска трассера до момента отбора i -ой пробы.

$$\sigma_\tau^2 = \frac{\sum \tau_i^2 C_{\phi i}}{\sum C_{\phi i}} - \left(\frac{\sum \tau_i C_{\phi i}}{\sum C_{\phi i}} \right)^2. \quad (8)$$

Определенный по уравнению (5) и параметрам С-кривой критерий Пекле $Pe = 3,99$.

С другой стороны

$$Pe'_L = \frac{U_L H}{D_L}, \quad (9)$$

где H – высота реакционной зоны смесителя, на котором проводились экспериментальное исследование, м.

Из уравнения (9) определяется коэффициент продольного перемешивания

$$D_L = \frac{U_L H}{Pe'_L}, \quad (10)$$

для реактора-смесителя, на котором проводился эксперимент, $D_L = 0,0145 \text{ м}^2/\text{с}$ при $U_L = 0,00747 \text{ м/с}$ и $H = 7,75 \text{ м}$.

3. Компьютерное моделирование процесса в реакторе-смесителе

Уравнения (1), (2) и (3) аналитического решения не имеют, поэтому при реализации математической модели реактора-смесителя использовались численные методы интегрирования [2], в частности метод Рунге-Кутты четвертого порядка точности, который дает малую ошибку и легко программируемый для применения компьютерной модели.

Для их компьютерной реализации модели была составлена блок-схема решения уравнений (1), (2), (3) и (4). В блоке 1 вводятся в расчет начальные концентрации и температура жидкости, требуемая степень разложения хлористого аммония f_H на выходе из реактора, диаметр реактора-смесителя D_M , выгрузка по жидкости $L \text{ м}^3/\text{сек}$, начальный шаг интегрирования Δh_c и допустимая погрешность интегрирования δ . В

блоках 5-9 проводиться расчет $\Delta\Phi_{ij}$ на i -м шаге интегрирования в i -м пересчете, где $\Phi = \frac{df}{dk}$, в блоках 10-14 производится расчет Δf_{ij} на i -м шаге интегрирования.

Для оценки правильности выбора шага Δh_{ij} применяется двойной пересчет: величину Δf_i вычисляют вначале с некоторым шагом Δh_{j-1} , а затем с двойным шагом Δh_j (блок 16). Если расхождение значений Δf_i , полученных в i -м и j -м пересчете превышает допустимую погрешность (блок 17), шаг интегрирования уменьшают в 2 раза (блок 18) и вновь производят расчет. Если условия в блоке 17 выполняются, осуществляется переход к интегрированию второго дифференциального уравнения системы. В блоках 19-23 рассчитывается ΔT_i на i -м шаге интегрирования ($T = \frac{dt}{dh}$), в блоках 24-28 определяется Δt_i . Далее определяется степень разложения NH_4Cl и температура на $i+1$ -м шаге интегрирования

$$f_{i+1} = f_i + \Delta f_i \quad (\text{блок 29})$$

$$t_{i+1} = t_i + \Delta t_i \quad (\text{блок 30})$$

плотность и теплоемкость жидкости (блоки 31 и 32). В блоке 33 результаты расчета выводятся на печать; в блоке 34 проверяется достижение заданной степени разложения хлористого аммония – если это условие в блоке 34 не выполняется, осуществляется переход к $i+1$ -му шагу интегрирования.

Следует отметить, что на данном этапе реализован алгоритм упрощенной задачи: расходы хлорида аммония и гидроокиси кальция в реакторе были приняты в соответствие со стехиометрией, не учитывалась дополнительная подача пара в реактор, не рассматривался процесс кристаллизации гипса в аппарате. Построение более сложного и более близкого к реальному процессу математического описания – задача дальнейших исследований. В то же время, при реализации упрощенного варианта можно получить определенные практические результаты. Для представления системы дифференциальных уравнений (1-4) в машинном виде и снижения порядка системы вводятся следующие обозначения функций и их производных:

$$y_0 = f_{A1}; \quad y_1 = f_{B1}; \quad y_2 = t_i; \quad y_3 = k_{ii};$$

$$y_4 = \frac{df_A}{dh}; \quad y_5 = \frac{df_B}{dh}; \quad y_6 = \frac{dt}{dh};$$

После подстановки численных значений коэффициентов:

$$C_{A_0} = 114; \quad C_{B_0} = 105; \quad U_L = 0,0074; \quad D_L = 0,0145;$$

$$\rho_L = 1120; \quad C_P = 0,814; \quad q = 55.$$

Система записывается в общем виде:

$$y'_0 = y_4; \quad y'_1 = y_5; \quad y'_2 = y_6; \quad y'_3 = 0,0001775y_6;$$

$$y'_4 = 825517 y_0^2 y_1 y_2 + 0,5152 y_4; \quad y'_5 = 896275 y_0^2 y_1 y_2 + 0,5152 y_5;$$

$$y'_6 = 5677148 y_0^2 y_1 y_2 + 0,5152 y_6.$$

Начальные условия:

$$y_0(0) = 0,02; \quad y_1(0) = 0,01; \quad y_2(0) = 95; \quad y_3(0) = 0,00228;$$

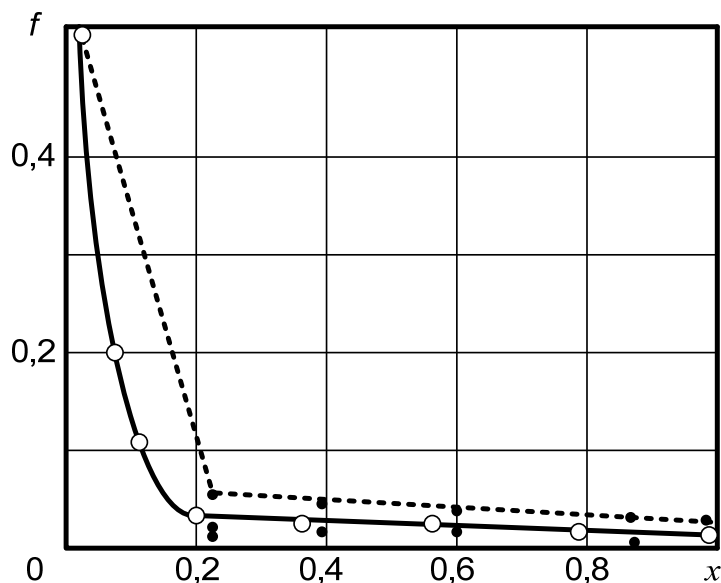
$$y_4(0) = 0; \quad y_5(0) = 0; \quad y_6(0) = 0.$$

Начальное значение аргумента $t_0 = 0$.

Конец интервала интегрирования $M_0 = 0$.

Шаг интегрирования $H_0 = -0,25$

Для проверки адекватности модели результаты расчета были сопоставлены с данными экспериментальных исследований рис. 2.



f – доля неразложившегося NH_4Cl ;
 x – высота реакционной зоны;

пунктирная линия – результаты экспериментального исследования;
сплошная линия – результаты решения математической модели на ПК.

Рис. 2. Зависимость доли неразложившегося NH_4Cl
от высоты реакционной зоны

4. Заключение

В результате анализа полученных данных была установлена сходимость экспериментальных данных с результатами решения математической модели, что позволяет получить вполне удовлетворительные результаты при расчете величины реакционной зоны и считать процесс взаимодействия активной гидроксиды кальция с хлоридом аммония, идущим в кинетической области. В то же время, необходимо также учитывать процесс разложения малоактивной извести, кинетика которого отличается от принятых в данной модели допущений расчета реагирующих компонентов в стехиометрических соотношениях, что свидетельствует о перспективности дальнейших исследований и поиска путей повышения эффективности работы реактора-смесителя отделения дистилляции.

Литература

1. Филоненко Д.В. Шестопалов А.В. Анализ направлений усовершенствования реактора-смесителя отделения дистилляционного производства / Д. В. Филоненко, А. В. Шестопалов // Вісник НТУ «ХП». Серія: Нові рішення в сучасних технологіях. – Х: НТУ «ХП», – 2013. – № 26 (999). – С.194–198.
2. Кафаров В. В. Методы кибернетики в химии и химической технологии: учеб.пособие для вузов / В. В. Кафаров. – 2-е изд., перераб. – М.: Химия, 1971.–496с.
3. Микулин Г.И. Дистилляция в производстве соды [Текст]/ Микулин Г.И., Поляков И.К. – М.: Госхимиздат, 1956. – 348 с.